

Skript zur Vorlesung :

Kompakte Fortgeschrittene Theoretische Physik

Teil I: Quantenmechanik

Vorlesung SS 22

Prof. Dr. Jens Timmer

28. Juni 2022

ernst gemeint bis zum bitteren Ende

0 Einleitung

Technicalities:

- Skript ist dünn, ersetzt nicht das Studium von Lehrbüchern !
Hierarchie
 - Vorlesung: Konzepte
 - Bücher: Konzepte und Details, Empfehlung: Filk Buch
 - Übungen: Rechnen & Verständnis, Themen, die wir in der Vorlesung nicht schaffen
Viele Stunden darauf verwenden. Nicht versuchen, es mit Google zu lösen.
Wird zu Katastrophe führen.
Abgeben in 2er-Gruppen.
Fragen zu den Übungen an Christian Tönsing
- Scheinkriterium, 50 % der Übungspunkte, Bestehen der Klausur
- Bemerkung Vektorpfeile und Nomenklatur
- Wer hat nicht Mathe als zweites Fach ?
- Wenn etwas unklar: Fragen ! In der Vorlesung, bitte keine mails.
- Münsterführung

Literatur:

- Schwabl. Quantenmechanik
- Grawert. Quantenmechanik
- Greiner ...
- Cohen-Tannoudji ...

Unterschiede der Bücher:

- Verhältnis Text zu Gleichungen
- Der Einstieg, Beispiel Griffiths

Inhaltsverzeichnis

0	Einleitung	2
1	Prolegomena	5
2	Die Schrödinger-Gleichung	7
2.1	Die Ausgangslage	7
2.2	Motivation über Dispersionsrelation	11
3	Formalisierung	16
3.1	Physikalische Formalisierung	16
3.2	Mathematische Formalisierung	22
3.3	Zurück zur Physik	39
4	Unschärferelationen	44
5	Erste Anwendungen	50
5.1	Freies Teilchen	51
5.2	Potentialbarriere und Tunneleffekt	55
5.3	Potentialtopf	62
5.4	Harmonischer Oszillator	65
6	Drehimpuls	73
6.1	Der quantenmechanische Drehimpuls	74
6.2	Eigenfunktionen von \hat{L}_z	78
6.3	Eigenfunktionen von \hat{L}^2	79
7	Wasserstoffatom	85
7.1	Hamiltonian	85
7.2	Lösung der Schrödinger-Gleichung	86
8	Spin	92
9	Vielteilchen Systeme	95
9.1	Symmetrie der Vielteilchenwellenfunktionen	95
9.2	Dichtematrix	97
9.3	Verschränkte Zustände	100

10 Einstein-Podolsky-Rosen – Paradoxon	102
10.1 Theorien verborgener Parameter	102
10.2 Bell'sche Ungleichungen	104

1 Prolegomena

QM auf nüchternen Magen schwer verdaulich, hier etwas Frühstück

Zwei Arten von physikalischen Theorien, i.e. Axiomen

- Von Phänomenen zu Axiomen

Beispiele

- Newton'sche Mechanik
- Quantenmechanik

Bedingungen der Möglichkeiten

Beide sagen natürlich auch neue Phänomene vorher

- Von Axiomen zur Vorhersage von Phänomen

Beispiele

- Spezielle Relativitätstheorie: Lichtgeschwindigkeit in allen Interimalsystemen gleich
Vorhersagen: Längenkontraktion, Zeitdilatation
- Allgemeine Relativitätstheorie (1914): Schwere Masse = Träge Masse
Vorhersagen, u.a.: Lichtablenkung an der Sonne (1919), Gravitation beeinflusst Uhren (GPS), Gravitationswellen (2015)

Newton:

- 1. Axiom genial, aber auch gewöhnungsbedürftig

SRT:

- $c = \text{const.}$ auch nicht anschaulich

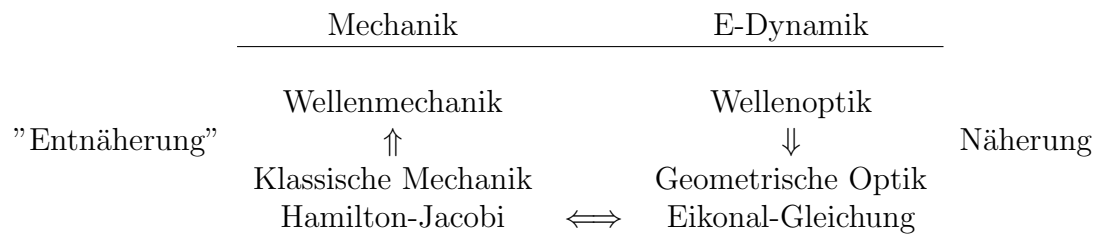
QM:

- Die Axiome erschlagen einen erst mal
- Die Phänomene erzwingen sie
- zwangsläufig oder zwanglos

- Wenn QM Ihnen - wie auch Einstein - nicht gefällt machen Sie einen Vorschlag :-)

Drei Zugänge zu Quantenmechanik

- Schrödinger: "Platonischer Zugang"
 - Abstrakter Formulierung der Klassischen Mechanik: Hamilton-Jacobi Formalismus
 - Näherung der Wellengleichung zur geometrischen/Strahlenoptik: Eikonalgleichung
 - Äquivalenz Hamilton-Jakobi/Eikonalgleichung
 - Geniale Spekulation



- Heisenberg: "Aristotelischer" Zugang
 - Abstrakt: In dieser Arbeit soll versucht werden, Grundlagen zu gewinnen für eine quantentheoretische Mechanik, die ausschließlich auf Beziehungen zwischen prinzipiell beobachtbaren Größen basiert ist.
 - Ein Jahr später: Schrödinger zeigt Äquivalenz beider Zugänge
- Nichtrelativistische Dispersionsrelation massiver Teilchen

2 Die Schrödinger-Gleichung

Zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{x}, t) \right) \psi(\vec{x}, t), \quad \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} \quad (1)$$

Eigenschaften:

- Partielle Differentialgleichung
- Linear
- Keine konstanten Koeffizienten
- Wesentlich komplex, Kap. 2.2
Keine andere fundamentale Gleichung der Physik ist komplex
- Wellenfunktion ψ , Bedeutung von ψ vor der Hand unklar

Zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung, siehe Original-paper auf ILIAS

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{x}) \right) \psi(\vec{x}) = E \psi(\vec{x}) \quad (2)$$

- Eigenwert-Gleichung
- Energie E lässt sich berechnen, ohne dass man wissen muss, was $\psi(\vec{x})$ bedeutet
- Beachte: Wo vorher Zeit war ist jetzt Energie, erinnere Noether-Theorem

2.1 Die Ausgangslage

- Stabilität von Atomen

Klassisches Bild

- Elektron rotiert um Atomkern
- Beschleunigte Bewegung
- Elektrodynamik: Energie wird abgestrahlt
- Klassische Mechanik: Elektron spiralisiert in Kern
- (Deutlicher) Widerspruch zur Erfahrung

- Ultraviolett-Katastrophe, Planck 14.12.1900
- Klassisches Licht: Elektromagnetische Welle
 - Charakteristische Welleneigenschaft: Interferenz
 - Doppelspalt-Experiment

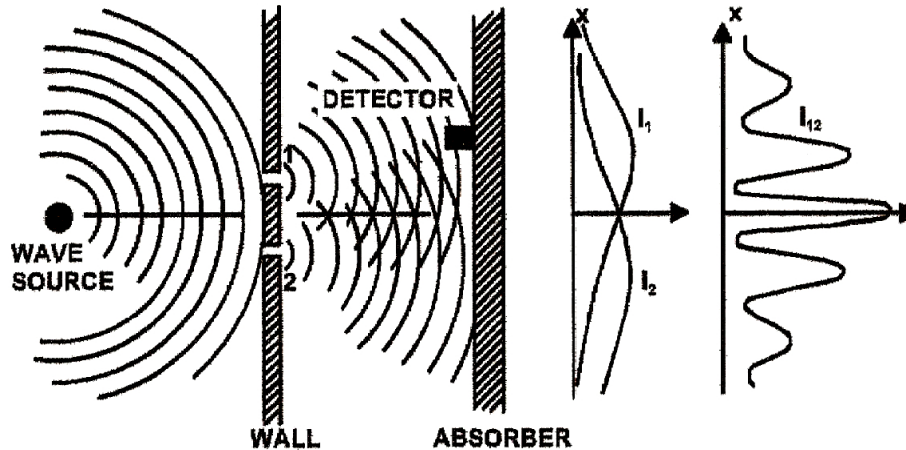


Abbildung 2.1

Aber auch Teilcheneigenschaften: Photonen

- Einstein, 1905: Photo-Effekt (Nobelpreis):
Elektromagnetische Wellen verhalten sich wie Teilchen mit Energie $E = \hbar\omega$
Energie E des herausgeschlagenen Elektrons:

$$E = \hbar\omega - A, \quad A : \text{Ablösearbeit} \quad (3)$$

Energie E nicht abhängig von Intensität des Lichtes

- Compton-Effekt, 1922
Stoß von Photonen auf freie Elektronen führt zur Abnahme der Energie, $E = \hbar\omega$, d.h. Zunahme der Wellenlänge

$$\Delta\lambda = \frac{h}{mc}(1 - \cos\phi), \quad \text{Compton-Wellenlänge } \lambda_C = \frac{h}{mc} \quad (4)$$

Für $\lambda \gg \lambda_C$ gilt klassisches Streuverhalten

- Klassische Teilchen: Punktförmig mit (x, p)
 - Charakteristische Teilcheneigenschaft: Energieübertrag bei Stoß
 - Doppelspaltexperiment Billiard-Kugeln

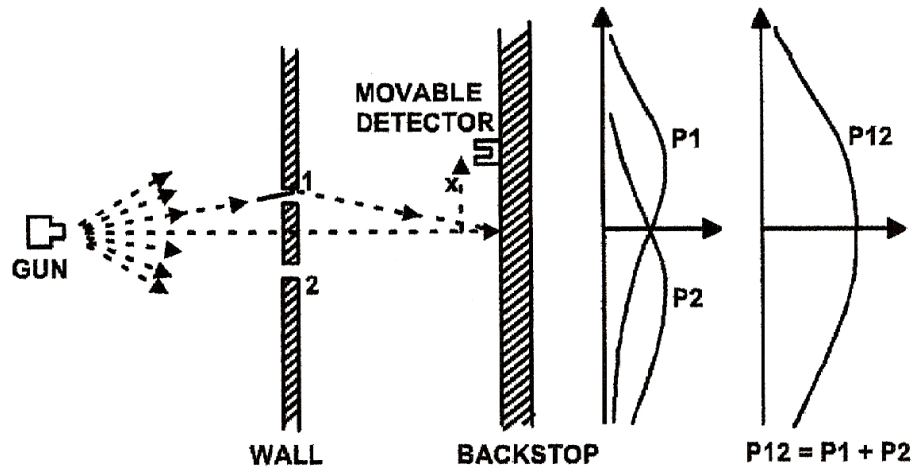


Abbildung 2.2

Aber auch Welleneigenschaften

- de Broglie, 1924: Impuls $\vec{p} = \hbar \vec{k}$, Wellenzahl $|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$, $\lambda = \frac{h}{p}$
- Doppelspaltexperiment Elektronen

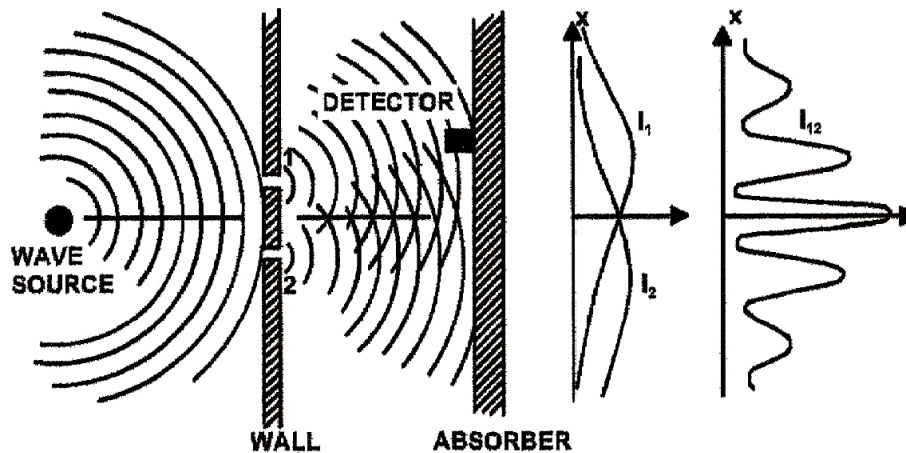


Abbildung 2.3

- Kein Interferenzmuster, wenn man annimmt, dass Elektron entweder durch Spalt 1 oder Spalt 2 geht
 - Auf dem Schirm werden immer nur "ganze" Elektronen beobachtet, Elektron "teilt" sich nicht
 - Interferenzmuster verschwindet, wenn durch zusätzliche Messung bestimmt wird, durch welchen Spalt das Elektron geflogen ist Termin1
 - Quanteneffekte für mikroskopische Systeme
 - * kleine Massen
 - * niedrige Temperaturen
 - * kleine Längen
 - Quanteneffekte für makroskopische Systeme
 - * Supraleitung
 - * Magnetismus
 - * Spezifische Wärme
 - * Schwarz-Körper Strahlung, Planck 14.12.1900, Geburtsstunde QM
 - * Verschränkte Zustände, km-Skala, Kap. 9.3
- Welle-Teilchen Dualismus
 - Sowohl Licht als auch massive Teilchen zeigen sowohl Wellen- als auch Teilcheneigenschaften
 - Ungewohnt, weil um 1800
 - * "klassisches Licht" Welleneigenschaften zeigte
 - * "klassische Teilchen" Teilcheneigenschaften zeigten
 - Welleneigenschaften, wenn es um Ausbreitung geht
 - Teilcheneigenschaften, wenn es um Wechselwirkung geht
 - Dualismus, kein Widerspruch, da nicht in der selben Hinsicht
 - Elektrisches Feld \vec{E}
 - Quadrierte Größe $|\vec{E}|^2 \propto$ Anzahl der Photonen
 - Nicht-quadrierte Größe \vec{E} ist physikalisch: Kraft
 - Erwähne dies für die Interpretation der Wellenfunktion ψ

- Quantenmechanik
 - In Einklang mit allen experimentellen Fakten, teilweise mit Genauigkeit 10^{-10} , gyromagnetischer Faktor
 - Grundlage für ca. 40% unseres Bruttosozialproduktes
 - In gewisser Weise bis heute nicht verstanden, Kap. 10
 - Alle Gründerväter der Quantenmechanik haben sie am Ende ihres Lebens gehasst

2.2 Motivation über Dispersionsrelation

Zeitabhängige Schrödinger-Gleichung soll folgende Eigenschaften haben

- linear, damit Superpositionsprinzip gilt
- Wellenlösungen, damit Interferenz möglich ist
- Dispersionsrelation für Materie erfüllen¹

Dispersionsrelationen

- Erinnere

$$E = \hbar\omega, \quad \vec{p} = \hbar\vec{k} \quad (5)$$

In $\omega = \frac{2\pi}{T}$ steckt die Zeit, in Wellenvektor $|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$ steckt der Raum

- Dispersionsrelationen beschreiben Beziehung zwischen Impuls und Energie oder entsprechend Wellenlänge und Frequenz
- Allgemein: Beschreiben Zusammenhang zwischen räumlichem und zeitlichen Verhalten
- Beispiele
 - Elektromagnetische Wellen, Photonen

$$E = cp, \quad \text{lineare Abhängigkeit} \quad (6)$$

¹In vielen Büchern steht auch noch, dass die Gleichung erster Ordnung Zeitableitung haben soll, damit durch den Anfangszustand die Zeitentwicklung festgelegt ist. Das ist aber Quatsch, wie man an der elektromagnetischen Wellengleichung sieht.

- Nicht-relativistische Materie

$$E = \frac{1}{2m} p^2, \quad \text{quadratische Abhängigkeit} \quad (7)$$

- Relativistische Materie, Ruhemasse m_0

$$E^2 = (m_0 c^2)^2 + c^2 p^2, \quad \text{oder } E = \sqrt{(m_0 c^2)^2 + c^2 p^2} \quad (8)$$

Übung

- Phononen im Festkörper

Übung

Erinnere Elektrodynamik

- Aus Maxwell-Gleichungen folgte Wellengleichung für's elektromagnetische Feld im Vakuum, hier mal B , weil E grade benutzt :-)

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} B = \frac{\partial^2}{\partial x^2} B \quad (9)$$

Lösung

$$B(x, t) = B_0 e^{-i(\omega t - kx)} \quad (10)$$

- Intuition:

- In ω steckt Energie E , in k Impuls p
- Ableiten nach der Zeit holt ω und damit E aus dem Exponenten
- Ableiten nach dem Ort holt k und damit p aus dem Exponenten
- Dispersionsrelation: $E = cp$

\implies

Es muss gleich häufig nach t und nach x abgeleitet werden

- Einfachste Möglichkeit:

$$\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} B = - \frac{\partial}{\partial x} B \quad (11)$$

Beweis durch Einsetzen

$$\frac{i\omega}{c} B_0 e^{-i(\omega t - kx)} = ik B_0 e^{-i(\omega t - kx)}, \quad \omega = ck \quad E = cp \quad (12)$$

Beachte: Nicht jede PDE mit einer zeitlichen- und einer räumlichen Ableitung ergibt Wellengleichung, sondern nur obige. Notwendig und hinreichend.

- Dass in der elektromagnetischen Wellengleichung je zweimal und nicht nur je einmal abgeleitet wird, sagen die Maxwell'schen Gleichungen

Betrachte nun nicht-relativistisches, freies, massives Teilchen:

$$E = \frac{1}{2m} p^2 \quad (13)$$

- Wellenansatz

$$\psi(x, t) = A \exp(-i(\omega t - kx)) = A \exp\left(\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right) + \left(i\frac{p}{\hbar}x\right)\right) \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \psi &= \frac{-iE}{\hbar} A \exp\left(\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right) + \left(i\frac{p}{\hbar}x\right)\right) \implies \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\right) \psi = E\psi \\ \frac{\partial}{\partial x} \psi &= \frac{ip}{\hbar} A \exp\left(\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right) + \left(i\frac{p}{\hbar}x\right)\right) \implies \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi = p\psi \end{aligned}$$

Definition Operator: Frißt etwas, spuckt etwas aus

Der Energie E wird der Energie-Operator \hat{E}

$$E \rightsquigarrow \hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (15)$$

dem Impuls p der Impuls-Operator \hat{p}

$$p \rightsquigarrow \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad (16)$$

zugeordnet:

Korrespondenz-Prinzip: Den klassischen physikalischen Größen werden in der Quantenmechanik Operatoren zugeordnet

- Da die Dispersionsrelation quadratisch ist, muss Energie-Operator einmal, der Impuls-Operator zweimal angewendet werden, ergänze noch $\frac{1}{2m}$

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\right) \psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \psi \quad (17)$$

die freie zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

- Merke

i unumgänglich auf Grund der Dispersionsrelation für nicht-relativistische Materie

Aber: Dies ist nur die einfachste Möglichkeit. Erwähne elektromagnetische Wellengleichung: Dort wurde die einfachste Möglichkeit nicht genutzt.

Übung: Wie sieht das im relativistischen Falle aus ?

- Hamiltonfunktion allgemein

$$H(x, p, t) = \frac{1}{2m} p^2 + V(x, t) \quad (18)$$

Potential V taucht in Argument der Wellenfunktion nicht auf, ergibt einfach additiven Beitrag

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \psi(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) \right) \psi(x, t) \quad (19)$$

die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

- Mit Hamilton-Operator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, z) \quad (20)$$

- Von der zeitabhängigen zur zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung

Hängt Potential $V(x)$ nicht von der Zeit ab, wähle Separationsansatz

$$\psi(x, t) = \psi_u(x) \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right) \quad (21)$$

Eingesetzt:

$$E\psi_u(x) \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right) = \hat{H}\psi_u(x) \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right) \quad (22)$$

Teile durch $\exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)$, ergibt zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H}\psi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi(x) = E\psi(x) \quad (23)$$

eine gewöhnliche Differentialgleichung

Lösungen sind die stationären Zustände des Systems

Beachte:

$$\hat{H}\psi(x) = E \psi(x) \quad (24)$$

ist die natürliche Formulierung, nicht

$$E \psi(x) = \hat{H}\psi(x) \quad (25)$$

Interpretation von ψ

- $|\psi(x, t)|^2 dx = \psi^*(x, t)\psi(x, t)dx$ ist die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen zum Zeitpunkt t am Orte $(x, x + dx)$ zu detektieren

- Es gilt

$$\int dx |\psi(x, t)|^2 = 1 \quad (26)$$

- Beachte: Die Wellenfunktion fasst Welleneigenschaften (bei Ausbreitung) und Teilcheneigenschaften (bei Detektion) von Quantenobjekten zusammen.

Vergleich klassischer Physik und Quantenmechanik für Punktteilchen

	klassisch	quantenmechanisch
Beschreibung des Zustands durch (Kinematik)	(\vec{x}, \vec{p}) , Element eines 6-dimensionalen Raumes	Wellenfunktion $\psi(\vec{x}, t)$, Element eines unendlich-dimensionalen Vektorraums über \mathbb{C}
Zeitentwicklung (Dynamik)	Bewegungsgleichung, gewöhnliche, i.a. nicht-lineare Differentialgleichung	Schrödinger-Gleichung, lineare partielle Differentialgleichung
Ergebnis einer Messung bei bekanntem Zustand	völlig bestimmt	nur Wahrscheinlichkeitsaussagen

Lessons learned:

- Um Wellenphänomene erklären zu können, braucht es eine partielle Differentialgleichung
- Korrespondenz-Prinzip: Klassischen Größen werden (Differential-)Operatoren zugeordnet
- Grundlage der QM ist klassische Theorie, was merkwürdig ist.
- i in zeitabhängiger Schrödinger-Gleichung "folgt" aus (nicht-relativistischer) Dispersionsrelation für Materie

Termin2

3 Formalisierung

Wir werden uns der Sache spiralisierend nähern

3.1 Physikalische Formalisierung

- Keine physikalische Theorie ist beweisbar, am Ende entscheidet das Experiment
- Physikalische Theorien sind motivierbar²
- Formuliere sie durch Axiome, um sie auf den Punkt zu bringen

Die Axiome der klassischen Mechanik, Hamilton'sche Variante

1. Der Zustand ist durch einen Punkt (x, p) im Phasenraum P gegeben
2. Eine Observable ist eine reellwertige Funktion $f : P \rightarrow \mathbb{R}$ auf dem Phasenraum
3. Die Zeitentwicklung im Phasenraum ist durch die Hamilton'schen Gleichungen gegeben

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} \quad (27)$$

²Für Genießer: Maxwell-Gleichungen durch Newton'sches Argumentieren motiviert, aber am Ende Lorentz- nicht Galilei-invariant.

Daraus folgt Zeitentwicklung der Observable

$$\dot{f}(x, p) = \{f(x, p), H(x, p)\} \quad (28)$$

mit Poisson-Klammer

$$\{a, b\} = \sum_i \left(\frac{\partial a}{\partial q_i} \frac{\partial b}{\partial p_i} - \frac{\partial a}{\partial p_i} \frac{\partial b}{\partial q_i} \right) \quad (29)$$

Die Axiome der Quantenmechanik³

1. Der Zustand ist durch einen Vektor $|\psi\rangle$ in einem (unendlich-dimensionalen) Hilbertraum \mathcal{H} gegeben.
2. Eine Observable A entspricht einem hermiteschen/selbstadjungierten linearen Operator $\hat{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ mit Eigenfunktionen $|n\rangle$ und Eigenwerten a_n .
3. Sei $|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$. Die Wahrscheinlichkeit P der Messung von a_n ist

$$P(\text{Messung von } \hat{A} \text{ an } |\psi\rangle \text{ ergibt } a_n) = |c_n|^2 = \langle \psi | \hat{P}_{|n\rangle} | \psi \rangle \quad (30)$$

mit $\hat{P}_{|n\rangle} = |n\rangle\langle n|$ dem Projektor auf $|n\rangle$

Daraus folgt: Der Erwartungswert von A ist

$$\langle A \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \quad (31)$$

4. Die Messung von a_n führt zu einem Kollaps der Wellenfunktion $|\psi\rangle \rightarrow |n\rangle$
5. Zeitentwicklung von $|\psi\rangle$ für geschlossene Systeme ist gegeben durch Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle \quad (32)$$

Zentral:

- Zufall des Messausgangs liegt nicht an Unkenntnis des Zustands
- Im Unterschied zur Statistischen Physik

³Unterstrichen ist, was wir im Folgenden lernen werden

- Der Kollaps der Wellenfunktion kann nicht durch eine Schrödinger-Gleichung beschrieben werden. Schon allein deshalb, weil er zufällig ist, nicht wie Schrödinger-Gleichung deterministisch

Betrachte zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x) \quad (33)$$

Zwei Aufbaustücke:

- Operator \hat{H}
 - "Frißt" $\psi(x)$ und gibt $E\psi(x)$ aus
 - Eigenwert-Problem, der Eigenwert E muss reell sein
 - Frage: Welche Eigenschaften müssen Operatoren in der Quantenmechanik erfüllen ?
 - Wie wird eine Messung mathematisch abgebildet ?
- Wellenfunktion $\psi(x)$
 - In welchen Raum leben die Wellenfunktionen $\psi(x)$?

3.1.1 Zustände

- Schrödinger-Gleichung ist linear \implies Wellenfunktionen bilden Vektorraum
- Für Wellenfunktion $\psi(x)$ muss gelten

$$\int dx |\psi(x)|^2 = 1 \quad (34)$$

D.h., sie liegen im Raum der quadratintegrablen Funktionen L_2

- $\int dx |\psi(x)|^2$ stellt ein Skalarprodukt dar
- Wir brauchen Vektorraum mit Skalarprodukt: Einen Hilbertraum

3.1.2 Operatoren

Zeit-abhängige Schrödinger-Gleichung

$$\begin{aligned}\hat{E}\psi(x, t) &= \hat{H}\psi(x, t) \\ \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi(x, t) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t)\right)\psi(x, t)\end{aligned}$$

- Verallgemeinertes Eigenwert-Problem

$$\text{Operator}_1\psi = \text{Operator}_2\psi \quad (35)$$

- Beispiel: Harmonischer Oszillator:

$$\begin{aligned}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi(x, t) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2\right)\psi(x, t) \\ \hat{E}\psi(x, t) &= \hat{H}_{kin}\psi(x, t) + \hat{H}_{pot}\psi(x, t)\end{aligned}$$

mit

- Energie-Operator \hat{E}

$$\psi(x, t) \text{ nach } \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi(x, t) \quad (36)$$

Zeitableitung

- Kinetischer Energie Operator \hat{H}_{kin}

$$\psi(x, t) \text{ nach } -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x, t) \quad (37)$$

Ortsableitung

- Potentieller⁴ Energie Operator \hat{H}_{pot}

$$\psi(x, t) \text{ nach const. } x^2\psi(x, t) \quad (38)$$

Multiplikation mit x^2

- Alle diese Operatoren O sind linear im Sinne von:

$$O(\alpha\psi_1 + \beta\psi_2) = \alpha O(\psi_1) + \beta O(\psi_2) \quad (39)$$

- Wir müssen über lineare Operatoren mit reellen Eigenwerten nachdenken, die in Hilberträumen wirken

⁴:;-)

3.1.3 Observable

Ausflug: Klassische Statistik

- Definition Zufallsvariable X
 - Etwas, das eine Wahrscheinlichkeitsdichte $p_X(x)$ hat
 - Wahrscheinlichkeit, eine Realisierung x in $(x, x + dx)$ zu beobachten, ist $p_X(x)dx$
 - $p_X(x) \geq 0$, $\int p_X(x) dx = 1$

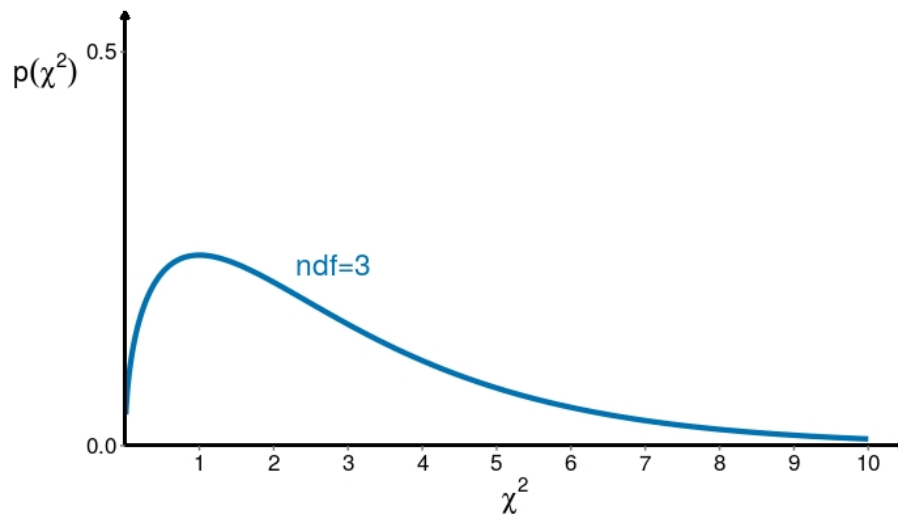


Abbildung 3.1

- Prominentes Beispiel:
Gaußverteilung oder Normalverteilung:

$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} \quad (40)$$

Bezeichnung: $N(\mu, \sigma^2)$

Wichtig wegen Zentralem Grenzwertsatz: Die Summe von beliebigen Zufallsvariablen (mit endlichen Momenten) konvergiert gegen eine Gaußverteilung.

- Physikalisch entsteht Zufall entweder durch
 - Chaos, bei Würfel und in der Statistischen Physik realisiert
 - viele Einflüsse á la Brownian Motion
 - Quantenmechanik
- Erwartungswert $\langle f(x) \rangle$, bitte für unten merken

$$\langle f(x) \rangle = \int dx f(x) p(x) \quad (41)$$

Beachte: Erwartungswert ist eine Zahl

- Beispiele: Momente

$$\mu_k = \langle x^k \rangle = \int x^k p(x) dx \quad (42)$$

1. Moment: Mittelwert

$$\mu_1 = \bar{x} = \mu = \langle x \rangle = \int x p(x) dx \quad (43)$$

2. Moment

$$\mu_2 = \langle x^2 \rangle = \int x^2 p(x) dx \quad (44)$$

Varianz σ^2

$$\sigma^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \mu_2 - \mu_1^2 \quad (45)$$

- Wie Erwartungswert in der Quantenmechanik definieren ?

Wir haben:

- Wellenfunktion $\psi(x)$
- Wahrscheinlichkeit Teilchen in $(x, x+dx)$ zu finden: $p(x)dx = |\psi(x)|^2 dx = \psi(x)^* \psi(x) dx$
- Zu Observablen A gehören Operatoren \hat{A} , die Wellenfunktionen fressen wollen

- Naive Analogie zu Gl. (41):

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \hat{A} |\psi(x)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \hat{A} (\psi(x)^* \psi(x)) \quad (46)$$

geht nicht

- Einzige vernünftige Möglichkeit

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x) \hat{A} \psi(x) \quad (47)$$

Da $\langle A \rangle$ reell sein muss, müssen Eigenwerte von \hat{A} reell sein.

- Wir müssen über hermitesche/selbstadjungierte Operatoren nachdenken

3.1.4 Messungen

- $\psi(x)$ ist "irgendwie"
- Messung gibt zufälligen Wert für Observable
- "Sofortige" zweite Messung ergibt denselben Wert
- Messung muss $\psi(x)$ verändert haben
- Wir müssen über die mathematische Formulierung einer Messung nachdenken

Quantenmechanik hat die Mathematik sehr befruchtet, Funktionalanalysis.

- δ -Distribution
- 1930 von Physiker Dirac lax eingeführt
- 1945 von Mathematiker Schwartz rigoros behandelt, Übung

3.2 Mathematische Formalisierung

3.2.1 Hilbert-Raum

Wellenfunktionen leben im Hilbert-Raum \mathcal{H}

1. \mathcal{H} ist ein Vektorraum über \mathbb{C}

- Kommutativ-Gesetz
- Assoziativ-Gesetz
- Existenz des Null-Vektors
- Die üblichen Vektor-Gesetze

2. Es existiert ein Skalarprodukt: $\langle a|b\rangle$

- Bra- und Ket-Vektoren, von bra-ket: Klammer, © Dirac
- Ket-Vektoren: "normale" Vektoren

Im endlich-dimensionalen:

$$|b\rangle := \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} \quad (48)$$

- Bra-Vektoren leben im Dualraum: Operatoren, lineare Funktionale: Werfen Vektor auf Zahlen

Im endlich-dimensionalen, mit * komplexe Konjugation:

$$\langle a| := (a_1^*, \dots, a_n^*) \quad (49)$$

Bilden auch einen Vektorraum, aber einen ganz anderen

- Es gelten die üblichen Gesetze für das Skalarprodukt
- Die Norm ist durch

$$||a\rangle| := \sqrt{\langle a|a\rangle} \quad (50)$$

gegeben.

Es gilt die Cauchy-Schwarze Ungleichung

$$|\langle a|b\rangle| \leq ||a\rangle| \cdot ||b\rangle| \quad \text{oder} \quad |\langle a|b\rangle|^2 \leq \langle a|a\rangle \langle b|b\rangle \quad (51)$$

- Hier besonders wichtig: Der abzählbar unendlich-dimensionale L_2 -Raum der quadratintegrierbaren Funktionen

$$\langle \psi|\psi\rangle = \int dx \, \psi^*(x)\psi(x) \quad (52)$$

Bra-Vektoren:

$$\int dx \psi^*(x) \quad (53)$$

warten auf ein $\psi(x)$, fressen es und geben eine Zahl aus

$$\int dx \psi^*(x) : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{R} \quad (54)$$

3. Es gibt eine abzählbare Menge von paarweise orthogonalen Vektoren, deren lineare Hülle dicht in \mathcal{H} ist. Diese bilden eine Basis
4. Hilbert-Raum ist vollständig: Zu jeder Cauchy-Folge in \mathcal{H} existiert ein Grenzelement in \mathcal{H}

Bemerkungen

- Für endlich-dimensionale Hilbert-Räume folgen 3. und 4. aus 1. und 2. Für Quantenmechanik aber (abzählbar-)unendlich dimensionale Vektorräume von besonderem Interesse

Wichtige Definitionen:

- Orthogonalität von Vektoren

Zwei Vektoren $|a\rangle$ und $|b\rangle$ heißen orthogonal, wenn gilt:

$$\langle a|b\rangle = 0 \quad (55)$$

- Orthonormalsystem

Menge $\{|a_n\rangle\}$ von Vektoren heißt Orthonormalsystem, wenn gilt

$$\langle a_n|a_m\rangle = \delta_{nm} \quad (56)$$

- Vollständiges Orthonormalsystem

Orthonormalsystem $\{|a_n\rangle\}$ heißt vollständig, wenn jeder Vektor $|b\rangle$ darin ausgedrückt werden kann:

$$|b\rangle = \sum_n c_n |a_n\rangle \quad (57)$$

mit

$$c_m = \langle a_m | b \rangle = \langle a_m | \sum_n c_n | a_n \rangle \quad (58)$$

Vollständiges System von Basisvektoren kann stets in ein orthonormiertes System überführt werden

Bras und Kets revisited, Nomenklatur flexibel halten

- Mit $\{|\psi_i\rangle\}$ ein VOS (ab jetzt immer), eine Basis

$$|\phi\rangle = \sum_i c_i |\psi_i\rangle \quad (59)$$

folgt für normierte Zustände

$$1 = \langle \phi | \phi \rangle = \sum_{ij} \langle \psi_j | c_j^* c_i | \psi_i \rangle = \sum_i |c_i|^2 \quad (60)$$

also

$$\sum_i |c_i|^2 = 1 \quad (61)$$

Für später: Interpretation: $|c_i|^2$ ist Wahrscheinlichkeit, dass bei einer Messung von $|\phi\rangle$ der Basiszustand $|\psi_i\rangle$ gemessen wird

- Vollständigkeitsrelation und Projektoren

Betrachte

$$\begin{aligned} |\phi\rangle &= \sum_i \langle \psi_i | \phi \rangle |\psi_i\rangle \\ &= \sum_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i | \phi \rangle \\ &= \left(\sum_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \right) |\phi\rangle \\ &\rightarrow \sum_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| = \mathbb{1} \quad \text{Vollständigkeitsrelation} \end{aligned}$$

Einschieben der Eins oft sehr nützlich

Betrachte einen Summanden ergibt Projektionsoperator P_j

$$P_j = |\psi_j\rangle\langle\psi_j| \quad (62)$$

Warum ?

$$P_j|\phi\rangle = \sum_i |\psi_j\rangle\langle\psi_j|\langle\psi_i|\phi\rangle|\psi_i\rangle = \langle\psi_j|\phi\rangle|\psi_j\rangle = c_j|\psi_j\rangle \quad (63)$$

Das j -te Element wird herausprojiziert

Allgemein: $|a\rangle\langle b|$ ist aus der linearen Algebra als dyadisches Produkt bekannt.
Im endlich-dimensionalen:

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \cdot (b_1^*, \dots, b_n^*) = \begin{pmatrix} a_1 b_1^* & \dots & a_1 b_n^* \\ \vdots & & \vdots \\ a_n b_1^* & \dots & a_n b_n^* \end{pmatrix} \quad (64)$$

Es gilt

$$P_j^2 = |\psi_j\rangle\langle\psi_j|\psi_j\rangle\langle\psi_j| = P_j \quad (65)$$

Projektsoperator ist idempotent

Eigenwerte des Projektionsoperators sind 0 und 1

Sei

$$P_j\psi = \lambda\psi \quad (66)$$

dann

$$P_j^2\psi = \lambda^2\psi = P_j\psi = \lambda\psi, \quad \lambda^2 = \lambda \quad \lambda = 0, 1 \quad (67)$$

Interpretation:

- $\lambda = 0$: ψ im Kern von P_j
- $\lambda = 1$: ψ im Bild von P_j

Summen von Projektionsoperatoren projizieren auf Teilräume

- Basistransformationen

Zustand $|\phi\rangle$ sei in Basis $\{|\psi_i\rangle\}$ gegeben

$$|\phi\rangle = \sum_i c_i |\psi_i\rangle, \quad \text{mit } c_i = \langle\psi_i|\phi\rangle \quad (68)$$

Um in eine andere Basis $\{|a_n\rangle\}$ zu gelangen, Eins einschieben

$$\begin{aligned} |\phi\rangle &= \sum_i \langle\psi_i|\phi\rangle \sum_n |a_n\rangle \langle a_n|\psi_i\rangle \\ &= \sum_n \underbrace{\sum_i \langle\psi_i|\phi\rangle \langle a_n|\psi_i\rangle}_{=k_n} |a_n\rangle = \sum_n k_n |a_n\rangle \end{aligned}$$

- Kontinuierliche Basen

Bisher: Diskrete Basiszustände $|\psi_i\rangle$ mit (un-) endlicher abzählbarer Dimension

Betrachte freie zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E \psi(x) \quad (69)$$

Lösung:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} =: |p\rangle, \quad p \in \mathbb{R} \quad (70)$$

Sicher nicht normierbar, uneigentlicher Zustandsvektor

Gesamtheit der ebenen Wellen definieren auch eine Basis:

$$|\phi\rangle = \int dp \, c(p) |p\rangle \quad (71)$$

Basis ist überabzählbar unendlich dimensional

Normierung

$$\langle p|p'\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp \, e^{i(p-p')x/\hbar} = \delta(p-p') \quad (72)$$

Von diskreter Basis zu kontinuierlicher Basis:

$$\begin{aligned} i &\rightarrow p \\ \sum_i &\rightarrow \int dp \\ \delta_{ij} &\rightarrow \delta(p - p') \end{aligned}$$

Termin3

3.2.2 Lineare Operatoren im Hilbert-Raum

Definition

- Ein Operator \hat{f} bildet einen Zustand $|\psi\rangle$ auf einen Zustand $|\phi\rangle$ ab:

$$|\phi\rangle = \hat{f}(|\psi\rangle) \quad (73)$$

In der Quantenmechanik sind lineare Operatoren A von Interesse.

- Definition:

Für lineare Operatoren \hat{A} gilt:

$$\hat{A}(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) = c_1\hat{A}|\psi_1\rangle + c_2\hat{A}|\psi_2\rangle \quad (74)$$

Beispiel: Der Impuls-Operator $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ ist linear

Darstellung von Operatoren

- Endlich-dimensionaler Fall

Stellen wir Bras $\langle\psi|$ und Kets $|\psi\rangle$ in einer Basis $|i\rangle$ dar

$$\begin{aligned} \langle\psi| &= (\psi_1^*, \dots, \psi_n^*) = \sum_i \psi_i^* \langle i| \\ |\psi\rangle &= \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix} = \sum_i \psi_i |i\rangle \end{aligned}$$

so ist Operator A eine Matrix mit Elementen

$$A_{ij} = \langle i | \hat{A} | j \rangle \quad (75)$$

Es folgt

$$\hat{A} = \sum_{ij} A_{ij} |i\rangle \langle j| \quad (76)$$

- Ist $|i\rangle$ Eigenbasis von A

$$\hat{A}|i\rangle = \lambda_i |i\rangle \quad (77)$$

so folgt der Spektralsatz

$$\hat{A} = \sum_i \lambda_i |i\rangle \langle i| \quad (78)$$

Sehr wichtig:

- \hat{A} hat Diagonalgestalt
- In Eigenbasis zerfällt das i.A. hoch-dimensionale Problem in viele ein-dimensionale Probleme
- Spektralsatz auch im unendlich-dimensionalen formulierbar, siehe Übung.

Hermitesche/selbstadjungierte Operatoren

- Der zu Operator A ⁵ adjungierte Operator A^\dagger ist definiert durch

$$\langle A^\dagger \phi | \psi \rangle = \langle \phi | A \psi \rangle \quad (79)$$

Adjungierter Operator A^\dagger wälzt Wirkung von A auf Ket-Vektor auf Bra-Vektor um

- Wegen $\langle \phi | \psi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle^*$ gilt

$$\langle \phi | A \psi \rangle = \langle A^\dagger \phi | \psi \rangle = \langle \psi | A^\dagger \phi \rangle^* \quad (80)$$

In Dirac-Notation

$$\langle \phi | A | \psi \rangle = \langle \psi | A^\dagger | \phi \rangle^* \quad (81)$$

⁵Das "Dach" ist ab jetzt mitunter unterdrückt

- Endlich dimensionaler Vektorraum

Sei A eine $n \times n$ Matrix, dargestellt in einer Basis, so gilt:

Adjungierte Matrix ergibt sich durch Transposition und komplexe Konjugation

- Definition:

Ein Operator ist hermitesch, wenn gilt

$$A^\dagger = A \quad (82)$$

- Sind ferner Definitionsbereiche von A und A^\dagger identisch, heißt A selbstadjungiert⁶.

- Beispiele:

- Endlich dimensionaler Vektorraum

Eine $n \times n$ Matrix ist selbstadjungiert, wenn sie reell und symmetrisch ist

- Der Ortsoperator ist (trivial) hermitesch

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x\psi) = \int_{-\infty}^{\infty} dx (x\psi)^*\psi \quad (83)$$

- Der Impulsoperator $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ ist hermitesch

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right) \psi &= \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^* \frac{d\psi}{dx} \\ &= \frac{\hbar}{i} \psi^* \psi \Big|_{-\infty}^{\infty} - \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{d\psi^*}{dx} \psi \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi \right)^* \psi \end{aligned}$$

- Damit folgt: Hamilton-Operator

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) \quad (84)$$

ist auch hermitesch

⁶Nur im unendlich-dimensionalen relevant. Wir werden die Begriffe synonym verwenden

- Es gilt

$$\begin{aligned}(A^\dagger)^\dagger &= A \\ (\lambda A)^\dagger &= \lambda^* A^\dagger \\ (A+B)^\dagger &= A^\dagger + B^\dagger \\ (AB)^\dagger &= B^\dagger A^\dagger\end{aligned}$$

Übersetzung in die Physik

- (Fast) alle Operatoren der Quantenmechanik sind hermitesch, wichtige Ausnahme siehe Kap. 5.4
- Schrödinger-Gleichung ist Eigenwert-Problem, betrachte zeitunabhängigen Fall

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (85)$$

Im endlich-dimensionalen Falle führt dies auf den bekannten Fall aus der linearen Algebra

$$\begin{pmatrix} h_{11} & \dots & h_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ h_{n1} & \dots & h_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix} \quad (86)$$

Im allgemeinen hat Gl. (85) unendlich viele Lösungen $i = 1, 2, \dots$

$$\hat{H}\psi_i = E_i\psi_i \quad (87)$$

- Wir müssen über Eigenwerte und Eigenfunktionen hermitescher Operatoren nachdenken

Wichtige Eigenschaften hermitescher Operatoren

- (i) Die Eigenwerte hermitescher Operatoren sind reell

Beweis:

- Sei a Eigenwert von \hat{A}

$$\hat{A}\psi = a\psi \quad (88)$$

- Dann gilt

$$a = \frac{\langle \psi | A \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\langle A \psi | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = a^* \quad (89)$$

(ii) Die Eigenfunktionen hermitescher Operatoren sind orthogonal

Beweis:

– Multipliziere

$$\hat{A}\psi_n = a_n\psi_n \quad (90)$$

mit ψ_m^* , ergibt

$$\psi_m^* \hat{A}\psi_n = a_n \psi_m^* \psi_n \quad (91)$$

Entsprechend

$$\hat{A}\psi_m = a_m\psi_m \quad (92)$$

mit ψ_n^* , ergibt

$$\psi_n^* \hat{A}\psi_m = a_m \psi_n^* \psi_m \quad (93)$$

– Subtrahiere Gl. (93) komplex konjugiert von Gl. (91) und integriere

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\psi_m^* \hat{A}\psi_n - (\hat{A}^\dagger \psi_m)^* \psi_n \right) = \int_{-\infty}^{\infty} dx (a_n \psi_m^* \psi_n - a_m^* \psi_m^* \psi_n) \quad (94)$$

\hat{A} hermitesch \implies linke Seite = 0, damit

$$(a_n - a_m^*) \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_m^* \psi_n = 0 \quad (95)$$

– Drei Fälle :

1. $n = m$

- * Eigenwerte sind reell.
- * Gleichung trivial erfüllt

2. $n \neq m$, nicht entartete Eigenwerte $a_n \neq a_m$

- * Es folgt

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_m^* \psi_n = 0 \quad (96)$$

- * Mit der richtigen Normierung

$$\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_m^* \psi_n = \delta_{mn} \quad (97)$$

- * Eigenfunktionen eines hermiteschen Operators zu verschiedenen nicht-entarteten Eigenwerten sind orthogonal

3. Betrachte $n \neq m$, entartete Eigenwerte $a_n = a_m$

- * Zugehörige Eigenfunktionen nicht notwendiger Weise orthogonal
- * Orthogonalisierung durch Bildung von Linearkombinationen
- * Entartung physikalisch relevant, da mit Symmetrien des Problems verbunden

(iii) Die Eigenfunktionen hermitescher Operatoren sind vollständig

Beweis:

- Eigenfunktionen $\{\psi_n\}$ vollständig bedeutet für beliebige Wellenfunktion ϕ :

$$\phi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) \quad (98)$$

ϕ lässt sich nach ψ_n entwickeln

- Zur Berechnung der c_n , multipliziere mit ψ_m^* und integriere

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_m^* \phi = \sum_n c_n \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_m^* \psi_n}_{=\delta_{nm}} = c_m \quad (99)$$

ergo

$$c_m = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_m^*(x) \phi(x) \quad (100)$$

- ϕ sei normiert, so folgt

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \phi^* \phi = \int_{-\infty}^{\infty} dx \sum_{nm} c_n^* c_m \psi_n^* \psi_m = \sum_{nm} c_n^* c_m \delta_{nm} \quad (101)$$

und damit

$$1 = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 \quad (102)$$

$\{c_n\}$ ist unendlich-dimensionaler Vektor der Länge 1.

- Es besteht ein-eindeutiger Zusammenhang zwischen $\phi(x)$ und c_n

Berechnung von Erwartungswerten

- Betrachte beliebige Wellenfunktion $\phi(x)$ und Operator \hat{A} mit seinem orthogonalen, vollständigen und normierten System von Eigenfunktionen $\psi_n(x)$

$$\hat{A}\psi_n(x) = a_n\psi_n(x) \quad (103)$$

- Frage: Wie lautet Erwartungswert von A ?

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \phi^*(x) \hat{A}\phi(x) \quad (104)$$

Mit $\{\psi_n\}$ Eigenfunktionen von \hat{A}

$$\phi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x), \quad c_n = \langle \psi_n | \phi \rangle \quad (105)$$

folgt

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \sum_{nm} c_m^* c_n \psi_m^* \underbrace{\hat{A}\psi_n}_{=a_n\psi_n} \\ &= \sum_{nm} c_m^* c_n a_n \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_m^* \psi_n}_{=\delta_{nm}} \\ &= \sum_n c_n^* c_n a_n \end{aligned}$$

Ergo

$$\langle A \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 a_n \quad (106)$$

- Interpretation

- Erwartungswert von A ist Summe über Eigenwerte von \hat{A} gewichtet mit $|c_n|^2$, dem quadrierten Überlapp $|\langle \psi_n | \phi \rangle|^2$ von ψ_n und ϕ
 - Ist ϕ Eigenfunktion von \hat{A} , d.h. $\phi = \psi_k$, so gilt $c_k = 1$ und $c_l = 0$ für $l \neq k$
- Dann

$$\langle \hat{A} \rangle = a_k \quad (107)$$

eine scharfe Messung

Korrespondenz-Prinzip revisited:

- Observablen werden hermitesche Operatoren zugeordnet

$$A(x, p) \rightsquigarrow \hat{A}(\hat{x}, \hat{p}) \quad (108)$$

Das ist nicht eindeutig:

- Trivial nicht eindeutig:

$$p^2 x^2 \rightsquigarrow \begin{cases} \hat{p}^2 \hat{x}^2 & \text{nicht hermitesch} \\ \frac{1}{2}(\hat{p}^2 \hat{x}^2 + \hat{x}^2 \hat{p}^2) & \text{hermitesch} \\ \frac{1}{4}(\hat{p} \hat{x} + \hat{x} \hat{p})^2 & \text{hermitesch} \end{cases} \quad (109)$$

- Tiefsinnig nicht eindeutig

Groenewald-van-Hove Theorem, 1946, 1951

Quantisierung ist nicht konsistent für Potenzen > 2

- FAPP (For all practical purposes), Ort, Impuls, Energie, Drehimpuls, geht alles gut.

Inverser Operator

- Definition:

Wenn für $|\phi\rangle = A|\psi\rangle$ ein Operator A^{-1} mit $A^{-1}|\phi\rangle = |\psi\rangle$ existiert, so heißt dieser inverser Operator

- Es gilt

$$A^{-1}A = AA^{-1} = \mathbb{1} \quad (110)$$

Unitäre Operatoren

- Definition: Ein Operator U ist unitär, wenn gilt

$$U^\dagger = U^{-1} \quad (111)$$

und damit

$$U^\dagger U = UU^\dagger = \mathbb{1} \quad (112)$$

- Betrachte unitäre Transformation U eines

- Zustandes:

$$|\psi'\rangle = U|\psi\rangle \quad (113)$$

- Operators:

$$A' = UAU^\dagger \quad (114)$$

so bleiben experimentell messbare Größen invariant:

- Skalarprodukte

$$\langle\phi|\psi\rangle = \langle\phi|U^\dagger U|\psi\rangle = \langle\phi'|\psi'\rangle \quad (115)$$

- Erwartungswerte:

$$\langle\psi|A|\psi\rangle = \langle\psi|U^\dagger UAU^\dagger U|\psi\rangle = \langle\psi'|A'|\psi'\rangle \quad (116)$$

- Eigenwerte:

Sei

$$U\psi = \lambda\psi \quad (117)$$

dann gilt

$$\langle\psi|\psi\rangle = \langle\psi|U^\dagger U\psi\rangle = \langle U\psi|U\psi\rangle = |\lambda|^2 \langle\psi|\psi\rangle \implies |\lambda|^2 = 1 \quad (118)$$

Alle Eigenwerte eines unitären Operators sind vom Betrage eins.

Beispiel: Zeitentwicklungsoperator

- Betrachte zeitabhängige Schrödinger-Gleichung, zeitunabhängiges Potential

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle \quad (119)$$

Formale Lösung:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= U(t-t_0)|\psi(t_0)\rangle \\ U(t, t_0) &= e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)} \end{aligned}$$

$e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}$ definiert über Potenzreihe⁷

$$e^{\hat{A}t} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^n t^n}{n!} = \mathbb{1} + \hat{A}t + \frac{1}{2}\hat{A}^2 t^2 + \dots \quad (120)$$

⁷Wunderschöner Artikel: Moler & van Loan. Nineteen Dubious Ways to Compute the Exponential of a Matrix, Twenty-Five Years Later, SIAM Review, 2003, 45(1), 3-49.

- Zeitentwicklungsoperator $U(t, t_0)$ ist unitär:

$$U^\dagger(t, t_0) = e^{\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)} = U(t_0, t) = U^{-1}(t, t_0) \quad (121)$$

und erhält somit die Norm der Wellenfunktion

$$\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t_0) | U^\dagger(t, t_0) U(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle = \langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle \quad (122)$$

Termin4

3.2.3 Kommutatoren

- Betrachte zwei Operatoren A und B . Der Kommutator $[., .]$ ist definiert als

$$[A, B] := AB - BA \quad (123)$$

Kommutator misst, ob zwei Operatoren vertauschen

- Erinnere endlich-dimensionalen Fall: Für Matrizen A und B gilt in der Regel:

$$[A, B] = AB - BA \neq 0 \quad (124)$$

- Betrachte Kommutator von Orts- und Impulsoperator

$$[\hat{x}, \hat{p}] = \left[x, \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right] = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{d}{dx} - \frac{d}{dx} x \right) \quad (125)$$

Beachte: Operatoren wollen auf Zustände angewandt werden

Daher

$$\frac{d}{dx} x \psi = 1 \psi + x \frac{d}{dx} \psi = \left(1 + x \frac{d}{dx} \right) \psi \quad (126)$$

Somit

$$[\hat{x}, \hat{p}] = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{d}{dx} - 1 - x \frac{d}{dx} \right) = -\frac{\hbar}{i} \quad (127)$$

oder

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \quad (128)$$

- Beachte: Orts- und Impulsoperator bezüglich verschiedener Komponenten vertauschen

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = \left[x_i, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} \right] = \frac{\hbar}{i} \left(x_i \frac{\partial}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} x_i \right), \quad i \neq j \quad (129)$$

Wegen:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} x_i \psi = x_i \frac{\partial}{\partial x_j} \psi \quad (130)$$

folgt

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = 0 \quad (131)$$

- Übung: Berechne diverse Kommutatoren
- Definition: Antikommutator

$$[A, B]_+ := AB + BA \quad (132)$$

- Frage: Wann ergibt das Produkt zweier hermitescher Operatoren wieder einen hermiteschen Operator ?

Übung:

Verswindet der Kommutator, $[A, B] = 0$, ist das Produkt AB hermitesch

Wichtiger Satz:

- Zwei Operatoren \hat{A} und \hat{B} kommutieren genau dann, wenn ein Satz von gemeinsamen Eigenfunktionen beider Operatoren existiert.
- Gemeinsame Eigenfunktionen $\implies \hat{A}$ und \hat{B} kommutieren

Beweis:

Sei ψ_n gemeinsame Eigenfunktion von \hat{A} und \hat{B} , dann folgt:

$$AB\psi_n = Ab_n\psi_n = a_nb_n\psi_n = b_na_n\psi_n = Ba_n\psi_n = BA\psi_n, \quad \forall \psi_n \quad (133)$$

$$\implies [A, B] = 0 \quad (134)$$

- \hat{A} und \hat{B} kommutieren \implies Es existiert gemeinsames Eigensystem
Annahme: Eigenwerte seien nicht entartet, Satz gilt aber auch sonst.

Beweis:

Sei

$$\hat{A}\psi_n = a_n\psi_n \quad (135)$$

Dann gilt

$$\hat{B}\hat{A}\psi_n = a_n\hat{B}\psi_n \quad (136)$$

Mit Kommutativität:

$$\hat{B}\hat{A}\psi_n = \hat{A}\hat{B}\psi_n \quad (137)$$

Damit zusammen

$$\hat{A}(\hat{B}\psi_n) = a_n(\hat{B}\psi_n) \quad (138)$$

$\implies \phi_n = \hat{B}\psi_n$ ist auch Eigenfunktion von \hat{A} mit Eigenwert a_n

Da Eigenwerte nicht-entartet sind, sind Eigenfunktionen eindeutig $\implies \phi_n \propto \psi_n$

$$\hat{B}\psi_n = b_n\psi_n \quad (139)$$

ψ_n ist Eigenfunktion von \hat{B} zum Eigenwert b_n .

- Dieses wird später, Kap. 7, wichtig zur Definition von Quantenzahlen.

3.3 Zurück zur Physik

3.3.1 Die Messung

Der Ablauf, Axiome der Quantenmechanik revisited

- Zeitentwicklung von $\psi(x, t)$ durch Schrödinger-Gleichung gegeben
- Observable A durch hermiteschen Operator \hat{A} gegeben
- Bestimme Eigenfunktionen $|n\rangle$ mit Eigenwerten a_n von \hat{A}
- Messung zum Zeitpunkt t : Projiziere $\psi(x, t)$ auf $|n\rangle$

$$c_n = \langle n | \psi(x, t) \rangle \quad (140)$$

- $|c_n|^2$ gibt Wahrscheinlichkeit, dass a_n gemessen wird.

Beachte:

$$\begin{aligned} |c_n|^2 &= \langle n | \psi(x, t) \rangle^* \langle n | \psi(x, t) \rangle, \quad \text{mit } \langle n | \psi(x, t) \rangle^* = \langle \psi(x, t) | n \rangle \\ &= \langle \psi(x, t) | \underbrace{|n\rangle\langle n|}_{\text{Projektor}} | \psi(x, t) \rangle \end{aligned}$$

- Wird a_n gemessen, geht Zustand $|\psi(x, t)\rangle$ in Zustand $|n\rangle$ über.
Kollaps der Wellenfunktion.
Wird direkt danach noch mal gemessen, ist System immer noch in Zustand $|n\rangle$,
Messung ergibt wieder a_n
- Falls nicht, ist $|n\rangle$ Anfangswert für Zeitentwicklung mit Schrödinger-Gleichung
- Wird mehrfach an identisch präpariertem Zustand $|\psi(x, t)\rangle$ gemessen, erinnere Gl. (106), so gilt:

$$\langle A \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 a_n \quad (141)$$

Interpretation

- Erwartungswert von A ist Summe über Eigenwerte von \hat{A} gewichtet mit $|c_n|^2$,
der Wahrscheinlichkeit, dass a_n auftritt
 $|c_n|^2$ ergibt sich aus Überlapp von $|\psi(x, t)\rangle$ und $|n\rangle$
- Ist ψ Eigenfunktion von \hat{A} , d.h. $\psi = |k\rangle$, so gilt $c_k = 1$ und $c_l = 0$ für $l \neq k$
Dann

$$\langle \hat{A} \rangle = a_k \quad (142)$$

eine scharfe Messung

- Ist ψ nicht Eigenfunktion von \hat{A} , so wird eine einzelne Messung einen der Eigenwerte a_n liefern und zwar mit Wahrscheinlichkeit $|c_n|^2$.
- Ergebnis einer einzelnen Messung ist also unbestimmt⁸.

⁸und zwar in einem sehr tiefen Sinne, siehe Kap. 10

- Merke: Die Zeitentwicklung des Zustandes ist deterministisch. Zustand bestimmt aber nicht deterministisch Ergebnis einer Messung

Zentral:

- Zufall des Messausgangs liegt nicht an Unkenntnis des Zustands
- Im Unterschied zur Statistischen Physik
- Der Kollaps der Wellenfunktion kann nicht durch eine Schrödinger-Gleichung beschrieben werden.

3.3.2 Ehrenfest Theorem

Die klassische Mechanik muß als Grenzfall in der Quantenmechanik enthalten sein.

- Betrachte Schrödinger-Gleichung und die komplex konjugierte, adjungierte

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t) &= -\frac{i}{\hbar}H\psi(x, t) \\ \frac{\partial}{\partial t}\psi^*(x, t) &= \frac{i}{\hbar}H^*\psi^*(x, t) = \frac{i}{\hbar}H\psi^*(x, t)\end{aligned}$$

Für Operator A ist der Erwartungswert

$$\langle A \rangle(t) = \int dx \psi^*(x, t) A(t) \psi(x, t) \quad (143)$$

- Zeitliche Ableitung, alle Argumente unterdrückt

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle A \rangle &= \int dx \left(\underbrace{\frac{\partial \psi^*}{\partial t}}_{=\frac{i}{\hbar}H\psi^*} A\psi + \psi^* \frac{\partial A}{\partial t} \psi + \psi^* A \underbrace{\frac{\partial \psi}{\partial t}}_{=-\frac{i}{\hbar}H\psi} \right) \\ &= \int dx \left(\frac{i}{\hbar} (H\psi^* A\psi - \psi^* A H\psi) + \psi^* \frac{\partial A}{\partial t} \psi \right) \\ &= \int dx \left(\frac{i}{\hbar} (\psi^* H A\psi - \psi^* A H\psi) + \psi^* \frac{\partial A}{\partial t} \psi \right) \\ &= \int dx \left(\frac{i}{\hbar} (\psi^* (H A - A H) \psi) + \psi^* \frac{\partial A}{\partial t} \psi \right)\end{aligned}$$

Ergibt

$$\frac{d}{dt}\langle A \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H, A] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle \quad (144)$$

- Vergleich mit klassischer Mechanik

$$\frac{d}{dt}f = \{H, f\} + \frac{\partial f}{\partial t} \quad (145)$$

mit Poisson-Klammer

$$\{f, g\} = \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial g}{\partial q} - \frac{\partial g}{\partial p} \frac{\partial f}{\partial q} \quad (146)$$

Andere Formulierung des Korrespondenz-Prinzips:

Klassische Poisson-Klammer entspricht quantenmechanischem Kommutator multipliziert mit $\frac{i}{\hbar}$

- Zwei wichtige Kommutatoren, Beweise als Übung

$$[H, x_i] = \left[\sum_j \frac{p_j^2}{2m}, x_i \right] = -i\hbar \frac{p_i}{m} \quad (147)$$

$$[H, p_i] = \left[V(x), \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_i} \right] = i\hbar \frac{\partial V}{\partial x_i} \quad (148)$$

- Anwendung von Gl. (144) auf x und p , mit Kraft: $F(x) = -\nabla V(x)$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle x \rangle &= \frac{1}{m}\langle p \rangle \\ \frac{d}{dt}\langle p \rangle &= -\langle \nabla V(x) \rangle = \langle F(x) \rangle \end{aligned}$$

Fasse zusammen:

$$m \frac{d^2}{dt^2}\langle x \rangle = \langle F(x) \rangle \quad \text{erscheint bekannt} \quad (149)$$

- Ehrenfest Theorem: Die klassischen Gleichungen gelten für die Mittelwerte
- ABER: Das bedeutet nicht, dass die Mittelwerte $\langle x \rangle$ und $\langle p \rangle$ den klassischen Bewegungsgleichungen genügen.

- Dazu muss man Mittelwert der Kraft

$$\langle F(x) \rangle = \int dx \psi^*(x, t) F(x) \psi(x, t) \quad (150)$$

durch ihren Wert $F(\langle x \rangle)$ an der Stelle $\langle x \rangle$ ersetzen dürfen

- Wann gilt dies ? Betrachte Taylor-Entwicklung

$$F(x) = F(\langle x \rangle) + F'(\langle x \rangle)(x - \langle x \rangle) + \frac{1}{2} F''(\langle x \rangle)(x - \langle x \rangle)^2 + \dots \quad (151)$$

Wegen $\langle (x - \langle x \rangle) \rangle = 0$ entfällt 2. Term

$$F(x) = F(\langle x \rangle) + \frac{1}{2} F''(\langle x \rangle) \underbrace{(x - \langle x \rangle)^2}_{=\Delta x^2} + \dots \quad (152)$$

Ersetzen von $\langle F(x) \rangle$ durch $F(\langle x \rangle)$ ist exakt, wenn zweite und höhere Ableitungen verschwinden. Näherungsweise gut, wenn Wellenfunktion so gut lokalisiert ist, dass sich $F(x)$ im Bereich ihrer Ausdehnung nur wenig ändert

$$\frac{(\Delta x)^2 F''(\langle x \rangle)}{F(\langle x \rangle)} \ll 1 \quad (153)$$

Lessons learned

- Die Axiome der Quantenmechanik:
 - Zustände leben im Hilbertraum
 - Observable durch selbstadjungierte Operatoren repräsentiert
 - Messung: Projektion der Wellenfunktion auf Eigenzustände des selbstadjungierten Operators
 - Eigenwert als zufälliges Messergebnis
 - Wahrscheinlichkeit durch Überlapp von Wellenfunktion mit Eigenzuständen gegeben
 - Kollaps der Wellenfunktion auf zugehörigen Eigenzustand
- Drei wichtige Eigenschaften selbstadjungierter Operatoren:
 - Eigenwerte sind reell
 - Eigenzustände sind orthogonal
 - Eigenzustände sind vollständig
- Groenewald-van-Hove Theorem: Korrespondenz-Prinzip nicht konsistent
- Kommutatoren messen Vertauschbarkeit von Operatoren
- Ehrenfest-Theorem: Klassische Mechanik als Grenzfall der Quantenmechanik

Termin5

4 Unschärferelationen

- Erinnere Cauchy-Schwarz'sche Ungleichung:

$$\langle \phi | \phi \rangle \langle \psi | \psi \rangle \geq |\langle \phi | \psi \rangle|^2 \quad (154)$$

- Betrachte zwei hermitesche Operatoren \hat{A} und \hat{B} und Zustand ψ
Definiere Operatoren A und B durch Abziehen des Mittelwertes im Zustand ψ

$$A = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle = \hat{A} - \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \quad (155)$$

B entsprechend

- Setze $A\psi$ und $B\psi$ in Cauchy-Schwarz'sche Ungleichung ein

$$\langle A\psi|A\psi\rangle\langle B\psi|B\psi\rangle \geq |\langle A\psi|B\psi\rangle|^2 \quad (156)$$

Hermiteizität ausnutzen

$$\langle\psi|A^2|\psi\rangle\langle\psi|B^2|\psi\rangle \geq |\langle\psi|AB|\psi\rangle|^2 \quad (157)$$

- Mit Antikommutator

$$[A, B]_+ = AB + BA \quad (158)$$

zerlege AB in hermiteschen und einen anti-hermiteschen Anteil

$$AB = \frac{1}{2}[A, B]_+ + \frac{1}{2}[A, B] \quad (159)$$

mit

$$\begin{aligned} [A, B]_+^\dagger &= [A, B]_+ \quad \text{hermitesch} \\ \langle\psi|[A, B]_+|\psi\rangle &\in \mathbb{R} \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} [A, B]^\dagger &= -[A, B] \quad \text{anti-hermitesch} \\ \text{Kommutator von } A \text{ und } B &= iC, \quad A, B, C \text{ hermitesch} \\ \langle\psi|[A, B]|\psi\rangle &\quad \text{rein imaginär} \end{aligned}$$

- Zerlegung eines Operators in einen hermiteschen und einen antihermiteschen bedeutet für Erwartungswert Zerlegung in Real- und Imaginärteil

Damit gilt für Betragsquadrat:

$$|\langle\psi|AB|\psi\rangle|^2 = \frac{1}{4}\langle\psi|[A, B]_+|\psi\rangle^2 + \frac{1}{4}|\langle\psi|[A, B]|\psi\rangle|^2 \quad (160)$$

- Die Mittelwerte $\langle\hat{A}\rangle$ und $\langle\hat{B}\rangle$ sind Zahlen, kommutieren mit allem.

Daher gilt

$$[\hat{A}, \hat{B}] = [A, B] \quad (161)$$

Damit folgt bei Vernachlässigung des ersten Terms in Gl. (160)

$$|\langle \psi | AB | \psi \rangle|^2 \geq \frac{1}{4} |\langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle|^2 \quad (162)$$

Warum nicht den zweiten statt des ersten Terms vernachlässigen? Über kommutierende Operatoren wissen wir was :-)

- Die Unschärfe ΔA ist die Standardabweichung von \hat{A} , Wurzel aus der Varianz

$$(\Delta A)^2 = \langle \psi | (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 | \psi \rangle \quad (163)$$

ΔB entsprechend

- Somit folgt für das Produkt der Unschärfen mit Gln. (157, 162)

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle| \quad (164)$$

die allgemeine Unschärfe-Relation:

Observablen von nicht-kommutierenden Operatoren sind nicht simultan scharf messbar

- Betrachte : $\hat{A} = \hat{x}_i$ und $\hat{B} = \hat{p}_j$

Erinnere:

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij} \quad (165)$$

Es folgt der wichtige Spezialfall der Orts-Impulsunschärfe:

$$\Delta x_i \Delta p_j \geq \frac{\hbar}{2} \delta_{ij} , \quad (166)$$

die Heisenberg'sche Unschärfe-Relation.

Kurzklausur

Physikalisch/mathematische Interpretation

- Kommutierende Operatoren
 - Erinnere: Kommutieren zwei Operatoren A und B , so haben sie die gleichen Eigenfunktionen $|n\rangle$
 - Messung von A überführt Wellenfunktion $|\psi\rangle$ in Eigenfunktion $|n\rangle$ und ergibt Eigenwert a_n als Messwert

- Unmittelbar anschließende Messung von B lässt Eigenfunktion $|n\rangle$ unverändert und ergibt b_n als Messwert
- Erneute Messung von A ergibt wieder $|n\rangle$ und a_n
- Dieses lässt beliebig häufig wiederholen
- $\Delta t \rightarrow 0$
- Ergo: Man kann von simultanen scharfen Messwerten sprechen
- Nicht-kommutierende Operatoren
 - Messung von A überführt Wellenfunktion $|\psi\rangle$ in Eigenfunktion $|n\rangle$ ergibt Eigenwert a_n
 - $|n\rangle$ ist nicht Eigenfunktion von B
 - Messung von B lässt $|n\rangle$ in Eigenfunktion $|m\rangle$ von B kollabieren und ergibt b_m
 - $|m\rangle$ ist keine Eigenfunktion von A
 - Erneute Messung von A ergibt Kollaps in Eigenfunktion $|n'\rangle$ und Eigenwert $a_{n'}$
 - Diese wechselseitigen Zerstörung der Eigenfunktionen iteriert
 - Die Messwerte ändern sich ständig
 - Ergo: Man kann nicht von scharfen Messwerten sprechen
- Gilt alles im zeit-abhängigen wie im zeit-unabhängigen Falle

Unschärferelation ist eine Ungleichung

Unter welchen Bedingungen an die Wellenfunktion wird das Gleichheitszeichen angenommen ?

- Gleichheitszeichen bei Cauchy-Schwarz'scher Ungleichung

$$\langle A\psi|A\psi\rangle\langle B\psi|B\psi\rangle \geq |\langle A\psi|B\psi\rangle|^2 \quad (167)$$

wird angenommen für

$$B\psi = zA\psi, \quad z \in \mathbb{C} \quad (168)$$

Gleichheitszeichen in Gl. (162)

$$|\langle\psi|AB|\psi\rangle|^2 \geq \frac{1}{4}|\langle\psi|[\hat{A}, \hat{B}]|\psi\rangle|^2 \quad (169)$$

wird angenommen, wenn Erwartungswert des Antikommutators verschwindet

$$\langle \psi | AB | \psi \rangle + \langle \psi | BA | \psi \rangle = \langle A\psi | B\psi \rangle + \langle B\psi | A\psi \rangle = 0 \quad (170)$$

Gl. (168) eingesetzt

$$0 = \langle A\psi | z A\psi \rangle + \langle z A\psi | A\psi \rangle = \langle A\psi | z A\psi \rangle + \langle A\psi | z A\psi \rangle^* = (z + z^*) \langle A\psi | A\psi \rangle \quad (171)$$

Ergo: z muss rein imaginär sein

- Eingesetzt in Gl. (168)

$$B\psi = i\lambda A\psi, \quad \lambda \text{ reell} \quad (172)$$

- Für $A = \hat{x}$ und $B = \hat{p}$ ergibt sich die Differentialgleichung

$$\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} - \langle p \rangle \right) \psi = i\lambda(x - \langle x \rangle)\psi \quad (173)$$

Lösung: Gauß'sches Wellenpaket, siehe Kap. 5.1. Beweis als Übung

Beweis der Orts-Impuls Unschärfe auf Grund der Fourier-Transformation

- Sei $\psi(x)$ eine quadrat-integrierte Funktion
- Dann ist⁹

$$\tilde{\psi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \psi(x) e^{-ikx} \quad (174)$$

die Fourier-Transformierte von $\psi(x)$

- Sei ferner

$$\begin{aligned} (\Delta x)^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \psi^*(x) (x - \langle x \rangle)^2 \psi(x) \\ (\Delta k)^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} dk \, \tilde{\psi}^*(k) (k - \langle k \rangle)^2 \tilde{\psi}(k) \end{aligned}$$

dann gilt

$$\Delta x \Delta k \geq \frac{1}{2} \quad (175)$$

⁹mal wieder nomenklatorisch flexibel bleiben :-)

- Beweis als Übung
- Mit de Broglie-Beziehung $p = \hbar k$ folgt

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (176)$$

Termin6

Energie-Zeit Unschärfe

- Betrachte $\psi(t)$ und Fourier-Transformierte

$$\tilde{\psi}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dt \psi(t) e^{-i\omega t} \quad (177)$$

und

$$\begin{aligned} (\Delta t)^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} dt \psi^*(t) (t - \langle t \rangle)^2 \psi(t) \\ (\Delta \omega)^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \tilde{\psi}^*(\omega) (\omega - \langle \omega \rangle)^2 \tilde{\psi}(\omega) \end{aligned}$$

Es folgt analog

$$\Delta \omega \Delta t \geq \frac{1}{2} \quad (178)$$

und mit $E = \hbar \omega$ folgt

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \quad (179)$$

- Aber: Die Zeit t ist in der Quantenmechanik keine Observable, nur ein Parameter. Es gibt keinen Zeit-Operator
- Daher lässt Zeit-Energie Unschärfe sich nicht aus Kommutator-Relation ableiten
- Bedeutung von Δt : Zeitdauer, keine Standardabweichung in obigem Sinne
- Anwendungsbeispiele

- Durchgangsdauer und Energieunschärfe

Etwas hand-waving :-)

Energieunschärfe eines freien Wellenpaketes mit p_0 und Δp

$$\Delta E \approx \frac{p_0 \Delta p}{m} \quad (180)$$

Zeitunschärfe Δt : Zeit, die das Teilchen an Stelle x gefunden werden kann, d.h. die Zeit, die das Wellenpaket mit Ausdehnung Δx für Durchgang durch Ort x benötigt

$$\Delta t \approx \frac{\Delta x}{v_0} = \frac{m \Delta x}{p_0} \quad (181)$$

Somit

$$\Delta E \Delta t \approx \Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (182)$$

- Energie-Zeit-Unschärfe hat praktische Konsequenzen in der Spektroskopie:
 - * Hat ein angeregter Zustand die Lebensdauer Δt , dann ist die Frequenz nur bis auf $\Delta \omega$, resp. die Energie auf ΔE bestimmt.
 - * Endliche Lebensdauern führen zu verbreiterten Emissionslinien im Spektrum

Lessons learned

- Observable, die zu nicht kommutierenden Operatoren gehören, sind nicht simultan scharf messbar
- Die Zeit ist in der Quantenmechanik keine Observable, es gibt keinen "Zeit-Operator"
- Energie-Zeit Unschärfe in besonderem Sinne

5 Erste Anwendungen

"Shut up and calculate"

Überblick

- Zentral ist der Hamilton-Operator:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) \quad (183)$$

- Zeitunabhängig

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi(x) = E\psi(x) \quad (184)$$

- Das heißt, die Fragestellungen klassifizieren sich nach dem Potential $V(x)$
 - Freies Teilchen
 - Potentialbarriere
 - Kastenpotential
 - Harmonischer Oszillator
 - Periodische Potentiale
- Bestimme Eigenfunktionen und Eigenwerte, das Energiespektrum, von \hat{H}

5.1 Freies Teilchen

- $V(x) = 0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E\psi(x) \quad (185)$$

Lösung: trigonometrische Funktionen

Ansatz: $\psi(x) = Ae^{\pm ikx}$

- Es folgt

$$-\frac{\hbar^2}{2m} A(-k^2)e^{\pm ikx} = EAe^{\pm ikx} \quad (186)$$

mit Energie E

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (187)$$

bzw.

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} \quad (188)$$

- Für jede Energie E existieren zwei Lösungen, jeder Eigenwerte ist zweifach entartet

$$\psi_{\pm}(x) = Ae^{\pm ikx} \quad (189)$$

Jeder Wert $E \geq 0$ ist Eigenwert, keine Quantisierung, sondern kontinuierliches Spektrum

- Energie kann scharf gemessen werden $\Delta E = 0$
- Zeitabhängige Lösung

$$\psi_{\pm}(x, t) = Ae^{\pm ikx} e^{-i/\hbar Et} \quad (190)$$

ergibt mit $\omega = E/\hbar$

$$\begin{aligned} \psi_+(x, t) &= Ae^{i(kx - \omega t)} && \text{rechtslaufende Welle} \\ \psi_-(x, t) &= Ae^{i(-kx - \omega t)} && \text{linkslaufende Welle} \end{aligned}$$

Allgemeine Lösung: Linearkombination

$$\psi(x, t) = (Ae^{ikx} + Be^{-ikx}) e^{-i\omega t} \quad (191)$$

- Quantenmechanische Wahrscheinlichkeitsamplitude für freies Teilchen ist eine Welle.

Dies erlaubt Effekte wie Interferenz, so war es konstruiert.

Wellenpakete

- Konstruiere lokalisierte Lösung durch Superposition

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk a(k) e^{i(kx - \omega(k)t)} \quad (192)$$

Anfangsbedingung, $t = 0$

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk a(k) e^{ikx} \quad (193)$$

$a(k)$ ist (inverse) Fouriertransformierte von $\psi(x, 0)$

- Beachte: Wellenpaket ist keine Eigenfunktion von \hat{H}

Zerfliessen von freien Wellenpakten

- Quantenmechanische Dispersion
- Betrachte Gauß'sches Wellenpaket

$$a(k) = C e^{-\alpha(k-k_0)^2} \quad (194)$$

α legt Breite fest, C sorgt für Normierung

- Ganz allgemein, gilt auch für elektromagnetische Wellen.
- Erinnere unterschiedliche Dispersionsrelationen

$$\begin{aligned} \omega &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} & \text{QM} \\ \omega &= ck & \text{ED} \end{aligned}$$

Entwickele $\omega(k)$ um k_0

$$\begin{aligned} \omega(k) &= \omega(k_0) + \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} (k - k_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2\omega}{dk^2} \right|_{k_0} (k - k_0)^2 + \dots \\ \omega(k) &= \omega_0 + v_G(k - k_0) + \beta(k - k_0)^2 + \dots \end{aligned}$$

v_G : Gruppengeschwindigkeit, β : Dispersionsparameter

- Hier: Entwicklung bricht (spätestens) nach quadratischem Term ab
Eingesetzt in Gl. (192)

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \frac{C}{\sqrt{2\pi}} \int dk e^{-\alpha(k-k_0)^2} e^{ikx} e^{-i(\omega_0 + v_G(k-k_0) + \beta(k-k_0)^2)t} \\ &= \frac{C}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{\alpha + i\beta t}} e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \exp\left(-\frac{(x - v_G t)^2}{4(\alpha + i\beta t)}\right) \end{aligned}$$

Beweis als Übung

Damit Wahrscheinlichkeitsdichte

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{|C|^2}{2\sqrt{\alpha^2 + \beta^2 t^2}} \exp\left(-\frac{\alpha(x - v_G t)^2}{2(\alpha^2 + \beta^2 t^2)}\right) \quad (195)$$

Erinnere Varianz von Gauß-Verteilung

$$p_G(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x - \langle x \rangle)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (196)$$

$$\sigma^2 = \frac{\alpha^2 + \beta^2 t^2}{\alpha} = (\Delta x)^2 \quad (197)$$

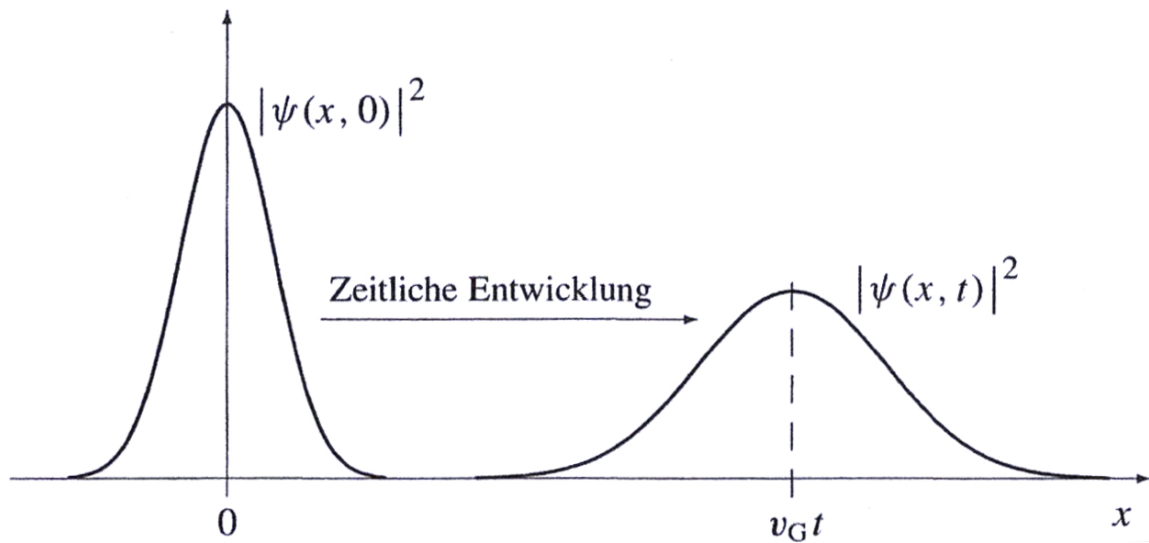


Abbildung 5.1

- Für Impulsunschärfe gilt

$$\Delta p = \frac{\hbar}{2\sqrt{\alpha}} \quad (198)$$

- Damit folgt für die Unschärferelation

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2} \sqrt{1 + \frac{\beta^2 t^2}{\alpha^2}} \geq \frac{\hbar}{2} \quad (199)$$

Beachte: Für $t = 0$ gilt minimale Unschärfe.

- Quantenmechanischer Fall:

$$v_G = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} = \frac{\hbar k_0}{m}, \quad \beta = \frac{\hbar}{2m} \quad (200)$$

Dispersion gilt für jede Art von freien Wellenpaketen.

- Elektrodynamischer Fall: im Vakuum keine Dispersion, da

$$v_G = c, \quad \beta = 0 \quad (201)$$

5.2 Potentialbarriere und Tunneleffekt

- Betrachte Teilchen mit Energie E und eine Potentialbarriere $V(x)$

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < -a \\ V_0 & \text{für } -a \leq x \leq a \quad 0 < E < V_0 \\ 0 & \text{für } x > a \end{cases} \quad (202)$$

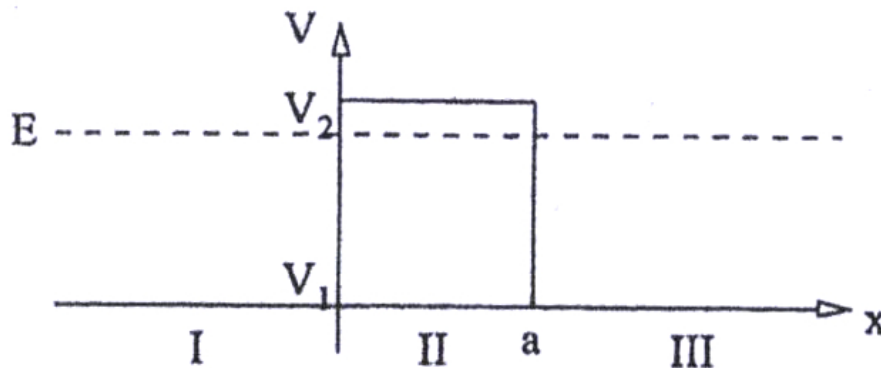


Abbildung 5.2

- Klassisch: Teilchen kann Barriere nicht überwinden
- Quantenmechanisch: Es gibt endliche Tunnelwahrscheinlichkeit $T(E)$, ein von links kommendes Teilchen rechts der Barriere zu finden
- Intuition, Faktor $e^{-i\omega t}$ im Folgenden unterdrückt:

- Rechts und links der Barriere: freies Teilchen

$$\psi(x) \propto e^{\pm ikx}, \quad k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} \quad (203)$$

- In der Barriere, Schrödinger-Gleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0 \right) \psi(x) = E\psi(x) \quad (204)$$

oder

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = \underbrace{(E - V_0)}_{<0} \psi(x) \quad (205)$$

Lösung: Exponentielles Verhalten

$$\psi(x) \propto e^{\pm gx}, \quad g = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} \quad (206)$$

Allgemeine Lösung

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & \text{für } x < -a \\ Ce^{-gx} + De^{gx} & \text{für } -a \leq x \leq a \\ Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} & \text{für } x > a \end{cases} \quad (207)$$

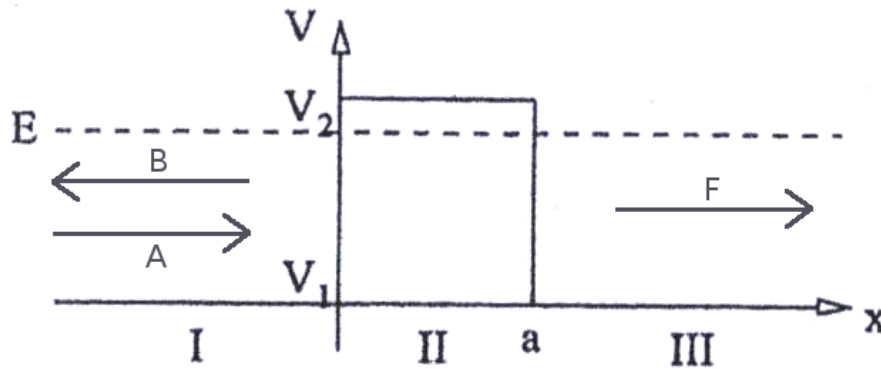


Abbildung 5.3: Von links ein laufendes Teilchen

- Bei $x = -a$ und $x = a$ müssen die Wellenfunktionen für endliches Potential V_0 stetig und differenzierbar aneinander anschließen

Beweise:

– Intuitiv

- * Angenommen $\psi(x)$ oder $\psi'(x)$ wären unstetig, dann bewirkt

$$\begin{aligned}\psi(x) &\propto \Theta(x-a) \text{ für } \psi''(x) \propto \delta'(x-a) \\ \psi'(x) &\propto \Theta(x-a) \text{ für } \psi''(x) \propto \delta(x-a)\end{aligned}$$

- * $\psi''(\pm a)$ hat aber höchstens endliche Sprungstelle

- * Widerspruch

- * Analoge Argumentation: Bei unendlichen Sprüngen von $V(x)$ bleibt $\psi(x)$ stetig, aber $\psi'(x)$ wird unstetig

- Physikalisch: $\psi'(x)$ entspricht Impuls, dieser kann nicht unendlich sein, daher muss $\psi(x)$ stetig sein.

– Mathematisch

- * Integriere Schrödinger-Gleichung über das Intervall $[a - \epsilon, a + \epsilon]$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} dx \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} dx E \psi(x) - \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} dx V(x) \psi(x) \quad (208)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\psi'(a+\epsilon) - \psi'(a-\epsilon)) = \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} dx E \psi(x) - \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} dx V(x) \psi(x) \quad (209)$$

- * Für $\epsilon \rightarrow 0$ folgt verschwindet 1. Integral auf jeden Fall, zweites, wenn Sprung in $V(x)$ endlich

- Anschlußbedingung bei $x = -a$

Stetigkeit

$$Ae^{-ika} + Be^{ika} = Ce^{ga} + De^{-ga} \quad (210)$$

Differenzierbarkeit

$$ik(Ae^{-ika} - Be^{ika}) = -g(Ce^{ga} - De^{-ga}) \quad (211)$$

Beginn Heimarbeit

In Matrixschreibweise

$$\begin{pmatrix} e^{-ika} & e^{ika} \\ e^{-ika} & -e^{ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ga} & e^{-ga} \\ \frac{ig}{k}e^{ga} & -\frac{ig}{k}e^{-ga} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad (212)$$

Umgestellt

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{ika} & e^{ika} \\ e^{-ika} & -e^{-ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ga} & e^{-ga} \\ \frac{ig}{k}e^{ga} & -\frac{ig}{k}e^{-ga} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad (213)$$

Ergibt

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = M(a) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad (214)$$

mit

$$M(a) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \left(1 + \frac{ig}{k}\right)e^{ga+ika} & \left(1 - \frac{ig}{k}\right)e^{-ga+ika} \\ \left(1 - \frac{ig}{k}\right)e^{ga-ika} & \left(1 + \frac{ig}{k}\right)e^{-ga-ika} \end{pmatrix} \quad (215)$$

- Anschlußbedingung bei $x = a$

Analoge Rechnung

$$\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = M(-a) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad (216)$$

- Zusammenhang $\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$ und $\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}$:

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = M(a)M(-a)^{-1} \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} \quad (217)$$

mit

$$M(-a)^{-1} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \left(1 - \frac{ik}{g}\right)e^{ga+ika} & \left(1 + \frac{ik}{g}\right)e^{ga-ika} \\ \left(1 + \frac{ik}{g}\right)e^{-ga-ika} & \left(1 - \frac{ik}{g}\right)e^{-ga-ika} \end{pmatrix} \quad (218)$$

Ergibt

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\cosh 2ga + \frac{i\epsilon}{2} \sinh 2ga)e^{2ika} & \frac{i\eta}{s} \sinh 2ga \\ -\frac{i\eta}{2} \sinh 2ga & (\cosh 2ga - \frac{i\epsilon}{2} \sinh 2ga)e^{-2ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} \quad (219)$$

mit

$$\begin{aligned}\epsilon &= \frac{g}{k} - \frac{k}{g} \\ \eta &= \frac{g}{k} + \frac{k}{g}\end{aligned}$$

- Ende Heimarbeit

Termin7

Betrachte von links einlaufendes Teilchen, d.h. $G = 0$. Dann

$$\begin{aligned}A &= F \left(\cosh 2ga + \frac{i\epsilon}{2} \sinh 2ga \right) e^{2ika} \\ B &= -F \frac{i\eta}{2} \sinh 2ga\end{aligned}$$

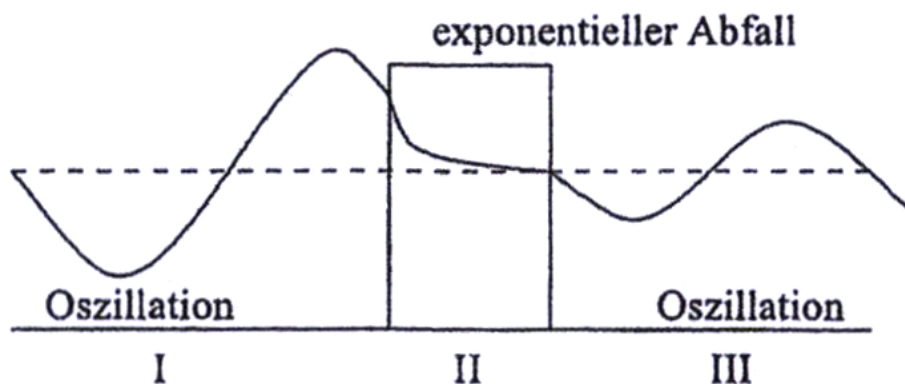


Abbildung 5.4: Wellenfunktion

- Definiere Transmissionsamplitude $S(E)$:

$$S(E) := \frac{F}{A} = \frac{e^{-2ika}}{\cosh 2ga + \frac{i\epsilon}{2} \sinh 2ga} \quad (220)$$

Definiere Tunnelwahrscheinlichkeit $T(E) = |S(E)|^2$, dass Teilchen, das auf Schwelle trifft, diese durchdringt:

$$T(E) := \frac{1}{1 + (1 + (\epsilon^2/4)) \sinh^2 2ga} \quad (221)$$

- Betrachte Grenzfall einer sehr hohen und breiten Barriere: $ga \gg 1$

Beginn Heimarbeit

Dann gilt

$$\sinh 2ga = \frac{1}{2}(e^{2ga} - e^{-2ga}) \approx \frac{1}{2}e^{2ga} \gg 1 \quad (222)$$

Damit

$$T(E) \approx \left(1 + \frac{\epsilon^2}{4}\right)^{-1} 4e^{-4ga} = \frac{16(gk)^2}{(g^2 + k^2)^2} e^{-4ga} \quad (223)$$

Mit $k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}$ und $g = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)}$

$$T(E) \approx \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} \exp\left(-4\frac{a}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)}\right) \quad (224)$$

Ziehe Vorfaktor in den Exponenten

$$T(E) \approx \exp\left(-4\frac{a}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)} + \log\left(\frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2}\right)\right) \quad (225)$$

Logarithmus wächst viel langsamer als Wurzel, vernachlässige ihn

$$T(E) \approx \exp\left(-4\frac{a}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)}\right) \quad (226)$$

Ergebnis: Für sehr hohe und breite Barriere, $ga \gg 0$

Ende Heimarbeit

$$\begin{aligned} T(E) &\approx e^{-\beta} \\ \beta &= \frac{4a}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)} \end{aligned}$$

Tunnelwahrscheinlichkeit nimmt exponentiell ab mit der

- Breite der Barriere
- Wurzel der Masse

– Wurzel aus der Energiedifferenz

- Tunneleffekt ist ein Wellenphänomen. Geht auch mit elektromagnetischen Wellen: Evaneszente Wellen, lateinisch: evanescere: verschwinden. Z.B. bei Totalreflexion

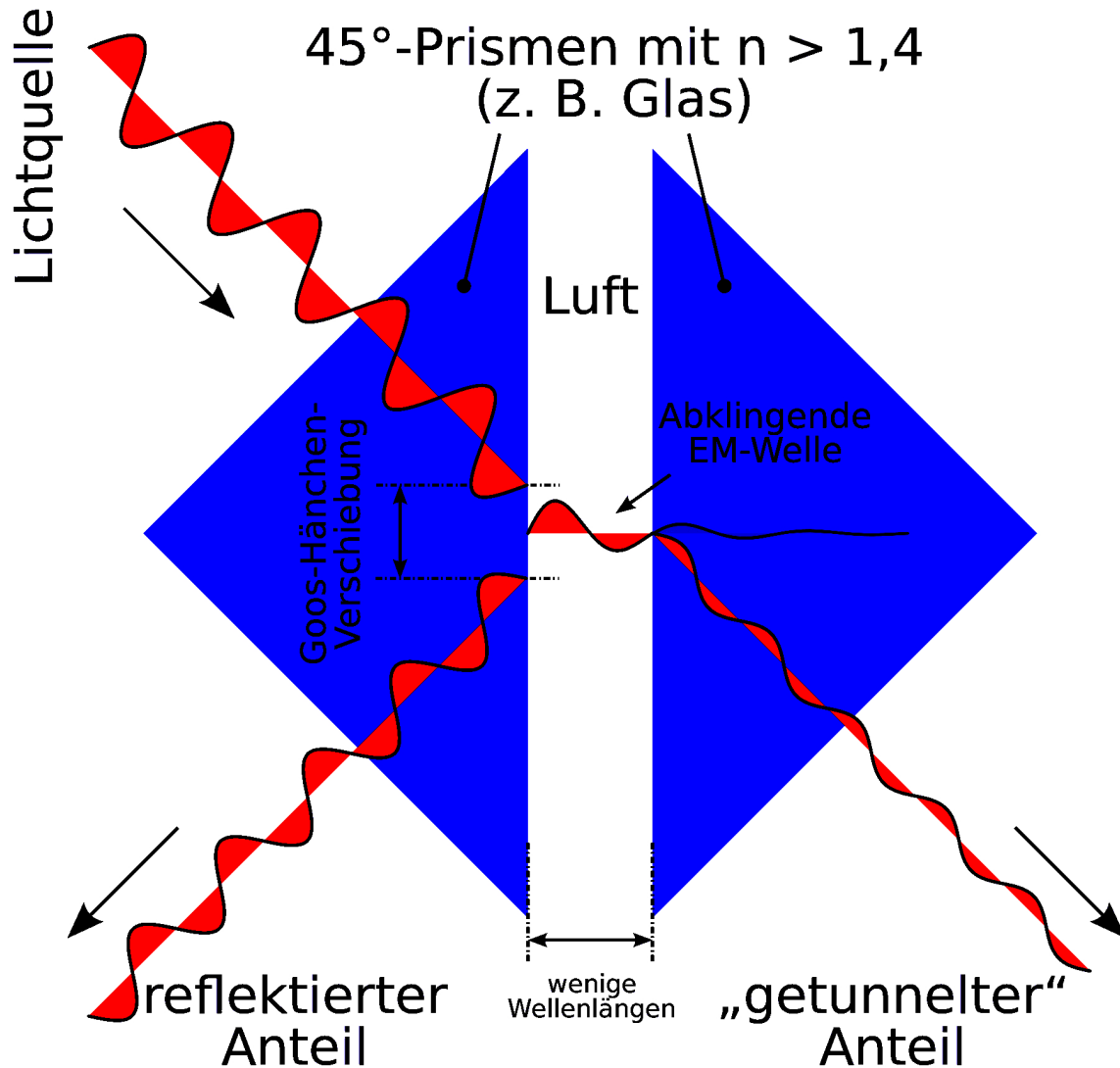


Abbildung 5.5

- Technisch: Grundlage des Rastertunnelmikroskopes, Nobelpreis 1986 für G. Binnig und H. Rohrer

- Halte Metallspitze über abzutastender Oberfläche
- Zwischenraum entspricht Potentialbarriere
- Lege Spannung zwischen Metallspitze und Oberfläche an
- Strom misst den Abstand
- Quantitative Beziehung zwischen Abstand und Strom schwierig
- Praxis: Halte Strom konstant und variere Abstand durch Piezokristalle
- Abstand \propto Spannung an Piezokristall

Übung: α -Zerfall

5.3 Potentialtopf

Unendlich hoher Potentialtopf

- Sei

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } 0 < x < L \\ \infty & \text{sonst} \end{cases} \quad (227)$$

- Lösung muss im Außenbereich verschwinden, sonst wäre Erwartungswert der potentiellen Energie

$$\langle V \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx V(x) |\psi(x)|^2 \quad (228)$$

unendlich

- Schrödinger-Gleichung im Innenbereich

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E \psi(x) \quad (229)$$

Allgemeine Lösung

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad (230)$$

- Wellenfunktion muss stetig sein: $\psi(0) = \psi(L) = 0$

$$\psi_n(x) = A \sin(k_n x), \quad k_n = \frac{n\pi}{L}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (231)$$

Richtig normiert:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right) \quad (232)$$

- Wellenfunktion ist an $x = 0$ und $x = L$ nicht differenzierbar

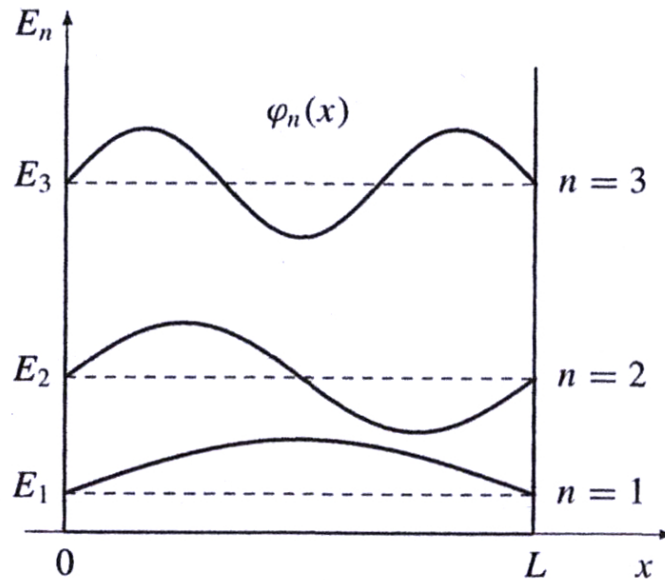


Abbildung 5.6

- Energiespektrum durch Einsetzen in Schrödinger-Gleichung

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2, \quad n = 1, 2, \dots \quad (233)$$

$E_n \propto n^2$ mag zunächst überraschen, da Energielücken zwischen benachbarten Energie-Eigenwerten damit auch groß werden.

Aber relativ werden Abstände kleiner

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{E_{n+1} - E_n}{E_n} = \frac{2n+1}{n^2} \rightarrow \frac{2}{n} \quad (234)$$

- Fünf Beobachtungen
 - Tiefster Energiewert liegt nicht bei Null

- Es gibt nur diskrete Energiewerte.
Es gilt allgemein: Lokalisierte Lösungen führen über Randbedingungen zu diskreten Energieeigenwerten
- Für große Massen und breite Töpfe ergibt sich Quasi-Kontinuum, der klassische Grenzfall
- Für große n oszilliert $\psi_n(x)$ sehr schnell. Wahrscheinlichkeit $p_{\Delta x}(x)$ Teilchen in $[x, x + \Delta x]$ zu finden

$$p_{\Delta x}(x) = \frac{2}{L} \int_x^{x+\Delta x} dx \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \approx \frac{\Delta x}{L}, \quad \text{für } \frac{L}{n} \ll \Delta x \quad (235)$$

- Verringerung von L erhöht die Energie: Es gibt einen Druck
- $E_1 \neq 0$ ist in Übereinstimmung mit der Unschärferelation
 - Wäre $E_1 = 0$ wäre p scharf bestimmt. Dann müsste $\Delta x = \infty$ gelten. Geht aber bei beschränktem System nicht
 - Überschlagsrechnung
 $\Delta x \approx L$, damit $\Delta p \approx \hbar/L$
 Dazu gehört $E = \frac{\hbar^2}{2mL^2}$, bis auf Faktor π^2 die Grundzustandsenergie
- Beachte:
 - Durch Potential-Randbedingungen wird aus überabzählbar unendlich dimensionalem Lösungsraum der freien Schrödinger-Gleichung ein abzählbar unendlicher Lösungsraum
 - Die ganze Rechnung geht, ohne dass man über ψ nachdenken muss

Endlicher Potentialtopf als Übung

- Nicht-triviale Anschlussbedingungen analog zur Potential-Barriere
- $V(x)$ ist endlich, $\psi(x)$ verschwindet außerhalb des Potentialtopfes nicht
- $V(x)$ macht bei $x = \pm a$ einen Sprung, also auch $V(x)\psi(x)$
- Also macht $\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)$ einen endlichen Sprung
- Damit hat erste Ableitung einen Knick.
- $\psi(x)$ einmal stetig differenzierbar

5.4 Harmonischer Oszillator

- Hamilton-Funktion des klassischen harmonischen Oszillators:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \quad (236)$$

- Zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right) \psi(x) = E\psi(x) \quad (237)$$

mit charakteristischer Länge

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad (238)$$

5.4.1 Lösung per Leiteroperatoren, algebraische Methode

Fast alle $\hat{}$ unterdrückt

- Definiere Leiter-Operatoren a und a^\dagger , seinen adjungierten Operator

$$\begin{aligned} a &= \frac{\omega m x + ip}{\sqrt{2\omega m \hbar}} \\ a^\dagger &= \frac{\omega m x - ip}{\sqrt{2\omega m \hbar}} \end{aligned}$$

Beachte: a und a^\dagger sind nicht hermitesch, Beweis als Übung

- In Umkehrung

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega m}} (a + a^\dagger) \quad (239)$$

$$p = -i\sqrt{\frac{\hbar\omega m}{2}} (a - a^\dagger) \quad (240)$$

- Es gilt, Übung

$$[a, a^\dagger] = 1 \quad (241)$$

- Mit charakteristischer Länge $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{x_0} + x_0 \frac{d}{dx} \right) \\ a^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{x_0} - x_0 \frac{d}{dx} \right) \end{aligned}$$

Mit Gln. (239, 240) ergibt sich Hamilton-Operator des harmonischen Oszillators, Übung :

$$H = \frac{1}{2} \hbar \omega (a^\dagger a + a a^\dagger) \quad (242)$$

- Addiere $a^\dagger a - a^\dagger a$, unter Benutzung des Kommutators, Gl. (241), folgt

$$H = \frac{1}{2} \hbar \omega (a^\dagger a + a^\dagger a + \underbrace{a a^\dagger - a^\dagger a}_{=1}) = \hbar \omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) = \hbar \omega \left(\hat{n} + \frac{1}{2} \right) \quad (243)$$

mit hermiteschen Besetzungszahloperator $\hat{n} := a^\dagger a$

- Aufgabe: Finde Eigenwerte und Eigenfunktionen, die sogenannten Fockzustände, des Besetzungszahloperators.
- Es sei ψ_ν Eigenfunktion zum Eigenwert ν von \hat{n}

$$\hat{n} \psi_\nu = \nu \psi_\nu \quad (244)$$

- Berechnung von ψ_0

Aus

$$\nu \langle \psi_\nu | \psi_\nu \rangle = \langle \psi_\nu | \hat{n} \psi_\nu \rangle = \langle \psi_\nu | a^\dagger a \psi_\nu \rangle = \langle a \psi_\nu | a \psi_\nu \rangle \geq 0 \quad (245)$$

folgt

$$\nu \geq 0 \quad (246)$$

Kleinstmöglicher Eigenwert: $\nu = 0$

Um zugehörige Eigenfunktion zu berechnen, beachte, dass Norm von $a \psi_0$ verschwinden muss:

$$a\psi_0 = 0 \quad (247)$$

d.h.

$$\left(\frac{x}{x_0} + x_0 \frac{d}{dx}\right) \psi_0 = 0 \quad (248)$$

Normierte Lösung dieser Differentialgleichung

$$\psi_0(x) = \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}x_0}\right)^{-1/2} \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2\right) \quad (249)$$

- Berechnung der übrigen Eigenfunktionen

Es gilt, Übung

$$[\hat{n}, a^\dagger] = a^\dagger \quad \text{und} \quad [\hat{n}, a] = -a \quad (250)$$

Behauptung: $a^\dagger \psi_\nu$ ist Eigenfunktion von \hat{n} zum Eigenwert $\nu + 1$

Beweis:

Addiere geschickt eine Null:

$$\hat{n}a^\dagger \psi_\nu = (a^\dagger \hat{n} + \underbrace{\hat{n}a^\dagger - a^\dagger \hat{n}}_{a^\dagger}) \psi_\nu = (a^\dagger \hat{n} + a^\dagger) \psi_\nu = (\nu + 1)a^\dagger \psi_\nu \quad (251)$$

Damit

$$\psi_{\nu+1} \propto a^\dagger \psi_\nu \quad (252)$$

Normierung, wieder geschickt Null addieren, erinnere $[a, a^\dagger] = 1$

$$\begin{aligned} \langle a^\dagger \psi_\nu | a^\dagger \psi_\nu \rangle &= \langle \psi_\nu | a a^\dagger \psi_\nu \rangle = \langle \psi_\nu | (a a^\dagger - a^\dagger a + a^\dagger a) \psi_\nu \rangle \\ &= \langle \psi_\nu | (a^\dagger a + 1) \psi_\nu \rangle = \langle \psi_\nu | (\hat{n} + 1) \psi_\nu \rangle = \\ &= (\nu + 1) \langle \psi_\nu | \psi_\nu \rangle > 0 \end{aligned}$$

Somit gilt für normierte ψ_ν und $\psi_{\nu+1}$

$$\psi_{\nu+1} = \frac{1}{\sqrt{\nu+1}} a^\dagger \psi_\nu \quad (253)$$

Iteriere

$$\psi_\nu = \frac{1}{\sqrt{\nu}} a^\dagger \psi_{\nu-1} = \frac{1}{\sqrt{\nu!}} (a^\dagger)^\nu \psi_0 \quad (254)$$

Merke: Mit a^\dagger geht es die Leiter eins hoch

Termin8

- Behauptung: $a\psi_\nu$ ist Eigenfunktion von \hat{n} zum Eigenwert $\nu - 1$

Beweis:

$$\hat{n}a\psi_\nu = (a\hat{n} + \underbrace{\hat{n}a - a\hat{n}}_{-a})\psi_\nu = (a\hat{n} - a)\psi_\nu = (\nu - 1)a\psi_\nu \quad (255)$$

Damit

$$\psi_{\nu-1} \propto a\psi_\nu \quad (256)$$

Normierung:

$$\langle a\psi_\nu | a\psi_\nu \rangle = \langle \psi_\nu | a^\dagger a \psi_\nu \rangle = \langle \psi_\nu | \hat{n} \psi_\nu \rangle = \nu \langle \psi_\nu | \psi_\nu \rangle \quad (257)$$

$\nu = 0$ hatten wir schon oben, Gl. (247)

Für $\nu \geq 1$

$$\psi_{\nu-1} = \frac{1}{\sqrt{\nu}} a\psi_\nu \quad (258)$$

Merke: Mit a geht es die Leiter eins runter

- Behauptung: Mit ψ_ν , $\nu = 0, 1, 2, \dots$ sind alle Eigenfunktionen gefunden

Beweis durch Widerspruch:

Nehme an, es gäbe einen Eigenwert $\nu = n + \alpha$ mit $0 < \alpha < 1$ und $n \in \mathbb{N}$

$$\hat{n}\psi_\nu = (n + \alpha)\psi_\nu \quad (259)$$

Dann folgt mit Gl. (255)

$$\hat{n}(a^n \psi_\nu) = \alpha(a^n \psi_\nu) \quad (260)$$

und

$$\hat{n}(a^{n+1} \psi_\nu) = (\alpha - 1)(a^{n+1} \psi_\nu) \quad (261)$$

Norm von $a^{n+1} \psi_\nu$ existiert, aber $\alpha - 1$ ist negativ. Widerspruch zur Positivität der Eigenwerte

- Zusammengefasst:

$$\hat{H} = \left(\hat{n} + \frac{1}{2} \right) \quad (262)$$

Zustand	n	E
Grundzustand ψ_0	0	$\hbar\omega/2$
1. angeregter Zustand $\psi_1 = a^\dagger\psi_0$	1	$3\hbar\omega/2$
2. angeregter Zustand $\psi_2 = (a^\dagger)^2\psi_0$	2	$5\hbar\omega/2$
\vdots	\vdots	\vdots

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (263)$$

- a^\dagger erhöht Energieeigenwert um $\hbar\omega \implies$ Erzeugungsoperator eines Energiequantums

a erniedrigt Energieeigenwert um $\hbar\omega \implies$ Vernichtungsoperator eines Energiequantums

- a^\dagger und a zentral in der Quantenfeldtheorie
- Dort werden auch die Felder quantisiert
- Felder haben Moden, das sind im wesentlichen harmonische Oszillatoren
- Diese können angeregt, erzeugt, und abgeregt, vernichtet werden.
- Stichwort: Zweite Quantisierung
- Berechnung der Wellenfunktionen, Faktoren unterdrückt

$$\psi_\nu = \frac{1}{\sqrt{\nu!}} a^\dagger \psi_{\nu-1} = \frac{1}{\sqrt{\nu!}} (a^\dagger)^\nu \psi_0 \quad (264)$$

- Grundzustand: Von oben

$$\psi_0 \propto e^{-x^2/2} \quad (265)$$

- Erster angeregter Zustand

$$\psi_1 \propto a^\dagger \psi_0 \propto \left(x - \frac{d}{dx} \right) e^{-x^2/2} = x e^{-x^2/2} - (-x e^{-x^2/2}) = 2x e^{-x^2/2} \quad (266)$$

- Zweiter angeregter Zustand

$$\psi_2 \propto a^\dagger \psi_1 \propto \left(x - \frac{d}{dx}\right) 2x e^{-x^2/2} = (4x^2 - 2) e^{-x^2/2} \quad (267)$$

- Allgemein

$$\psi_n \propto H_n(x) e^{-x^2/2} \quad (268)$$

Mit den Hermite-Polynomen $H_n(x)$

$$\begin{aligned} H_0(x) &= 1 \\ H_1(x) &= 2x \\ H_2(x) &= 4x^2 - 2 \\ H_3(x) &= 8x^3 - 12x \\ H_4(x) &= 16x^4 - 48x^2 + 12 \end{aligned}$$

Fingerübungen damit als Übung

- In aller Schönheit:

Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0}} \frac{\pi^{-1/4}}{\sqrt{2^n n!}} H_n\left(\frac{x}{x_0}\right) \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right) \quad (269)$$

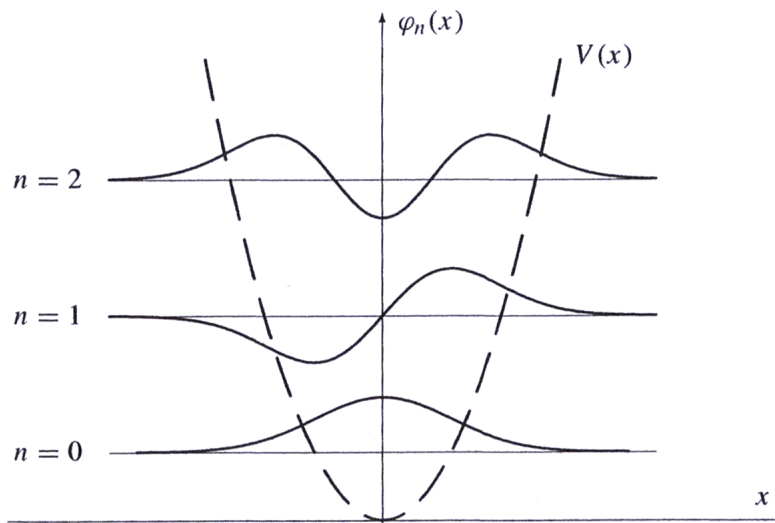


Abbildung 5.7: Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators

5.4.2 Nullpunktsenergie

- Analog zum Potentialtopf: Klassisch ist niedrigste Energie des harmonischen Oszillators: $E = 0$

Quantenmechanisch: $E = \frac{\hbar\omega}{2}$

- Berechnung des Unschärfeprodukts $\Delta x \Delta p$
- Mittelwert und Varianz des Ortes

$$\langle x \rangle = \langle \psi_n | x \psi_n \rangle \propto \langle \psi_n | (a + a^\dagger) \psi_n \rangle \propto \langle \psi_n | \psi_{n-1} \rangle + \langle \psi_n | \psi_{n+1} \rangle = 0 \quad (270)$$

und

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{2\omega m} \langle \psi_n | (a^2 + \underbrace{aa^\dagger + a^\dagger a}_{=2\tilde{n}+1}) \psi_n \rangle = x_0^2 (n + 1/2) \quad (271)$$

- Analog für den Impuls

$$\langle p \rangle \propto \langle \psi_n | (a - a^\dagger) \psi_n \rangle = 0, \quad (\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{x_0^2} (n + 1/2) \quad (272)$$

Aus Unschärferelation

$$(\Delta x)^2 (\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle \langle x^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} \quad (273)$$

folgt Ungleichung für Energie

$$E = \langle H \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \langle x^2 \rangle \geq \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \frac{\hbar^2}{4} \frac{1}{\langle p^2 \rangle} \quad (274)$$

- Ableitung nach $\langle p^2 \rangle$ liefert Bedingung für Minimum

$$\frac{1}{2m} - \frac{m\omega^2 \hbar^2}{8} \frac{1}{\langle p^2 \rangle_{\min}^2} \stackrel{!}{=} 0 \quad (275)$$

Somit:

$$\langle p^2 \rangle_{\min} = \frac{m\hbar\omega}{2} \quad (276)$$

Für die Energie gilt

$$E \geq \frac{m\hbar\omega}{4m} + \frac{m\omega^2\hbar^2}{8} \frac{2}{m\hbar\omega} = \frac{\hbar\omega}{2} \quad (277)$$

Ergo: Nullpunktsenergie ist der kleinste Energiewert, der mit der Unschärferelation vereinbar ist.

5.4.3 Vergleich mit klassischem harmonischem Oszillator

- Für große Werte von n ist die Wellenfunktion $\psi_n(x)$ an den Rändern größer als in der Mitte
- Das entspricht klassischem Fall
- Berechnung der klassischen Aufenthaltswahrscheinlichkeit

$$x(t) = A \sin \omega t, \quad \frac{dx}{dt} = \omega A \cos \omega t \quad (278)$$

Mit $A^2 \cos^2 \omega t + A^2 \sin^2 \omega t = A^2$

$$dx = \omega A \cos \omega t \, dt = \omega \sqrt{A^2 - A^2 \sin^2 \omega t} \, dt = \omega \sqrt{A^2 - x(t)^2} \, dt \quad (279)$$

oder

$$dt = \frac{dx}{\omega \sqrt{A^2 - x(t)^2}} \quad (280)$$

- Mit Periode $T = \frac{2\pi}{\omega}$ folgt für relative Zeitspanne, die das Teilchen während einer Periode im Intervall dx ist, Faktor 2 für hin und zurück

$$\frac{dt}{T} = \frac{dx}{\pi \sqrt{A^2 - x(t)^2}} \quad (281)$$

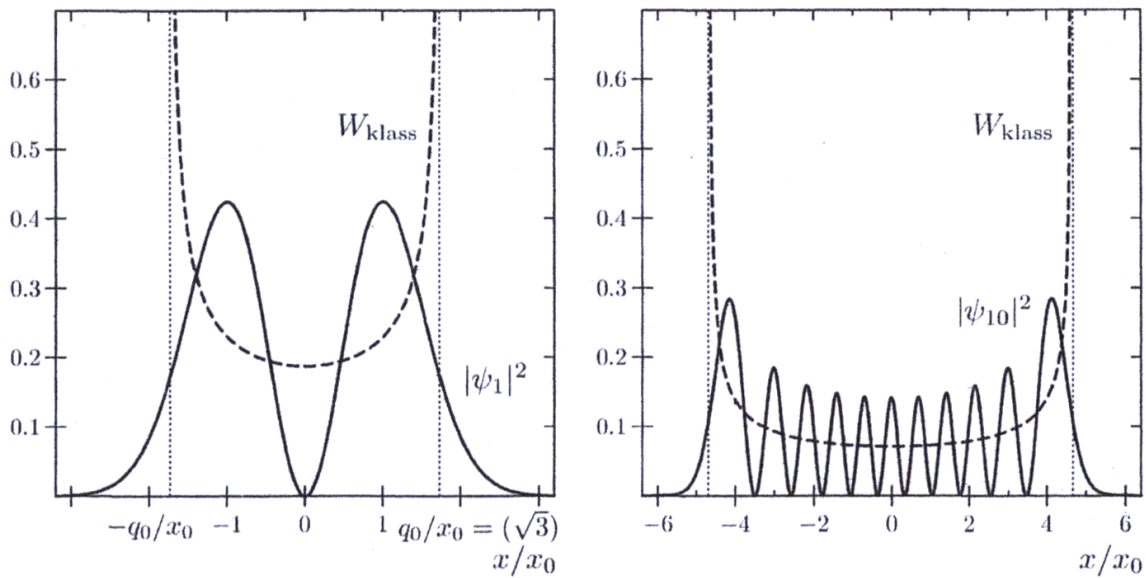


Abbildung 5.8

Lessons learned:

- Quantenmechanische Dispersion: freie Wellenpakete zerfließen
- Tunneleffekt als Wellenphänomen
- Diskrete Energien im Potentialtopf und beim harmonischen Oszillator
- Jeweils Nullpunktsenergien in Übereinstimmung mit der Unschärferelation
- Harmonischer Oszillator: (Nicht-hermitesche) Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren werden wichtig in Quantenfeldtheorie
- Harmonischer Oszillator und klassischer Grenzfall

6 Drehimpuls

- In ≥ 2 Dimensionen zusätzlich zu Translation auch Rotation. Speziell wichtig für Atomphysik.

- Klassischer Drehimpuls

$$\vec{L} = m\vec{r} \times \vec{v} = \vec{r} \times \vec{p} \quad (282)$$

- Rotation in x - y -Ebene

$$L_z = xp_y - yp_x \quad (283)$$

6.1 Der quantenmechanische Drehimpuls

Betrachte L_z

- Korrespondenz-Prinzip: Ersetze die klassischen Impulse durch die entsprechenden Operatoren

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \quad (284)$$

- Damit Operator \hat{L}_z

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad (285)$$

- Entsprechend

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \quad \hat{L}_y = \frac{\hbar}{i} \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad (286)$$

Kommutatoren

- Kommutator $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = \hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x$

$$\begin{aligned} \hat{L}_x \hat{L}_y &= -\hbar^2 \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ &= -\hbar^2 \left(y \underbrace{\frac{\partial}{\partial z} z}_{=1+z\frac{\partial}{\partial z}} \frac{\partial}{\partial x} - y \frac{\partial}{\partial z} x \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} z \frac{\partial}{\partial x} + z \frac{\partial}{\partial y} x \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ &= -\hbar^2 \left(y \frac{\partial}{\partial x} + yz \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial}{\partial x} - yx \frac{\partial^2}{\partial z^2} - z^2 \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x} + zx \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial z} \right) \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}\hat{L}_y \hat{L}_x &= -\hbar^2 \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ &= -\hbar^2 \left(zy \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial z} - z^2 \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} - xy \frac{\partial^2}{\partial z^2} + x \frac{\partial}{\partial y} + xz \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial}{\partial y} \right)\end{aligned}$$

- Damit Kommutator

$$\begin{aligned}[\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= \hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x \\ &= -\hbar^2 \left(y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) = i\hbar \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = i\hbar \hat{L}_z\end{aligned}$$

- Entsprechend

$$\begin{aligned}[\hat{L}_y, \hat{L}_z] &= i\hbar \hat{L}_x \\ [\hat{L}_z, \hat{L}_x] &= i\hbar \hat{L}_y\end{aligned}$$

Dies impliziert Unschärferelationen

Da die \hat{L}_i nicht kommutieren, kann immer nur eine Komponente des Drehimpulses scharf gemessen werden.

- Wie in Klassischer Mechanik: Drehungen um verschiedene Achsen vertauschen nicht

Termin9

Betrachte Quadrat des Drehimpulsoperators \hat{L}^2

- \hat{L}^2 :

$$\hat{L}^2 = \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{L}} = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \quad (287)$$

- Es gilt

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_x] = [\hat{L}^2, \hat{L}_y] = [\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0 \quad (288)$$

- \hat{L}^2 und \hat{L}_i kommutieren. Daher können \hat{L}^2 und einer der \hat{L}_i s simultan diagonalisiert und ohne Unschärfe gemessen werden.

- Alle Kommutator-Relationen gelten auch für den Spin von Elementarteilchen, siehe Kap. 8

Kugel- und Zylinder-Koordinaten

- Azimutwinkel ϕ : $0 \leq \phi \leq 2\pi$
- Polarwinkel θ : $0 \leq \theta \leq \pi$
- Radius r : $\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$

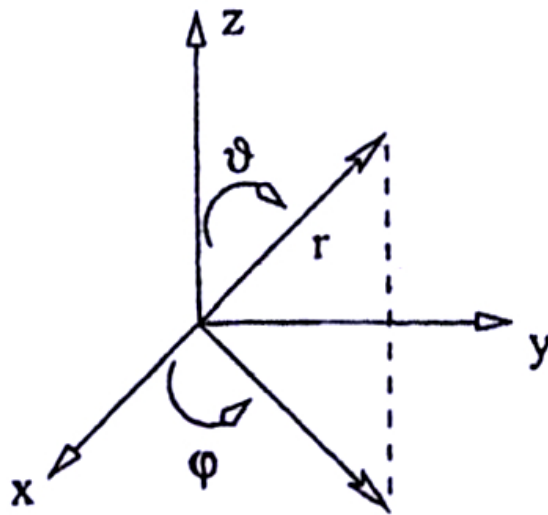


Abbildung 6.1

- Kugelkoordinaten:

$$x = r \sin \theta \cos \phi$$

$$y = r \sin \theta \sin \phi$$

$$z = r \cos \theta$$

- Zylinderkoordinaten in x - y -Ebene

$$x = r \cos \phi$$

$$y = r \sin \phi$$

$$z = z$$

mit $r = \sqrt{x^2 + y^2}$

Berechnung von \hat{L}_z in Zylinderkoordinaten

- Ausgangspunkt: \hat{L}_z in kartesischen Koordinaten

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad (289)$$

- Für Funktion $f(x, y) = f(x(\phi), y(\phi))$ gilt

$$\frac{df}{d\phi} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \phi} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \phi} \quad (290)$$

- Mit

$$\begin{aligned} \frac{\partial x}{\partial \phi} &= -r \sin \phi = -y \\ \frac{\partial y}{\partial \phi} &= r \cos \phi = x \end{aligned}$$

folgt

$$\frac{\partial f}{\partial \phi} = -y \frac{\partial f}{\partial x} + x \frac{\partial f}{\partial y} \quad (291)$$

und damit

$$\frac{\partial}{\partial \phi} = x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \quad (292)$$

Folglich, \hat{L}_z in Zylinder- (und Kugel-) Koordinaten:

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (293)$$

- Übung: Zeige, dass in Kugelkoordinaten gilt:

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \quad (294)$$

Übung: Auf Grund von welchem mathematisch-intuitiven Argument kommutieren \hat{L}^2 und \hat{L}_z ?

6.2 Eigenfunktionen von \hat{L}_z

Betrachte Eigenwert-Gleichung von \hat{L}_z , Beispiel für Quantisierung

-

$$\hat{L}_z \psi(\phi) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \psi(\phi) = \lambda \psi(\phi) \quad (295)$$

- Lösung durch Hingucken

$$\psi(\phi) = A e^{\frac{i}{\hbar} \lambda \phi} \quad (296)$$

- Es muss gelten

$$\psi(\phi + 2\pi) = e^{\frac{i}{\hbar} \lambda 2\pi} \psi(\phi) = \psi(\phi) \quad (297)$$

Dies führt zur Quantisierung:

$$e^{\frac{i}{\hbar} \lambda 2\pi} = 1 = e^{i 2\pi m} \rightarrow \frac{i}{\hbar} \lambda 2\pi = i 2\pi m, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (298)$$

- Damit Eigenwerte λ und Eigenfunktionen ψ_m von \hat{L}_z

$$\begin{aligned} \lambda &= m\hbar, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \\ \psi_m(\phi) &= A_m e^{im\phi} \end{aligned}$$

Energie der zweidimensionalen Bewegung

- Klassische Formel der Rotationsenergie in der x - y -Ebene

$$H = \frac{L_z^2}{2mr^2} = \frac{1}{2I} L_z^2, \quad I = mr^2 \text{ das Trägheitsmoment} \quad (299)$$

Siehe Analogie zur freien Bewegung: $E = \frac{p^2}{2m}$

- Quantenmechanisch:

$$\hat{H} = \frac{1}{2I} \hat{L}_z^2 \quad (300)$$

- Eigenwertgleichung:

$$\frac{1}{2I} \hat{L}_z^2 \psi = E \psi \quad (301)$$

Aus

$$\hat{L}_z \psi = m\hbar \psi \quad (302)$$

folgt

$$\hat{L}_z^2 \psi = m^2 \hbar^2 \psi \quad (303)$$

- Ergo: Die Eigenfunktionen $\psi(\phi)$ von \hat{L}_z sind auch Eigenfunktionen von \hat{H} mit den Eigenwerten

$$E_m = \frac{\hbar^2}{2I} m^2 \quad (304)$$

Merke:

- Drehimpuls-Eigenfunktionen sind auch Energie-Eigenfunktionen
- Zustände mit $m \neq 0$ sind zweifach entartet, die beiden Eigenfunktionen entsprechen den entgegengesetzten Drehsinnen
- Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Drehimpulseigenzustand ist $|\psi_m(\phi)|^2 = |A_m|^2$, damit unabhängig von $\phi \implies$ Kenntnis von Drehimpuls schließt Kenntnis des Winkels aus.

- Unschärferelation

Winkeloperator $\hat{\Phi}$

$$\hat{\Phi} \psi(\phi) = \phi \psi(\phi) \quad (305)$$

Damit Kommutator

$$[\hat{\Phi}, \hat{L}] = i\hbar \quad (306)$$

und Unschärferelation

6.3 Eigenfunktionen von \hat{L}^2

- Die Eigenwert-Gleichung des Operators \hat{L}^2 ergibt:

$$\hat{L}^2 Y_{lm}(\theta, \phi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \phi), \quad l \geq 0 \quad (307)$$

mit

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \quad (308)$$

- Ergebnis

$$\begin{aligned}
Y_{lm}(\theta, \phi) &= \left(\frac{2l+1}{4\pi} \frac{l-|m|!}{l+|m|!} \right)^{1/2} P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\phi} \\
P_l^m(x) &= (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x) \\
P_l(x) &= \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2-1)^l
\end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned}
l &= 0, 1, 2, \dots && \text{Drehimpulsquantenzahl} \\
m &= -l, \dots, 0, \dots, l && \text{magnetische Quantenzahl}
\end{aligned}$$

und

- $Y_{lm}(\theta, \phi)$: Kugelflächenfunktionen
 - $P_l^m(x)$: Legendre-Funktionen
 - $P_l(x)$: Legendre-Polynome
- Übung zu Legendre-Polynomen

- Es gilt

$$Y_{l,-m}(\theta, \phi) = Y_{lm}^*(\theta, \phi) \quad (309)$$

und

$$\hat{L}_z Y_{lm}(\theta, \phi) = m\hbar Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (310)$$

Y_{lm} sind Eigenfunktionen von \hat{L}_z und \hat{L}^2 . Das geht & muss so sein, da \hat{L}_z und \hat{L}^2 kommutieren.

- Drehimpulseigenfunktionen Y_{lm} bilden orthonormales und vollständiges System von Eigenfunktionen

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^1 d\cos \theta Y_{lm}^*(\theta, \phi) Y_{l'm'}(\theta, \phi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (311)$$

- Quantenmechanischer Drehimpuls wird durch die Quantenzahlen l und m beschrieben:

- l legt Betrag des Drehimpulses fest: $L^2 = l(l+1)\hbar^2$

- m legt Projektion auf z -Achse fest: $L_z = m\hbar$
- Beispiel $l = 2$

$$\frac{L}{\hbar} = \sqrt{2(2+1)} = \sqrt{6}, \quad m = -2, -1, 0, 1, 2 \quad (312)$$

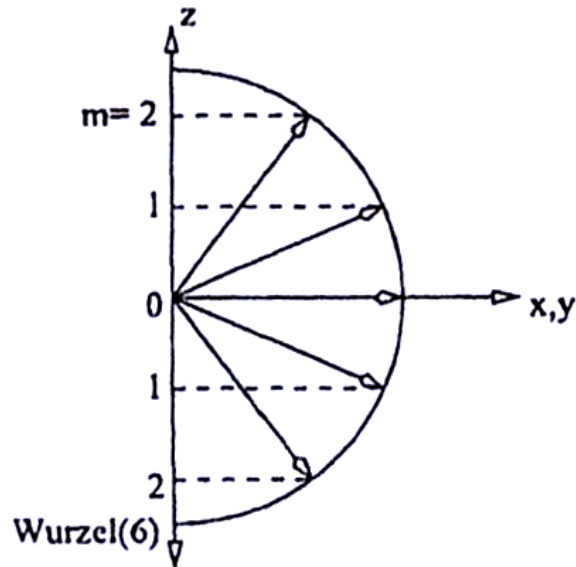


Abbildung 6.2

Das ergibt folgende Eigenfunktionen

- $l = 0, m = 0$ liefert $Y_{00} = 1/\sqrt{4\pi}$
Kugelförmige Wellenfunktion, genannt s-Orbital. Radialabhängigkeit nächstes Kapitel

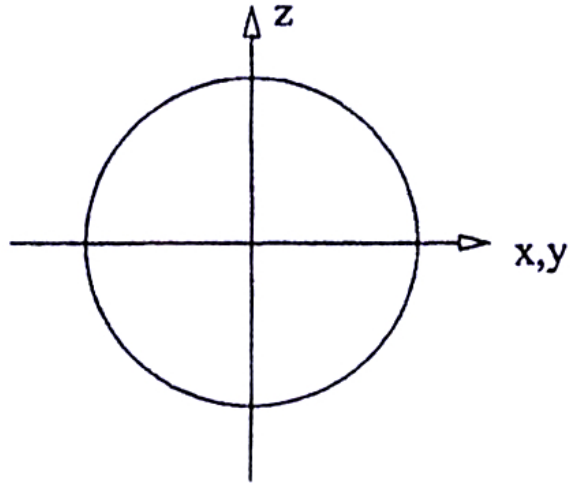


Abbildung 6.3

- $l = 1, m = 0$ liefert $Y_{10} = \sqrt{3/4\pi} \cos \theta$
Das p_z -Orbital

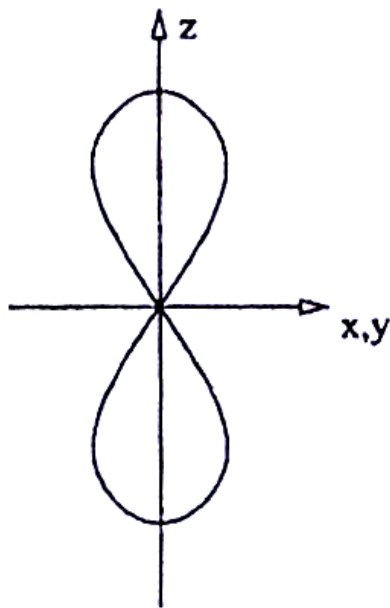


Abbildung 6.4

- $l = 1, m = \pm 1$ liefert $Y_{1,\pm 1} = -\sqrt{3/8\pi} \sin \theta e^{\pm i\phi}$

Durch Linearkombination zu reellen Orbitalen

$$-\frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{11} + Y_{1,-1}) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \theta \cos \phi \quad p_x - \text{Orbital}$$

$$-\frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{11} - Y_{1,-1}) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \theta \sin \phi \quad p_y - \text{Orbital}$$

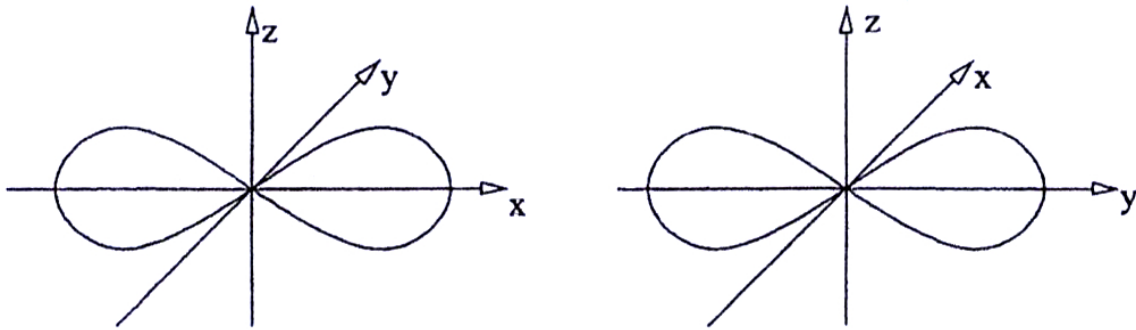


Abbildung 6.5

Energie der drei-dimensionalen Rotation

- Klassisch

$$H = \frac{1}{2mr^2} L^2 = \frac{1}{2I} L^2 \quad (313)$$

Ergibt quantenmechanisch

$$\hat{H} = \frac{1}{2I} \hat{L}^2 \quad (314)$$

- Eigenfunktionen Y_{lm} sind also auch Eigenfunktionen der Schrödinger-Gleichung für die drei-dimensionale Rotation

$$\hat{H}Y_{lm} = \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1)Y_{lm} \quad (315)$$

Die Energieeigenwerte

$$E_l = \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1) \quad (316)$$

hängen nicht von m ab, sind damit unabhängig von Orientierung von \vec{L} zur z -Achse

- Wegen $m = -l, \dots, 0, \dots, l$ gibt es zu jedem Eigenwert $2l + 1$ Eigenfunktionen, E_l ist $2(l + 1)$ -fach entartet

Rotationsspektroskopie

- Durch elektromagnetische Strahlung der Energie $\hbar\omega$, Bereich Mikrowellen, können Übergänge zwischen benachbarten Rotationsniveaus induziert werden

$$\hbar\omega = E_{l+1} - E_l = \frac{\hbar^2}{2I}(l+1)(l+2) - \frac{\hbar^2}{2I}l(l+1) = \frac{\hbar^2}{I}(l+1), \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (317)$$

Absorptionsspektroskopie: Aus einer Richtung kommend, in alle Richtungen abstrahlen

- Rotationsspektrum weist äquidistante Linien bei

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2}{I}, 2\frac{\hbar^2}{I}, 3\frac{\hbar^2}{I}, \dots \quad (318)$$

auf

Damit läßt sich Trägheitsmoment I eines Moleküls bestimmen

Lessons learned:

- $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$ und zyklisch
- $[L_i, L^2] = 0$, simultan diagonalisierbar, gleichzeitig scharf messbar, gleiche Eigenfunktionen
- Eigenfunktionen von L^2 sind die Kugelflächenfunktionen

Termin10

7 Wasserstoffatom

7.1 Hamiltonian

- Vom Zweikörper-Problem zum Einkörper-Problem
 - Schwerpunkts- und Relativbewegung separieren
 - Reduzierte Masse, im wesentlichen unverändert
- Klassischer Hamiltonian

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \quad (319)$$

Quantenmechanisch:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \quad (320)$$

- Da V nur vom Radius $|r|$ abhängt, gehe in Kugelkoordinaten.
Damit

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \quad (321)$$

- Operator für kinetische Energie \hat{T} in Kugelkoordinaten:

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \right)^2 - \frac{\hbar^2}{2mr^2} \left(\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right) \quad (322)$$

Merke: In Kugelkoordinaten ist Berechnung des Potentials einfacher, Berechnung der kinetischen Energie aber schwieriger.

- Mit

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right) \quad (323)$$

folgt

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \right)^2 + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} = \hat{T}_r + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} \quad (324)$$

T_r : Kinetische Energie der Radialbewegung

$\frac{\hat{L}^2}{2mr^2}$: Kinetische Energie der Winkelbewegung, erinnere Zentrifugalbarriere

- Somit

$$\hat{H} = \hat{T}_r + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \quad (325)$$

7.2 Lösung der Schrödinger-Gleichung

- Löse

$$\hat{H}\psi(r, \theta, \phi) = E \psi(r, \theta, \phi) \quad (326)$$

Eigenfunktionen von Term $\frac{\hat{L}^2}{2mr^2}$ bekannt: Kugelflächenfunktionen Y_{lm}

- Separationsansatz:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (327)$$

Damit

$$\left(T_r + V(r) + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} \right) R(r)Y_{lm}(\theta, \phi) = E R(r)Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (328)$$

- Mit

$$\frac{\hat{L}^2}{2mr^2} R(r)Y_{lm}(\theta, \phi) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} R(r)Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (329)$$

folgt

$$\left(T_r + V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right) R(r)Y_{lm}(\theta, \phi) = E R(r)Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (330)$$

Teile durch $Y_{lm}(\theta, \phi)$, ergibt Radialgleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \right)^2 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right) R(r) = E R(r) \quad (331)$$

eine gewöhnliche Differentialgleichung 2. Ordnung

- Transformation:

$$R(r) = \frac{u(r)}{r} \quad (332)$$

Technische Rechnung ergibt die übliche Form der eindimensionalen Schrödinger-Gleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + V_{\text{eff}}(r) \right) u(r) = E u(r) \quad (333)$$

mit dem effektiven Potential der Radialbewegung

$$V_{\text{eff}}(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m} \frac{1}{r^2} \quad (334)$$

ganz in Analogie zur Klassischen Mechanik mit abstoßendem Zentrifugalterm

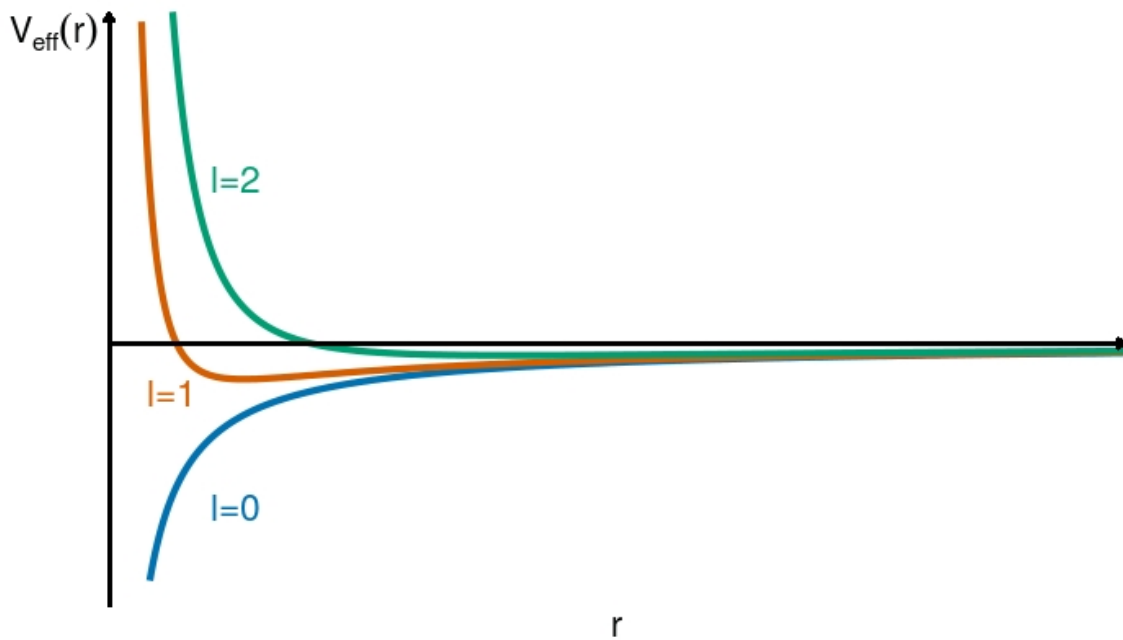


Abbildung 7.1

Lange technische Rechnung ergibt:

- Energie-Eigenwerte:

$$E_n = -\text{Ry} \frac{1}{n^2}, \quad n \in \mathbb{N} \quad (335)$$

mit Rydberg-Konstante

$$\text{Ry} = \frac{\mu e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} = 13.67 \text{eV}, \quad \mu = \frac{m_p m_e}{m_p + m_e} \quad (336)$$

Kugelsymmetrie: Energie-Eigenwerte unabhängig von m

$SO(4)$ Symmetrie des $\frac{1}{r}$ -Potentials Energieeigenwerte auch unabhängig von l

- Eigenfunktionen :

$$R_{nl} = (\alpha_n r)^l e^{-\alpha_n r/2} L_{n-l}^{2l+1}(\alpha_n r), \quad \alpha_n = \frac{2}{na_0} \quad (337)$$

mit Bohr'schem Atomradius a_0

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} = 5.2917 \cdot 10^{-11} \text{m} \approx 0.5 \text{\AA} \quad (338)$$

und den Laguerre-Polynomen

$$L_m^s(x) = \sum_{k=0}^{m-s} (-1)^{k+s} \frac{(m!)^2}{k!(k+s)(m-k-s)} x^k \quad (339)$$

- Struktur der Radial-Wellenfunktionen: $R_{nl}(r) \propto e^{-r} \cdot \text{Polynom}(r)$ mit $n-l-1$ Nullstellen

Radiale Wahrscheinlichkeitsdichte: $r^2 R_{nl}^2(r)$

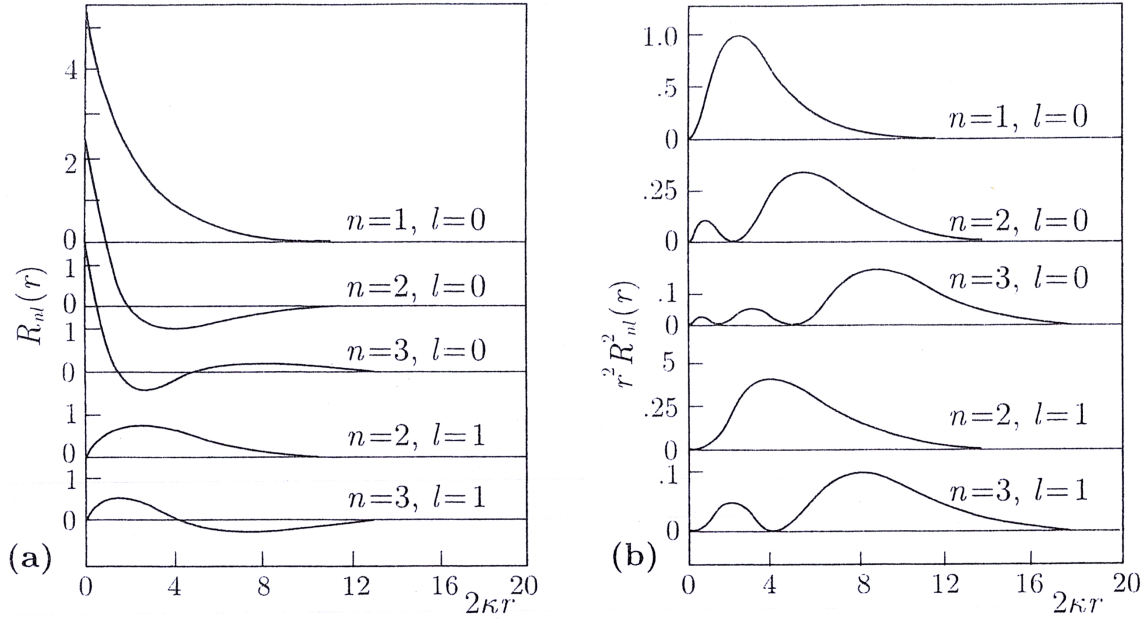


Abbildung 7.2

- Man zeigt leicht

$$\langle r \rangle \propto n^2, \quad \text{für große } n \quad (340)$$

- Konvention: Eigenfunktionen zu $l = 0, 1, 2, 3$ werden als s-, p-, d- und f-Orbitale bezeichnet
- Insgesamt:

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = A_{nl} R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (341)$$

mit Normierungsfaktor A_{nl}

$$A_{nl} = \left(\frac{(n-l-1)! \alpha_n^3}{2n((n+l)!)^3} \right) \quad (342)$$

- Aus Normierungsfaktor folgt, beachte: $0! = 1$

$$n-l-1 \geq 0, \quad \text{resp. } l \leq n-1 \quad (343)$$

Damit ergibt sich für die Quantenzahlen

n	l	m	Entartungsgrad
1	0	0	1
2	0	0	
	1	0, ± 1	4-fach
	0	0	
3	1	0, ± 1	9-fach
	2	0, ± 1 , ± 2	
4	16-fach

Für den Entartungsgrad g_n gilt:

$$g_n = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2 \quad (344)$$

Spektroskopie am Wasserstoffatom

- Spektroskopie misst Energiedifferenzen zwischen Zuständen

$$E_{\text{Photon}} = \hbar\omega = \Delta E_{\text{Atom}} = E_i - E_f \quad (345)$$

folgt

$$\hbar\omega = \text{Ry} \left(-\frac{1}{n_i^2} + \frac{1}{n_f^2} \right) \quad (346)$$

- Wichtigste Fälle

$n_f = 1$	$n_i = 2, 3, \dots$	Lyman-Serie	im UV
$n_f = 2$	$n_i = 3, 4, \dots$	Balmer-Serie	im Sichtbaren
$n_f = 3$	$n_i = 4, 5, \dots$	Paschen-Serie	im Infrarot

Die Serien waren lange vor der Quantenmechanik experimentell bekannt

Abschlußbemerkungen:

- Dass es drei Quantenzahlen gibt, sollte nicht überraschen, da es sich um ein drei-dimensionales Problem handelt
- Wie gehabt: Grundzustand mit Unschärferelation verträglich

- Klassischer Grenzfall: Es lassen sich "kohärente" Wellenpakete konstruieren, die lokalisiert sind und dem 3. Kepler'schen Gesetz $T^2 \propto r^3$ gehorchen

- Korrekturen

- Feinstrukturkonstante:

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137} \quad (347)$$

- Relativistische Korrekturen ergeben Feinstruktur, Stichworte: Darwin-Term und Spin-Bahn-Kopplung. Effektgröße: α^2
- Quantenfeldtheorie: Lamb-Verschiebung. Effektgröße: $\alpha^3 \log \alpha$
- Wechselwirkung Elektron und Kernspin: Hyperfeinstruktur. Effektgröße: $m_e/m_K \approx 1/1500$

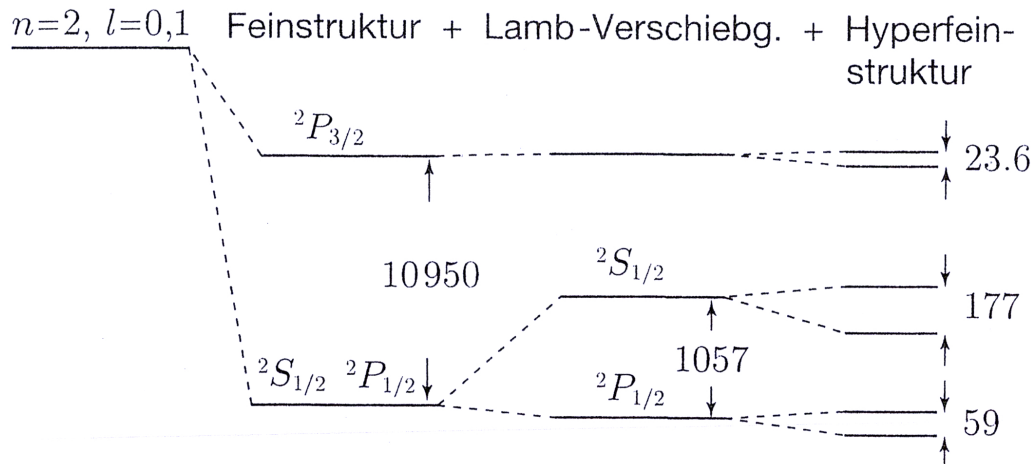


Abbildung 7.3

- Theorie und Experiment: Beliebig gute Übereinstimmung

Lessons learned:

- Separationsansatz nach Winkeln und Radius
- Winkelanteil aus \hat{L}^2 Eigenfunktionen
- Lösung Radialgleichung technisch
- Quantisierung der Hauptquantenzahl n aus Radialgleichung
- Hauptquantenzahlen sind entartet
- l -Entartungen werden durch relativistische, quantenfeldtheoretische und Kernspin-Effekte aufgehoben.
- m -Entartungen durch externes Magnetfeld, Zeeman-Effekt

Termin11

8 Spin

- Stern-Gerlach Versuch: Elektron hat "inneren Drehimpuls", genannt Spin, der nur die Werte $+\hbar/2$ (spin up) und $-\hbar/2$ (spin down) annehmen kann
- Beachte: Bahndrehimpuls war mit $\hbar l(l+1)$ ganz-zahlig
- Spin ist messbar, es muss also einen selbstadjungierten Spinoperator $\vec{S} = (S_x, S_y, S_z)$ geben, der ein Drehimpulsoperator ist.
- Sei \vec{e} Einheitsvektor, so gilt

$$\vec{S} \cdot \vec{e} |\vec{e}, \pm\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} |\vec{e}, \pm\rangle \quad (348)$$

Sei o.B.d.A: $\vec{e} = \vec{e}_z$. Bezeichnungsweise

$$|\vec{e}_z, \pm\rangle =: \begin{cases} |\uparrow\rangle \\ |\downarrow\rangle \end{cases} \quad (349)$$

- Eigenwertgleichung für S_z lautet dann:

$$S_z \begin{pmatrix} |\uparrow\rangle \\ |\downarrow\rangle \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} +|\uparrow\rangle \\ -|\downarrow\rangle \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\uparrow\rangle \\ |\downarrow\rangle \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_z \begin{pmatrix} |\uparrow\rangle \\ |\downarrow\rangle \end{pmatrix} \quad (350)$$

mit der Pauli-Spinmatrix σ_z

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (351)$$

- Für Spin $s = \frac{1}{2}$ hat S^2 den Eigenwert $\frac{3}{4}\hbar^2$

$$S^2|\uparrow\rangle = \hbar^2 s(s+1)|\uparrow\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\uparrow\rangle \quad (352)$$

- Da S_z hermitesch, sind die zu verschiedenen Eigenwerten gehörenden Zustände $|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$ orthogonal

$$\langle\uparrow|\downarrow\rangle = 0 \quad (353)$$

Normierung auf 1

$$\langle\uparrow|\uparrow\rangle = \langle\downarrow|\downarrow\rangle = 1 \quad (354)$$

- Bestimmung der Pauli-Spinmatrizen σ_x und σ_y

Mit Leiteroperatoren

$$S_{\pm} = S_x \pm iS_y, \quad \text{entsprechend } S_x = \frac{1}{2}(S_+ + S_-) \quad S_y = \frac{1}{2i}(S_+ - S_-) \quad (355)$$

folgt mit $l = \frac{1}{2}$ und $m = \pm\frac{1}{2}$

$$S_+|\uparrow\rangle = 0, \quad S_-|\uparrow\rangle = \hbar|\downarrow\rangle \quad (356)$$

$$S_+|\downarrow\rangle = \hbar|\uparrow\rangle, \quad S_-|\downarrow\rangle = 0 \quad (357)$$

Damit Darstellung der Spinoperatoren in der Basis der Zustände $|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$

$$S_{\pm} = \begin{pmatrix} \langle\uparrow|S_{\pm}|\uparrow\rangle & \langle\uparrow|S_{\pm}|\downarrow\rangle \\ \langle\downarrow|S_{\pm}|\uparrow\rangle & \langle\downarrow|S_{\pm}|\downarrow\rangle \end{pmatrix} \quad (358)$$

Mit Gln. (356, 357) folgt

$$S_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (359)$$

und damit mit Gl. (355) und $\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$ die Pauli-Spinmatrizen

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (360)$$

Spinoren

- Allgemeiner Spinzustand, ein Spinor, $|\rangle$ in Basis $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$

$$|\rangle = a_+|\uparrow\rangle + a_-|\downarrow\rangle, \quad a_+, a_- \in \mathbb{C}, \quad \text{mit } |a_+|^2 + |a_-|^2 = 1 \quad (361)$$

- Darstellung des allgemeinen Zustandes $|\rangle$ durch Spinor χ , dessen Komponenten sich durch Projektion auf Basissystem ergeben

$$\chi = \begin{pmatrix} a_+ \\ a_- \end{pmatrix}, \quad a_+ = \langle\uparrow|\rangle, \quad a_- = \langle\downarrow|\rangle \quad (362)$$

Polarisation von Photonen

- Photonen haben Spin 1, Spin 1 ist normaler Weise 3-komponentig
- Da Licht transversale Welle, geht ein Freiheitsgrad verloren
- Den jeweils zwei mal drei Möglichkeiten von Spin $\frac{1}{2}$ Teilchen entspricht
 - Horizontal / vertikal, entspricht Eigenzuständen zu σ_z

$$|h\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |v\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (363)$$

- $\pm 45^\circ$ polarisiert, entspricht Eigenzuständen zu σ_x

$$\begin{aligned} | + 45^\circ \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|h\rangle + |v\rangle) \\ | - 45^\circ \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|h\rangle - |v\rangle) \end{aligned}$$

- rechts/links zirkular polarisiert, entspricht Eigenzuständen zu σ_y

$$\begin{aligned}|R\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|h\rangle + i|v\rangle) \\ |L\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|h\rangle - i|v\rangle)\end{aligned}$$

Lessons learned:

- Spin rein quantenmechanisches Phänomen
- Bahndrehimpuls immer ganzzahlig
- Spin halbzahlig
- Photonen, obwohl Spin 1, äquivalent zu massiven Spin $\frac{1}{2}$ -Teilchen

9 Vielteilchen Systeme

9.1 Symmetrie der Vielteilchenwellenfunktionen

Betrachte zunächst unterscheidbare Teilchen

Dann Gesamtwellenfunktion Produkt der Ein-Teilchenzustände:

$$\psi(r_1, r_2) = \phi_a(r_1)\phi_b(r_2) \quad (364)$$

In Quantenmechanik Ununterscheidbarkeit fundamental

- Betrachte zwei ununterscheidbare Teilchen mit Gesamtwellenfunktion $\psi(r_1, r_2)$ und Permutationsoperator \hat{P} :

$$\hat{P}\psi(r_1, r_2) = \psi(r_2, r_1) \quad (365)$$

Nochmalige Anwendung:

$$\hat{P}\psi(r_2, r_1) = \psi(r_1, r_2) \quad (366)$$

damit

$$\forall \psi : \hat{P}^2 \psi(r_1, r_2) = \psi(r_1, r_2) \implies \hat{P}^2 = \mathbb{1} \quad (367)$$

Folglich hat \hat{P} Eigenwerte $\lambda = \pm 1$. Zudem ist $[\hat{P}, \hat{H}] = 0$

- Gemeinsame Eigenzustände zu \hat{H} und \hat{P} definieren offensichtlich zwei Arten von Teilchen
- Spin-Statistik Theorem¹⁰, Pauli, 1940
 - Bosonen, Spin ganz-zahlig, $S = 0, 1, \dots$, besitzen eine symmetrische Vielteilchenwellenfunktion: $\psi_S = \hat{P}\psi_S$
Besetzungszahlen können alle Werte $0, 1, \dots, \infty$ annehmen
 - Fermionen, Spin halb-zahlig, $S = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$, besitzen eine anti-symmetrische Vielteilchenwellenfunktion: $\psi_A = -\hat{P}\psi_A$
Besetzungszahlen können die Werte $0, 1$ annehmen

Zusammenfassend:

$$\hat{P}\psi(r_1, r_2) = (-1)^{2S}\psi(r_2, r_1) \quad (368)$$

Folge: Reiner Produktansatz

$$\psi(r_1, r_2) = \phi_a(r_1)\phi_b(r_2) \quad (369)$$

geht für ununterscheidbare Teilchen nicht durch.

- (Anti)symmetrisierung:

$$\begin{aligned} \psi_S(r_1, r_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_a(r_1)\phi_b(r_2) + \phi_a(r_2)\phi_b(r_1)) \\ \psi_A(r_1, r_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_a(r_1)\phi_b(r_2) - \phi_a(r_2)\phi_b(r_1)) \end{aligned}$$

Folge: Pauli-Prinzip: Für identische Einteilchen-Wellenfunktionen verschwindet die antisymmetrische Gesamtwellenfunktion

$$\phi_a = \phi_b \implies \psi_A = 0 \quad (370)$$

Zwei Elektronen können nicht im selben Zustand sein. Hierbei ist der Spin zu berücksichtigen.

Beispiel Wasserstoffatom

¹⁰Leseempfehlung: R.F. Streater, A.S. Wightman. PCT, Spin and Statistics, and All That

- Bosonen können für $T \rightarrow 0$ alle in den Grundzustand gehen: Bose-Einstein Kondensation. Makroskopischer Quantenzustand
- Verallgemeinert auf N Teilchen

9.2 Dichtematrix

Reine Zustände

- Bisher haben wir nur reine Zustände $|\psi\rangle$ betrachtet. Diese lassen sich durch Wellenfunktionen beschreiben, z.B. "Elektron befindet sich in Zustand $|n, l, m\rangle$ "
- Viele Teilchen mit Zustand $|\psi\rangle$: Reine Gesamtheit oder Reines Ensemble
- Beachte: Die Superposition von zwei reinen Zuständen gibt wieder einen reinen Zustand, d.h. lässt sich wieder durch Wellenfunktion $|\phi\rangle = a|\psi_1\rangle + b|\psi_2\rangle$ beschreiben.
- Definition: Sei $|n\rangle$ ein vollständiges Orthonormalsystem. Dann ist die Spur der Matrix M definiert als

$$\text{Sp}(M) = \sum_n \langle n|M|n\rangle \quad (371)$$

Spur ist unabhängig von der Basis, im Eigenvektorsystem von M besonders anschaulich

- Definition Dichtematrix¹¹ ρ für reine Zustände:

$$\rho := |\psi\rangle\langle\psi| \quad (372)$$

- Für Observable A kann Erwartungswert $\langle A \rangle$ mit Dichtematrix berechnet werden. Sei $|n\rangle$ Orthonormalsystem. Trick: Einschleiben der Eins

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \langle \psi|A|\psi \rangle = \sum_n \langle \psi|A|n \rangle \langle n|\psi \rangle \\ &= \sum_n \langle n|\psi \rangle \langle \psi|A|n \rangle \\ &= \sum_n \langle n|\rho A|n \rangle = \text{Sp}(\rho A) \end{aligned}$$

¹¹Eigentlich Dichteoperator, wird in einer Basis zur Matrix

Es gilt

$$\begin{aligned}\text{Sp } \rho = 1 & : \sum_n \langle n | \psi \rangle \langle \psi | n \rangle = \sum_n \langle \psi | n \rangle \langle n | \psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle = 1 \\ \rho^2 = \rho & : |\psi\rangle \langle \psi | \psi \rangle \langle \psi | = |\psi\rangle \langle \psi | \end{aligned}$$

Für reine Zustände ist das reine Spielerei

Gemischte Zustände oder Gemischte Gesamtheit oder Gemischtes Ensemble

- Betrachte Ensemble von N Teilchen, von denen sich N_i im Zustand $|\psi_i\rangle$ befinden
- Wahrscheinlichkeit, das sich ein zufällig herausgegriffenes Teilchen im Zustand $|\psi_i\rangle$ befindet, ist

$$p_i = \frac{N_i}{N}, \quad \sum_i p_i = 1 \quad (373)$$

- Gemischter Zustand lässt sich nicht durch Wellenfunktion beschreiben

$$\nexists |\phi\rangle \text{ mit } |\phi\rangle = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \quad (374)$$

aber durch eine Dichtematrix

- Definition Dichtematrix ρ für gemischte Zustände:

$$\rho := \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| := \sum_i p_i \rho_i \quad (375)$$

Es gilt wieder $\langle A \rangle = \text{Sp}(\rho A)$:

$$\begin{aligned}\langle A \rangle &= \sum_i p_i \langle \psi_i | A | \psi_i \rangle = \sum_i \sum_n p_i \langle \psi_i | A | n \rangle \langle n | \psi_i \rangle \\ &= \sum_i \sum_n \langle n | p_i \psi_i \rangle \langle \psi_i | A | n \rangle \\ &= \sum_n \langle n | \rho A | n \rangle = \text{Sp}(\rho A)\end{aligned}$$

Es gilt immer noch

$$\text{Sp } \rho = 1 \quad (376)$$

aber nun

$$\rho^2 \neq \rho \text{ und } \text{Sp } \rho^2 < 1, \text{ falls } p_i \neq 0 \text{ für mehr als ein } i \quad (377)$$

Beweis 1. Aussage:

Wähle Operator $A = \mathbb{1}$

$$\rho^2 = \sum_i \sum_j = |p_i \psi_i\rangle \langle \psi_i | p_j \psi_j\rangle \langle \psi_j| = \sum_i \sum_j = p_i p_j |\psi_i\rangle \langle \psi_i | \psi_j\rangle \langle \psi_j| \neq \rho \quad (378)$$

Beweis der 2. Aussage:

$$\begin{aligned} \text{Sp } \rho^2 &= \sum_n \sum_{ij} \langle n | p_i \psi_i\rangle \langle \psi_i | p_j \psi_j\rangle \langle \psi_j | n\rangle \\ &= \sum_n \sum_{ij} p_i p_j \langle \psi_i | \psi_j\rangle \langle \psi_j | n\rangle \langle n | \psi_i\rangle \\ &= \sum_{ij} p_i p_j |\langle \psi_i | \psi_j\rangle|^2 < \sum_i p_i \sum_j p_j = 1 \end{aligned}$$

Es gilt: $\text{Sp } \rho^2$ ist zeitunabhängig

Beweis: Zyklische Invarianz der Spur, erinnere Zeitentwicklungsoperator $U(t, t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t - t_0)\right)$ und Unitarität $U^\dagger U = \mathbb{1}$

$$\text{Sp } \rho^2(t) = \text{Sp } U \rho(t_0) U^\dagger U \rho(t_0) U^\dagger = \text{Sp } \rho^2(t_0) \quad (379)$$

Damit folgt: Einmal rein, immer rein. Einmal gemischt, immer gemischt

Merke:

- Unterscheidung reiner und gemischter Zustand an Hand von $\rho^2 \stackrel{=}{\neq} \rho$ und $\text{Sp } \rho^2 \stackrel{=}{<} 1$
- Auch für Dichtematrix Dynamik analog zur Schrödinger-Gleichung
- Dichtematrix-Formalismus allgemeiner als Wellenfunktion, da sich gemischte Zustände nicht durch Wellenfunktionen, wohl aber durch Dichtematrizen beschreiben lassen.

Beispiel

- Reiner Zustand: Betrachte Zwei-Niveau-System, z.B. Spin, mit $|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$
- Befindet sich System in einem der Zustände, gilt für Wellenfunktion und Dichtematrix

$$\begin{aligned} |\psi\rangle = |\uparrow\rangle \rightarrow \rho = |\uparrow\rangle\langle\uparrow| &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \text{oder } |\psi\rangle = |\downarrow\rangle \rightarrow \rho = |\downarrow\rangle\langle\downarrow| &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (380)$$

- Kohärente Superposition der Zustände, z.B.:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \rightarrow \rho = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix} \quad (381)$$

ergibt wieder einen reinen Zustand, da $\rho^2 = \rho$ und $\text{Sp } \rho^2 = 1$.

- Gemisch der Zustände mit $p_1 = p_2 = 0.5$ ergibt

$$\rho = \frac{1}{2}|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + \frac{1}{2}|\downarrow\rangle\langle\downarrow| = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix} \quad (382)$$

$$\begin{aligned} \rho^2 &= \frac{1}{4}(|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow|)^2 \\ &= \frac{1}{4}(|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow|) = \frac{1}{2}\rho \neq \rho \end{aligned}$$

- Off-Diagonalelemente des reinen Zustands in Gl. (381) beschreiben die Kohärenz zwischen $|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$, die im Gemisch nicht existiert.
- Last not least: Es gibt keine Wellenfunktion, die die Dichtematrix des gemischten Zustands ergeben würde.

Termin12

9.3 Verschränkte Zustände

Übergang von Ein-Teilchen zu N -Teilchen Fall

- Klassische Mechanik:

Zustandsraum ist Phasenraum (q, p)

Phasenraum von N Teilchen ist das kartesische Produkt der Einteilchen-Phasenräume, für zwei Teilchen: (q_1, q_2, p_1, p_2)

Dimensionen addieren sich

- Quantenmechanik:

Zustandsraum ist Hilbertraum, ein Vektorraum.

Für Vektorräume ist Produktraum für N Teilchen das Tensorprodukt der Ausgangsvektorräume

Beispiel: Zwei Spin 1 Teilchen

$|-1\rangle |0\rangle |1\rangle$ und $|-1\rangle |0\rangle |1\rangle$

Basis:

$$\begin{aligned}
 |-1\rangle |-1\rangle =: & \quad |-1, -1\rangle, \quad |-1, 0\rangle, \quad |-1, 1\rangle \\
 & \quad |0, -1\rangle, \quad |0, 0\rangle, \quad |0, 1\rangle \\
 & \quad |1, -1\rangle, \quad |1, 0\rangle, \quad |1, 1\rangle
 \end{aligned}$$

Dimensionen multiplizieren sich

Führt zu verschränkten Zuständen, die gleich relevant werden

Lessons learned

- Ununterscheidbarkeit quantenmechanischer Teilchen hat Konsequenzen:
 - Bosonen: symmetrische Wellenfunktionen
 - Fermionen: anti-symmetrische Wellenfunktionen
- Dichtematrix als allgemeine Beschreibung quantenmechanischer Zustände
- Verschränkte Zustände auf Grund des Tensorproduktes

10 Einstein-Podolsky-Rosen – Paradoxon

Übung: Fassen Sie EPR paper stichwortartig zusammen

10.1 Theorien verborgener Parameter

Natürliche Erwartung an eine physikalische Theorie

- Lokal, die 1.: keine Informationsübertragung schneller als Lichtgeschwindigkeit
- Lokal, die 2.: Messung am Orte A sollte Messung am Orte B zu gleicher Zeit in keiner Weise beeinflussen
- Deterministisch: Zustand gibt eindeutiges Messergebnis
- Real: Theorie und Realität in 1 zu 1 Verhältnis

Klassische Physik:

- Alles im grünen Bereich

Quantenmechanik:

- Lokal, die 1.: O.K.
- Lokal, die 2.: Wir werden sehen
- Deterministisch: Nein
- Real: Nein, Wellenfunktion

Theorien verborgener Parameter

- Klassische Statistische Physik von 10^{23} Teilchen
 - Im Prinzip alle (deterministischen) Trajektorien ermittelbar
 - Aber: Praktisch nicht machbar und inhaltlich nicht relevant
- Übertragung auf die Quantenmechanik
 - Es gibt eine zu Grunde liegende lokale, deterministische, reale Theorie, die die individuellen Messergebnisse festlegt
 - Nur kennen wir sie nicht

- Beispiel: Spin-Messung

Quantenmechanik: Bei Messung von S_x im Eigenzustand S_z : Für jedes Teilchen 50 % Wahrscheinlichkeit für $\pm\hbar/2$

Theorie verborgener Parameter legt für jedes Teilchen vorher fest, ob $+\hbar/2$ oder $-\hbar/2$ resultiert, so dass in je 50 % der Fälle $\pm\hbar/2$ vorkommt

Einstein, Podolsky, Rosen ” Can¹² Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete ?”, 1935, modernisiert für Photonen von Bohm, 1951

- Betrachte 2 Spin 1/2 Teilchen im (verschränkten) Singulett-Zustand

$$\psi_{\text{EPR}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle) \quad (383)$$

Präparation:

- Spin 1/2 Teilchen: Zweiatomigen Molekül mit Gesamtspin 0 mit Laser in 2 Spin 1/2 Teilchen zerschießen
- Polarisierte Photonen: Parametrische Fluoreszenz von nichtlinear optischen Kristallen. Aus einem Photon der Energie E werden zwei verschränkte der Energie $E/2$
- Teilchen bewegen sich von einander weg.
- Misst man die z -Komponenten der Spins und findet bei Teilchen 1 Spin up, so ergibt sich für Teilchen 2 spin down.
- Misst man stattdessen die x -Komponenten, so impliziert $+\hbar/2$ bei Teilchen 1 $-\hbar/2$ bei Teilchen 2
- Messung an einem Teilchen legt Ergebnis für das andere fest, auch wenn dieses raum-zeitlich getrennt ist, d.h. keine Information mit Lichtgeschwindigkeit ausgetauscht werden konnte. Nicht-lokal, die 2.: ”spooky action at a distance”
- Aber: Kein Widerspruch zur speziellen Relativitätstheorie, lokal, die 1., da keine Information übermittelt werden kann
- EPR: Da Teilchen separiert, kann es keine Beeinflussung der Teilchen geben. Deshalb müssen die Werte von S_x , S_z , usw. schon vor der Messung festgelegt haben.

¹²Fehlender Artikel wird auf schlechtestes English des Russen Podolsky zurückgeführt

- Forderung nach einer vollständigen, lokalen, deterministischen, realen Theorie mit verborgenen Parameter

10.2 Bell'sche Ungleichungen

Kausale Inferenz

- Beobachtbar sind nur Korrelationen
- Von Korrelationen auf Kausalitäten schließen geht nicht
- Aber man kann auf Grund von Korrelationen bestimmte Kausalstrukturen ausschließen: Kausale Inferenz

Zwei widerstreitende Theorien

- Einigt Euch auf ein Experiment
- Berechnet Vorhersagen basierend auf den beiden Theorien
- Am Ende entscheidet das Experiment :-)

Quantenmechanische Vorhersage:

- Messung Spinkomponente S_{z_1} des ersten Teilchens in z -Richtung
Messung Spinkomponente S_{ϕ_2} des zweiten Teilchen in Winkel ϕ zur z -Achse
- Falls erste Messung $+\frac{\hbar}{2}$ ergibt, ist S_{z_2} notwendiger Weise $-\frac{\hbar}{2}$, Spinor:

$$\chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (384)$$

Spinoperator \hat{S}_ϕ mit Winkel ϕ zu z -Achse ist gegeben durch, erinnere Pauli-Spinmatrizen

$$\hat{S}_\phi = \hat{S}_z \cos \phi + \hat{S}_x \sin \phi = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \phi & \sin \phi \\ \sin \phi & -\cos \phi \end{pmatrix} \quad (385)$$

- Eigenwerte: $\pm\hbar/2$, Eigenvektoren von \hat{S}_ϕ

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\phi}{2} \\ \sin \frac{\phi}{2} \end{pmatrix}, \quad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} -\sin \frac{\phi}{2} \\ \cos \frac{\phi}{2} \end{pmatrix} \quad (386)$$

Die $\phi/2$ haben es in sich.

Entwicklung der Wellenfunktion χ_- nach Eigenvektoren von \hat{S}_ϕ

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \sin \frac{\phi}{2} \begin{pmatrix} \cos \frac{\phi}{2} \\ \sin \frac{\phi}{2} \end{pmatrix} + \cos \frac{\phi}{2} \begin{pmatrix} -\sin \frac{\phi}{2} \\ \cos \frac{\phi}{2} \end{pmatrix} \quad (387)$$

- Wahrscheinlichkeit, dass nach spin up (+) Messung an Teilchen 1, auch an Teilchen 2 spin up gemessen wird, ist:

$$P_{++}(\phi) = \sin^2 \frac{\phi}{2} \quad (388)$$

Die anderen möglichen Ergebnisse

$$P_{+-}(\phi) = \cos^2 \frac{\phi}{2}, \quad P_{-+}(\phi) = \cos^2 \frac{\phi}{2}, \quad P_{--}(\phi) = \sin^2 \frac{\phi}{2} \quad (389)$$

- Mittelwert des Produktes $S_{z_1} S_{\phi_2}$: Kovarianzkoeffizient $C(\phi)$

$$\begin{aligned} C_{QM}(\phi) &= \frac{\hbar^2}{8} (P_{++}(\phi) - P_{+-}(\phi) - P_{-+}(\phi) + P_{--}(\phi)) \\ &= \frac{\hbar^2}{4} \left(\sin^2 \frac{\phi}{2} - \cos^2 \frac{\phi}{2} \right) \end{aligned}$$

$$C_{QM}(\phi) = -\frac{\hbar^2}{4} \cos(\phi) \quad (390)$$

Vorhersage von Theorien verborgener Parameter

- Parameter λ legt Werte von S_{z_1} und S_{ϕ_2} fest. Beide Teilchen wissen λ lokal
- Jedes Teilchenpaar hat bestimmten Wert von λ . Das einzige, was wir darüber wissen:

$$\int d\lambda p(\lambda) = 1 \quad (391)$$

- Kovarianzkoeffizient:

$$C_{hv}(\phi) = \int d\lambda p(\lambda) S_{z_1}(\lambda) S_{\phi_2}(\lambda) \quad (392)$$

- Betrachte weiteres Experiment mit Winkel θ zur z -Achse

$$C(\phi) - C(\theta) = \int d\lambda p(\lambda) (S_{z_1}(\lambda) S_{\phi_2}(\lambda) - S_{z_1}(\lambda) S_{\theta_2}(\lambda)) \quad (393)$$

Es gilt

$$S_{\phi_1}(\lambda) = -S_{\phi_2}(\lambda) \quad (394)$$

Damit

$$\begin{aligned} C(\phi) - C(\theta) &= - \int d\lambda p(\lambda) S_{z_1}(\lambda) (S_{\phi_1}(\lambda) + S_{\theta_2}(\lambda)) \\ \text{mit } (S_{\phi_1}(\lambda))^2 &= \frac{\hbar^2}{4} \\ C(\phi) - C(\theta) &= - \int d\lambda p(\lambda) S_{z_1}(\lambda) S_{\phi_1}(\lambda) \left(1 + \frac{4}{\hbar^2} S_{\phi_1}(\lambda) S_{\theta_2}(\lambda) \right) \end{aligned}$$

- Betragsmässige Abschätzung

$$|C(\phi) - C(\theta)| \leq \int d\lambda p(\lambda) |S_{z_1}(\lambda) S_{\phi_1}(\lambda)| \left(1 + \frac{4}{\hbar^2} S_{\phi_1}(\lambda) S_{\theta_2}(\lambda) \right) \quad (395)$$

- Mit $|S_{z_1}(\lambda) S_{\phi_1}(\lambda)| = \frac{\hbar^2}{4}$

$$\begin{aligned} |C(\phi) - C(\theta)| &\leq \int d\lambda p(\lambda) \left(\frac{\hbar^2}{4} + S_{\phi_1}(\lambda) S_{\theta_1}(\lambda) \right) \\ &= \frac{\hbar^2}{4} + \int d\lambda p(\lambda) S_{\phi_1}(\lambda) S_{\theta_2}(\lambda) \end{aligned}$$

Korrelation hängen nur von relativer Orientierung der Messungen ab, Integral ergibt: $C(\theta - \phi)$

Damit die Bell'sche Ungleichung

$$|C_{hv}(\phi) - C_{hv}(\theta)| - C_{hv}(\theta - \phi) \leq \frac{\hbar^2}{4} \quad (396)$$

- Folgt notwendig aus jeder lokalen, deterministischen, realen Theorie verborgener Parameter

Vergleich mit Vorhersage der Quantenmechanik. Betrachte Fall: $\theta = 2\phi$

- Gl. (390) ergibt:

$$C_{QM}(\phi) = -\frac{\hbar^2}{4} \cos \phi, \quad C_{QM}(\theta) = -\frac{\hbar^2}{4} \cos 2\phi \quad (397)$$

In Gl. (396) eingesetzt

$$\frac{\hbar^2}{4} (|\cos \phi - \cos 2\phi| + \cos \phi) \leq \frac{\hbar^2}{4} \quad (398)$$

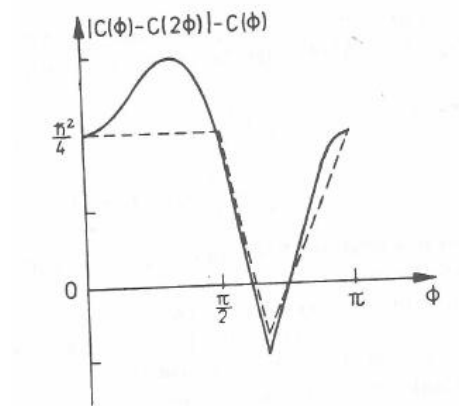


Abbildung 10.1: Bell'sche Ungleichung für QM und eine Theorie verborgener Variablen

- Für $0 \leq \phi \leq \pi/2$ ist die Ungleichung verletzt, maximale Verletzung bei $\phi = \pi/3$, Cosinus-Terme ergeben dort $3/2$.
- Ergo: Quantenmechanik im Widerspruch zu verborgenen Parametern
- Tiefer Grund: $SU(2)$ ist die zweifache Überlagerung der $SO(3)$... erinnere $\phi/2$

Vergleich mit dem Experiment

- Bell, 1962

- Freedman, Clauser, 1972: Erster Bericht über Verletzung der Bell'schen Ungleichung
- Aspect, 1982: Deutlicher Hinweis auf Verletzung
- Kritik an den Experimenten: Loopholes
 - Effizienz der Detektoren
 - wirkliche raum-zeitliche Trennung der Detektoren
- Final ausgeräumt Dezember 2015
- Rekord für "Größe" von verschränktem Zustand $> 100 \text{ km}$

Lessons learned:

- Quantenmechanische Messungen stellen Eigenschaften nicht fest, sondern her
- Wir stehen selbst enttäuscht und sehn betroffen
den Vorhang zu und alle Fragen offen
Bertolt Brecht: Der gute Mensch von Sezuan

Das hier war die Schul-Meinung: "Kopenhagener Interpretation"

Alternative Interpretationen:

- SG ist linear: Nichtlineare Erweiterungen, um Kollaps in die Dynamik mit aufzunehmen.
- SG ist deterministisch: Stochastische Erweiterungen, um Zufälligkeiten intern dynamisch zu erklären
- Dekohärenz durch Wechselwirkung: Erklärt Verschwinden von Diagonalelementen, aber nicht Kollaps der Wellenfunktion
- Viele-Welten Theorie: Jede Möglichkeit wird realisiert.
 - Leichte Probleme mit der Energieerhaltung
 - experimentell nicht testbar

- erklärt nicht, warum die Wahrscheinlichkeiten in meinem jeweiligen Universum richtig hinkommen.
 - Intrinsisch nicht widerlegbar, bar jeder Plausibilität
- Bohm'sche Interpretation: Am Donnerstag

Termin13



Significant-Loophole-Free Test of Bell's Theorem with Entangled Photons

Marissa Giustina,^{1,2,*} Marijn A. M. Versteegh,^{1,2} Sören Wengerowsky,^{1,2} Johannes Handsteiner,^{1,2} Armin Hochrainer,^{1,2} Kevin Phelan,¹ Fabian Steinlechner,¹ Johannes Kofler,³ Jan-Åke Larsson,⁴ Carlos Abellán,⁵ Waldimar Amaya,⁵ Valerio Pruneri,^{5,6} Morgan W. Mitchell,^{5,6} Jörn Beyer,⁷ Thomas Gerrits,⁸ Adriana E. Lita,⁸ Lynden K. Shalm,⁸ Sae Woo Nam,⁸ Thomas Scheidl,^{1,2} Rupert Ursin,¹ Bernhard Wittmann,^{1,2} and Anton Zeilinger^{1,2,†}

¹*Institute for Quantum Optics and Quantum Information (IQOQI), Austrian Academy of Sciences, Boltzmannngasse 3, Vienna 1090, Austria*

²*Quantum Optics, Quantum Nanophysics and Quantum Information, Faculty of Physics, University of Vienna, Boltzmannngasse 5, Vienna 1090, Austria*

³*Max-Planck-Institute of Quantum Optics, Hans-Kopfermann-Straße 1, 85748 Garching, Germany*

⁴*Institutionen för Systemteknik, Linköpings Universitet, 581 83 Linköping, Sweden*

⁵*ICFO – Institut de Ciències Fotoniques, The Barcelona Institute of Science and Technology, 08860 Castelldefels, Barcelona, Spain*

⁶*ICREA – Institució Catalana de Recerca i Estudis Avançats, 08015 Barcelona, Spain*

⁷*Physikalisch-Technische Bundesanstalt, Abbestraße 1, 10587 Berlin, Germany*

⁸*National Institute of Standards and Technology (NIST), 325 Broadway, Boulder, Colorado 80305, USA*

(Received 10 November 2015; published 16 December 2015)

Local realism is the worldview in which physical properties of objects exist independently of measurement and where physical influences cannot travel faster than the speed of light. Bell's theorem states that this worldview is incompatible with the predictions of quantum mechanics, as is expressed in Bell's inequalities. Previous experiments convincingly supported the quantum predictions. Yet, every experiment requires assumptions that provide loopholes for a local realist explanation. Here, we report a Bell test that closes the most significant of these loopholes simultaneously. Using a well-optimized source of entangled photons, rapid setting generation, and highly efficient superconducting detectors, we observe a violation of a Bell inequality with high statistical significance. The purely statistical probability of our results to occur under local realism does not exceed 3.74×10^{-31} , corresponding to an 11.5 standard deviation effect.

DOI: 10.1103/PhysRevLett.115.250401

PACS numbers: 03.65.Ud, 42.50.Xa

Einstein, Podolsky, and Rosen (EPR) argued that the quantum mechanical wave function is an incomplete description of physical reality [1]. They started their discussion by noting that quantum mechanics predicts perfect correlations between the outcomes of measurements on two distant entangled particles. This is best discussed considering Bohm's example of two entangled spin-1/2 atoms [2,3], which are emitted from a single spin-0 molecule and distributed to two distant observers, now commonly referred to as Alice and Bob. By angular momentum conservation, the two spins are always found to be opposite. Alice measures the spin of atom 1 in a freely chosen direction. The result obtained allows her to predict with certainty the outcome of Bob should he measure atom 2 along the same direction. Since Alice could have chosen any possible direction and since there is no interaction between Alice and Bob anymore, one may conclude that the results of all possible measurements by Bob must have

been predetermined. However, these predetermined values did not enter the quantum mechanical description via the wave function. This is the essence of the argument by EPR that the quantum state is an incomplete description of physical reality [1].

Bell's theorem states that quantum mechanics is incompatible with *local realism*. He showed that if we assume, in line with Einstein's theory of relativity, that there are no physical influences traveling faster than the speed of light (the assumption of *locality*) and that objects have physical properties independent of measurement (the assumption of *realism*), then correlations in measurement outcomes from two distant observers must necessarily obey an inequality [4]. Quantum mechanics, however, predicts a violation of the inequality for the results of certain measurements on entangled particles. Thus, Bell's inequality is a tool to rule out philosophical standpoints based on experimental results. Indeed, violations have been measured.

Do these experimental violations invalidate local realism? That is not the only logical possibility. The experimental tests of Bell's inequality thus far required extra assumptions, and therefore left open *loopholes* that still allow, at least in principle, for a local realist explanation of the measured data. (Note that empirically closing a

Published by the American Physical Society under the terms of the Creative Commons Attribution 3.0 License. Further distribution of this work must maintain attribution to the author(s) and the published article's title, journal citation, and DOI.



Strong Loophole-Free Test of Local Realism*

Lynden K. Shalm,^{1,†} Evan Meyer-Scott,² Bradley G. Christensen,³ Peter Bierhorst,¹ Michael A. Wayne,^{3,4} Martin J. Stevens,¹ Thomas Gerrits,¹ Scott Glancy,¹ Deny R. Hamel,⁵ Michael S. Allman,¹ Kevin J. Coakley,¹ Shellee D. Dyer,¹ Carson Hodge,¹ Adriana E. Lita,¹ Varun B. Verma,¹ Camilla Lambrocco,¹ Edward Tortorici,¹ Alan L. Migdall,^{4,6} Yanbao Zhang,² Daniel R. Kumor,³ William H. Farr,⁷ Francesco Marsili,⁷ Matthew D. Shaw,⁷ Jeffrey A. Stern,⁷ Carlos Abellán,⁸ Waldimar Amaya,⁸ Valerio Pruneri,^{8,9} Thomas Jennewein,^{2,10} Morgan W. Mitchell,^{8,9} Paul G. Kwiat,³ Joshua C. Bienfang,^{4,6} Richard P. Mirin,¹ Emanuel Knill,¹ and Sae Woo Nam^{1,‡}

¹National Institute of Standards and Technology, 325 Broadway, Boulder, Colorado 80305, USA

²Institute for Quantum Computing and Department of Physics and Astronomy, University of Waterloo, 200 University Avenue West, Waterloo, Ontario, Canada, N2L 3G1

³Department of Physics, University of Illinois at Urbana-Champaign, Urbana, Illinois 61801, USA

⁴National Institute of Standards and Technology, 100 Bureau Drive, Gaithersburg, Maryland 20899, USA

⁵Département de Physique et d'Astronomie, Université de Moncton, Moncton, New Brunswick E1A 3E9, Canada

⁶Joint Quantum Institute, National Institute of Standards and Technology and University of Maryland, 100 Bureau Drive, Gaithersburg, Maryland 20899, USA

⁷Jet Propulsion Laboratory, California Institute of Technology, 4800 Oak Grove Drive, Pasadena, California 91109, USA

⁸ICFO-Institut de Ciències Fotoniques, The Barcelona Institute of Science and Technology, 08860 Castelldefels (Barcelona), Spain

⁹ICREA-Institució Catalana de Recerca i Estudis Avançats, 08015 Barcelona, Spain

¹⁰Quantum Information Science Program, Canadian Institute for Advanced Research, Toronto, Ontario, Canada

(Received 10 November 2015; published 16 December 2015)

We present a loophole-free violation of local realism using entangled photon pairs. We ensure that all relevant events in our Bell test are spacelike separated by placing the parties far enough apart and by using fast random number generators and high-speed polarization measurements. A high-quality polarization-entangled source of photons, combined with high-efficiency, low-noise, single-photon detectors, allows us to make measurements without requiring any fair-sampling assumptions. Using a hypothesis test, we compute p values as small as 5.9×10^{-9} for our Bell violation while maintaining the spacelike separation of our events. We estimate the degree to which a local realistic system could predict our measurement choices. Accounting for this predictability, our smallest adjusted p value is 2.3×10^{-7} . We therefore reject the hypothesis that local realism governs our experiment.

DOI: 10.1103/PhysRevLett.115.250402

PACS numbers: 03.65.Ud, 42.50.Xa, 42.65.Lm

But if [a hidden variable theory] is local it will not agree with quantum mechanics, and if it agrees with quantum mechanics it will not be local. This is what the theorem says. —JOHN STEWART BELL [1].

Quantum mechanics at its heart is a statistical theory. It cannot, with certainty, predict the outcome of all single events, but instead it predicts probabilities of outcomes. This probabilistic nature of quantum theory is at odds with the determinism inherent in Newtonian physics and relativity, where outcomes can be exactly predicted given sufficient knowledge of a system. Einstein and others felt that quantum mechanics was incomplete. Perhaps quantum

systems are controlled by variables, possibly hidden from us [2], that determine the outcomes of measurements. If we had direct access to these hidden variables, then the outcomes of all measurements performed on quantum systems could be predicted with certainty. The 1927 pilot-wave theory of de Broglie was a first attempt at formulating a hidden variable theory of quantum physics [3]; it was completed in 1952 by Bohm [4,5]. While the pilot-wave theory can reproduce all of the predictions of quantum mechanics, it has the curious feature that hidden variables in one location can instantly change values because of events happening in distant locations. This seemingly violates the locality principle from relativity, which says that objects cannot signal one another faster than the speed of light. In 1935 the nonlocal feature of quantum systems was popularized by Einstein, Podolsky, and Rosen [6], and is something Einstein later referred to as “spooky actions at a distance” [7]. But in 1964 Bell showed that it is impossible to construct a hidden variable theory that obeys locality and simultaneously reproduces all of the predictions of quantum mechanics [8]. Bell’s theorem

*This work includes contributions of the National Institute of Standards and Technology, which are not subject to U.S. copyright.

Published by the American Physical Society under the terms of the Creative Commons Attribution 3.0 License. Further distribution of this work must maintain attribution to the author(s) and the published article’s title, journal citation, and DOI.

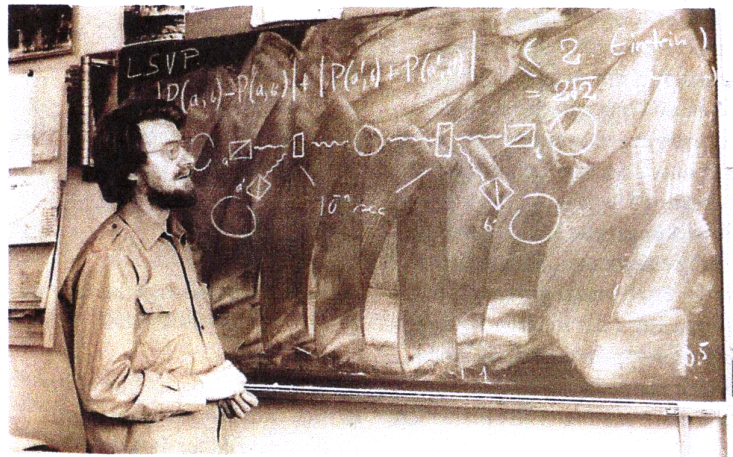
Keine Ausreden mehr!

Drei Experimente schließen durch Verletzung der Bellschen Ungleichungen lokal-realistische Modelle aus.

Wenn zwei Verdächtige bei einem Verhör dieselbe Geschichte erzählen, kann es dafür verschiedene Gründe geben. Der eine kann von der Version des anderen erfahren haben und seine Darstellung des Geschehens danach ausgerichtet haben. Oder es gibt eine gemeinsame Ursache für die Übereinstimmung: Im besten Fall erzählen beide nichts als die Wahrheit; sie können sich aber auch im Vorhinein abgesprochen haben. Finden die Verhöre gleichzeitig an verschiedenen Orten statt, liegt eine gemeinsame Ursache nahe.

Das illustriert, wie natürlich es ist, bei Korrelationen eine gemeinsame Ursache anzunehmen. Das ist auch als Reichenbach-Prinzip bekannt. Gilt dieses Prinzip auch in der Physik? In der Quantenmechanik kann es starke Korrelationen zwischen weit entfernten Teilchen geben, falls sie miteinander verschränkt sind. Möchte man diese durch gemeinsame Ursachen erklären, stößt man auf das Problem, dass dies nicht im Formalismus der Quantenmechanik vorgesehen ist. Muss sie also durch zusätzliche Parameter vervollständigt werden, die die Messresultate im Voraus festlegen? Oder muss man akzeptieren, dass es in der Quantenmechanik so etwas wie eine „spukhafte“ Fernwirkung gibt? Das ist einer der Punkte beim Gedankenexperiment von Einstein, Podolsky und Rosen [1]. Sie waren der Meinung, dass der Formalismus der Quantenmechanik durch eine vollständigere Beschreibung ersetzt werden soll.

Vor etwas mehr als fünfzig Jahren hat der irische Physiker John Bell jedoch gezeigt, dass eine solche Komplettierung nicht ohne Weiteres möglich ist [2]. Er betrachtete dabei eine beliebige physikalische Theorie, die folgende Bedingungen erfüllt: Physikalische Effekte breiten sich nicht instantan im Raum aus (Lokalität), physikalische Eigenschaften sind unabhängig von einer Messung und liegen bereits davor fest (Realismus), und ein Experi-



Der irische Physiker John Bell, hier im Jahr 1982 am CERN, zeigte 1964 mathematisch, dass sich die Quantenmechanik

nicht auf eine lokal-realistische Theorie zurückführen lässt, wie es sich beispielsweise Albert Einstein erhofft hatte.

mentator kann frei wählen, welche Messungen er an einem System durchführt. Solche Theorien heißen lokal-realistisch.

Nun wird die Situation betrachtet, bei der zwei Parteien, meist Alice und Bob genannt, Messungen an zwei Teilchen durchführen. Beide haben je zwei Messungen A_1 , A_2 und B_1 , B_2 mit den Resultaten $+1$ oder -1 zur Verfügung. Dann gilt unter den obigen Annahmen die Bellsche Ungleichung

$$\langle B \rangle = \langle A_1 B_1 \rangle + \langle A_1 B_2 \rangle + \langle A_2 B_1 \rangle - \langle A_2 B_2 \rangle \leq 2,$$

die in der Quantenmechanik mit $\langle B \rangle = 2\sqrt{2}$ verletzt werden kann. Deshalb ist in der Quantenmechanik mindestens eine der obigen Annahmen nicht erfüllt.

Wie lässt sich diese Ungleichung experimentell überprüfen? Bisher hat es verschiedene Versuche mit polarisierten Photonen und in Fallen gefangenen Ionen oder neutralen Atome gegeben. Dabei ließ sich eine Verletzung beobachten, aber noch nicht so, dass alle Anhänger des lokalen Realismus ihre Überzeugungen aufgeben mussten. Dabei gibt es im Wesentlichen zwei Schlupflöcher [3]: Zum einen sind in einigen Experimenten die Messungen von Alice und Bob nicht raumartig im Sinne der Relativi-

tätstheorie getrennt. Damit ist es im Prinzip möglich, dass Alice von Bobs Wahl der Messung erfährt und ihr Messergebnis von Bobs Wahl abhängt. Ein anderes Schlupfloch bilden die Detektoren, die nur einen Bruchteil aller Teilchen nachweisen. Dann muss man annehmen, dass die nicht detektierten Teilchen sich genauso verhalten wie die detektierten. Natürlich sind solche Zusatzannahmen im Rahmen der Quantenmechanik begründbar. Allerdings ist das Ziel eines Bell-Experiments nicht, die Quantenmechanik zu bestätigen, sondern die Klasse aller lokal-realistischen Theorien auszuschließen. Deshalb ist das Schließen aller Schlupflöcher wichtig. In drei aktuellen Experimenten ist das nun gelungen.

Das erste Experiment haben Bas Hensen und Kollegen an der TU Delft durchgeführt [4]. Dabei kamen Stickstoff-Fehlstellen-Zentren (NV-Zentren) in Diamant als Quantensystem zum Einsatz, die sich effektiv wie ein quantenmechanisches Spin-1-System verhalten. Die Energieniveaus $m_s = -1 = |\downarrow\rangle$ und $m_s = 0 = |\uparrow\rangle$ dienen als Quantenbits. Im Experiment waren Alice und Bob 1280 Meter voneinander entfernt und besaßen beide einen Diamantkristall mit NV-Zentrum.

Um die Verschränkung zwischen beiden Parteien herzustellen, be-

Prof. Dr. Otfried
Gühne, Naturwis-
senschaftlich-Tech-
nische Fakultät,
Department Physik,
Universität Siegen,
Walter-Flex-Straße 3,
57068 Siegen