
Einführung in die Quantenmechanik

Karl-Heinz Mantel



München 2011

Einführung in die Quantenmechanik

Karl-Heinz Mantel

Lehrstuhl für BioMolekulare Optik
der Fakultät für Physik
der Ludwig-Maximilians-Universität
München

München, den 17. April 2012

Version: 20110530-1.0

Vorwort

Das vorliegende Skript soll eine kurze Einführung in die Grundbegriffe der Quantenmechanik geben wie sie in der Atomphysik (E4-Vorlesung) an der Ludwig-Maximilians-Universität München benötigt werden. Auf eine relativistische Beschreibung wird verzichtet. In den meisten Fällen wird zur Vereinfachung nur die eindimensionale Darstellung diskutiert. Die Erweiterung auf drei Dimensionen ist in der Regel einfach möglich durch Ersetzen von $\partial_x \rightarrow \nabla$ und Verwendung der Vektorschreibweise.

Ausgehend von der These von De Broglie, dass jedem Teilchen eine Materiewelle zukommt, wird in Anlehnung an die Wellengleichung der Optik die stationäre Schrödingergleichung abgeleitet. Am Beispiel des Kastenpotentials werden Unterschiede zwischen klassischer und quantenmechanischer Behandlung aufgezeigt. Operatoren werden eingeführt und deren Eigenschaften diskutiert. Es wird gezeigt, dass die Heisenbergsche Unschärferelation aus der De Broglie-Beziehung abgeleitet werden kann.

München, den 30.04.2008

Karl-Heinz Mantel

In der zweiten Auflage wurde eine Einführung in die Bra-Ket-Notierung hinzugefügt. Außerdem wurden einige mißverständliche Formulierungen korrigiert.

München, den 10.05.2010

Karl-Heinz Mantel

In der dritten Auflage wurde ein Kapitel zur Dichtematrix und dem Drehimpuls hinzugefügt. Ein paar Schreibfehler wurden korrigiert.

München, den 30.05.2011

Karl-Heinz Mantel

Inhaltsverzeichnis

Vorwort	v
1. Einführung	1
1.1. Historische Entwicklung	1
1.2. Unschärferelation	2
2. Materiewellen	3
2.1. De Broglie-Beziehungen	3
2.2. Ebene Wellen	3
2.3. Wellenpakete	4
2.4. Wahrscheinlichkeitsdeutung	5
3. Quantenmechanik am Beispiel des Kastenpotential	9
3.1. Stationäre Schrödingergleichung	9
3.2. Kastenpotential	10
3.2.1. Klassische Deutung	10
3.2.2. Bohrsche Deutung	11
3.2.3. Quantenmechanische Deutung (1926)	11
4. Messwerte und Erwartungswerte	15
4.1. Quantenmechanischer Erwartungswert für den Ort	15
4.2. Quantenmechanischer Erwartungswert für das Potential	16
4.3. Quantenmechanischer Erwartungswert für den Impuls	16
4.4. Quantenmechanischer Erwartungswert für die Kinetische Energie	18
4.5. Quantenmechanischer Erwartungswert für die Gesamtenergie	18
4.6. Zusammenfassung quantenmechanische Erwartungswerte	18
5. Mathematische Grundlagen	21
5.1. Eigenschaften des Zustandsraumes	21
5.1.1. Der Zustandsraum als linearer Vektorraum	21
5.1.2. Das Skalarprodukt im Zustandsraum	21
5.1.3. Eigenschaften von linearen Operatoren	22
5.1.4. Basisfunktionen des Zustandsraumes	23
5.1.5. Vollständigkeitsaxiom	23
5.2. Dirac-Notation	24
5.2.1. Bra und Ket Vektoren	24
5.2.2. Lineare Operatoren in Dirac-Notation	25

5.2.3.	Darstellungen im Zustandsraum	28
5.3.	Eigenwertgleichung	29
5.3.1.	Definitionen	29
5.3.2.	Darstellung der Eigenwertgleichung	30
5.3.3.	Charakteristische Gleichung	30
5.3.4.	Bestimmung der Eigenvektoren	31
5.3.5.	Entartete Eigenwerte	32
5.4.	Observable	32
5.4.1.	Eigenwerte eines hermiteschen Operators	32
5.4.2.	Eigenvektoren eines hermiteschen Operators	33
5.4.3.	Definition einer Observablen	33
6.	Postulate der Quantenmechanik	35
6.1.	Zustand eines physikalischen Systems	36
6.2.	Physikalische Messgrößen	36
6.3.	Mögliche Messergebnisse	36
6.4.	Wahrscheinlichkeit für ein bestimmtes Messergebnis	36
6.5.	Reduktion des Wellenpakets	37
6.6.	Schrödingergleichung	38
6.7.	Quantisierungsregeln	38
6.8.	Erwartungswert einer Observablen	39
6.9.	Standardabweichung	39
6.10.	Kommutativität von Messgrößen	40
7.	Dichtematrix	41
7.1.	Superposition von Zuständen - Statistisches Ensemble	41
7.2.	Wahrscheinlichkeiten in der Quantenmechanik	43
7.3.	Dichte-Operator	43
7.3.1.	Die Spur des Dichte-Operators	44
7.3.2.	Erwartungswert als Funktion des Dichte-Operators	45
7.3.3.	Zeitliche Entwicklung des Dichte-Operators	45
7.3.4.	Wahrscheinlichkeit für ein Messergebnis als Funktion des Dichte-Operators	45
7.3.5.	Populationen und Kohärenzen	46
8.	Drehimpuls	49
8.1.	Die Eigenfunktionen des Laplace-Operators	49
8.2.	Der Drehimpuls-Operator	51
8.2.1.	Die Quantenzahlen l und m	53
8.2.2.	Beispiele	54
A.	Literaturempfehlungen	57
A.1.	Literatur zur Atomphysik	57

A.2. Einführende Literatur zur Quantenmechanik	57
A.3. Literatur zur Quantenmechanik	57
A.4. Literatur zur Geschichte der Quantenmechanik	58
A.5. Literatur zur Quantenmechanik in der Schulphysik	58
Abbildungsverzeichnis	59
Tabellenverzeichnis	61
Index	65

1. Einführung

1.1. Historische Entwicklung

Mit der Einführung des Bohrschen Atommodells im Jahr 1913 war es erstmalig möglich, die Energieniveaus im Wasserstoffatom zu berechnen. Allerdings war dazu die zusätzliche Annahme notwendig, dass für die Bahnen des Elektrons um den Atomkern nur ganzzahlige Vielfache des Planckschen Wirkungsquantum möglich sind.

$$\text{Wirkung auf geschlossener Bahn} = n \cdot h$$

Jedoch beinhaltet das Bohrsche Atommodell einige Widersprüche, so konnte es z.B. nicht erklären, warum keine Abstrahlung des Elektrons bei seiner Bewegung um den Atomkern beobachtet wird, wie dies nach der Elektrodynamik vorhergesagt wird.

In der Folge gab es verschiedene Versuche das Bohrsche Atommodell weiter zu verbessern (z.B. Sommerfeld 1915/1916: Einführung von Ellipsenbahnen).

Einen wesentlichen Beitrag leistete in der Folge De Broglie in seiner Dissertation (1923), in der er die Hypothese aufstellte, dass jedem materiellen Teilchen eine Materiewelle mit einer bestimmten Wellenlänge, der sog. De Broglie-Wellenlänge zukommt. Damit postulierte er den Welle-Teilchen-Dualismus auch für materielle Teilchen. Seine Überlegungen lieferten wichtige Hinweise für Schrödinger, der 1926 schließlich seine berühmte Schrödingergleichung aufstellte. 1927 konnten Davisson und Germer erstmalig in einem Experiment mit Elektronen Beugungserscheinungen an Kristallen nachweisen, und damit die Theorie der Materiewellen von De Broglie bestätigen. Auf der 5. Solvay-Konferenz 1927 (29 Teilnehmer, darunter 17 Nobelpreisträger) wurden diese Ergebnisse ausführlich diskutiert und gewürdigt. 1929 erhielt De Broglie den Physik-Nobelpreis für seine Theorie der Materiewellen.

Parallel zu Schrödinger hatte Heisenberg seine Matrizenmechanik entwickelt, die ebenfalls die Zustände eines quantenmechanischen System beschreiben konnte. Schrödinger konnte später zeigen, dass beide Ansätze - Schrödingergleichung und Matrizenmechanik - gleichwertig sind und sich ineinander überführen lassen.

In vielen weiteren Experimenten bis heute wurde immer wieder der Wellencharakter der Materie bestätigt. So konnten z.B. die Interferenzen bei einem Doppelspaltexperiment mit makroskopischen Teilchen (Molekülen) nachgewiesen werden (Zeilinger 2002) [O.N02]. Auch die Interferenz-Experimente mit Bose-Einstein-Kondensaten bestätigen eindrucksvoll die Materiewellentheorie von De Broglie.

1.2. Unschärferelation

Wenn wir eine physikalische Größe messen wollen, können wir dies nur mit materiellen Dingen bzw. Werkzeugen tun (z.B. Uhr, Maßstab). Dies bedeutet, dass wir bei der Größenbestimmung von sehr kleinen Objekten auch entsprechend kleine Werkzeuge benötigen. Dies schränkt unseren Horizont entscheidend ein, denn es bedeutet, dass wir bei der Größenbestimmung von Elementarteilchen eben solche Teilchen zur Messung benützen müssen.

Wenn jedoch die Werkzeuge zur Größenbestimmung von der gleichen Größenordnung wie das zu messende Objekt sind, wird die Größenbestimmung von Natur aus ungenau. Dies läßt sich folgendermaßen zeigen:

Wenn wir Licht der Wellenlänge λ zur Ortsbestimmung verwenden, so ergibt sich auf Grund von Beugung eine Begrenzung der auflösbaren Ortsunschärfe Δx von:

$$\Delta x \approx \frac{\lambda}{\sin(\epsilon)}$$

Dabei ist der Winkel ϵ der Öffnungswinkel unter dem das Objekt beobachtet wird.

Bei der Ortsbestimmung mit Licht findet eine Wechselwirkung des Lichts (Photonen) mit dem Objekt (z.B. Atom) statt. Es wird Impuls übertragen und damit die Ortsmessung gestört. Zur Abschätzung dieses Effekts können wir annehmen, dass mindestens ein Photon zur Ortsbestimmung benötigt wird. Dieses Photon erzeugt einen Impulsübertrag von der Größenordnung $h\nu/c$ (Comptonstreuung, siehe später). Die Richtung dieses Impulsübertrags ist innerhalb des Öffnungswinkels unbestimmt, wir erhalten dann für die Unschärfe des übertragenen Impulses Δp_x in X-Richtung:

$$\Delta p_x = \sin(\epsilon) \frac{h\nu}{c}$$

Somit ergibt sich insgesamt:

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \approx h$$

Diese Abschätzung für einen einzelnen Fall ist natürlich noch kein allgemeiner Beweis, dass eine solche Beziehung unter allen Umständen gilt. Wir werden aber später sehen, dass sich eine solche Unschärfebeziehung allgemein aus der Quantenmechanik ableiten läßt.

Die Unschärfebeziehung zeigt aber, dass makroskopische Begriffe wie z.B. Ort und Impuls auf atomare Ebene nicht so einfach übertragen werden können, bzw. neu interpretiert werden müssen.

2. Materiewellen

2.1. De Broglie-Beziehungen

De Broglie stellte 1923 die These auf, dass mit allen materiellen Teilchen eine Materiewelle verbunden ist (er sprach damals von *Phasenwelle*). Er hoffte mit solch einem Modell den Welle-Teilchen-Widerspruch auflösen zu können. Seine Idee war dem Teilchen, das sich entlang einer bestimmten Trajektorie bewegt ein wellenartiges Verhalten zuzuordnen. Er zeigte, dass sich bei der Bewegung eines Wellenpaketes die Gruppengeschwindigkeit des Wellenpaketes mit der Bewegungsgeschwindigkeit eines Teilchens (z.B. Elektron) identifizieren lässt, wenn die Annahmen gemacht wird, dass der Impuls des Teilchens proportional zur Wellenzahl des Wellenpakets ist:

$$p = \hbar k = \frac{h}{\lambda}$$

Zusätzlich muss noch angenommen werden, dass die Energie wie von Planck (1900) postuliert gequantelt ist und folgender Zusammenhang zwischen Frequenz und Energie eines Teilchens gilt:

$$E = h\nu$$

Wir wie im folgenden sehen werden sind diese beiden Beziehungen grundlegend für die gesamte Quantenmechanik. Damit lässt sich nicht nur die stationäre Schrödingergleichung, sondern auch die Heisenbergsche Unschärferelation ableiten. Dazu ist es zunächst nötig die Eigenschaften eines Wellenpaketes, das aus ebenen Wellen aufgebaut ist zusammenzustellen.

2.2. Ebene Wellen

Eine *ebene Welle* lässt sich folgendermaßen schreiben:

$$A(x, t) = A_0 \cos(kx - \omega t) = \frac{A_0}{2} [e^{i(kx - \omega t)} + e^{-i(kx - \omega t)}]$$

Unter Berücksichtigung der De Broglie-Beziehung für den Impuls und der Tatsache, dass die Energie in Einheiten des Planckschen Wirkungsquantum gequantelt ist ($E = h\nu = \hbar\omega$), lässt sich dies auch umschreiben zu:

$$A(x, t) = \frac{A_0}{2} [e^{i/\hbar(px - Et)} + e^{-i/\hbar(px - Et)}]$$

Man beachte, dass im Exponenten die Produkte px und Et jeweils von der Dimension einer *Wirkung* ($\dim[\text{Wirkung}] = \text{Js}$) sind!

2.3. Wellenpakete

Ebene Wellen lassen sich nicht direkt zur Beschreibung von Materiewellen von Teilchen verwenden, da sie unendlich in Raum und Zeit ausgedehnt sind und sich somit kein bestimmter Ort eines Teilchens mit einer ebenen Welle verbinden lässt. Jedoch können ebene Wellen verwendet werden um ein *Wellenpaket* darzustellen. Verwenden wir z.B. zwei ebene Wellen ($A_1(x, t)$ und $A_2(x, t)$) gleicher Amplitude A_0 , aber verschiedener Wellenzahl k , so ergibt sich:

$$\begin{aligned} A(x, t) &= A_1(x, t) + A_2(x, t) \\ &= A_0 [\cos(k_1 x - \omega_1 t) + \cos(k_2 x - \omega_2 t)] \\ &= 2A_0 \cdot \cos(kx - \omega t) \cdot \cos(\Delta k x - \Delta \omega t) \end{aligned}$$

wobei

$$\begin{aligned} k &:= 1/2(k_1 + k_2) \\ \omega &:= 1/2(\omega_1 + \omega_2) \\ \Delta k &:= 1/2(k_1 - k_2) \\ \Delta \omega &:= 1/2(\omega_1 - \omega_2) \end{aligned}$$

Wie wir sehen ergibt sich als Überlagerung der beiden ebenen Wellen wieder eine Welle, die sich mit zwei cos-Termen beschreiben lässt. Der erste Term liefert eine hochfrequente Oszillation, der zweite liefert die niederfrequente Einhüllende der Überlagerung. Werden weitere ebene Wellen überlagert, so ergibt sich ein sog. *Wellenpaket*, dessen Einhüllende ein deutliches Maximum zeigt. Zur einfacheren Darstellung verwendet man meist die Euleridentität $e^{i\phi} = \cos(\phi) + i \cdot \sin(\phi)$ und schreibt die cos-Terme in Form von Exponentialfunktionen.

Betrachten wir den Grenzfall eines Spektrums ebener Wellen, so ergibt sich für das Wellenpaket $\psi(x, t)$ (jetzt in Exponentialschreibweise):

$$\psi(x, t) = \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} a e^{i(kx - \omega t)} dk$$

dies lässt sich umschreiben zu:

$$\psi(x, t) = a e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \cdot 2 \cdot \frac{\sin[(\omega' t - x)\Delta k]}{\omega' t - x}$$

wobei $\omega' := \frac{d\omega}{dk}$. Die erste Komponente beschreibt wieder eine hochfrequente Oszillation, der Sinus-Term die Einhüllende. Das Maximum der Funktion $\psi(x, t)$ liegt bei $x = \omega' t$, die erste Nullstelle (für $t = t_0 = 0$) bei $x_0 = \frac{\pi}{\Delta k}$. Die Gruppengeschwindigkeit ω' dieses Wellenpaketes lässt sich mit Hilfe der De Broglie-Beziehungen mit der Teilchengeschwindigkeit identifizieren:

$$\omega' = v_{Gruppe} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d}{dk} \frac{E}{\hbar} = \frac{d}{dp} \frac{dp}{dk} \frac{E}{\hbar} = \frac{dE}{dp} = \frac{p}{m} = v_{Teilchen}$$

Das Maximum des Wellenpakets bewegt sich also mit der Geschwindigkeit des Teilchens. Die Breite des Wellenpakets ist gegeben durch:

$$\Delta x = \frac{2\pi}{\Delta k}$$

Je größer also Δk wird, d.h. je mehr einzelne ebene Wellen dazu genommen werden, je breiter also das Spektrum wird, desto schärfer ist das Wellenpaket lokalisiert. Umgekehrt gilt auch je größer die räumliche Ausdehnung desto weniger verschiedene Frequenzen (ebene Wellen) tragen zum Wellenpaket bei.

Wir können also ein solches Wellenpaket $\psi(x, t)$ hinsichtlich Ort und Geschwindigkeit mit einem Teilchen identifizieren und bezeichnen $\psi(x, t)$ als die *Zustandsfunktion* des Teilchens.

2.4. Wahrscheinlichkeitsdeutung

In der Optik hatten wir bereits den Welle-Teilchen-Dualismus kennengelernt - bei der Ausbreitung von Licht treten Wellen-Phänomene wie Beugung und Interferenz auf (Voraussetzung: die Wellenlänge λ liegt in einer ähnlichen Größenordnung wie die typischen Größen im System wie Spaltbreite, Gitterkonstante, etc.). Bei der Absorption und Emission von Licht hingegen tritt immer der Teilchen-Charakter auf (z.B: Photoeffekt). Die Ausbreitung von Licht wird über das elektromagnetische Feld ($E(x, t)$) beschrieben. An einem Detektor wird stets die Intensität ($I = E(x, t)^2$) gemessen. Messen wir die Intensitätsverteilung bei einem Doppelspaltversuch, so können wir diese als eine Wahrscheinlichkeitsdichte interpretieren, an einem bestimmten Raumzeitpunkt ein Photon zu finden.

Analoges gilt für Materiewellen: Die Ausbreitung der Materiewelle wird durch die sog. Zustandsfunktion $\psi(x, t)$ beschrieben. Die Materiewelle $\psi(x, t)$ selbst kann nicht gemessen werden. Das Amplitudenquadrat $|\psi(x, t)|^2$ lässt sich als eine Wahrscheinlichkeitsdichte interpretieren, das zugehörige Teilchen an einem Raumzeitpunkt zu finden:

$$W(x_0, x_0 + dx) := \int_{x_0}^{x_0+dx} |\psi(x', t)|^2 dx'$$

Da das Teilchen sich ja irgendwo im gesamten Raum befinden muss und nur einmal vorhanden sein kann, ist für die Interpretation der Wahrscheinlichkeitsdichte noch eine Normierung erforderlich:

$$\boxed{\int |\psi(x', t)|^2 dx' = 1} \quad (2.1)$$

wir betrachten z.B. folgende Funktion:

$$\psi(x, t) = A_0 \cdot e^{i(kx - \omega t)}$$

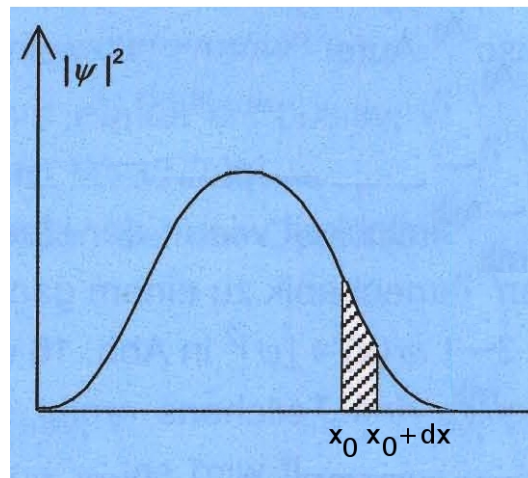


Abb. 2.1.: Wahrscheinlichkeitsdichte

Tabelle 2.1.: Vergleich Optik-Quantenmechanik

Deutung i.d. Optik	Deutung i.d. Quantenmechanik
$ E ^2$: Wahrscheinlichkeitsdichte für das Auftreten von Photonen	$ \psi ^2$: Wahrscheinlichkeitsdichte der Zustandsfunktion
$ E ^2 dV$: Wahrscheinlichkeit Photon im Volumen dV zu finden	$ \psi ^2 dV$: Wahrscheinlichkeit Teilchen im Volumen dV zu finden

dann ergibt sich für die Normierung über ein begrenztes Raumzeitvolumen V für die Normierungskonstante A_0 :

$$A_0 = \frac{1}{\sqrt{V}}$$

Max Born hat als erster die Interpretation der Wahrscheinlichkeitsdichte für $|\psi|^2$ formuliert. Tabelle 2.1 gibt einen Vergleich zwischen Optik und Quantenmechanik.

Bemerkung: In der Optik ist das elektromagnetische Feld immer reel, wenn auch meist eine komplexe Schreibweise zur Vereinfachung der Rechnung benutzt wird. In der Quantenmechanik ist die Zustandsfunktion $\psi(x, t)$ in der Regel komplexwertig wie sich noch zeigen wird. Bei der Berechnung des Amplitudenquadrats muss deshalb beachtet werden, dass bei komplexwertigen Funktionen der erste Term komplex zu konjugieren ist:

$$|\psi(x, t)|^2 = \psi^*(x, t) \cdot \psi(x, t)$$

2. Materiewellen

3. Quantenmechanik am Beispiel des Kastenpotential

3.1. Stationäre Schrödingergleichung

Der Wellencharakter der Materie wird durch die Zustandsfunktion $\psi(x, t)$ beschrieben. Dabei ergibt $|\psi(x, t)|^2 dV$ die Wahrscheinlichkeit das Teilchen im Volumen dV zu finden.

Bisher haben wir ganz allgemeine Eigenschaften der Zustandsfunktion besprochen, es fehlt noch eine Gleichung, die die Zustandsfunktion für einen speziellen Fall festlegt. Dazu werfen wir wieder einen Blick auf die Optik. Wir betrachten eine elektromagnetische Welle mit der Periodendauer T und der Wellenlänge λ :

$$E(x, t) = A \cdot \sin\left[2\pi\left(\frac{t}{T} - \frac{x}{\lambda}\right)\right]$$

Da uns im folgenden nur stationäre Zustände interessieren, halten wir die Zeit zu einem bestimmten Zeitpunkt t_0 fest ($t_0/T = \text{const.} = \phi_c$), somit vereinfacht sich die Gleichung für $E(x, t)$:

$$E(x, t_0) = A \cdot \sin\left[2\pi\left(\phi_c - \frac{x}{\lambda}\right)\right]$$

Wir betrachten für den festgehaltenen Zeitpunkt t_0 die Veränderung des elektromagnetischen Feldes im Raum:

$$\frac{dE}{dx} = -A \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right) \cos\left[2\pi\left(t_c - \frac{x}{\lambda}\right)\right] \quad (3.1)$$

$$\frac{d^2E}{dx^2} = -A \left(\frac{4\pi^2}{\lambda^2}\right) \sin\left[2\pi\left(t_c - \frac{x}{\lambda}\right)\right] = -\frac{4\pi^2}{\lambda^2} E \quad (3.2)$$

Aus den Maxwell-Gleichungen der Elektrodynamik erhält man die Wellengleichung der Optik. Setzt man Gl. 3.2 in die Wellengleichung der Optik ein, so erhält man für stationäre Zustände der elektromagnetischen Welle:

$$\frac{d^2}{dx^2} E + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} E = 0$$

Übertragen wir dies auf die Materiewellen der Quantenmechanik, dann brauchen wir nur die elektromagnetische Welle E durch die Zustandsfunktion ψ , sowie die

3. Quantenmechanik am Beispiel des Kastenpotential

Wellenlänge λ durch die De Broglie-Wellenlänge λ_B zu ersetzen:

$$\lambda_B = \hbar k = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$

Den Impuls ersetzen wir durch die Energie des Teilchens, wobei wir hier die klassische (nicht-relativistische) Energie verwenden:

$$E_{kin} = \frac{p^2}{2m} = E - V \Rightarrow p = \sqrt{2m(E - V)}$$

Somit ergibt sich für die De Broglie-Wellenlänge λ_B :

$$\lambda_B = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m(E - V)}}$$

Setzen wir jetzt diesen Ausdruck zusammen mit der Zustandsfunktion ψ in die stationäre Wellengleichung der Optik ein, so erhalten wir die *stationäre Schrödinger-gleichung* :

$$\boxed{\frac{d^2}{dx^2}\psi + \frac{8m\pi^2}{h^2}(E - V)\psi = 0}$$

3.2. Kastenpotential

Als Anwendungsbeispiel betrachten wir im folgenden ein Teilchen in einem Kastenpotential. Dabei soll außerhalb des Kastens in dem sich das Teilchen aufhält ein unendlich hohes Potential anliegen. Das Teilchen soll sich nur in X-Richtung bewegen können, der Kasten habe eine Länge L .

Das Potential können wir dann schreiben:

$$\begin{aligned} V(x) &= 0 \quad \text{fuer } 0 < x < L \\ V(x) &= \infty \quad \text{fuer } 0 \leq x \text{ oder } x \geq L \end{aligned}$$

3.2.1. Klassische Deutung

Das Teilchen bewegt sich mit beliebiger Geschwindigkeit hin und her und wird an den Wänden elastisch reflektiert. Es sind alle Energiewerte möglich (Kontinuum). Ort und Geschwindigkeit sind jederzeit genau messbar!

Die Wahrscheinlichkeit $w_{kl}(x)dx$ das Teilchen in einem bestimmten Bereich dx zu finden ist überall gleich und beträgt:

$$w_{kl}(x)dx = \frac{dx}{L} = \text{const.}$$

wobei:

$$\int_0^L w_{kl}(x)dx = \int_0^L \frac{dx}{L} = \frac{1}{L} \int_0^L dx = 1$$

3.2.2. Bohrsche Deutung

Als Grundpostulat im Bohrschen Atommodell wird verwendet, dass die Wirkung über einen geschlossenen Weg in Einheiten des Planckschen Wirkungsquant gequantelt ist:

$$Wirkung = n \cdot h$$

oder genauer:

$$\oint p dx = n \cdot h$$

Wendet man dieses Prinzip auf eine geschlossene Bahn des Teilchens im Kastenpotential an (hin und her Bewegung), so erhält man:

$$\int_0^L p dx + \int_L^0 (-p) dx = p \int_0^L dx - p \int_L^0 dx = 2pL = n \cdot h \Rightarrow p = \frac{nh}{2L}$$

Somit ergibt sich für die Energie:

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{n^2 h^2}{8mL^2} = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = E_n$$

Wir erhalten ein diskretes Spektrum von möglichen Energiewerten. Ort und Impuls des Teilchens sind gleichzeitig genau messbar, die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für das Teilchen beträgt wie im klassischen Fall:

$$W(x) dx = \frac{dx}{L} = const.$$

3.2.3. Quantenmechanische Deutung (1926)

Wir verwenden zur Beschreibung die stationäre Schrödingergleichung:

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi + \frac{8m\pi^2}{h^2} (E - V) \psi = 0$$

Für das Teilchen im Inneren des Kastens ($V=0$) erhalten wir:

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi + \frac{8m\pi^2}{h^2} E \psi = \frac{d^2}{dx^2} \psi + \frac{2m\pi^2}{\hbar^2} E \psi = 0$$

Da das Potential unendlich hoch ist, gilt an den Rändern:

$$\psi = 0 \quad \text{für} \quad x = 0, L$$

3. Quantenmechanik am Beispiel des Kastenpotential

d.h. kein Eindringen in den äußeren Bereich bei $V = \infty$. Somit lautet die stationäre Schrödingergleichung:

$$\psi'' = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi \quad (3.3)$$

Lösung dieser Gleichung ergibt:

$$\psi = C \cdot \sin(kx) \quad (3.4)$$

wobei k eine zunächst unbestimmte Konstante ist.

Die mathematisch mögliche Lösung $\psi = C \cdot \cos(kx)$ entfällt wegen den Randbedingungen $\psi = 0$ für $x = 0, L$. Setzt man die Lösung 3.4 in Gl. 3.3 ein, so ergibt sich eine Bedingungsgleichung für die möglichen Energien:

$$E = \frac{k^2 \hbar^2}{2m}$$

Aus den Randbedingungen ergeben sich Einschränkungen für die möglichen k -Werte:

$$\begin{aligned} C \cdot \sin(kL) &= 0 \\ \Rightarrow kL &= n\pi \quad n = 0, 1, 2, \dots \\ \Rightarrow k &= \frac{n\pi}{L} \end{aligned}$$

Für die möglichen Energiewerte bedeutet dies:

$$E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

Somit ergibt sich das gleiche Ergebnis wie bei Bohr! Die Quantenmechanik liefert also ein diskretes Spektrum für die möglichen Energiewerte. Zum Schluss muss nun noch die Konstante k in der Zustandsfunktion $\psi(x)$ ersetzt werden und die Zustandsfunktion normiert werden:

$$\int_0^L |\psi_n|^2 = 1 \Rightarrow C^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx = C^2 \frac{L}{2} = 1 \Rightarrow C = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

Somit ergibt sich für die normierte Zustandsfunktionen des Kastenpotentials (s. Abb 3.1):

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

In der Optik ergeben sich für das elektromagnetische Feld in einem Resonator (Kasten mit unendlichem Potential an den Wänden) ganz ähnliche Ergebnisse z.B. beim Laser-Resonator. Auch dort findet man dann stationäre Zustände mit bestimmten Energien (Moden) .

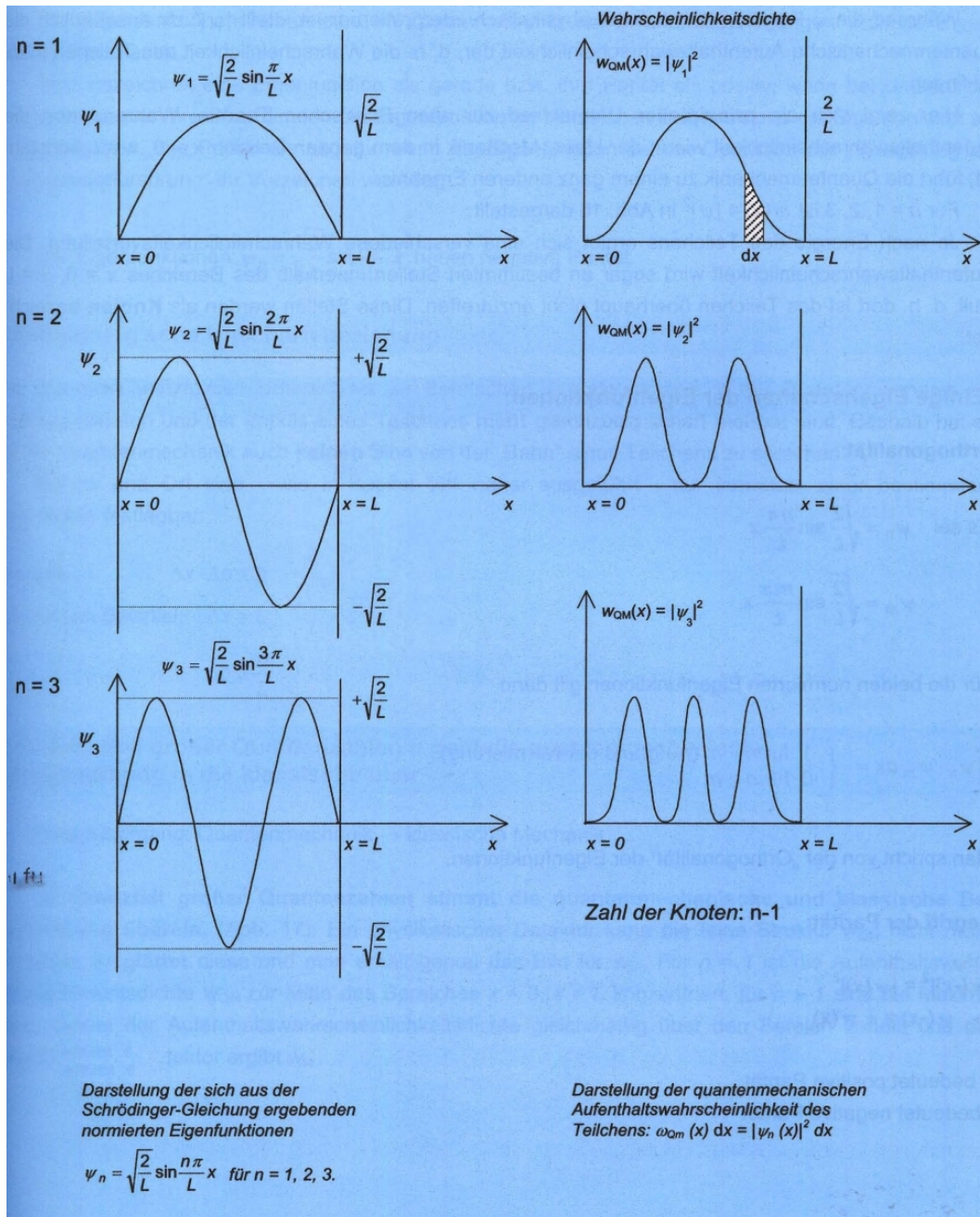


Abb. 3.1.: Eigenfunktionen für das Kastenpotential

3. Quantenmechanik am Beispiel des Kastenpotential

4. Messwerte und Erwartungswerte

In der klassischen Physik liefert z.B. die Hamiltonsche Theorie ein Ergebnis der Form

$$x = f(t)$$

d.h. der Ort eines Teilchens kann in Abhängigkeit von der Zeit exakt angegeben werden. Allerdings können hier auch Unbestimmtheiten auftreten, wenn z.B. die Anfangsbedingungen (x_0, v_0) nicht genau genug bekannt sind. Dies tritt z.B. bei Berechnungen auf, die über große Skalen erfolgen (z.B. Untersuchungen zur Stabilität des Sonnensystems). In diesen Fällen sind dann nur Wahrscheinlichkeitsaussagen möglich (z.B. mittels Monte-Carlo-Methoden).

In der Quantenmechanik ist dies grundlegend anders: beim Beispiel des Kastenpotentials hatten wir gesehen, dass die möglichen stationären Lösungen folgende Form besitzen:

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

Wir erhalten in der Quantenmechanik als Lösung der Schrödingergleichung also eine Schar von möglichen Lösungen, wir wissen aber zunächst nicht welche Lösung im quantenmechanischen System realisiert ist.

Eine ähnliche Situation tritt z.B. beim Würfeln auf: die möglichen Ergebnisse E sind bekannt: $E = 1, 2, 3, 4, 5, 6$, das Ergebnis eines einzelnen Wurfes kann aber nicht exakt vorausgesagt werden. In dieser Situation kann man trotzdem eine Aussage über das wahrscheinliche Eintreten machen. Dazu bildet man aus den möglichen Ereignissen i gewichtet mit ihrer Wahrscheinlichkeit $w(i)$ (hier $w(i) = \frac{1}{6} = const.$) einen gewichteten Mittelwert m , den man auch *Erwartungswert* $\langle m \rangle$ nennt:

$$\langle m \rangle = \sum_{n=1}^6 \frac{1}{6} n = 3,5$$

4.1. Quantenmechanischer Erwartungswert für den Ort

Analog zum Beispiel mit dem Würfel können wir auch in der Quantenmechanik eine Wahrscheinlichkeitsaussage treffen. Da wir hier aber ein Kontinuum von möglichen Lösungen haben, ersetzen wir die Summe durch ein Integral. Die Wahrscheinlichkeit für das Vorliegen eines bestimmten Messwertes (sog. Erwartungswert) ist dann

4. Messwerte und Erwartungswerte

gegeben durch das Amplitudenquadrat der Zustandsfunktion multipliziert mit dem jeweiligen Wert, wobei wir noch über alle möglichen Werte integrieren müssen:

$$\langle x \rangle := \int_0^L x |\psi(x)|^2 dx$$

4.2. Quantenmechanischer Erwartungswert für das Potential

Ebenso können wir z.B. einen Erwartungswert für das Potential berechnen:

$$\langle V \rangle := \int_0^L V(x) |\psi(x)|^2 dx$$

4.3. Quantenmechanischer Erwartungswert für den Impuls

Bisher hatten wir Erwartungswerte von Größen bestimmt, die nur eine Ortsabhängigkeit besitzen. Da der Impuls nicht explizit vom Ort abhängig ist, können wir obiges Verfahren zur Berechnung eines Erwartungswertes nicht so direkt anwenden. Wir müssen die implizite Ortsabhängigkeit berücksichtigen. Formal ist der Erwartungswert für den Impuls durch folgenden Ausdruck gegeben:

$$\langle p \rangle := \int_p p |\psi(p)|^2 dp \quad (4.1)$$

Wir haben aber zunächst nur $\psi(x)$ gegeben. Wie können wir daraus $\psi(p)$ bestimmen? Der Weg dahin geht über die Fouriertransformation und die De Broglie-Beziehung.

Mit Hilfe der Fouriertransformation können wir die Ortsabhängigkeit der Lösung in eine k-Abhängigkeit transformieren:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{ikx} \psi(k) dk \\ \psi(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{-ikx} \psi(x) dx \end{aligned}$$

Unter Verwendung der De Broglie-Beziehung $p = \hbar k$ können wir dies umschreiben:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{\frac{i}{\hbar}px} \psi(p) dp \\ \psi(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{-\frac{i}{\hbar}px} \psi(x) dx \end{aligned}$$

Damit können wir in Gleichung 4.1 den Ausdruck $\psi(p)$ ersetzen:

$$\langle p \rangle = \int_p dp \cdot p \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{x'} e^{\frac{i}{\hbar}px'} \psi^*(x') dx' \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{x'} e^{-\frac{i}{\hbar}px} \psi(x) dx \quad (4.2)$$

Zur Umformung zeigen wir zunächst:

$$\int \partial_x (e^{-\frac{i}{\hbar}px} \cdot \psi(x)) dx = \int \left(\partial_x e^{-\frac{i}{\hbar}px} \right) \cdot \psi(x) dx + \int e^{-\frac{i}{\hbar}px} \cdot \partial_x \psi(x) dx$$

Der Term auf der linken Seite ist 0. Der Grund hierfür liegt in der Normierung der Zustandsfunktion $\psi(x)$: Integral und Ableitung läßt sich durch die Differenz der Funktion an den Integrationsgrenzen ersetzen, wegen der Normierung muss die Zustandsfunktion aber auf dem Rand des Integrationsbereiches verschwinden:

$$\int \partial_x (e^{-\frac{i}{\hbar}px} \cdot \psi(x)) dx = \left[e^{-\frac{i}{\hbar}px} \cdot \psi(x) \right]_a^b = e^{-\frac{i}{\hbar}pb} \cdot \psi(b) - e^{-\frac{i}{\hbar}pa} \cdot \psi(a) = 0$$

Bemerkung: Man sieht dies auch über den Gaußschen Satz: Der Ausdruck unter dem Integral ist die X-Komponente der Divergenz eines Vektorfeldes. Nach dem Gaußschen Satz lässt sich das Integral umschreiben in ein Oberflächenintegral (Integral über den Rand) das aber wegen der Normierung der Wellenfunktion verschwindet.

Somit ergibt sich nach Ausführen der Differentiation:

$$0 = -\frac{i}{\hbar}p \int e^{-\frac{i}{\hbar}px} \cdot \psi(x) dx + \int e^{-\frac{i}{\hbar}px} \cdot \partial_x \psi(x) dx \quad (4.3)$$

$$\Rightarrow p \int e^{-\frac{i}{\hbar}px} \cdot \psi(x) dx = \int e^{-\frac{i}{\hbar}px} \cdot (-i\hbar\partial_x)\psi(x) dx \quad (4.4)$$

Setzen wir dieses Ergebnis in die Gl.4.2 ein, erhalten wir:

$$\langle p \rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_x \int_{x'} \psi^*(x') (-i\hbar\partial_x)\psi(x) \int_p e^{-\frac{i}{\hbar}p(x'-x)} dp$$

Das Integral über p ergibt die Deltafunktion $\delta(x' - x)$:

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_x \int_{x'} \psi^*(x') (-i\hbar\partial_x)\psi(x) \delta(x' - x)$$

Ausführen der Integration über die Deltafunktion ergibt schließlich:

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_x \psi^*(x) (-i\hbar\partial_x)\psi(x)$$

Damit sind wir wieder bei der ursprünglichen Form der Berechnung eines Erwartungswertes angekommen. Man sieht, dass beim Impuls die Größe p durch eine Ableitung nach dem Ort $-i\hbar\partial_x$ ersetzt wird. Dabei ist jedoch auf Grund der Ableitung die Position unter dem Integral entscheidend!

4.4. Quantenmechanischer Erwartungswert für die Kinetische Energie

Die kinetische Energie ist (im nicht-relativistischen Fall) gegeben durch:

$$E_{kin} = \frac{p^2}{2m}$$

Auch hier tritt der Impuls auf. Für die Berechnung des Erwartungswertes gehen wir wie beim Impuls vor und ersetzen p durch $-i\hbar\partial_x$:

$$\begin{aligned}\langle E_{kin} \rangle &= \int \frac{p^2}{2m} |\psi(p)|^2 dp \\ &= \int \psi^*(x) \cdot \frac{(-i\hbar\partial_x)^2}{2m} \cdot \psi(x) dx \\ &= \int \psi^*(x) \cdot \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \right] \cdot \psi(x) dx\end{aligned}$$

4.5. Quantenmechanischer Erwartungswert für die Gesamtenergie

Mit dem Ergebnis für den Erwartungswert der kinetischen Energie läßt sich der Erwartungswert für die Gesamtenergie angeben:

$$E_{ges} = \int \psi^*(x) \cdot \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + V(x) \right] \cdot \psi(x) dx$$

4.6. Zusammenfassung quantenmechanische Erwartungswerte

Bei der Berechnung der quantenmechanischen Erwartungswerte muss die jeweilige Größe über die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Zustandsfunktion integriert werden. Bei Größen, bei denen eine explizite Ortsabhängigkeit vorliegt, kann einfach über das Produkt aus Größe und Aufenthaltswahrscheinlichkeit integriert werden. Bei implizierter Ortsabhängigkeit (z.B. Impuls) muss eine Transformation erfolgen. Dabei wird die Größe des Impulses ersetzt durch $-i\hbar\partial_x$. Der so erhaltene neue Ausdruck ist nicht direkt die gesuchte Größe, sondern liefert eine Rechenvorschrift mit der die gesuchte Größe dann durch Integration berechnet werden kann. Deshalb nennt man diesen neuen Ausdruck auch *Operator*.

4.6. Zusammenfassung quantenmechanische Erwartungswerte

Tabelle 4.1.: Erwartungswerte

Größe	klassisch	Operator	Erwartungswert
Ort	$x(t)$	x	$\langle x \rangle = \int \psi^*(x)x\psi(x)dx$
Impuls	$p(t) = mv(t)$	$-i\hbar\partial_x$	$\langle p \rangle = \int \psi^*(-i\hbar\partial_x)\psi(x)dx$
Energie	$E = H(x, p)$	$-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V(x)$	$\langle E \rangle = \int \psi^*(x) \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V(x) \right] \psi(x)dx$
Drehimpuls- komponente	$l_x = xp_y - yp_x$	$-i\hbar(x\partial_y + y\partial_x)$	$\langle L \rangle = \int \psi^*(x) [-i\hbar(x\partial_y + y\partial_x)] \psi(x)dx$
Drehimpuls	$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$	$\vec{r} \times \frac{\hbar}{i}\nabla$	$\langle \vec{L} \rangle = \int \psi^*(x) [\vec{r} \times \frac{\hbar}{i}\nabla] \psi(x)dx$

Tabelle 4.1 gibt noch einmal einen Überblick über die Berechnung der quantenmechanischen Erwartungswerte sowie einen Vergleich mit den jeweiligen klassischen Größen.

4. Messwerte und Erwartungswerte

5. Mathematische Grundlagen

5.1. Eigenschaften des Zustandsraumes

Im Kapitel 3 und 4 hatten wir gesehen, dass quantenmechanische Zustände durch die Zustandsfunktion ψ beschrieben werden. Die Wahrscheinlichkeitsinterpretation verlangt, dass jede Zustandsfunktion quadrat-integrierbar sein muss. Die Menge aller quadrat-integrierbarer Funktionen bezeichnet man mit dem Zustandsraum L^2 . Diese Menge hat die Struktur eines Hilbertraumes (d.h. ein unendlichdimensionaler Vektorraum über den komplexen Zahlen).

5.1.1. Der Zustandsraum als linearer Vektorraum

Für zwei Zustandsfunktionen ψ_1 und ψ_2 gilt, dass die Linearkombination ebenfalls wieder ein Element des Zustandsraumes ist:

$$\psi = \lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2$$

wobei λ_1 und λ_2 zwei komplexe Konstanten sind.

5.1.2. Das Skalarprodukt im Zustandsraum

Für zwei Zustandsfunktionen ψ und ϕ des Zustandsraumes ist das Skalarprodukt von ψ mit ϕ folgendermaßen definiert:

$$(\psi, \phi) = \int \phi(r)^*\psi(r)d^3r$$

ϕ^* bezeichnet die komplex-konjugierte Eigenfunktion ϕ .

Das Skalarprodukt hat folgende Eigenschaften:

$$\begin{aligned}(\phi, \psi) &= (\psi, \phi)^* \\(\phi, \lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2) &= \lambda_1(\phi, \psi_1) + \lambda_2(\phi, \psi_2) \\(\lambda_1\phi_1 + \lambda_2\phi_2, \psi) &= \lambda_1^*(\phi_1, \psi) + \lambda_2^*(\phi_2, \psi)\end{aligned}$$

Das Skalarprodukt ist also linear bezüglich der zweiten Funktion, aber antilinear bezüglich der ersten.

Zwei Zustandsfunktionen ψ und ϕ sind genau dann orthogonal, wenn gilt:

$$(\psi, \phi) = 0$$

Mit der Norm der Zustandsfunktion ψ wird die Wurzel aus dem Skalarprodukt von ψ mit sich selber bezeichnet:

$$\sqrt{(\psi, \psi)} = \sqrt{\int |\psi(r)|^2 d^3r}$$

Es gilt die *Schwarzsche Ungleichung*:

$$(\psi_1, \psi_2) \leq \sqrt{(\psi_1, \psi_1)} \cdot \sqrt{(\psi_2, \psi_2)}$$

5.1.3. Eigenschaften von linearen Operatoren

Die Übersicht am Ende von Kapitel 4 in Tabelle 4.1 zeigt, dass manche Größen in der Quantenmechanik nicht direkt in Form von Zahlen gegeben sind, sondern als Rechenvorschrift definiert sind, die angibt, wie diese Größe im Einzelfall zu berechnen ist (z.B. Impulsoperator). Eine solche Rechenvorschrift wird als Operator bezeichnet. Lineare Operatoren finden in der Quantenmechanik eine breite Anwendung. Im folgenden werden einige grundlegende Eigenschaften linearer Operatoren diskutiert.

Distributivgesetz

Ein Operator A heißt linear wenn gilt:

$$A \cdot (\lambda_1 \phi_1 + \lambda_2 \phi_2) = \lambda_1 A \phi_1 + \lambda_2 A \phi_2 \quad (5.1)$$

wobei λ_1 und λ_2 zwei komplexe Konstanten und ϕ_1 und ϕ_2 zwei beliebige Zustandsfunktionen sind. Lineare Operatoren erfüllen also das Distributivgesetz.

Assoziativgesetz

Das Produkt zweier linearer Operatoren A und B ist assoziativ:

$$(AB)\phi = A(B\phi) \quad (5.2)$$

Kommutator

Im allgemeinen gilt kein Kommutativgesetz für lineare Operatoren, d.h. $AB \neq BA$. Der Kommutator zwischen zwei Operatoren $[A, B]$ ist definiert als:

$$[A, B] = AB - BA \quad (5.3)$$

Ist der Kommutator zwischen zwei Operatoren Null, dann erfüllen diese beiden Operatoren das Kommutativgesetz, man sagt sie vertauschen. Das bedeutet, es hat keine Auswirkungen für das Ergebnis welcher Operator zuerst auf die Zustandsfunktion angewandt.

5.1.4. Basisfunktionen des Zustandsraumes

Eine Menge von Zustandsfunktionen $\{u_i\}$ des Zustandsraumes heißen orthonormal, wenn gilt:

$$(u_i, u_j) = \int u_i^*(r)u_j(r)d^3r = \delta_{ij}$$

Darüber hinaus heißt diese Menge Basis des Zustandsraumes, wenn jede Funktion ψ des Zustandsraumes durch die Menge der Funktionen u_i in genau einer Art und Weise dargestellt werden kann:

$$\psi(r) = \sum_i c_i u_i(r)$$

wobei c_i komplexe Konstanten sind, die sich aus dem Skalarprodukt des jeweiligen Basisvektors mit der Zustandsfunktion u_i ergeben:

$$c_i = (u_i, \psi) = \int u_i^*(r)\psi(r)d^3r$$

Es kann durchaus mehrere verschiedene Basen des Zustandsraumes geben. Dies ist ganz analog zu Funktionen im R^3 , die durch verschiedene Koordinatensysteme beschrieben werden können (rechtwinklige Koordinaten, Kugelkoordinaten, etc.).

Das Skalarprodukt von zwei Zustandsfunktionen ϕ und ψ kann folgendermaßen berechnet werden:

$$(\phi, \psi) = \left(\sum_i b_i u_i, \sum_j c_j u_j \right) = \sum_{i,j} b_i^* c_j (u_i, u_j) = \sum_{i,j} b_i^* c_j \delta_{ij} = \sum_i b_i^* c_i \quad (5.4)$$

Es ergibt sich also ganz analog zum Skalarprodukt im R^3 die Summe des Produkts der Komponenten im Basissystem.

5.1.5. Vollständigkeitsaxiom

Zur Beschreibung des *Vollständigkeitsaxioms* betrachten wir die Entwicklung einer Zustandsfunktion in Basisfunktionen des Zustandsraumes:

$$\psi(r) = \sum_i c_i u_i(r) = \sum_i (u_i, \psi) u_i(r) = \sum_i \left[\int u_i^*(r') \psi(r') d^3r' \right] u_i(r)$$

Durch Vertauschen von \sum und \int erhalten wir:

$$\psi(r) = \int \psi(r') \left[\sum_i u_i^*(r') u_i(r) \right] d^3r' \quad (5.5)$$

Das bedeutet, wir können $\psi(r)$ formal schreiben als:

$$\psi(r) = \int \psi(r') F(r, r') d^3 r'$$

Als Lösung dieser Gleichung erhält man

$$F(r, r') = \delta(r - r')$$

Vergleichen wir dieses Ergebnis mit Gl. 5.5, dann ergibt sich:

$$\sum_i u_i^*(r') u_i(r) = \delta(r - r')$$

Diesen Zusammenhang bezeichnet man als *Vollständigkeitsaxiom*. Wenn eine Menge von Funktionen das Vollständigkeitsaxiom erfüllt, dann ist sie eine Basis des Zustandsraumes.

5.2. Dirac-Notation

Eine Zustandsfunktion wird durch ihre vektoriellen Komponenten in einer speziellen Basis beschrieben. Dies kann z.B. eine Basis im rechtwinkligen Koordinatensystem oder in Kugelkoordinaten sein. Rechnungen mit der Zustandsfunktion müssen stets in der jeweiligen Basis durchgeführt werden (siehe z.B. Gl. 5.4). In vielen Fällen ist eine abstrakte Beschreibung, die sich nicht auf eine bestimmte Basis bezieht von Vorteil. Dirac hat dazu eine basis-freie Schreibweise, die sog. *Dirac-Notation* eingeführt. In dieser Beschreibung wird jedem quantenmechanischen Zustand ein Zustandsvektor in einem Zustandsraum E des Systems zugeordnet. Der Zustandsraum E ist wieder ein Unterraum des Hilbertraumes.

5.2.1. Bra und Ket Vektoren

Ket Vektoren

Ein Zustandsvektor im Zustandsraum wird als **Ket** bezeichnet und durch das Symbol $|\ >$ gekennzeichnet. Zu jeder Zustandsfunktion $\psi(r)$ gibt es genau einen Zustandsvektor. Der Ket $|\psi >$ gehört zur Zustandsfunktion $\psi(r)$. Also

$$\psi(r) \in L^2 \equiv |\psi > \in E$$

Man beachte, dass auf der rechten Seite keine r -Abhängigkeit mehr auftritt, da die Dirac-Notation eine basis-freie Beschreibung darstellt.

Bra Vektoren

Zur Beschreibung eines Skalarprodukts definieren wir einen weiteren Zustandsraum, der als Dualraum zu E bezeichnet wird: E^* . Jedes Element von E^* wird als **Bra** bezeichnet und mit dem Symbol $\langle \psi |$ gekennzeichnet. Wieder entspricht jeder Zustandsfunktion ψ genau ein Zustandsvektor. Der Bra $\langle \psi |$ gehört zur Zustandsfunktion ψ . Die Bezeichnungen ‘Bra’ und ‘Ket’ sind angelehnt an das englische Wort ‘bracket’ welches für die Schreibweise ‘ $\langle \psi |$ ’ steht.

Zu jedem Ket-Vektor gibt es einen Bra-Vektor¹. Allerdings hatten wir bei der Definition des Skalarprodukts (siehe 5.1.2) gesehen, dass dieses *antilinear* im ersten Argument ist. Also gilt zwischen Ket und Bra folgende antilineare Korrespondenz:

$$\lambda_1 |\phi_1 \rangle + \lambda_2 |\phi_2 \rangle \equiv \lambda_1^* \langle \phi_1 | + \lambda_2^* \langle \phi_2 |$$

Dirac-Notation für das Skalarprodukt

In der Dirac-Notation wird das Skalarprodukt zwischen den beiden Zustandsvektoren ψ und ϕ geschrieben als $\langle \psi | \phi \rangle$. Wir übertragen die Definitionen des Skalarprodukts (vgl. 5.1.2) und können damit schreiben:

$$\begin{aligned} \langle \phi | \psi \rangle &= \langle \psi | \phi \rangle^* \\ \langle \phi | \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2 \rangle &= \lambda_1 \langle \phi | \psi_1 \rangle + \lambda_2 \langle \phi | \psi_2 \rangle \\ \langle \lambda_1 \phi_1 + \lambda_2 \phi_2 | \psi \rangle &= \lambda_1^* \langle \phi_1 | \psi \rangle + \lambda_2^* \langle \phi_2 | \psi \rangle \end{aligned} \quad (5.6)$$

Das Skalarprodukt $\langle \psi | \psi \rangle$ ist immer reel und positiv. Es ist genau dann Null, wenn $|\psi \rangle = 0$.

5.2.2. Lineare Operatoren in Dirac-Notation

Schreibweise

Ein linearer Operator transformiert einen Ket in einen anderen Ket, wir können deshalb schreiben:

$$|\psi' \rangle = A |\psi \rangle \quad (5.7)$$

Ebenso können wir auch einen Bra transformieren:

$$\langle \psi' | = \langle \psi | A^+ \quad (5.8)$$

Allerdings müssen wir jetzt, da die Operation im Dualraum stattfindet den zu A adjungierten (=hermitisch konjugierten) Operator A^+ benutzen. Man erhält den zu A adjungierten Operator A^+ , indem man A transponiert und komplex konjugiert.

¹Tatsächlich gibt es nicht zu jedem Bra-Vektor einen Ket-Vektor: betrachtet man eine Funktion χ_ϵ , die im Grenzfall $\epsilon \rightarrow 0$ in eine δ -Funktion übergeht, so kann man zeigen, dass im Grenzfall für $\chi_{\epsilon \rightarrow 0}$ zwar ein Bra aber kein Ket existiert. Für eine genauere Diskussion siehe [B.D99]

Eigenschaften adjungierter Operatoren

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

Skalarprodukt mit adjungierten Operatoren

Wie für das Skalarprodukt können wir auch die Definitionen für lineare Operatoren in die Dirac-Notation übernehmen. Es ergeben sich folgende Schreibweisen :

$$\begin{aligned}
 A(\lambda_1|\psi_1 \rangle + \lambda_2|\psi_2 \rangle) &= \lambda_1 A|\psi_1 \rangle + \lambda_2 A|\psi_2 \rangle \\
 (AB)|\psi \rangle &= A(B|\psi \rangle) \\
 (\lambda_1 \langle \psi_1| + \lambda_2 \langle \psi_2|)A^+ &= \lambda_1 \langle \psi_1|A^+ + \lambda_2 \langle \psi_2|A^+ \\
 \langle \psi|(AB)^+ &= \langle \psi|B^+ A^+
 \end{aligned} \tag{5.9}$$

Das Matrix-Element des Operator A zwischen den beiden Kets $|\phi \rangle$ und $|\psi \rangle$ ist gegeben durch:

$$\langle \phi|(A|\psi \rangle) = \langle \phi|A|\psi \rangle = (\langle \phi|A)|\psi \rangle \tag{5.10}$$

Beachte:

$$\begin{aligned}
 |A\psi \rangle &= A|\psi \rangle \\
 \langle A\psi| &= \langle \psi|A^+
 \end{aligned} \tag{5.11}$$

Operationen mit Operatoren, Kets, Bras und Konstanten lassen sich also sowohl im Zustandsraum als auch im Dualraum durchführen. Beim Übergang vom Zustandsraum in den Dualraum muss man lediglich alle Objekte (Operatoren, Kets, Bras und Konstanten) hermitisch konjugieren. Das heißt konkret:

- **Ersetze**
 Konstanten durch ihren komplex-konjugierten Wert
 Kets durch die entsprechenden Bras
 Bras durch die entsprechenden Kets
 Operatoren durch ihren adjungierten Operator
- **Vertausche**
 die Reihenfolge der Faktoren, wobei die Position der Konstanten irrelevant ist

Beispiele:**Operator**

Der Ausdruck $\lambda \langle u|A|v \rangle |w \rangle \langle \psi|$ ist ein Operator. Wir wollen diesen Ausdruck hermitisch konjugieren. Durch Anwendung der obigen Regeln erhalten wir:

$$\lambda \langle u|A|v \rangle |w \rangle \langle \psi| \Rightarrow |\psi \rangle \langle w| \langle v|A^+|u \rangle \lambda^* = \lambda^* \langle v|A^+|u \rangle |\psi \rangle \langle w|$$

Ket

Der Ausdruck $\lambda |u \rangle \langle v|w \rangle$ ist ein Ket. Daraus ergibt sich der konjugierte Bra:

$$\lambda |u \rangle \langle v|w \rangle \Rightarrow \langle w|v \rangle \langle u|\lambda^* = \lambda^* \langle w|v \rangle \langle u|$$

Projektor

Wir betrachten den folgenden Ausdruck:

$$\langle \phi|\eta \rangle |\psi \rangle = |\psi \rangle \langle \phi|\eta \rangle \quad (5.12)$$

Hier ist $\langle \phi|\eta \rangle$ ein Skalarprodukt, also eine komplexe Zahl, die vor oder nach dem Ket $|\psi \rangle$ stehen kann, wir erhalten also wieder einen Ket. Wir können aber auch $|\psi \rangle \langle \phi|$ als Operator auffassen, der den Ket $|\eta \rangle$ in einen anderen Ket transformiert.

Ein Ausdruck von der Form $|\psi \rangle \langle \psi|$ wird als *Projektor* (P_ψ) bezeichnet:

$$P_\psi |\phi \rangle = |\psi \rangle \langle \psi|\phi \rangle \quad (5.13)$$

Wenn der Projektor P_ψ auf den Zustand $|\phi \rangle$ wirkt, ergibt sich also ein Zustand, der proportional zum Zustand $|\psi \rangle$ ist.

Ganz ähnlich wie in der Geometrie, wenn wir den Vektor $\vec{\alpha}$ projizieren auf den Vektor $\vec{\beta}$ und einen neuen Vektor $\vec{\beta}'$ erhalten, der proportional zum Vektor $\vec{\beta}$ ist:

$$\vec{\beta}' = \vec{\beta} \cdot (\vec{\beta}\vec{\alpha}) \quad (5.14)$$

Antilinearität

Bei der Definition des Skalarprodukt (siehe 5.1.2) hatten wir gesehen, dass dieses *antilinear* im ersten Argument ist. Also gilt zwischen Ket und Bra folgende antilineare Korrespondenz:

$$\lambda_1 |\phi_1 \rangle + \lambda_2 |\phi_2 \rangle \Leftrightarrow \lambda_1^* \langle \phi_1| + \lambda_2^* \langle \phi_2|$$

5.2.3. Darstellungen im Zustandsraum

Es gibt also im Zustandsraum eine Darstellung der Zustände, Operatoren und des Skalarprodukts (die Dirac-Notation), die unabhängig von einer bestimmten Basis ist. D.h. man kann Zustände und Vorgänge im Zustandsraum beschreiben ohne sich auf ein bestimmtes Koordinatensystem zu beziehen, dies erleichtert die Beschreibung erheblich. Wenn man konkrete Messwerte erhalten möchte, muss man jedoch die Beschreibung aus dem Zustandsraum in ein konkretes Basissystem transformieren. Da es verschiedene Basissysteme geben kann, wird es auch verschiedene Darstellungsformen geben, je nach dem welches Basissystem gewählt wird.

Darstellung von Kets

Wir wählen im Zustandsraum eine Menge von Basisvektoren $|u_i\rangle$. Dann können wir einen beliebigen Ket $|\psi\rangle$ durch seine Skalarproduktkomponenten c_i mit den Basisvektoren darstellen:

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i \cdot |u_i\rangle = \sum_i \langle u_i|\psi\rangle |u_i\rangle = \sum_i |u_i\rangle \langle u_i|\psi\rangle$$

Diese Komponenten können in Form eines Spalten-Vektors angeordnet werden:

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \\ c_i \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle u_1 | & | \psi \rangle \\ \langle u_2 | & | \psi \rangle \\ \langle u_3 | & | \psi \rangle \\ \vdots & \vdots \\ \langle u_i | & | \psi \rangle \\ \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots \end{pmatrix}$$

Darstellung von Bras

Sei $|\phi\rangle$ ein beliebiger Ket mit einer Entwicklung in der Basis $|u_i\rangle$:

$$|\phi\rangle = \sum_i b_i \cdot |u_i\rangle = \sum_i \langle u_i|\phi\rangle |u_i\rangle = \sum_i |u_i\rangle \langle u_i|\phi\rangle$$

Dann läßt sich der zugehörige Bra $\langle\phi|$ ganz analog in der Basis $\langle u_i|$ entwickeln (jetzt jedoch b_i^* statt b_i):

$$\langle\phi| = \sum_i b_i^* \cdot \langle u_i| = \sum_i \langle\phi|u_i\rangle \langle u_i| = \sum_i \langle u_i| \langle\phi|$$

Die Komponenten b_i^* können in Form eines Zeilen-Vektors angeordnet werden:

$$(b_1, b_2, \dots, b_i, \dots) = (\dots \langle\phi|u_i\rangle \dots)$$

Darstellung von Operatoren

Ein Operator A kann in einer Basis $|u_i\rangle$ durch eine quadratische Matrix dargestellt werden:

$$A_{ij} = \langle u_i | A | u_j \rangle$$

$$\langle u_i | A | u_j \rangle = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1j} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2j} & \dots \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot & \dots \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot & \dots \\ A_{i1} & A_{i2} & \dots & A_{ij} & \dots \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot & \dots \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot & \dots \end{pmatrix}$$

Beispiele

$$\langle \phi | A | \psi \rangle = (b_1^* b_2^* \dots b_i^* \dots) \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1j} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2j} & \dots \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot & \dots \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot & \dots \\ A_{i1} & A_{i2} & \dots & A_{ij} & \dots \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot & \dots \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ c_i \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix}$$

$$|\psi\rangle \langle \psi| = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ c_i \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix} (c_1^* c_2^* \dots c_i^* \dots) = \begin{pmatrix} c_1^* c_1 & c_1^* c_2 & \dots & c_1^* c_j & \dots \\ c_2^* c_1 & c_2^* c_2 & \dots & c_2^* c_j & \dots \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot & \dots \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot & \dots \\ c_i^* c_1 & c_i^* c_2 & \dots & c_i^* c_j & \dots \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot & \dots \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot & \dots \end{pmatrix}$$

5.3. Eigenwertgleichung

5.3.1. Definitionen

Bei der Diskussion des Kastenpotentials hatte sich aus der stationären Schrödingergleichung eine typische Wellengleichung ergeben, die sich auch in Form einer *Eigenwertgleichung* schreiben läßt:

$$A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$$

Dabei ist A ein linearer Operator, λ eine Konstante, der sog. *Eigenwert*. Ein Zustandsvektor $|\psi\rangle$ der solch eine Gleichung erfüllt bezeichnet man auch als *Eigenvektor* des linearen Operators A .

Eigenvektoren sind nur bis auf eine multiplikative Konstante bestimmt. Wenn $|\psi\rangle$ ein Eigenvektor von A ist, dann ist auch $(\alpha|\psi\rangle)$ ein Eigenvektor von A :

$$A(\alpha|\psi\rangle) = \alpha A|\psi\rangle = \alpha\lambda|\psi\rangle = \lambda(\alpha|\psi\rangle)$$

5.3.2. Darstellung der Eigenwertgleichung

Zur Lösung der Eigenwertgleichung müssen wir die Eigenwertgleichung in einer Basis $|u_i\rangle$ darstellen. Wir projizieren die Eigenvektoren $|\psi\rangle$ auf die orthonormale Basis $|u_i\rangle$ $|i = 1, 2, \dots, N$:

$$\langle u_i|A|\psi\rangle = \lambda \langle u_i|\psi\rangle$$

Einfügen der Vollständigkeitsrelation ergibt:

$$\sum_j \langle u_i|A|u_j\rangle \langle u_j|\psi\rangle = \lambda \langle u_i|\psi\rangle$$

Damit erhalten wir:

$$\sum_j A_{ij}c_j = \lambda c_i$$

oder:

$$\sum_j [A_{ij} - \lambda\delta_{ij}]c_j = 0 \tag{5.15}$$

5.3.3. Charakteristische Gleichung

Das Gleichungssystem 5.15 besteht aus N Gleichungen mit N unbekanntem c_j . Es ist ein homogenes, lineares Gleichungssystem und hat eine nicht-triviale Lösung genau dann, wenn die Determinante der Koeffizienten Null ist:

$$\text{Det}[A - \lambda I] = 0$$

dabei ist A die $N \times N$ Koeffizientenmatrix A_{ij} und I die Einheitsmatrix. Gleichung 5.16 wird auch als *charakteristische Gleichung* bezeichnet. Ausgeschrieben lautet sie:

$$\begin{vmatrix} A_{11} - \lambda & A_{12} & \dots & A_{1N} \\ A_{21} & A_{22} - \lambda & \dots & A_{2N} \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ A_{N1} & A_{N2} & \dots & A_{NN} - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

Dies ist eine Gleichung N -ter Ordnung und hat N Lösungen, dies sind die N Eigenwerte des Operators A . Man kann zeigen, dass sich unabhängig von der Wahl der Basis $|u_i\rangle, i = 1, 2, \dots, N$ immer die gleiche charakteristische Gleichung ergibt.

5.3.4. Bestimmung der Eigenvektoren

Zur Bestimmung der Eigenvektoren werden die Eigenwerte λ der Reihe nach in Gleichung 5.15 eingesetzt. Es ergibt sich jeweils ein lineares Gleichungssystem, dessen Lösung jeweils einen Eigenvektor ergibt.

Beispiel

Es sei der lineare Operator A gegeben durch:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 2 & -1 \\ 2 & -1 & 1 \\ 2 & -1 & 3 \end{pmatrix}$$

Dann ergibt sich die charakteristische Gleichung zu:

$$\begin{vmatrix} 0 - \lambda & 2 & -1 \\ 2 & -1 - \lambda & 1 \\ 2 & -1 & 3 - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

ausgeschrieben ergibt dies:

$$\begin{aligned} (0 - \lambda)(-1 - \lambda)(3 - \lambda) + 4 + 2 - (2\lambda + 2 + \lambda + 12 - 4\lambda) &= 0 \\ -\lambda^3 + 2\lambda^2 + 4\lambda - 8 &= 0 \\ (\lambda - 2)(\lambda - 2)(\lambda + 2) &= 0 \end{aligned}$$

Als Lösung ergibt sich:

$$\lambda_{1,2} = 2 \quad \lambda_3 = -2$$

Der Eigenwert $\lambda = 2$ ist doppelte Nullstelle der charakteristischen Gleichung. Zur Berechnung der Eigenvektoren setzen wir zunächst den ersten Eigenwert 2 ein:

$$A - 2 \cdot I = \begin{pmatrix} -2 & 2 & -1 \\ 2 & -3 & 1 \\ 2 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

Dies ergibt folgendes Gleichungssystem:

$$\begin{pmatrix} -2 & 2 & -1 \\ 2 & -3 & 1 \\ 2 & -1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Wir bringen die Matrix auf die obere Dreiecksform und erhalten:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1/2 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Als Lösung ergibt sich der Eigenvektor $c1$ zum Eigenwert 2:

$$c1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -2 \end{pmatrix}$$

Ebenso ergibt sich für den Eigenwert -2 der Eigenvektor $c2$:

$$c2 = \begin{pmatrix} -3 \\ 4 \\ 2 \end{pmatrix}$$

5.3.5. Entartete Eigenwerte

Es kann auch vorkommen, dass das lineare Gleichungssystem der Ordnung N nur $N - p$ unabhängige Gleichungen enthält. In diesem Fall ergeben sich nur $N - p$ verschiedene Eigenwerte. Zu einem Eigenwert existiert dann ein p -dimensionaler Unterraum mit p Eigenvektoren. Man sagt der Eigenwert ist p -fach entartet.

5.4. Observable

5.4.1. Eigenwerte eines hermiteschen Operators

Messgrößen werden in der Quantenmechanik durch Operatoren dargestellt. Die möglichen Messwerte einer Messgröße sind die Eigenwerte des Operators. Da Messwerte immer reell sein müssen, müssen auch die Eigenwerte des Operators reell sein. Daraus ergeben sich Bedingungen für den Operator:

Wir schreiben die Eigenwertgleichung des Operators A mit den Eigenvektoren $|\psi\rangle$ und den zugehörigen Eigenwerten λ auf und wollen untersuchen unter welchen Bedingungen die Eigenwerte des Operators reell sind.

$$A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$$

Multiplikation von links mit dem Eigenvektor $\langle\psi|$ ergibt:

$$\langle\psi|A|\psi\rangle = \lambda\langle\psi|\psi\rangle \quad (5.16)$$

Die Gleichung wird komplex konjugiert:

$$\langle\psi|A|\psi\rangle^* = \lambda^*\langle\psi|\psi\rangle$$

Wir können nun weiter umformen:

$$\langle\psi|A|\psi\rangle^* = \langle\psi|A^+|\psi\rangle = \lambda^*\langle\psi|\psi\rangle$$

Ein Vergleich mit Gleichung 5.16 zeigt:

$$\lambda^* = \lambda \iff \langle \psi | A | \psi \rangle = \langle \psi | A^+ | \psi \rangle$$

Das bedeutet die Eigenwerte eines linearen Operators sind reel, wenn dieser hermitisch ist, d.h.

$$\lambda \in \mathbb{R} \iff A = A^+ \iff A \text{ hermitisch}$$

5.4.2. Eigenvektoren eines hermiteschen Operators

Wir zeigen weiterhin, dass die Eigenvektoren eines hermiteschen Operators immer orthogonal sind. Dazu nehmen wir zwei Eigenvektoren $|\psi\rangle$ und $|\phi\rangle$ mit den Eigenwerten λ und μ des hermiteschen Operators A :

$$A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \quad A|\phi\rangle = \mu|\phi\rangle \quad (5.17)$$

Da A hermitisch ist kann man auch schreiben:

$$\langle \phi | A = \mu \langle \phi | \quad (5.18)$$

Durch Multiplikation von Gl. 5.18 mit $|\psi\rangle$ und Gl. 5.17 mit $\langle \phi|$ erhalten wir:

$$\langle \phi | A | \psi \rangle = \lambda \langle \phi | \psi \rangle \quad \langle \phi | A | \psi \rangle = \mu \langle \phi | \psi \rangle$$

Subtraktion dieser beiden Gleichungen ergibt:

$$(\lambda - \mu) \langle \phi | \psi \rangle = 0$$

Wenn $\lambda \neq \mu$ lässt sich diese Gleichung nur erfüllen, wenn die beiden Eigenvektoren orthogonal sind. Falls $\lambda = \mu$, so müssen auch die Eigenvektoren gleich sein und die Gleichung ist ebenfalls erfüllt.

5.4.3. Definition einer Observablen

Ein hermitescher Operator wird als Observable bezeichnet, wenn seine orthogonalen Eigenvektoren $|\psi_i\rangle$ eine Basis des Zustandsraumes bilden:

$$\sum_i^{\infty} |\psi_i\rangle \langle \psi_i| = 1$$

Beispiel: Der Projektor $P_{|\psi\rangle}$

Wir zeigen, dass der Projektor $P_{|\psi\rangle}$ eine Observable ist. Dazu nehmen wir einen beliebigen Zustandsvektor $|\phi\rangle$. Dieser kann immer geschrieben werden:

$$|\phi\rangle = P_{|\psi\rangle} |\phi\rangle + (1 - P_{|\psi\rangle}) |\phi\rangle$$

5. Mathematische Grundlagen

$P_\psi|\phi\rangle$ ist ein Eigenvektor von P_ψ zum Eigenwert 1:

$$P_\psi(P_\psi|\phi\rangle) = P_\psi^2|\phi\rangle = P_\psi|\phi\rangle = 1 \cdot P_\psi|\phi\rangle$$

$(1 - P_\psi)|\phi\rangle$ ist ebenfalls ein Eigenvektor von P_ψ allerdings mit dem Eigenwert 0:

$$P_\psi(1 - P_\psi)|\phi\rangle = (P_\psi - P_\psi^2)|\phi\rangle = 0$$

Damit kann also jeder Zustandsvektor $|\phi\rangle$ als Entwicklung der Eigenvektoren von P_ψ geschrieben werden, also ist P_ψ eine Observable.

6. Postulate der Quantenmechanik

Nach der Einführung in die mathematischen Methoden der Quantenmechanik wollen wir jetzt in den folgenden Abschnitten die grundlegenden Postulate der Quantenmechanik diskutieren.

Die experimentellen Befunde zeigen, dass bei quantenmechanischen Objekten (QMOs, z.B. Elektronen, Neutronen, C_{60} -Molekülen, Bose-Einstein-Kondensaten etc.) Interferenzerscheinungen beobachtet werden. Dies bedeutet, dass quantenmechanische Objekte (QMOs) auch Welleneigenschaften aufweisen und führt damit zum Welle-Teilchen-Dualismus: QMOs zeigen sowohl Teilchen- als auch Wellencharakter. Dies bedeutet, dass QMOs einerseits lokale Eigenschaften zeigen (z.B. Masse, Ladung, Geschwindigkeit, Nachweis an einem Ort mit einem Detektor), andererseits aber offensichtlich auch nicht-lokale Eigenschaften haben, die nicht mit einer Punktmechanik vereinbar sind (Interferenz am Doppelspalt: QMOs interferieren mit sich selbst). Die Verbindung dieser beiden Vorstellungen führt dazu, dass man QMOs mit einem Wellenpaket identifiziert (Phasenwelle, Materiewelle, Zustandsfunktion), das sich mit der Gruppengeschwindigkeit ($v_{gr} = d\omega/dk$) ausbreitet. Die Gruppengeschwindigkeit des Wellenpakets wird mit der Geschwindigkeit eines punktförmigen Teilchens identifiziert, dies beschreibt exakt die De Broglie-Beziehung $p = \hbar k = h/\lambda$.

Die De Broglie-Beziehung beschreibt die Verknüpfung der Wellenlänge bzw. des k -Vektors und damit über die Fouriertransformation des Ortes eines QMOs mit dessen Impuls. Daraus ergibt sich automatisch eine Orts-Impuls-Unschärfe für ein QMO. Aus der Wellengleichung der Optik zusammen mit der De Broglie-Beziehung und der Planckschen Energiequantelung läßt sich die stationäre Schrödingergleichung ableiten. Diese Gleichung beschreibt die möglichen stationären Zustände eines quantenmechanischen Systems im Wellenbild und hat die Form einer Eigenwertgleichung. Die typische Form der stationären Schrödingergleichung zeigt sich am Beispiel mit dem Kastenpotential:

$$\frac{d^2}{dx^2} |\psi_i \rangle = -\frac{2mE_i}{\hbar^2} |\psi_i \rangle$$

Auf der rechten Seite dieser Gleichung stehen die möglichen stationären Zustände ($|\psi_i \rangle$) zusammen mit den jeweils dazugehörigen Energiewerten, auf der linken Seite steht eine Rechenvorschrift (d^2/dx^2) angewandt auf einen stationären Zustand ($|\psi_i \rangle$). In mathematischer Sprechweise bedeutet dies, dass ein Operator angewandt auf die möglichen stationären Zustände die möglichen Eigenwerte ergibt.

Die Kenntnis über die möglichen stationären Zustände eines Systems sagt noch nichts darüber aus, in welchem Zustand das QMO sich aktuell befindet. Die Fragestellung in welchem Zustand das QMO sich aktuell befindet bedeutet das QMO

zu lokalisieren, d.h. wir interessieren uns nicht für die Ausbreitung des Wellenpakets und die damit verknüpften Interferenzerscheinungen, sondern einzig für die Wahrscheinlichkeit eines bestimmten Zustandes. Diese Wahrscheinlichkeit ergibt sich wie in der Optik aus dem Amplitudenquadrat der Zustandsfunktion (in der Optik aus dem Amplitudenquadrat des elektromagnetischen Feldes). Bei der Bildung des Amplitudenquadrats entfallen die Phasenterme, diese sind gerade für die Interferenzerscheinungen (d.h. die nichtlokalen Effekte) verantwortlich.

6.1. Zustand eines physikalischen Systems

Zu einem bestimmten Zeitpunkt t_0 wird der Zustand eines physikalischen Systems durch die Zustandsvektor $|\psi\rangle$ beschrieben. Dieser Zustandsvektor ist Element eines linearen Vektorraumes, des sog. Zustandsraumes E .

Es ist wichtig sich klar zu machen, dass dieses Postulat ein Superpositionsprinzip beinhaltet: da $|\psi\rangle$ ein Element eines linearen Vektorraumes ist, bedeutet dies dass auch eine Linearkombination verschiedener Kets wieder einen Zustand beschreibt. Ein physikalischer Zustand wird also durch einen Vektor beschrieben.

6.2. Physikalische Messgrößen

Jede physikalische Messgröße wird durch einen linearen Operator beschrieben. Dieser Operator ist eine Observable.

Eine physikalische Messgröße wird also durch einen hermiteschen Operator beschrieben.

6.3. Mögliche Messergebnisse

Die einzig möglichen Messergebnisse einer physikalischen Messgröße A sind durch die Eigenwerte dieses hermiteschen Operators A gegeben.

Da physikalische Messgrößen durch einen hermiteschen Operator beschrieben werden, sind die Eigenwerte des Operators immer reel.

6.4. Wahrscheinlichkeit für ein bestimmtes Messergebnis

Wenn an einem System, das sich im Zustand $|\psi\rangle$ befindet die physikalische Messgröße A gemessen wird, ergibt sich die Wahrscheinlichkeit dass der Messwert a_i erhalten wird zu

$$P(a_i) = |\langle u_i | \psi \rangle|^2 \quad (6.1)$$

wobei $|u_i\rangle$ der Eigenvektor von A mit dem Eigenwert a_i ist.

Beachte: Wir nehmen zwei Zustandsvektoren $|\psi\rangle$ und $|\psi'\rangle$ mit folgender Eigenschaft:

$$|\psi'\rangle = e^{i\theta}|\psi\rangle$$

wobei θ eine reelle Konstante ist. Dann folgt ist $|\psi'\rangle$ normalisiert, wenn $|\psi\rangle$ normalisiert ist:

$$\langle \psi' | \psi' \rangle = \langle \psi | e^{-i\theta} e^{i\theta} | \psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle$$

Außerdem sind die Wahrscheinlichkeiten für ein bestimmtes Messergebnis gleich:

$$|\langle u_i | \psi' \rangle|^2 = |e^{i\theta} \langle u_i | \psi \rangle|^2 = |\langle u_i | \psi \rangle|^2$$

Das bedeutet, zwei Zustandsvektoren, die sich nur um eine konstante Phase unterscheiden repräsentieren den gleichen physikalischen Zustand.

6.5. Reduktion des Wellenpakets

Wenn eine Messung der Messgröße A den Messwert a_i ergeben hat, so ist das System direkt nach der Messung im zugehörigen Eigenzustand $|u_i\rangle$.

Da die Eigenvektoren der Observablen A eine Basis des Zustandsraumes darstellen, kann der Zustand $|\psi\rangle$ vor der Messung in den Eigenvektoren der Messgröße A entwickelt werden:

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle$$

Nach der Messung liegt der Eigenwert a_i vor. Da mit jedem Eigenwert ein Eigenvektor verbunden ist, bedeutet dies, dass das System direkt bei der Messung vom Ausgangszustand $|\psi\rangle$ in einen der Eigenzustände $|u_i\rangle$ "springt". Man nennt dies *Reduktion des Wellenpakets*.

Beachte: In welchen Zustand das System bei der Messung übergeht läßt sich nur mit einer Wahrscheinlichkeit angeben, das quantenmechanische System verhält sich an dieser Stelle nicht mehr deterministisch! Die Tatsache, dass bei der Berechnung der Wahrscheinlichkeiten für die verschiedenen Eigenzustände eine hohe Wahrscheinlichkeit für einen bestimmten Eigenzustand ermittelt wird bedeutet nicht, dass dieser Zustand nach der Messung auch vorliegt!

Direkt nach der Messung ist das System im Zustand $|u_i\rangle$ und damit in einem Eigenzustand der Messgröße A . Eine weitere Messung direkt im Anschluß an die erste Messung würde stets den gleichen Messwert a_i und damit auch den gleichen Eigenzustand $|u_i\rangle$ liefern, denn die Wahrscheinlichkeit für das Ergebnis $|u_i\rangle$ ist 1 und für alle $|u_j\rangle$ $j \neq i$ ist sie 0, da die Eigenzustände senkrecht aufeinander stehen. Wenn also das System vor der Messung bereits in einem Eigenzustand der Messgröße ist, steht das Messergebnis mit Sicherheit fest.

6.6. Schrödingergleichung

Die zeitliche Entwicklung des Zustandsvektors $|\psi\rangle$ ist durch die Schrödingergleichung gegeben:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle$$

wobei die Observable $H(t)$ für die Gesamtenergie des quantenmechanischen Systems steht. $H(t)$ wird als Hamiltonoperator bezeichnet und ergibt sich aus der klassischen Hamiltonfunktion.

Direkt nach einer Messung wird die Entwicklung des Zustands durch die Schrödingergleichung beschrieben.

6.7. Quantisierungsregeln

Die sog. Quantisierungsregel (man spricht auch von 1. Quantisierung) beschreibt, wie sich aus den klassischen Messgrößen die quantenmechanischen Operatoren berechnen lassen:

Der quantenmechanische Operator A einer klassischen Messgröße A ergibt sich durch Ersetzung des Ortes r und des Impulses p durch die quantenmechanischen Operatoren R und P .

Allerdings ergibt sich dabei eine Schwierigkeit: während in der klassischen Physik die Größen r und p vertauschen, gilt dies nicht in der Quantenmechanik da der Kommutator zwischen R und P nicht Null ist $[R_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij}$. Außerdem ist weder der Operator $R \cdot P$, noch der Operator $P \cdot R$ hermitisch:

$$(R \cdot P)^+ = (X \cdot P_x + Y \cdot P_y + Z \cdot P_z)^+ = P \cdot R \neq R \cdot P$$

Somit kann ein Produkt aus zwei Operatoren die nicht vertauschen kein quantenmechanischer Operator und damit auch keine quantenmechanische Messgröße sein. Es gibt jedoch ein Verfahren das Produkt so umzuschreiben, dass ein hermitischer Operator entsteht. Man den Mittelwert der beiden nicht vertauschenden Produkte:

$$\frac{1}{2}(R \cdot P + P \cdot R)$$

Man nennt dieses Verfahren *Symmetrisierungsregel*.

Beim Ersetzen von Produkten der klassischen Größen r und p wird das symmetrisierte Produkt der beiden Operatoren R und P verwendet.

Beachte: Es gibt quantenmechanische Operatoren, für die keine klassische Messgröße existiert (z.B. Spin).

6.8. Erwartungswert einer Observablen

Wenn viele Messungen an einer Messgröße A durchgeführt werden (im Grenzfall $N \rightarrow \infty$), so wird sich der Erwartungswert $\langle A \rangle$ ergeben. Dieser läßt sich schreiben (vgl. Kap 4):

$$\langle A \rangle = \sum_i a_i P(a_i)$$

wobei a_i die Eigenwerte der Messgröße A und $P(a_i)$ die Wahrscheinlichkeiten für das Auftreten der Eigenwerte a_i sind. Verwenden wir das Postulat 6.1 so können wir schreiben:

$$\langle A \rangle = \sum_i a_i |\langle u_i | \psi \rangle|^2 = \sum_i a_i \langle \psi | u_i \rangle \langle u_i | \psi \rangle$$

Die Eigenwerte a_i sind über die Eigenwertgleichung gegeben:

$$A |u_i \rangle = a_i |u_i \rangle$$

Somit können wir die Gleichung für den Erwartungswert umschreiben:

$$\langle A \rangle = \sum_i \langle \psi | A |u_i \rangle \langle u_i | \psi \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle$$

Somit können wir für den Erwartungswert einer Messgröße wenn das System sich im Zustand $|\psi \rangle$ befindet schreiben:

$$\langle A_\psi \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle \quad (6.2)$$

6.9. Standardabweichung

Der Erwartungswert einer Messgröße sagt noch nichts über die Streuung der möglichen Messwerte aus. Dazu wird die Standardabweichung definiert:

$$\Delta A = \sqrt{\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle}$$

Unter Verwendung des Erwartungswertes (Gl. 6.2 kann man dafür auch schreiben:

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

Den Ausdruck unter der Wurzel läßt sich weiter umschreiben:

$$\begin{aligned} \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle &= \langle (A^2 - 2 \langle A \rangle A + \langle A \rangle^2) \rangle \\ &= \langle A^2 \rangle - 2 \langle A \rangle^2 + \langle A \rangle^2 \\ &= \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \end{aligned}$$

Also ergibt sich für die Standardabweichung:

$$\Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$$

6.10. Kommutativität von Messgrößen

Wir betrachten zwei Messgrößen (Observable) A und B . Der Kommutator der beiden Observablen sei Null, d.h. die beiden Observablen vertauschen. Sei $|\psi\rangle$ ein Eigenvektor von A . Dann ist $|\psi\rangle$ auch ein Eigenvektor von B . Dazu betrachten wir die Eigenwertgleichung für die Observable A :

$$A|\psi\rangle = a|\psi\rangle$$

Wir multiplizieren von links mit der Observablen B :

$$BA|\psi\rangle = aB|\psi\rangle$$

Da die beiden Observablen vertauschen, können wir auch schreiben:

$$A(B|\psi\rangle) = a(B|\psi\rangle)$$

Dieser Ausdruck bedeutet aber, dass der Zustandsvektor $B|\psi\rangle$ ein Eigenzustand der Observablen A zum Eigenwert a ist. Da der Eigenvektor zum Eigenzustand a eindeutig ist, bzw. muss der Zustandsvektor $B|\psi\rangle$ proportional zum Zustandsvektor $|\psi\rangle$ sein:

$$B|\psi\rangle = b|\psi\rangle$$

Also ist der Zustandsvektor $|\psi\rangle$ auch ein Eigenvektor der Observablen B .

Dieses Resultat hat entscheidende Bedeutung für aufeinander folgende Messungen der beiden Messgrößen A und B . Nach der ersten Messung z.B. an der Messgröße A wird das System in einem Eigenzustand von A sein. Da die beiden Observablen vertauschen, ist dies aber gleichzeitig ein Eigenzustand der Messgröße B . Bei einer weiteren Messung der Messgröße B befindet sich das System somit bereits in einem Eigenzustand von B , das Resultat steht damit mit Sicherheit fest. Das System wird während der Messung den Zustand nicht ändern. Somit spielt es keine Rolle welche der beiden Messgrößen zuerst gemessen wird, die beiden Messungen beeinflussen sich gegenseitig nicht!

Ist der Kommutator der beiden Observablen jedoch nicht Null, so liegt vor der zweiten Messung kein Eigenzustand dieser Messgröße vor, das System wird bei der zweiten Messung in einen neuen Zustand, einen Eigenzustand der Messgröße B übergehen und damit das Messresultat der ersten Messung "zerstören". Man kann nach der zweiten Messung nicht mehr mit Sicherheit sagen welcher Messwert der ersten Messgröße nun vorliegt!

7. Dichtematrix

7.1. Superposition von Zuständen - Statistisches Ensemble

Wir betrachten zwei Zustände $|\psi_1\rangle$ und $|\psi_2\rangle$ die orthogonal und normiert sein sollen, sodass gilt:

$$\begin{aligned}\langle \psi_1 | \psi_1 \rangle &= \langle \psi_2 | \psi_2 \rangle = 1 \\ \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle &= \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle = 0\end{aligned}$$

$|\psi_1\rangle$ und $|\psi_2\rangle$ können z.B. zwei Eigenzustände eines Operators B mit den Eigenwerten b_1 und b_2 sein. Wenn das System im Zustand $|\psi_1\rangle$ ist, dann können wir die Wahrscheinlichkeit ausrechnen bei einer Messung der der Observablen A den Messwert a_n mit dem Eigenvektor $|u_n\rangle$ zu erhalten:

$$P_1(a_n) = | \langle u_n | \psi_1 \rangle |^2$$

Falls das System im Zustand $|\psi_2\rangle$ ist ergibt sich analog:

$$P_2(a_n) = | \langle u_n | \psi_2 \rangle |^2$$

Nun betrachten wir einen normierten Zustand, der eine *lineare Superposition* der beiden Zustände $|\psi_1\rangle$ und $|\psi_2\rangle$ ist:

$$\begin{aligned}|\psi\rangle &= \lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle \\ \lambda_1^2 + \lambda_2^2 &= 1\end{aligned}$$

Diese Gleichung besagt folgendes: Wenn an dem Zustand $|\psi\rangle$ eine Messung mit des Operator B stattfindet, dann ergibt sich der Eigenwert b_1 mit dem Zustand $|\psi_1\rangle$ mit der Wahrscheinlichkeit $|\lambda_1|^2$ und ebenso der Zustand $|\psi_2\rangle$ mit der Wahrscheinlichkeit $|\lambda_2|^2$. Das bedeutet jedoch nicht, dass der Zustand $|\psi\rangle$ aus einer statistischen Mischung (= statistisches Ensemble) der beiden Zuständen $|\psi_1\rangle$ und $|\psi_2\rangle$ besteht. Denn dies würde bedeuten, wenn wir N identische Zustände $|\psi\rangle$ betrachten, würden wir $N\lambda_1$ -mal den Zustand $|\psi_1\rangle$ und $N\lambda_2$ -mal den Zustand $|\psi_2\rangle$ finden, dies ist jedoch nicht der Fall!

Was ist nun die Wahrscheinlichkeit $P(a_n)$ bei einer Messung an der Observablen A den Messwert a_n zu finden?

7. Dichtematrix

Die Wahrscheinlichkeit $P(a_n)$ können wir nach dem Standardverfahren berechnen:

$$P(a_n) = |\langle u_n | \psi \rangle|^2$$

wobei:

$$\langle u_n | \psi \rangle = \lambda_1 \langle u_n | \psi_1 \rangle + \lambda_2 \langle u_n | \psi_2 \rangle$$

somit ergibt sich:

$$\begin{aligned} P(a_n) &= |\lambda_1 \langle u_n | \psi_1 \rangle + \lambda_2 \langle u_n | \psi_2 \rangle|^2 \\ &= |\lambda_1|^2 |\langle u_n | \psi_1 \rangle|^2 + |\lambda_2|^2 |\langle u_n | \psi_2 \rangle|^2 + \\ &\quad 2\text{Re}\{\lambda_1 \lambda_2^* \langle u_n | \psi_1 \rangle \langle u_n | \psi_2 \rangle^*\} \\ &= |\lambda_1|^2 P_1(a_n) + |\lambda_2|^2 P_2(a_n) + 2\text{Re}\{\lambda_1 \lambda_2^* \langle u_n | \psi_1 \rangle \langle u_n | \psi_2 \rangle^*\} \end{aligned}$$

Die Wahrscheinlichkeit für das Vorkommen Auftreten des Messwertes a_n ist also nicht einfach die Summe der gewichteten Wahrscheinlichkeiten $P_1(a_n)$ und $P_2(a_n)$.

Im Gegensatz dazu würden wir bei einem statistischen Ensemble der Zustände $|\psi_1 \rangle$ und $|\psi_2 \rangle$ als Wahrscheinlichkeit für das Auftreten des Messwertes a_n einfach finden:

$$\begin{aligned} P(a_n)_E &= |\lambda_1 \langle u_n | \psi_1 \rangle|^2 + |\lambda_2 \langle u_n | \psi_2 \rangle|^2 \\ &= |\lambda_1|^2 P_1(a_n) + |\lambda_2|^2 P_2(a_n) \end{aligned}$$

Diese beiden Fälle sind also klar zu unterscheiden: im ersten Fall liegt eine Superposition von Zuständen vor, bei der Berechnung der Wahrscheinlichkeit treten Interferenzterme auf, im zweiten Fall bei einem statischen Ensemble liegen bei N gleichen Systemen $N|\lambda_1|^2$ Systeme im Zustand $|\psi_1 \rangle$ vor und $N|\lambda_2|^2$ Systeme im Zustand $|\psi_2 \rangle$, hier gibt es bei der Berechnung der Wahrscheinlichkeit für das Auftreten des Messwertes a_n keine Interferenzterme!

Beispiel Superposition: Polarisationszustand \vec{e} von Photonen, die sich entlang der Z-Achse ausbreiten

$$\vec{e} = \frac{1}{\sqrt{2}} \vec{e}_x + \frac{1}{\sqrt{2}} \vec{e}_y$$

Dieser Polarisationszustand entspricht einer Superposition von zwei Zuständen und führt zu einer linearen Polarisation von 45° zwischen X- und Y-Achse. Wird ein Analysator senkrecht zu dieser Richtung aufgestellt, so trifft kein Licht mehr auf einen dahinter liegenden Schirm.

Beispiel Statisches Ensemble: Wir betrachten ein Ensemble von N Photonen, wobei $N|\frac{1}{\sqrt{2}}|^2 = \frac{N}{2}$ Photonen sich im Polarisationszustand \vec{e}_x befinden und $N|\frac{1}{\sqrt{2}}|^2 = \frac{N}{2}$ Photonen im Polarisationszustand \vec{e}_y . In diesem Fall werden bei gleicher Stellung des Analysators wie im ersten Beispiel in $N/2$ Fällen Photonen auf dem Schirm beobachtet.

7.2. Wahrscheinlichkeiten in der Quantenmechanik

In der Quantenmechanik treten Wahrscheinlichkeiten auf verschiedenen Ebenen auf, die streng voneinander getrennt werden müssen.

Ausgangsinformation über ein System

Oft ist der Ausgangszustand eines System nicht genau bekannt, es liegt ein statisches Ensemble vor. Zu den vorhandenen Zuständen $|\psi_i\rangle$ gibt es jeweils Wahrscheinlichkeiten p_i .

Wahrscheinlichkeit für ein bestimmtes Messergebnis

Es liegt ein Ausgangszustand vor, der entweder genau bekannt sein kann (dann entweder ein reiner Zustand oder aber eine Superposition ist), oder aber aus einem statischen Ensemble verschiedener Zustände besteht. Die Wahrscheinlichkeit für einen bestimmten Messwert a_i beim Durchführen einer Messung an der Observablen A läßt sich als Wahrscheinlichkeit $P(a_i)$ angeben.

7.3. Dichte-Operator

Bisher sind wir immer davon ausgegangen, dass der Ausgangszustand genau festliegt. Oft ist aber der Ausgangszustand nicht genau bekannt, es liegt ein statisches Ensemble vor.

Wir betrachten einen Zustand $|\psi\rangle$ der sich in Basisvektoren $\{|u_i\rangle\}$ darstellen läßt:

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i(t) |u_i\rangle$$

Außerdem sei eine Observable A gegeben mit:

$$A_{np} = \langle u_n | A | u_p \rangle$$

Dann läßt sich der Erwartungswert $\langle A \rangle$ der Observable A schreiben:

$$\langle A(t) \rangle = \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle = \sum_{n,p} c_n^*(t) c_p(t) A_{np} \quad (7.1)$$

Die zeitliche Entwicklung dieses Erwartungswertes ist durch die Schrödingergleichung gegeben:

$$i\hbar \partial_t |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle$$

wobei $H(t)$ die Hamiltonfunktion des Systems ist. Wie Gleichung 7.1 zeigt, ist die zeitliche Entwicklung des Erwartungswertes offensichtlich von den Koeffizienten $c_n(t)$

und $c_p(t)$ abhängig. Wir können das Produkt dieser beiden Koeffizienten noch etwas umschreiben:

$$c_n^*(t)c_p(t) = \langle \psi(t)|u_n \rangle \langle u_p|\psi(t) \rangle \quad (7.2)$$

$$= \langle u_p|\psi(t) \rangle \langle \psi(t)|u_n \rangle \quad (7.3)$$

$$= \langle u_p|\rho(t)|u_n \rangle \quad (7.4)$$

Wobei:

$$\rho(t) := |\psi(t) \rangle \langle \psi(t)|$$

als Dichte-Operator bezeichnet wird. Der Dichte-Operator besteht aus einer Matrix deren Elemente die Produkte der Koeffizienten $c_n(t)$ und $c_p(t)$ sind:

$$\boxed{\rho_{np}(t) := \langle u_n|\rho(t)|u_p \rangle = c_n^*(t)c_p(t)}$$

7.3.1. Die Spur des Dichte-Operators

Die Spur $Tr\{\rho(t)\}$ des Dichte-Operators $\rho(t)$ ergibt sich zu:

$$Tr\{\rho(t)\} = \sum_i \rho_{ii} = \sum_i |c_i(t)|^2$$

Falls kein statistisches Ensemble sondern ein **reiner Zustand** vorliegt, also ein Zustand vorliegt der sich durch eine Menge von Basisvektoren $\{|u_i \rangle\}$ entwickeln läßt:

$$|\psi(t) \rangle = \sum_i c_i(t)|u_i \rangle$$

dann gilt darüber hinaus wegen $\sum_i c_i^2(t) = 1$ (Eigenschaft der Basis):

$$Tr\{\rho(t)\} = \sum_i \rho_{ii} = \sum_i |c_i(t)|^2 = 1$$

Für ein **statistisches Ensemble** gilt:

$$Tr\{\rho(t)\} = \sum_k p_k Tr\{\rho_k\}$$

Da die Spur über die einzelnen Dichtematrizen ρ_k immer Eins ist, gilt dann auch:

$$Tr\{\rho(t)\} = \sum_k p_k Tr\{\rho_k\} = \sum_k p_k * 1 = 1$$

7.3.2. Erwartungswert als Funktion des Dichte-Operators

Der Erwartungswert $\langle A \rangle$ einer Observablen A lässt sich ebenfalls als Funktion des Dichte-Operators $\rho(t)$ schreiben:

$$\langle A \rangle (t) = \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle \quad (7.5)$$

$$= \sum_{n,p} c_n^*(t) c_p(t) A_{np} \quad (7.6)$$

$$= \sum_{n,p} \langle u_p | \rho(t) | u_n \rangle \langle u_n | A | u_p \rangle \quad (7.7)$$

$$= \sum_p \langle u_p | \rho(t) A | u_p \rangle \quad (7.8)$$

$$= \text{Tr}\{\rho(t)A\} \quad (7.9)$$

7.3.3. Zeitliche Entwicklung des Dichte-Operators

Wir berechnen die zeitliche Entwicklung des Dichte-Operators zu:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho(t) &= \left(\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle \right) \langle \psi(t) | + |\psi(t)\rangle \left(\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \right) \\ &= \frac{1}{i\hbar} H(t) |\psi(t)\rangle \langle \psi(t) | + \frac{1}{-i\hbar} |\psi(t)\rangle \langle \psi(t) | H(t) \\ &= \frac{1}{i\hbar} [H(t), \rho(t)] \end{aligned}$$

Die zeitliche Entwicklung des Dichte-Operators wird also beschrieben durch den Kommutator der Hamiltonfunktion und dem Dichte-Operator:

$$\boxed{\frac{d}{dt}\rho(t) = \frac{1}{i\hbar} [H(t), \rho(t)]} \quad (7.10)$$

7.3.4. Wahrscheinlichkeit für ein Messergebnis als Funktion des Dichte-Operators

Wir können Gl. 7.5 verwenden um auch die Wahrscheinlichkeit für ein bestimmtes Messergebnis in Abhängigkeit des Dichte-Operators zu schreiben:

$$P(a_n) = \langle \psi(t) | P_n | \psi(t) \rangle = \langle P_n \rangle (t) = \text{Tr}\{\rho(t)P_n\} \quad (7.11)$$

Alle wesentlichen Größen in der Quantenmechanik können sowohl über den Zustandsvektor $|\psi(t)\rangle$ als auch über den Dichte-Operator $\rho(t)$ beschrieben werden. Die Beschreibung über den Zustandsvektor ist quadratisch in $|\psi(t)\rangle$, während sich bei Verwendung des Dichte-Operators $\rho(t)$ nur eine lineare Abhängigkeit ergibt. In vielen Fällen ist deshalb die Beschreibung über den Dichte-Operator von Vorteil, insbesondere wenn ein statisches Ensemble vorliegt.

7.3.5. Populationen und Kohärenzen

Nachdem wir bisher allgemeine Eigenschaften der Dichtematrix diskutiert haben, wollen wir diese Eigenschaften jetzt benutzen um die physikalische Bedeutung der Dichtematrix und ihrer Elemente besser zu verstehen. uns jetzt etwas mit der physikalischen Bedeutung auseinander setzen.

Ein Diagonalelement ρ_{nn} der Dichtematrix ρ_{np} in der Basis $\{|u_n\rangle\}$ können wir folgendermaßen beschreiben:

$$\rho_{nn} = \sum_k p_k [\rho_k]_{nn} \quad (7.12)$$

Nach Gl. 7.2 können wir ein Element der Dichtematrix durch die Koeffizienten c_n und c_p der Basisvektoren $|u_n\rangle$ und $|u_p\rangle$ beschreiben:

$$c_n^*(t)c_p(t) = \langle u_p | \rho(t) | u_n \rangle \quad (7.13)$$

Wir können also für ein Diagonalelement schreiben:

$$\rho_{nn} = \sum_k p_k |c_n^{(k)}|^2 \in \mathfrak{R} \quad (7.14)$$

Der Ausdruck $|c_n^{(k)}|^2$ ist eine reelle Zahl. Sie gibt die Wahrscheinlichkeit an bei einer Messung das System im Zustand $|u_n\rangle$ zu finden, wenn vor der Messung der Zustand $|\psi_k\rangle$ vorgelegen hat. Da wir den Ausgangszustand bei einem statischen Ensemble nicht genau kennen, beschreibt also ρ_{nn} die mittlere Wahrscheinlichkeit das System im Zustand $|u_n\rangle$ zu finden: wenn die Messung N -mal durchgeführt wird, wird man $N\rho_{nn}$ -mal das System im Zustand $|u_n\rangle$ finden. Man bezeichnet ρ_{nn} auch als **Population** des Zustands $|u_n\rangle$.

Für die Nicht-Diagonalelemente ergibt sich analog:

$$\rho_{np} = \sum_k p_k c_n^{(k)} c_p^{(k)*} \in \mathfrak{S} \quad (7.15)$$

Der Term $c_n^{(k)} c_p^{(k)*}$ beschreibt die Interferenzen zwischen den Zuständen $|u_n\rangle$ und $|u_p\rangle$ die auftreten wenn der Zustand $|\psi_k\rangle$ eine lineare Superposition von diesen Zuständen ist. Nach Gl. 7.15 ist ρ_{np} beim Vorliegen eines statischen Ensembles der Mittelwert dieser Interferenzen. Im Gegensatz zur Population ρ_{nn} die eine reelle Zahl ist, ist der Ausdruck ρ_{np} in der Regel komplex. Im Gegensatz zu der Population ρ_{nn} kann dieser Wert Null sein selbst wenn alle Einzeltermine von ρ_{np} ungleich Null sind. In diesem Fall heben sich die Interferenzen gegenseitig auf. Man bezeichnet ρ_{np} als **Kohärenzen**.

Beispiel 1: zeitunabhängige Hamiltonfunktion

Es seien die kets $|u_n\rangle$ Eigenvektoren der Hamiltonfunktion H , die zeitunabhängig sein soll:

$$H|u_n\rangle = E_n|u_n\rangle$$

Mit Gl. 7.10 ergibt sich:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \rho_{nm}(t) &= 0 \\ i\hbar \frac{d}{dt} \rho_{np}(t) &= (E_n - E_p) \rho_{np} \end{aligned}$$

das heißt:

$$\begin{aligned} \rho_{nn}(t) &= \text{constant} \\ \rho_{np}(t) &= e^{-\frac{i}{\hbar}(E_n - E_p)t} \rho_{np}(t=0) \end{aligned}$$

Das heißt in diesem Fall sind die Populationen konstant und die Kohärenzen oszillieren mit der Bohrfrequenz des Systems.

Beispiel 2: *System im thermischen Gleichgewicht*

Ein System im thermodynamischen Gleichgewicht bei der Temperatur T kann in der statischen Thermodynamik mit dem Dichteoperator ρ beschrieben werden:

$$\rho = \frac{1}{Z} e^{-H/kT}$$

Dabei ist H die Hamiltonfunktion des Systems und Z ein Normierungsfaktor der so gewählt wird, dass die Spur von ρ gleich Eins wird:

$$Z = \text{Tr}\{e^{-H/kT}\}$$

Z wird auch als **Zustandssumme** bezeichnet. In der Basis $\{|u_i\rangle\}$ der Eigenvektoren von H kann man schreiben:

$$\begin{aligned} \rho_{nn} &= \frac{1}{Z} \langle u_n | e^{-H/kT} | u_n \rangle \\ &= \frac{1}{Z} e^{-E_n/kT} \end{aligned}$$

und analog:

$$\begin{aligned} \rho_{np} &= \frac{1}{Z} \langle u_n | e^{-H/kT} | u_p \rangle \\ &= \frac{1}{Z} e^{-E_p/kT} \langle u_n | u_p \rangle \\ &= 0 \end{aligned}$$

Im thermodynamischen Gleichgewicht nehmen die Populationen also exponentiell mit der Temperatur ab und die Kohärenzen zwischen stationären Zuständen sind Null.

8. Drehimpuls

8.1. Die Eigenfunktionen des Laplace-Operators

Schwingungen eines dreidimensionalen Objektes können in Eigenschwingungen entwickelt werden. Wenn es dabei um sphärisch-symmetrische Probleme geht, eignen sich dafür besonders die Sphärisch-Harmonischen Funktionen, auch Kugelflächenfunktionen genannt. Zunächst interessieren wir uns speziell für die sphärischen Schwingungen und berücksichtigen die radialen Schwingungen nicht. Das Problem läßt sich damit vorteilhaft in Kugelkoordinaten untersuchen, da sich in diesem Koordinatensystem die radiale Abhängigkeit leicht abspalten läßt. Wir benutzen Kugelkoordinaten:

$$\begin{aligned}x &= r \cdot \cos\phi \cdot \sin\theta \\y &= r \cdot \sin\phi \cdot \sin\theta \\z &= r \cdot \cos\theta\end{aligned}$$

Um sphärische Schwingungen in drei Dimensionen zu untersuchen müssen wir die dreidimensionale Schwingungsgleichung für eine Funktion Φ lösen¹:

$$\nabla^2\Phi - k\Phi = 0$$

wobei k eine Konstante ist. Diese Gleichung können wir aber auch als Eigenwertgleichung für den Laplaceoperator betrachten:

$$\nabla^2\Phi = k\Phi$$

Wir müssen also die Eigenwertgleichung für den Laplace-Operator lösen. Da es sich um ein sphärisches Problem handelt ist die Darstellung in Kugelkoordinaten vorteilhaft. Dazu verwenden wir die Schreibweise des Laplace-Operators in Kugelkoordinaten:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\cos\theta}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \quad (8.1)$$

Da wir uns aber nur für die sphärischen Schwingungen interessieren, können wir die radiale Abhängigkeit separieren ($r=1$) und erhalten damit für den sphärischen Laplace-Operator $\nabla_{\theta\phi}^2$ in Kugelkoordinaten:

$$\nabla_{\theta\phi}^2 = \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$

¹eine ausführliche Diskussion dieses Problems findet sich z.B. bei [Som78] S.13ff

8. Drehimpuls

Offensichtlich können die Eigenfunktionen $Y_{\theta\phi}$ mit den zugehörigen Eigenwerten $y_{\theta\phi}$ dieses Operators nur von den Variablen θ und ϕ abhängig sein. Wir suchen also eine Lösung der folgenden Eigenwertgleichung:

$$\nabla^2 Y_{\theta\phi} = y_{\theta\phi} \cdot Y_{\theta\phi}$$

Eine ausführliche Rechnung zeigt, dass die Lösung dieser Eigenwertgleichung durch die Kugelflächenfunktionen Y_{lm} zu den Eigenwerten l gegeben ist:

$$\nabla^2 Y_{lm} = -l(l+1) \cdot Y_{lm} \quad (8.2)$$

wobei $l = 0, 1, 2, \dots$ und Y_{lm} die Kugelflächenfunktionen sind:

$$Y_{lm} : [0, \pi] \times [0, 2\pi] \Rightarrow C, \quad (\theta, \phi) \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot N_{lm} \cdot P_{lm}(\cos\theta) \cdot e^{im\phi}$$

dabei sind P_{lm} die zugeordneten Legendrepolynome:

$$P_{lm}(\cos\theta) = \frac{(-1)^m}{2^l \cdot l!} (1 - \cos^2\theta)^{m/2} \frac{d^{l+m}}{d(\cos\theta)^{l+m}} (\cos^2\theta - 1)^l$$

und die Konstanten N_{lm} gegeben durch:

$$N_{lm} = \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}}$$

und für m gilt:

$$-l \leq m \leq +l$$

Es tritt also eine weitere freie Variable m auf, deren Wert von l abhängig ist. Für die ersten Werte von l und m ergeben sich folgende Werte für Y_{lm} :

l	m	Y_{lm}
0	0	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$
1	0	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta$
1	± 1	$\mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{\pm i\phi}$
2	0	$\sqrt{\frac{3}{8\pi}} (3\cos^2\theta - 1)$

Die Kugelflächenfunktionen stellen einen Satz orthonormaler Eigenfunktionen des sphärischen Laplace-Operator $\nabla_{\theta\phi}$ dar. Zudem zeigt sich, dass die Kugelflächenfunktionen Y_{lm} gleichzeitig auch Eigenfunktionen des Operators $\partial/\partial\phi$ sind:

$$\frac{\partial}{\partial\phi} Y_{lm} = i \cdot m Y_{lm} \quad (8.3)$$

wobei für m wieder gilt: $-l \leq m \leq l$.

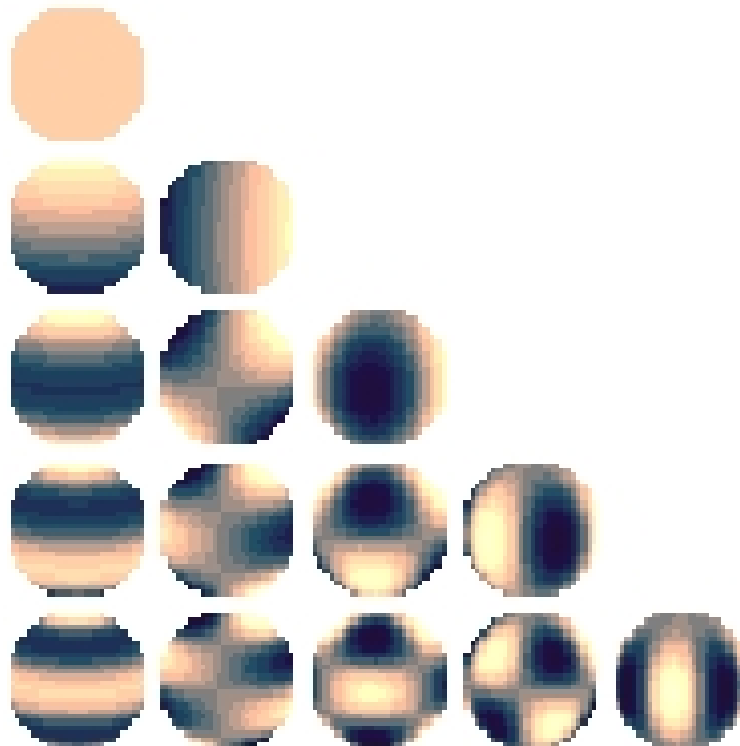


Abb. 8.1.: Visualisierung von Kugelflächenfunktionen, rotierend um die Z-Achse. Dargestellt ist Y_{lm} , wobei l der Zeile und m der Spalte, jeweils beginnend bei 0 entspricht. Quelle: Wikipedia: <http://de.wikipedia.org/wiki/Kugelflächenfunktionen>.

8.2. Der Drehimpuls-Operator

In der klassischen Mechanik wird der Drehimpuls geschrieben als:

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

Um also den Operator des Drehimpulses in der Quantenmechanik zu bekommen, müssen wir einfach den Ortsvektor \vec{r} und den Impuls \vec{p} durch den Ortsoperator R und den Impulsoperator P ersetzen:

$$L = R \times P$$

8. Drehimpuls

Das bedeutet, es ergibt sich für die einzelnen Komponenten des Drehimpuls-Operators:

$$\begin{aligned}L_x &= YP_z - ZP_y = i\hbar \left(Z \frac{\partial}{\partial Y} - Y \frac{\partial}{\partial Z} \right) \\L_y &= ZP_x - XP_z = i\hbar \left(X \frac{\partial}{\partial Z} - Z \frac{\partial}{\partial X} \right) \\L_z &= XP_y - YP_x = i\hbar \left(Y \frac{\partial}{\partial X} - X \frac{\partial}{\partial Y} \right)\end{aligned}$$

Für das Quadrat des Drehimpulses errechnet sich:

$$\begin{aligned}L^2 &= L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \\&= -\hbar^2 \left[\left(Z \frac{\partial}{\partial Y} - Y \frac{\partial}{\partial Z} \right)^2 + \left(X \frac{\partial}{\partial Z} - Z \frac{\partial}{\partial X} \right)^2 + \left(Y \frac{\partial}{\partial X} - X \frac{\partial}{\partial Y} \right)^2 \right]\end{aligned}$$

Damit können wir die Vertauschungsrelationen der Drehimpulskomponenten berechnen:

$$\begin{aligned}[L_y, L_z] &= i\hbar L_x \\[L_z, L_x] &= i\hbar L_y \\[L_x, L_y] &= i\hbar L_z\end{aligned}$$

Im Gegensatz zur klassischen Mechanik sind in der Quantenmechanik die Komponenten des Drehimpulses somit nicht gegeneinander vertauschbar, d.h. die Messung einer dieser Komponenten zerstört den Wert der vorher gemessenen anderen Drehimpulskomponente. Dieser Satz von Vertauschungsrelationen läßt sich auch kurz folgendermaßen schreiben:

$$\boxed{[L_i, L_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} L_k} \quad (8.4)$$

wobei das Levi-Cevita-Symbol definiert ist durch:

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & \text{für gerade Permutationen von } i, j, k = 1, 2, 3 \\ -1 & \text{für ungerade Permutationen von } i, j, k = 1, 2, 3 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Für das Quadrat des Drehimpulses ergeben sich folgende Vertauschungsrelationen:

$$\begin{aligned}[L_x, L^2] &= 0 \\[L_y, L^2] &= 0 \\[L_z, L^2] &= 0\end{aligned}$$

Zusammenfassend also:

$$[L_i, L^2] = 0 \quad \text{fuer } i = 1, 2, 3 \quad (8.5)$$

Die einzelnen Drehimpuls-Operatoren vertauschen also mit dem Betragsquadrat des Drehimpulses, d.h. L_i und L^2 haben gemeinsame Eigenvektoren.

Nun fehlen uns noch die Eigenfunktionen und Eigenwerte der Drehimpuls-Operatoren. Dazu schreiben wir die Drehimpuls-Operatoren in sphärischen Koordinaten:

$$L_x = i\hbar \left(\sin\phi \frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta \cos\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \quad (8.6)$$

$$L_y = -i\hbar \left(\cos\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta \sin\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \quad (8.7)$$

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\phi} \quad (8.8)$$

$$L^2 = -\hbar^2 \nabla_{\theta\phi}^2 \quad (8.9)$$

In dieser Koordinatendarstellung sieht man, dass die L^2 -Komponente bis auf die Konstante $-\hbar$ dem Laplace-Operator $\nabla_{\theta\phi}^2$ entspricht. Beide Operatoren haben also bis auf die Konstante die gleichen Eigenvektoren und die gleichen Eigenwerte. Ebenso entspricht die L_z -Komponente des Drehimpuls-Operators wieder bis auf die Konstante $-i\hbar$ dem Operator $\frac{\partial}{\partial\phi}$. Somit haben auch diese beiden Operatoren bis auf die erwähnte Konstante die gleichen Eigenvektoren und Eigenwerte. Zusammenfassend ergibt sich also:

$$L^2 Y_{lm}(\theta\phi) = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}(\theta\phi) \quad (8.10)$$

$$L_z Y_{lm}(\theta\phi) = m\hbar Y_{lm}(\theta\phi) \quad (8.11)$$

mit $l = 0, 1, 2, \dots$ und m im Bereich $-l \leq m \leq l$. Das Eigenwertspektrum des Drehimpulses ist also ebenfalls gequantelt. Entscheidend für die Eigenwerte der Drehimpuls-komponenten sind die beiden Quantenzahlen l (Bahndrehimpuls-Quantenzahl) und m (magnetische Quantenzahl). Das Eigenwertspektrum der Drehimpulsoperatoren entspricht dem Spektrum der Eigenschwingungen einer Sphäre im R^3 . (siehe Sommerfeld S.14 ff). Wie die Vertauschungsrelationen zeigen (vgl. Gl. 8.4, 8.5), kann zu einem Zeitpunkt immer nur eine Koordinate des Drehimpulses exakt gemessen werden, lediglich der Betrag von L und der Wert entlang der Z-Achse können gleichzeitig exakt bestimmt werden. Es gibt also eine ausgezeichnete Achse, hier mit Z-Achse bezeichnet.

8.2.1. Die Quantenzahlen l und m

Unter Verwendung von Gl. 8.8 und Gl. 8.11 können wir für die Z-Komponente des Drehimpulses schreiben:

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial\phi} Y_{ml}(\theta\phi) = m\hbar Y_{ml}(\theta\phi)$$

8. Drehimpuls

Wir suchen hier also eine Funktion deren Ableitung nach ϕ wieder bis auf eine Konstante die Funktion selbst ergibt. Dies bedeutet die gesuchte Funktion muss eine e -Funktion in ϕ enthalten:

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} Y_{ml}(\theta\phi) = m\hbar F_{ml}(\theta) e^{im\phi}$$

Das bedeutet, von der Funktion $Y_{ml}(\theta\phi)$ lässt sich eine e -Funktion abspalten, die nur von ϕ abhängig ist. Da die Variable ϕ von 0 bis 2π läuft, also periodisch in 2π ist, muss gelten:

$$e^{2im\pi} = 1 \tag{8.12}$$

Dies lässt sich nur erfüllen für ganzzahlige Werte von m . Auf Grund von Gl. 8.10 wissen wir, dass auch die Quantenzahl l ganzzahlig sein muss. Außerdem sieht man anhand von Gl. 8.12, dass beim Überstreichen des Wertebereichs von ϕ im Betragsquadrat der Funktion $Y_{ml}(\theta\phi)$ $2m$ -Nullstellen auftreten. Das heißt die Quantenzahl m ergibt sich als die halbe Zahl der Nullstellen:

$$m = \frac{1}{2}(\text{Anzahl d. Nullstellen im Wertebereich von } \phi)$$

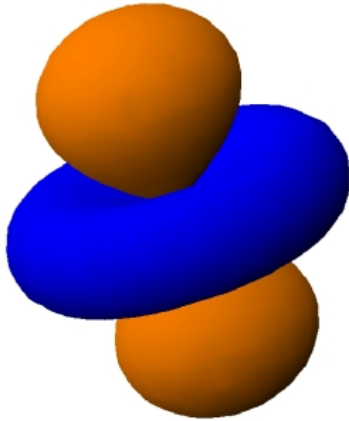
Betrachten wir die θ -Abhängigkeit näher, so fällt auf, dass diese Abhängigkeit nur in der Funktion P_{lm} auftritt. Diese Funktion enthält ein Polynom in θ vom Grad $l - m$, da P_{lm} eine $l + m$ -te Ableitung eines Polynoms der Ordnung $2l$ in θ ist. Beim Überstreichen des Wertebereichs von θ überstreicht diese Funktion (auf Grund des \cos -Terms) $l - m$ Nullstellen:

$$l - m = (\text{Anzahl d. Nullstellen im Wertebereich von } \theta)$$

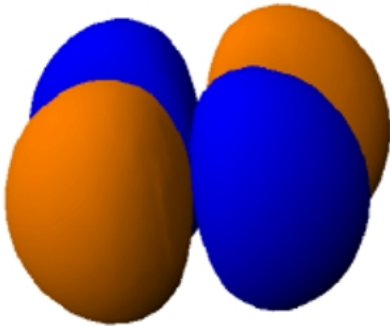
Somit kann man aus dem Abzählen der Nullstellen des Realteils der Funktion $Y_{ml}(\theta\phi)$ in ϕ - und θ -Richtung die Quantenzahlen l und m eindeutig bestimmen. Diese beiden Quantenzahlen legen also das Aussehen des Winkelanteils der Zustandsfunktion eindeutig fest.

8.2.2. Beispiele

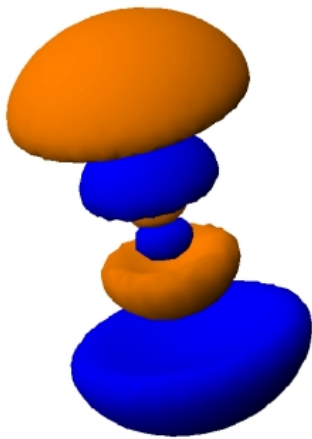
In den folgenden Beispielen ist jeweils der Realteil einer Wellenfunktion dargestellt. Bei Nulldurchgängen findet ein Farbwechsel statt. Die Flächen die dargestellt sind, entsprechen den Flächen mit dem größten Wert des Realteils. Nach oben ist jeweils die Z-Achse aufgetragen, der Winkel θ verläuft also von oben nach unten, der Winkel ϕ um die Z-Achse.



In dieser Abbildung gibt es keine Nulldurchgänge im Wertebereich des ϕ -Winkels (Rotationssymmetrie um die Z-Achse), deshalb ist also $m = 0$. Im Bereich des Θ -Winkels ($0 \leq \Theta \leq \pi$) finden wir zwei Farbwechsel und damit 2 Nulldurchgänge, also $l - m = 2$ und somit $l = 2$.



In dieser Abbildung gibt es vier Nulldurchgänge im Wertebereich des ϕ -Winkels, deshalb ist also $m = 2$. Im Bereich des Θ -Winkels ($0 \leq \Theta \leq \pi$) finden wir keinen Farbwechsel und damit 0 Nulldurchgänge, also $l - m = 0$ und somit $l = 2$.



In dieser Abbildung gibt es keine Nullstelle im Wertebereich des ϕ -Winkels, deshalb ist also $m = 0$. Im Bereich des Θ -Winkels ($0 \leq \Theta \leq \pi$) finden wir ebenfalls keinen Farbwechsel und damit 0 Nulldurchgänge, also $l - m = 0$ und somit $l = 0$.

A. Literaturempfehlungen

A.1. Literatur zur Atomphysik

Haken,H., Wolf,H.C., *Atom- und Quantenphysik*, 530 S., 2004, Springer, 55,-.

Die klassische Einführung in die Atom- und Molekülphysik. Soweit nötig wird der mathematische Formelapparat der Quantenmechanik dargestellt. Sehr gut verständlich und ausführlich, deckt etwa den Stoff einer E4-Vorlesung ab.

Demtröder, W., *Experimentalphysik 3, Atome, Moleküle und Festkörper*, 610 S., 2004, Springer, 45,-.

Nicht ganz so ausführlich wie das Buch von Haken-Wolf, deckt aber ebenfalls etwa den gesamten Stoff einer E4-Vorlesung ab. Beinhaltet auch Festkörperphysik.

Hertel,I.V., Schulz,C.P., *Atome, Moleküle und optische Physik 1*, 510 S., 2008, Springer, 50,-.

Das Buch bietet eine sehr fundierte Einführung in die Atom- und Molekülphysik. Es werden auch sehr viele Anwendungen beschrieben. Ausführlicher mathematischer Anhang. Sehr gut geeignet beigleitend zur Vorlesung.

A.2. Einführende Literatur zur Quantenmechanik

Pietschmann,H., *Quantenmechanik verstehen*, 140 S., 2003, Springer, 28,-.

Sehr gut verständliche Einführung in die Quantenmechanik. Pietschmann versucht die grundlegenden Ideen der Quantenmechanik zu erklären, was ihm hervorragend gelingt. Die mathematischen Methoden werden jedoch nicht in der Tiefe diskutiert, die für eine Quantenmechanikvorlesung erforderlich ist (z.B. fehlt die bra-ket Schreibweise).

A.3. Literatur zur Quantenmechanik

Cohen-Tannoudji,C., Diu,B., Laloe,F., *Quantum Mechanics I u. II*, 1524 S., 1977, de Gruyter, ca. 120,-.

Ein Klassiker der Quantenmechanik. Dieses Buch bietet eine fundierte Einführung in die Quantenmechanik (besonders auch für die Theorievorlesung geeignet). In einzelnen kurzen Kapiteln werden die Grundlagen vermittelt, die in sog. Complements umfangreich vertieft werden. Es gibt ein Kapitel, das sich speziell die mathematischen

A. Literaturempfehlungen

Grundlagen beschreibt. Dieses Buch ist sehr gut zum Selbststudium der Quantenmechanik geeignet. Auch als Nachschlagwerk zur Quantenmechanik gut geeignet.

Messiah, A. *Quantum Mechanics I u. II*, ca. 1000 S., 1990, de Gruyter, 75,-.

Ebenfalls ein Klassiker der Quantenmechanik. Gut gegliederte und umfangreiche Einführung in die Quantenmechanik. Die mathematischen Grundlagen werden gut verständlich dargestellt.

A.4. Literatur zur Geschichte der Quantenmechanik

Hund, F., *Geschichte der Quantentheorie*, 239 S., 1967, Bibliographisches Institut, BI-Hochschultaschenbuch Bd. 200, ca. 80,-.

Friedrich Hund schildert ausführlich die verschiedenen Entwicklungszweige die beginnend mit der Hohlraumstrahlung über verschiedene Theorien schließlich zur Quantentheorie geführt haben. Dabei stellt er nicht nur die verschiedenen Ansätze vor, sondern auch die Persönlichkeiten dahinter und zeigt die Abhängigkeiten der einzelnen Theorien auf. Ein phantastisches Buch für alle, die sich für die geschichtliche Entwicklung der Quantentheorie interessieren. Leider nur noch antiquarisch oder über Bibliotheken zu erhalten (z.B. in der UB-München erhältlich).

A.5. Literatur zur Quantenmechanik in der Schulphysik

Wünschmann, A., *Der Weg zur Quantenmechanik*, 96 S., 2006, Studienverlag Wünschmann, 12,-.

Eine kleine Einführung in die Quantenmechanik geschrieben für Schüler der Oberstufe ohne den quantenmechanischen Formelapparat. Sehr gut verständlich, ist aber nur eine kleine Einführung, gut für den Unterricht in der Oberstufe geeignet.

Abbildungsverzeichnis

2.1. Wahrscheinlichkeitsdichte	6
3.1. Eigenfunktionen für das Kastenpotential	13
8.1. Visualisierung von Kugelflächenfunktionen, rotierend um die Z-Achse. Dargestellt ist Y_{lm} , wobei l der Zeile und m der Spalte, jeweils beginnend bei 0 entspricht. Quelle: Wikipedia: http://de.wikipedia.org/wiki/Kugelflächenfunktion	

Tabellenverzeichnis

2.1. Vergleich Optik-Quantenmechanik	6
4.1. Erwartungswerte	19

Literaturverzeichnis

- [B.D99] C.CohenTannoudji B.Diu, F.Laloe. *Quantenmechanik I*. Walter de Gruyter Verlag, Berlin, zweite edition, 1999. [25](#)
- [Jac06] J.D. Jackson. *Klassische Elektrodynamik*. de Gruyter Verlag, Berlin, vierte edition, 2006.
- [O.N02] A.Zeilinger O.Nairz, M.Arndt. Experimental verification of the heisenberg uncertainty principle for fullerene molecules. *Phys. Rev. A*, 65(Berlin), 2002. [1](#)
- [Som78] A. Sommerfeld. *Atombau und Spektrallinien*. Harri Deutsch Verlag, Frankfurt, fünfte edition, 1978. [49](#)

Index

- Atommodell
 - Bohr, 1, 11
- Basis, 23
- Bohr, 1
- Born, Max, 6
- Bose-Einstein-Kondensat, 1
- Bra
 - Darstellung, 28
- Bra-Vektor, 24

- Davisson, 1
- De Broglie, 1
- DeBroglie-Wellenlänge, 10
- Dichtematrix, 41
- Dirac-Notation, 24
- Drehimpuls, 49
 - Operator, 51

- ebene Welle, 3
- Eigenvektor, 29
- Eigenwert, 29
- Eigenwerte
 - entartete, 32
- Eigenwertgleichung, 29
- Entartung, 32
- Erwartungswert, 15, 39
 - Energie, 18
 - Impuls, 16
 - kinetische Energie, 18
 - Ort, 15
 - Potential, 16
- Euleridentität, 4

- Fouriertransformation, 16
- Germer, 1

- Hamiltonoperator, 38
- Heisenberg, 1
- Heisenberg'sche Unschärferelation, 3
- Hilbertraum, 21

- Kastenpotential, 10
- Ket
 - Darstellung, 28
- Ket-Vektor, 24
- Kugelflächenfunktionen, 49

- Laplace-Operator, 49

- Materiewellen, 1, 3
- Maxwell-Gleichungen, 9
- Moden, 12

- Normierung, 5

- Observable, 32
 - Erwartungswert, 39
 - Standardabweichung, 39
- Operator, 18
 - Darstellung, 29
 - Erwartungswert, 39
 - hermitisch, 32
 - Laplace, 49
 - linear, 22
 - linearer, 25
 - Standardabweichung, 39
- Orthogonalität, 21

- Plancksches Wirkungsquantum, 3
- Projektor, 27

- Schrödinger, 1
- Schrödingergleichung, 1, 3, 9, 10
- Schwarzsche Ungleichung, 22

- Skalarprodukt, [21](#)
- Solvay-Konferenz, [1](#)
- Sommerfeld, [1](#)
- Sphärisch-Harmonische Funktionen, [49](#)
- Spin, [55](#)
- Standardabweichung, [39](#)
- Statistisches Ensemble, [41](#)
- Superposition, [41](#)
- Symmetrisierungsregel, [38](#)

- Vollständigkeitsaxiom, [23](#), [24](#)

- Wahrscheinlichkeitsdeutung, [5](#)
- Wahrscheinlichkeitsdichte, [5](#)
- Welle-Teilchen-Dualismus, [1](#), [5](#)
- Wellen
 - ebene, [3](#)
- Wellenpaket, [4](#)
 - Reduktion des, [37](#)
- Wellenpakete, [4](#)
- Wirkung, [1](#), [11](#)

- Zeilinger, [1](#)
- Zustandsfunktion, [5](#), [24](#)
- Zustandsraum, [21](#)