

Theoretische Physik L2 - WS11

Mitschrift zur Vorlesung von Prof. Bertlmann

Christian Steiner

10. Januar 2013

Version 3.0 - fertig

Inhaltsverzeichnis

Vorwort	3
I. Quantenmechanik	4
I. Welle Teilchen Dualität	5
II. Zeitabhängige Schrödinger-Gleichung	19
III. Mathematischer Formalismus der Quantenmechanik	30
IV. Zeitunabhängige Schrödingergleichung	34
V. Drehimpuls, Spin und Statistik, dreidimensionale Schrödingergleichung	49
VI. EPR, Relativitätstheorie - Vorträge	62
VII. Entanglement	63
VIII. Dichtematrizen	66
II. Statistische Physik	71
I. Thermodynamik	72
II. Entropie	77
III. Thermodynamische Zustandsgrößen und Verteilungen	80
IV. Zusammenfassung der Statistik	82
A. Abbildungsverzeichnis	83

Vorwort

An alle Leserinnen und Leser: Ihr könnt dieses Skriptum gerne (kostenlos) Kolleginnen und Kollegen zur Verfügung stellen.

E-Mail: csteiner@grg21.ac.at

Ich möchte noch einmal betonen, dass dieses Skriptum keine Anspruch auf Vollständigkeit oder Richtigkeit erhebt, ich habe es nach meinem Wissen erstellt und gemeinsam mit Prof. Bertlmann korrigiert. Es entspricht an einigen Stellen nicht exakt der Tafelmitschrift aus der Vorlesung.

Die Bilder stammen teilweise aus dem T2-Skriptum von Prof. Bertlmann¹, dort sind zu einigen Bildern auch externe Quellenangaben zu finden. Einige weitere Bilder habe ich selbst erstellt. Alle anderen Bilder sind Eigentum ihrer Besitzer.

Anmerkung zur Version 3.0: Diese Version ist die letzte, Prof. Bertlmann hat sie auf Fehler durchgelesen und korrigiert. Sollten nicht noch ernstzunehmende Fehler auftauchen, betrachte ich das Skriptum als abgeschlossen. Zu dem Skriptum gibt es drei Anhänge zu den beiden Vorträgen über EPR und Relativitätstheorie.

¹Bertlmann, Reinhold A.; Friis, Nicolai - Theoretical Physics T2 Quantum Mechanics. Course of Lectures by Reinhold A. Bertlmann. T2-Script of Sommersemester 2008.

https://www.univie.ac.at/physikwiki/index.php/Datei:T2_Skript_final.pdf , 02.02.2012

Teil I.

Quantenmechanik

I. Welle Teilchen Dualität

I.1. Planck'sches Strahlungsgesetz, Hohlraum Strahlung

4.10.2011

Historisch gesehen beginnt die Quantenmechanik 1900.

Planck's Entdeckung:

Die Energie ist der Frequenz proportional!

$$E = \hbar \cdot \omega \quad (\text{I.1})$$

1

Hohlraum Strahlung:

Die Energiedichte der austretenden Strahlung wird in Abhängigkeit der Kreisfrequenz gemessen, schon vor Planck wurden zwei Gesetzmäßigkeiten entdeckt.

für kleine Frequenzen: von Reighley und Jeans

$$u(\omega) = \frac{kT}{\pi^2 c^3} \cdot \omega^2 \quad (\text{I.2})$$

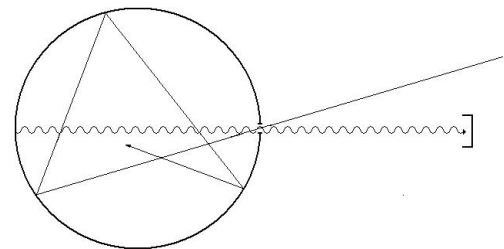


Abbildung I.1.: Hohlraumstrahlung

2

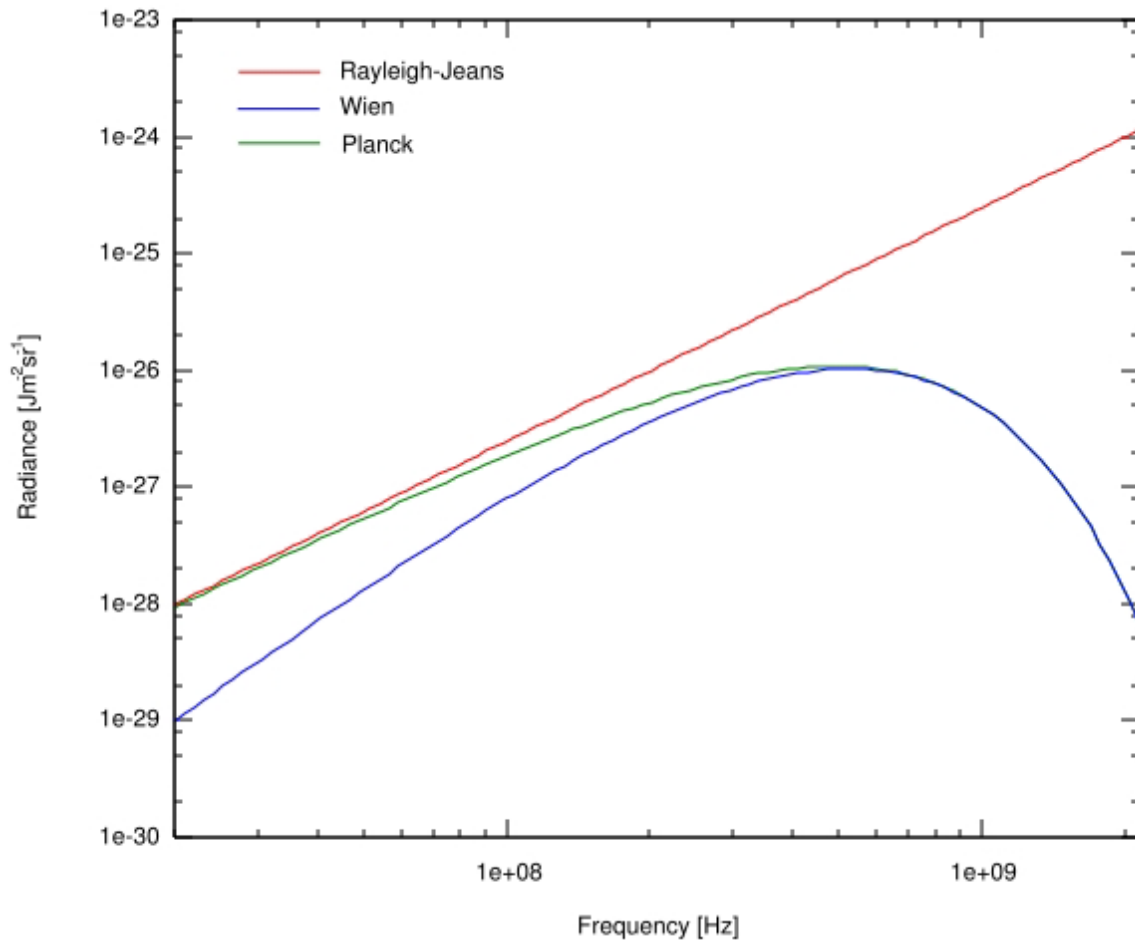
Diese Beschreibung gilt nur für kleine Frequenzen, bei $\omega \rightarrow \infty$ kommt es zur sogenannten 'UV-Katastrophe'.

¹ $\omega = 2\pi\gamma$	Kreisfrequenz (oft Frequenz genannt)
$\gamma = \frac{1}{T}$	Frequenz
T	Schwingungsdauer
$c = \lambda \gamma$	Lichtgeschwindigkeit
λ	Wellenlänge
$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,054 \cdot 10^{-27} \text{ ergs} \approx 10^{-34} \text{ Js}$	Planck'sches Wirkungsquantum
$h = 6,626 \cdot 10^{-27} \text{ ergs}$	
$1 \text{ erg} = 0,1 \mu\text{J} = 0,1 \cdot 10^{-6} \text{ kgm}^2\text{s}^{-2}$	Einheit für die Energie
² T	Temperatur des Hohlraums
$k = 1,38 \cdot 10^{-16} \text{ ergK}^{-1}$	Boltzmann-Konstante
$\frac{1}{2} \cdot kT = E$	Äquipartitionstheorem, thermodynamische Energie für jeden Freiheitsgrad

für große Frequenzen: empirisches Gesetz von Wien:

$$u(\omega) \rightarrow A \cdot \omega^3 e^{-B \frac{\omega}{T}} \quad (\text{I.3})$$

3



Planck untersuchte den Bereich in der Mitte.

Interpolation von Planck:

$$u(\omega) \stackrel{\omega \rightarrow \infty}{\approx} \frac{\omega^3}{e^{\frac{\omega}{T}} - 1} \quad (-1 \text{ im Nenner stört bei großen } \omega \text{ nicht})$$

$$u(\omega) \stackrel{\omega \rightarrow 0}{\approx} \frac{\omega^3}{e^{\frac{\omega}{T}} - 1} \approx \frac{\omega^3}{1 + \frac{\omega}{T} - 1} = \frac{kT}{\pi^2 c^3} \cdot \omega^2$$

\Rightarrow Planck-Gesetz:

$$u(\omega) = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \cdot \frac{\omega^3}{e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1} \quad (\text{I.4})$$

kT hat die Einheit einer Energie (ist die klassische Energie eines idealen Gases)
 $\Rightarrow E = \hbar \omega$

5.10.2011

³A, B empirisch bestimmte Konstanten

Einschub: Nobelpreise Physik 2011:

S. Perlmutter, USA; B. P. Schmidt, Australien; A. Riess, USA für 'accelerated expansion of our universe by observation' - haben ca. 50 weit entfernte Supernovas beobachtet und damit die **beschleunigte** Ausdehnung des Universums untersucht und gezeigt.

Big Bang \Rightarrow Hintergrundstrahlung $\approx 3K$

Einstein: Allgemeine Relativitätstheorie (ART): Gleichungen zwischen Geometrie und Materie (Geometry \leftrightarrow Matter, Krümmungstensor $T_{\mu\nu} \leftrightarrow$ Masse M)

Hier fehlt der Rest des Einschubs zum Nobelpreis, den ich auch nicht mehr einfügen werde.

Folgen der Strahlungsformel:

1. $\lambda_{\max} \cdot T = \text{const.} = 0,29 \text{ cmK} \dots$ Wien'sches Verschiebungsgesetz

2. Strahlungsleistung:

$$\int_0^\infty u(\omega) d\omega = \frac{\hbar}{\pi^2 c^2} \left(\frac{k}{\hbar} \right)^4 T^3 \cdot T \int_0^\infty \underbrace{\frac{\left(\frac{\hbar\omega}{kT} \right)^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}}_{=:x} d \underbrace{\left(\frac{\hbar\omega}{kT} \right)}_{=:x} = \frac{k^4}{\pi^2 c^3 \hbar^3} \int_0^\infty \underbrace{\frac{x^3 dx}{e^x - 1}}_{\text{nachschlagen: } \frac{\pi^4}{15}} \cdot T^4$$

$$\Rightarrow \boxed{\int_0^\infty u(\omega) d\omega = \frac{k^4 \pi^2}{15 c^3 \hbar^3} \cdot T^4} \text{ - Stefan-Boltzmann-Gesetz} \quad (\text{I.5})$$

3. $u(\omega) \xrightarrow{\omega \rightarrow 0} \omega^2$ - Gesetz von Reighley-Jeans

4. $u(\omega) \xrightarrow{\omega \rightarrow \infty} \omega^2 e^{-B \frac{\omega}{T}}$ - Gesetz von Wien

I.2. Photoelektrischer Effekt

H. Hertz entdeckte 1887 folgendes Phänomen: Metalloberfläche sendet e^- aus, wenn mit UV-Licht bestrahlt!

1. kinetische Energie der e^- ist unabhängig von der Intensität des Lichts
2. kinetische Energie der e^- nimmt mit der Frequenz des Lichtes zu
3. \exists Grenzfrequenz, unterhalb der keine e^- mehr ausgesandt werden

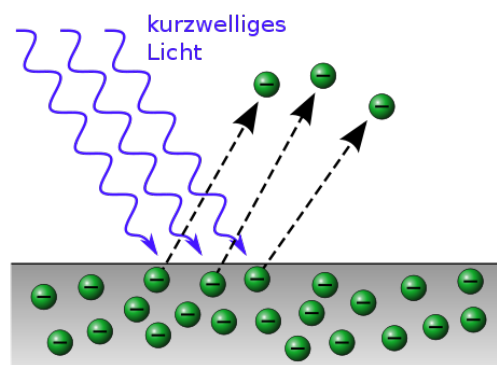


Abbildung I.2.: Photoelektrischer Effekt

1905 Photonenhypothese von Einstein:

Licht besteht aus Energiequanten, genannt Photonen! (Nobelpreis 1921)

(Name 'Photonen' nicht von Einstein, sondern von unbekanntem Chemiker verwendet - von allen übernommen)

$$E = \hbar \cdot \omega \quad (\text{I.6})$$

Photoelektrische Formel:

$$E_{kin} = \frac{mv^2}{2} = \hbar \cdot \omega - W \quad (\text{I.7})$$

4

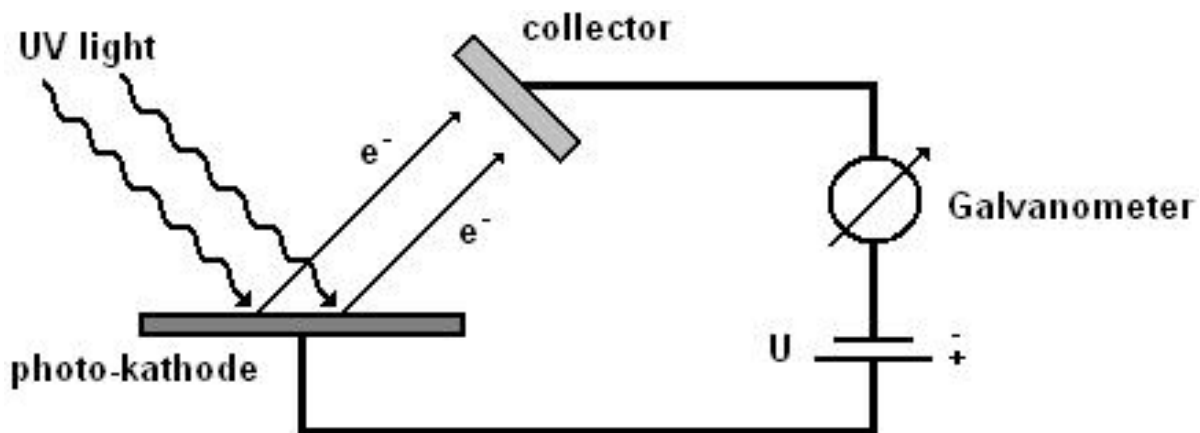
$$E_{kin}(\text{Energie des } e^-) < \hbar\omega(\text{Energie des Photons})$$

aus der photoelektrischen Formel folgen dann 1., 2. und 3. von oben

zu 3. - Grenzfrequenz: für $E_{kin} \rightarrow 0$ ergibt sich damit die Grenzfrequenz: $\omega_0 = \frac{W}{\hbar}$

6.10.2011

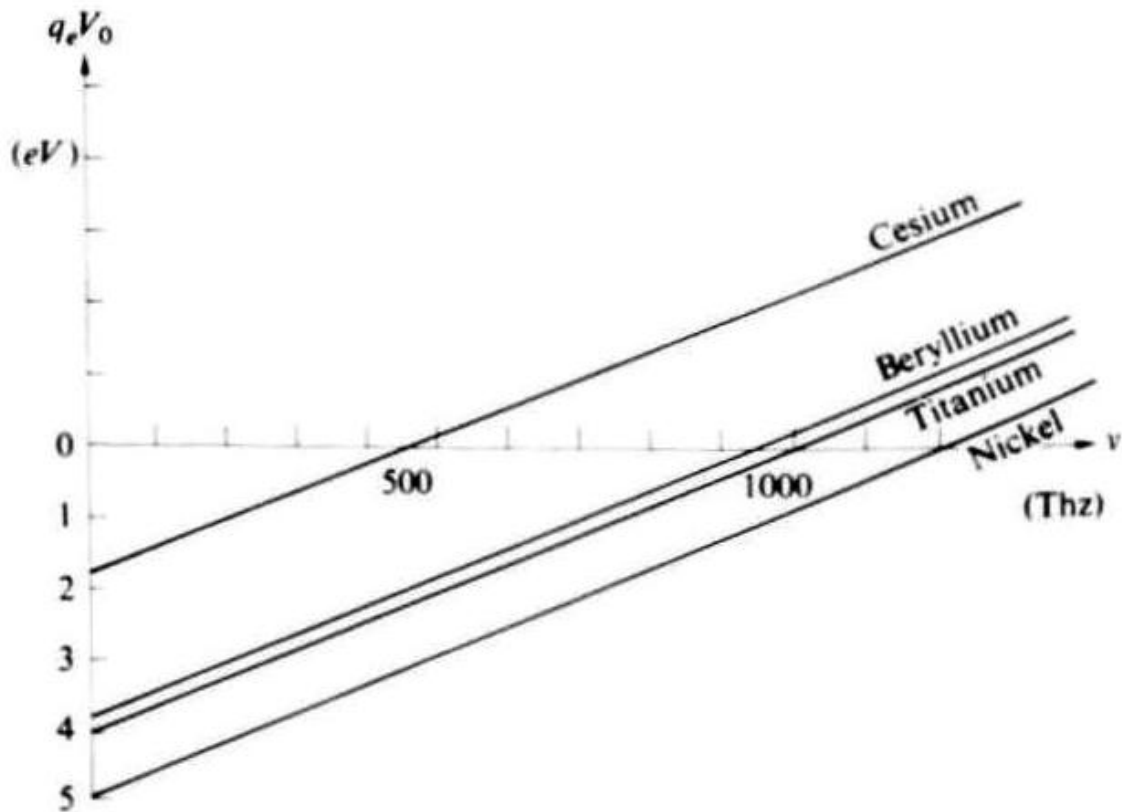
Experiment zum Photoelektrischen Effekt - Millikan (1916):



Theorie: $eU_0 = E_{kin} = \hbar\omega - W \rightarrow 0 \Rightarrow \omega_0 = \frac{W}{\hbar}$ (Grenzfrequenz)

experimentell: $\Rightarrow \omega_0, W, \hbar$ aus Daten ablesbar (erste sehr genaue Bestimmung von \hbar)
 Austrittsarbeit W für gängige Metalle alle in Größenordnungen von 2 – 5 eV (Vergleich: Ionisierungsenergie in Wasserstoff-Atom ca. 13,6 eV)

⁴ W Austrittsarbeit (Materialkonstante)



Licht - Photonen Zusammenfassung:

1. $E = \hbar\omega$
2. $c = 2,99792458 \cdot 10^{10} \text{ cm sec}^{-1}$
3. Ausbreitungsrichtung durch Wellenzahlvektor \vec{k} gegeben: $k = |\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$

erinnern an SRT \Rightarrow Aussage über Impuls und Masse des Photons:

Energie: $E = \sqrt{\vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4}$, Geschwindigkeit: $\vec{v} =$

$\frac{\partial E}{\partial \vec{p}} = \frac{\vec{p} c^2}{\sqrt{\vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4}}$, wenn $v \rightarrow c \Rightarrow \boxed{m_{\text{photon}} = 0}$! damit

für die Energie des Photons: $\Rightarrow \boxed{E = pc}$

QM + SRT: QM und SRT verbinden: $\hbar\omega = E = pc = p \frac{\omega}{k}$ weil $c = \frac{\omega}{k}$, damit kann man ω auf beiden Seite weglassen und es ergibt sich: $\boxed{p = \hbar k}$,

$$\boxed{\vec{p} = \hbar \vec{k}}$$

Teilchen - Welle: $\boxed{E = \hbar\omega, p = \hbar k}$

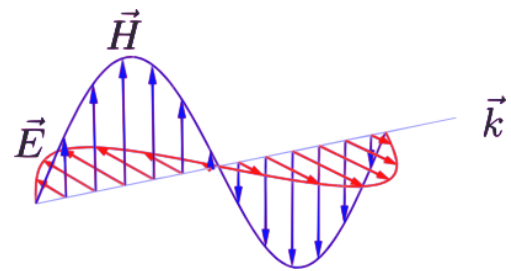
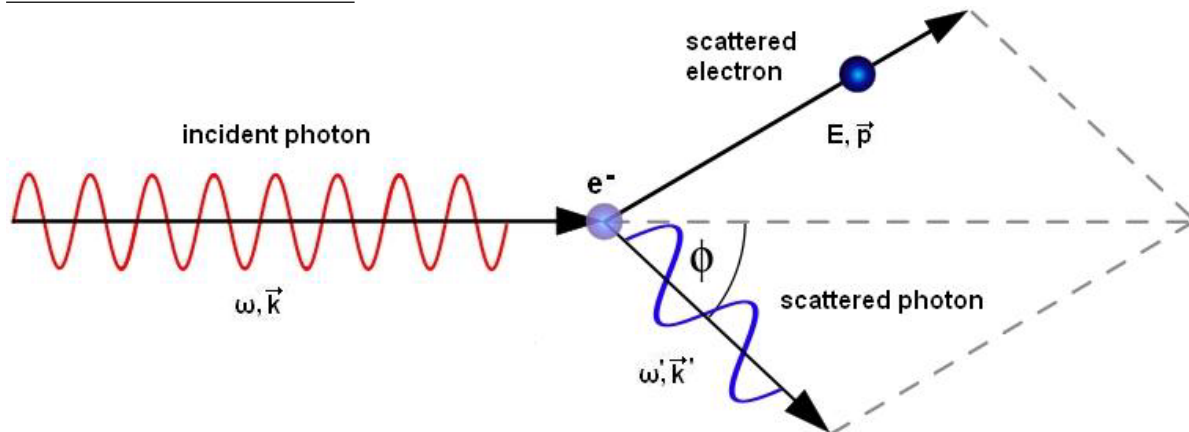


Abbildung I.3.: Wellenzahlvektor \vec{k}

I.3. Compton-Effekt

Compton, Experiment 1922, Nobelpreis 1927
Streuung von Photonen an ruhenden Elektronen



Streuprozess, es gilt Erhaltung von Energie und Impuls

Energieerhaltung: $\hbar\omega + mc^2 = \hbar\omega' + \underbrace{E}_{\sqrt{\vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4}}$

Impulserhaltung: $\hbar\vec{k} = \hbar\vec{k}' + \vec{p}$ ($\hbar\vec{k}' = |\vec{k}| \cdot |\vec{k}'| \cdot \cos\theta = |k| \cdot |k'| \cdot \cos\theta$)

nach Auswertung: $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = 4\pi \frac{\hbar}{mc} \sin^2 \frac{\theta}{2}$ - Compton-Formel

Resultat: gestreutes Photon → größere Wellenlänge wegen Energieabgabe an e^-

Compton-Wellenlänge: $\lambda_c = \frac{\hbar}{mc} = 3,80 \cdot 10^{-11} \text{ cm}$

Intensität von Photonen, Röntgenlicht mit Molybdän-Anoden:

I.4. Bohr's These

11.10.2011

Quantisierung der Energiezustände von Atomen.
 Fragen:

- Warum ergibt sich ein diskretes Linienspektrum?
- Warum fallen die Elektronen nicht in den Kern?

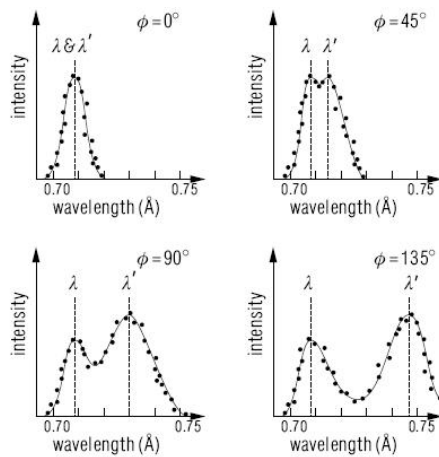


Abbildung I.4.: Intensität von Photonen

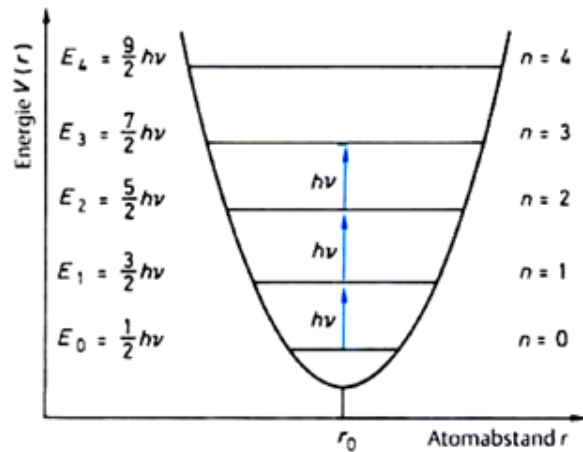


Abbildung I.5.: Energieniveaus

Bohr's Quantenpostulat (1913):

Nobelpreis 1922

Die Elektronen im Atom können nur diskrete Energiewerte einnehmen und beim Übergang von einem Energiewert zum anderen wird ein Photon mit der Frequenz

$$\omega = \frac{1}{\hbar}(E_n - E_m) \text{ ausgestrahlt oder absorbiert.}$$

E_0 stabiler Grundzustand

Bohr'sches Atommodell ('Babymodell' - aus historischen Gründen):

Die stationären Zustände sind jene, wo die klassische Bahn eine Quantisierungsbedingung erfüllt.

Wirkungsintegral:

$$\oint p dq = nh \quad ^5$$

Bohr: Atome auf Kreisbahnen ('wie die Planeten um die Sonne'), Sommerfeld erweitert das Modell (Ellipsenbahnen, ...)

Bohr's Modell konnte das Spektrum des H-Atoms 'erklären': $\hbar\omega = \underbrace{R_y}_{const.} \underbrace{\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right)}_{fixiert}$

n ... Nummer der Spektrallinie-Serie, benannt nach den Entdeckern, z.B. $n = 1$ Lyman-Serie, $n = 2$ Balmer-Serie, $n = 3$ Paschen-Serie

⁵ p Impuls
 q Weg
 $n = 1, 2, 3, \dots \in \mathbb{Z}^+$

$$\frac{R_y}{hc} = \underbrace{R_\infty}_{\text{Kernfix}} = 2\pi^2 \frac{me^4}{h^3 c} = 109737,3 \text{ cm}^{-1}$$

Bohr's Atommodell ist FALSCH, es erklärt nicht das Energiespektrum mit $\vec{L} = 0$.

Komplementaritätsprinzip:

Bohr: Welle und Teilchen sind komplementär zueinander. Ein System zeigt entweder Wellen- oder Teilcheneigenschaften (je nachdem, was man betrachtet - abhängig von der Messapparatur).

Welle und Teilchen sind 2 Aspekte in der Beschreibung von physikalischen Phänomenen, die komplementär sind.

Welle und Teilchen sind nicht gleichzeitig messbar (ähnlich wie 'Ort und Impuls' und 'Energie und Zeit').

Bohr'sches Korrespondenzprinzip:

Geht man zu sehr hohen Anregungen (große Quantenzahlen n) über, so gehen die Quantengesetze in die Klassischen über ($n \rightarrow \infty$ entspricht $\hbar \rightarrow 0$).

Kopenhagener Interpretation der QM:

Gibt an, wie der mathematische Formalismus physikalisch zu interpretieren ist. Vertreter: Bohr, Heisenberg, Pauli, Born, ...; Gegner: Einstein, Schrödinger

I.5. Welleneigenschaften der Materie

de Broglie Thesen:

1923, Nobelpreis 1929

Teilchen haben auch Welleneigenschaften

$$\text{Teilchen} \quad \boxed{E = \hbar\omega = h\nu} \quad \text{Welle}$$

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

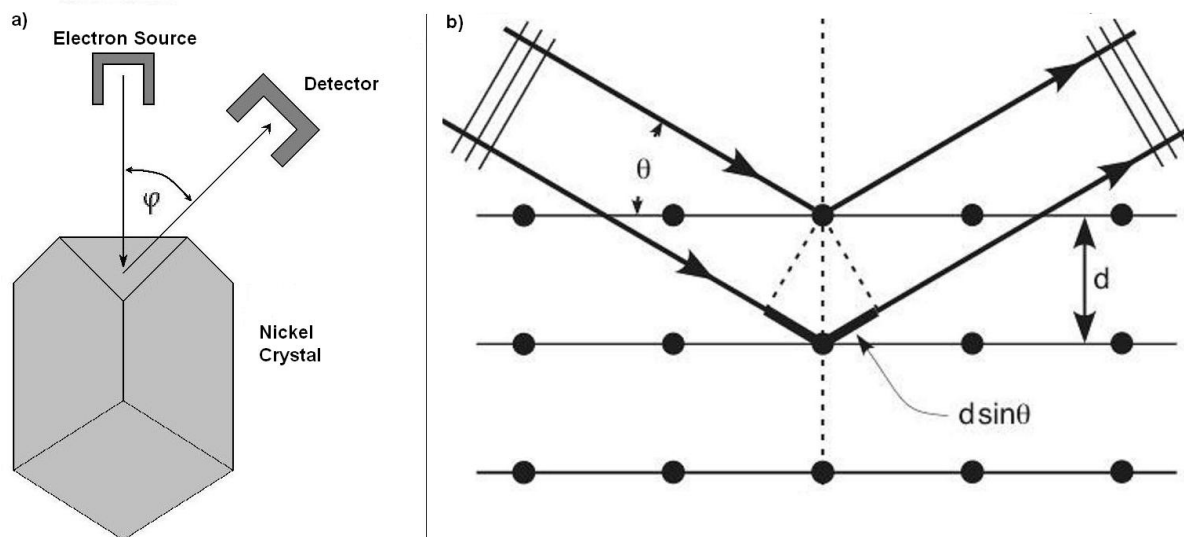
Ordnet Materie Wellenlängen zu, 'Materiewellen':

$$\boxed{\lambda_{\text{de Broglie}} = \frac{h}{mv} = \frac{h}{\sqrt{2mE_{\text{kin}}}}}$$

→ Schrödinger ψ -Funktion → Born Interpretation

$$\lambda_{\text{de Broglie}} \approx \underbrace{d}_{\text{Abstand v. Kristallgitter}}$$

I.6. Beugung von Elektronen am Kristall



\Rightarrow konstruktive Interferenz, $\sin \varphi = \frac{\lambda}{d} \Rightarrow \boxed{d \sin \varphi = n \cdot \lambda}$ ⁶

Elektron mit bestimmter Energie auf Kristall geschickt, Experiment von Davison, Germer, Thomson 1927 (Nobelpreis 1937).

I.7. Heisenberg'sche Unschärferelation

12.10.2011

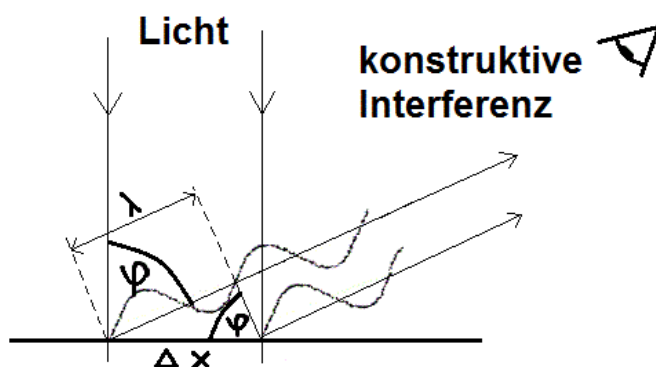


Abbildung I.6.: Konstruktive Interferenz

Veranschaulichung mittels Heisenberg-Mikroskop.

konstruktive Interferenz, Δx ist der kleinste Abstand für Auflösungsvermögen

$$\sin \varphi = \frac{\lambda}{\Delta x} \Rightarrow \boxed{\Delta x = \frac{\lambda}{\sin \varphi}}$$

Wenn λ klein wird ($\sin \varphi = \text{const.}$), dann wird Δx beliebig klein?

JA, aber ^{Heisenberg} \Rightarrow geht nur auf Kosten der Impulsinformation!

Warum - Erklärung mit Heisenberg-Mikroskop:

Am Schirm wird das gestreute Photon registriert. Richtung des gestreuten Photons ist unbestimmt innerhalb einer Öffnung mit dem Winkel φ . Daher ist der Rücksto-

⁶ $n = 1, 2, 3, \dots \in \mathbb{Z}^+$; λ de Broglie-Wellenlänge

Impuls des Elektrons unbestimmt ('unscharf'), das heißt die Impulswerte liegen innerhalb von einem Intervall Δp .

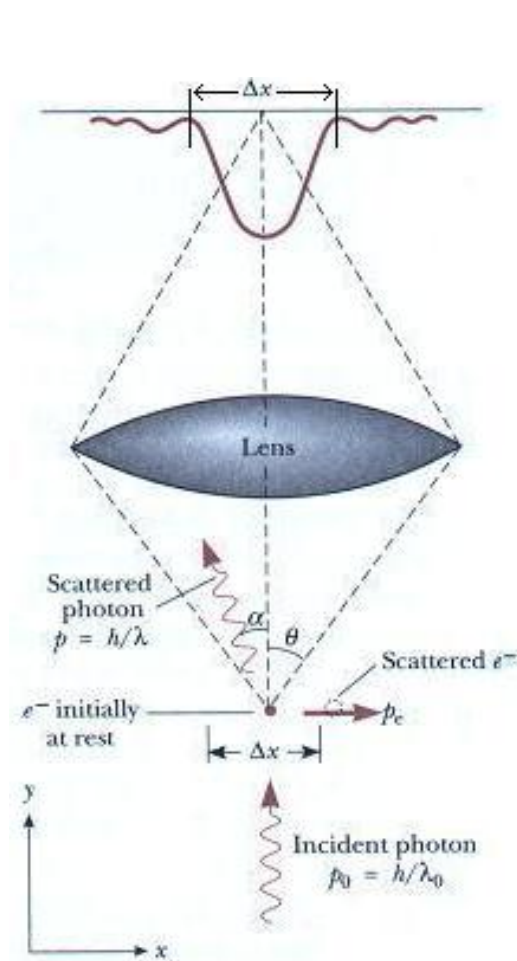


Abbildung I.7.: Heisenberg-Mikroskop

$$\Delta p_x^{e^-} \approx \Delta p_x^{photon} = \underbrace{p_{photon}}_{= \hbar k = \frac{h}{\lambda}} \cdot \sin \varphi = \frac{h}{\lambda} \cdot \sin \varphi = \Delta p_x^{e^-}$$

$$\Rightarrow \Delta x \cdot \Delta p \approx h \quad (I.8)$$

Unschärferelation zwischen Ort und Impuls von Heisenberg (1927, Nobelpreis: 1932)

Im quantenmechanischen Formalismus: Zustand des Elektrons \rightarrow Wellenfunktion; Orts-, Impulsmessung \rightarrow Operator (zwischen ihnen wird Erwartungswert ausgerechnet); U.R.:

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}, \text{ '}' \text{ bei Gauß-Wellenfunktion (für harmonischen Oszillator)}$$

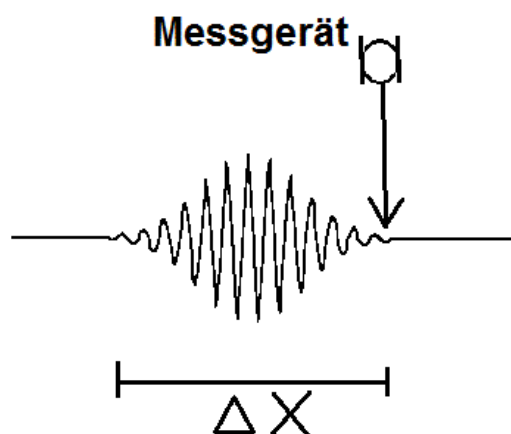
Satz: Wann immer es genaue Ortsmessungen gibt, ist die Information über den Impuls 'unscharf' (ungenau) und umgekehrt!

Das gilt prinzipiell (keine Ungenauigkeit von Messinstrumenten)!

Komplementarität: Ort x und Impuls p sind komplementär (im Sinne von Bohr), beides x und p ist nicht beliebig genau messbar (gleichzeitig).

Energie-Zeit Unschärferelation:

Es gibt Unschärfe zwischen Dauer Δt eines physikalischen Vorgangs und der Genauigkeit der Energiemessung ΔE .



Teilchen wird Wellenpaket zugeordnet, $\Delta t \dots$ wie lange das Wellenpaket braucht, um an einem bestimmten Ort vorbeizukommen. Man betrachtet nun ein freies Teilchen - frei bewegendes Wellenpaket:

$$\text{Energie: } E_{kin} = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow \text{Variation } \Delta E = \frac{p}{m} \cdot \Delta p$$

(kleine Änderung entspricht in etwa Differential einer Funktion - $df(p) = \frac{d}{dp} f(p) \cdot dp$)

Geschwindigkeit: $v = \frac{\Delta x}{\Delta t} \Rightarrow$ zeitliche Variation

Abbildung I.8.: Energie-Zeit-Unschärfe

$$\Delta t = \frac{\Delta x}{v} = \frac{m}{p} \Delta x$$

$$\text{Orts-Impuls-Unschärfe war } \Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \Rightarrow \underbrace{\frac{m}{p} \cdot \Delta x}_{\Delta t} \cdot \underbrace{\frac{p}{m} \Delta p}_{\Delta E} \geq \frac{\hbar}{2} \Rightarrow$$

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

(I.9)

Unschärferelation in Energie und Zeit

Es gibt Komplementarität zwischen Energie und Zeit.

Physikalische Konsequenz: Es gibt eine natürliche Linienbreite von Spektrallinien (eine mathematische Linie würde man gar nicht sehen). Diese Breite ist $\Delta E = \hbar \Delta \omega$. Entspricht der endlichen Emissionszeit des Wellenpaketes, diese bewirkt eine Energieunschärfe.

I.8. Doppelspalt-Experiment

13.10.2011

Klassischer Fall (Kügelchen, etc.)

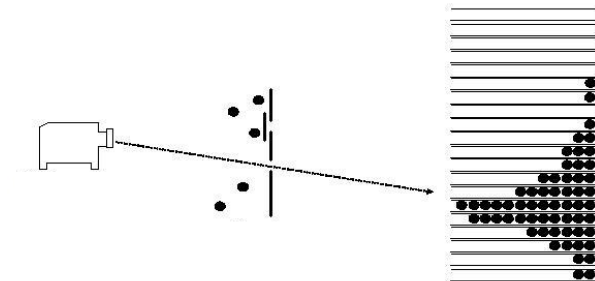


Abbildung I.9.: Ein Spalt geöffnet

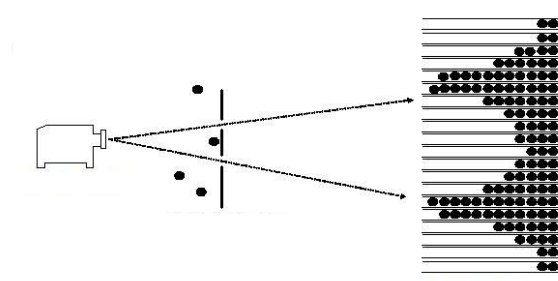


Abbildung I.10.: Beide Spalte geöffnet

Teilchen werden durch 2 Spalte geschickt (klassischer Fall).

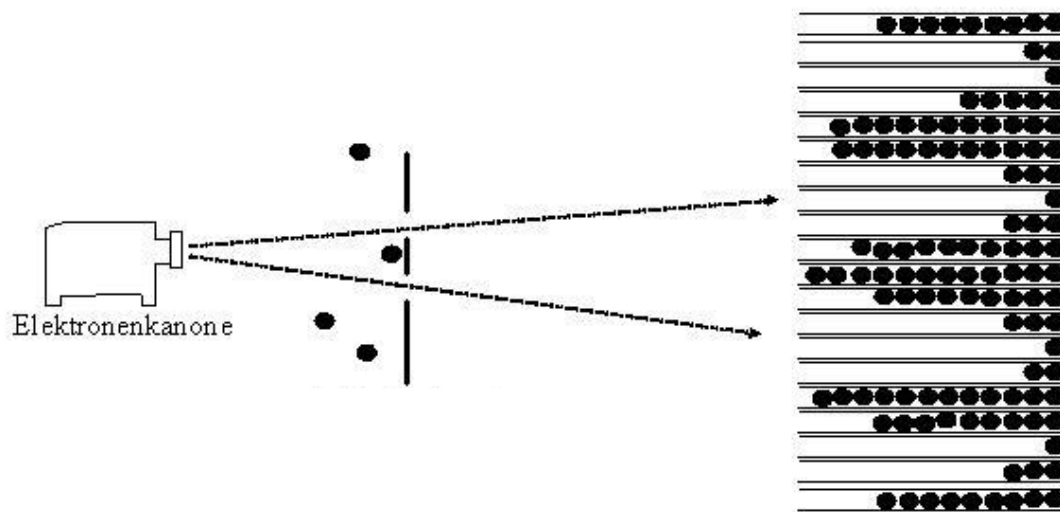
Wenn nur Spalt 1 offen: \Rightarrow Verteilung W_1

Wenn nur Spalt 2 offen: \Rightarrow Verteilung W_2

Wenn beide Spalte offen: \Rightarrow Verteilung $W_{12} = W_1 + W_2$

experimentell: Anzahl der 'Klicks', theoretisch: Wahrscheinlichkeit (W_{12} ist Summe der Wahrscheinlichkeiten)

Quantenmechanischer Fall



Versuch wird zum Beispiel mit Elektronen und einer Photoplatte als Detektor, die beim Auftreffen gefärbt wird, durchgeführt. Die Intensität zeigt eine Kurve, die fundamental verschieden zur Summe der Wahrscheinlichkeiten der Einzelspalte (die wie im klassischen Fall aussehen) ist.

ebene Welle wird beim Spalt zu Kugelwelle, es kommt in der Mitte zur größten konstruktiven Interferenz zwischen den beiden Kugelwellen

Elektronen werden durch 2 Spalte geschickt (quantenmechanischer Fall). Die Elektronen werden hinter dem Doppelspalt mittels Zählrohr registriert.

Wenn nur Spalt 1 offen: \Rightarrow Verteilung W_1 (wie oben!)

Wenn nur Spalt 2 offen: \Rightarrow Verteilung W_2 (wie oben!)

Wenn beide Spalte offen: \Rightarrow Verteilung $W_{12} \neq W_1 + W_2$

experimentell: Intensität, theoretisch: Wahrscheinlichkeit

Man erhält ein Interferenzbild einer Welle am Doppelspalt. Die Intensität ist dort hoch, wo die Wegdifferenz $\Delta L = L_2 - L_1$ der beiden Wege, die die Elektronen nehmen können (durch Spalt 1 oder durch Spalt 2) - auch Gangunterschied genannt - ein Vielfaches der de Broglie Wellenlänge ist: $\Delta L = n \cdot \lambda_{\text{de Broglie}}$.

Interpretation von Born (1926/27):

Nobelpreis 1954

Das Verhalten der Elektronen durch den Doppelspalt wird durch eine Welle (komplexwertige Funktion) beschrieben: $\Psi(x, t)$.

Die Wahrscheinlichkeit W des Auftreffens des Elektrons (bzw. die Intensität I) wird durch den Betrag des Amplitudenquadrats angegeben:

$$\text{Theorie} \quad |\Psi(x, t)|^2 = I \quad \text{Experiment}$$

Elektron als Welle:

Spalt 1 offen: $W_1 = |\Psi_1|^2$

Spalt 2 offen: $W_2 = |\Psi_2|^2$

beide Spalte offen: Welle $\Psi = \Psi_1 + \Psi_2$ (Amplituden),

$$W_{12} = |\Psi|^2 = |\Psi_1 + \Psi_2|^2 = \underbrace{|\Psi_1|^2}_{>0} + \underbrace{|\Psi_2|^2}_{>0} + \underbrace{2\operatorname{Re}\Psi_1^*\Psi_2}_{\text{Interferenzterm}}^7$$

Interferenzterm > 0 : konstruktive Interferenz, $= 0$: klassischer Fall, < 0 : destruktive Interferenz

Resultat:

Wenn ein Elektron durch einen Doppelspalt geht, dann trifft es wie ein Teilchen am Schirm auf ('Klick', lokalisiert). Aber die Anzahl der 'Klicks', Intensität, ist durch eine Welle bestimmt: $|\Psi(x,t)|^2$. In diesem Sinn: Elektron ist Teilchen oder Welle.

Bemerkungen:

1. Die wahrscheinlichkeitsverteilung gilt für jedes einzelne Elektron. Ψ beschreibt ein Elektron. Ein einzelnes Elektron folgt auch schon dem Beugungsmuster, man kann nicht voraussagen, wohin es fliegt, man kann nur sagen, dass es nicht auf ein Minimum der Interferenzkurve treffen wird. Die Elektronen werden gleich präpariert (ihnen wird auch die gleiche Welle zugeordnet), aber sind nicht die selben.
2. Die Weginformation zerstört das Wellenverhalten. Wenn man bestimmt, durch welchen Spalt die Elektronen gehen, so ergibt sich wieder die klassische Verteilung (nicht mehr die Interferenz). Je mehr Information darüber bekannt ist, durch welchen Spalt das Elektron geht, desto mehr verschwindet das Interferenzmuster (kontinuierlich).
3. Das Elektron teilt sich nicht am Doppelspalt! Es gibt nur 1 ganzes Elektron! Theorie dafür: Schrödinger.

Experiment Doppelspalt mit C_{60} -Molekülen (Fullerene, ^{60}C -Moleküle):

18.10.2011

M. Arndt, ... , A. Zeilinger - 1999

Fullerene: C_{60} - 60 Kohlenstoff-Atome (C^{12}) zu Molekül-Struktur

Durchmesser: $D = 1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$ (Durchmesser der äußersten Elektronenhülle)

Massenzahl: Daltonzahl: $60 \cdot 12 = 720 \text{ u}$

in Ofen erhitzt ($\approx 900 \text{ K}$) \rightarrow schießen aus Ofen mit $v_{\max} = 220 \text{ ms}^{-1}$

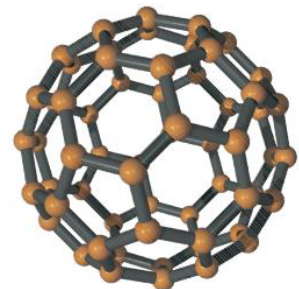


Abbildung I.11.: Fulleren

⁷ $\Psi_1^*\Psi_2 + \Psi_2^*\Psi_1 = \Psi_1^*\Psi_2 + (\Psi_1^*\Psi_2)^* = 2\operatorname{Re}\Psi_1^*\Psi_2$, da allgemein $z + z^* = 2\operatorname{Re} z$

deBroglie Wellenlänge: $\lambda_{deBroglie} = \frac{h}{mv} = 2,5 \text{ pm} = 2,5 \cdot 10^{-12} \text{ m}$ - Maß für Interferenzfähigkeit eines Objekts, Verhältnis $\frac{\lambda}{D} = \frac{1}{400}$
 Doppelspalt: SiN-Struktur, $d = 50 \text{ nm}$ breit, 100 nm Periode

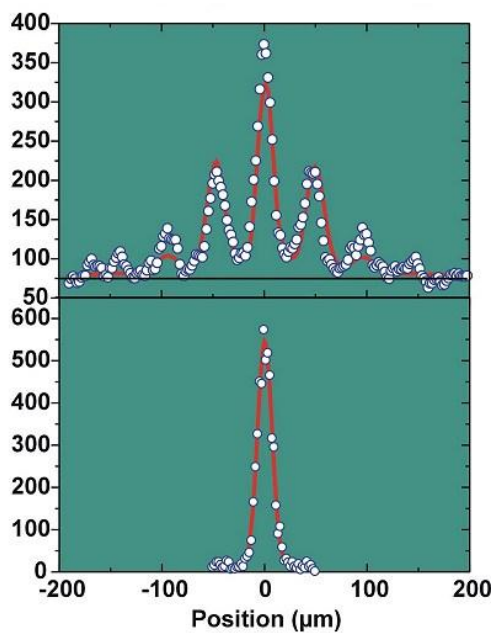


Abbildung I.12.: Verteilung der Fullere
 ne mit und ohne
 Gitter

Beugungswinkel: $\theta = \frac{\lambda_{deBroglie}}{d} = 5 \text{ Bogen}$
 \Rightarrow gute Kollimation (Einengung des Strahls) nötig
 \Rightarrow geringe Intensität wichtig (wichtig für einzelne Ereignisse, Effekt ist nicht reiner 'Masseneffekt')
Kohärenzlänge $L_c = 4,2 \text{ pm} = 4,2 \cdot 10^{-12} \text{ m}$ Dedektion:
 Laser schleudert ein Elektron aus dem Fulleren heraus, wenn Fulleren durch Laser geht, dadurch wird das Fulleren geladen und kann dedektiert werden keine Weginformation!
 Fullere ne heiß \rightarrow Strahlung, Photon Wellenlänge $\lambda_{photon} \approx 5 - 20 \mu\text{m} \gg d = 50 \text{ nm}$
 \Rightarrow \nexists Weginfo \rightarrow Interferenz möglich
Resultat: Interferenzbild

II. Zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

II.1. Schrödinger-Gleichung - Wellenfunktion

Energie $E = \hbar \cdot \omega$ Frequenz

Impuls $p = \hbar k$ Wellenzahl

suchen DGL., die Wellenverhalten hat und die Physik richtig wiedergibt

betrachten ebene Welle (ist Idealisierung, eigentlich Summe über alle möglichen Wellenzahlen, mit 'Gewicht' $\tilde{\psi}(k)$ - Fourier-Integral, Fourier-Transformation)

Idealisierung	eigentlich (Superposition)
$\psi(x,t) = e^{i(kx-\omega t)}$	$\psi_P(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} \tilde{\psi}(k) e^{i(kx-\omega t)}$
$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) = \underbrace{\hbar\omega}_E \psi(x,t) \stackrel{QT}{=} E \psi(x,t)$	$\rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} \tilde{\psi}(k) \underbrace{\hbar\omega}_E e^{i(kx-\omega t)}$
$-i\hbar \nabla \psi(x,t) = \underbrace{\hbar k}_p \psi(x,t) \stackrel{QT}{=} p \psi(x,t)$	$\rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} \tilde{\psi}(k) \underbrace{\hbar k}_p e^{i(kx-\omega t)}$
$-\hbar^2 \Delta \psi(x,t) = \underbrace{(\hbar k)^2}_{p^2} \psi(x,t) \stackrel{QT}{=} p^2 \psi(x,t)$	$\rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} \tilde{\psi}(k) \underbrace{(\hbar k)^2}_{p^2} e^{i(kx-\omega t)}$

nichtrelativistische Energie-Impuls-Beziehung;

$$\underbrace{E}_{\text{Gesamtenergie}} = \underbrace{\frac{p^2}{2m}}_{\text{kin.Energie}} + \underbrace{V(x)}_{\text{pot.Energie}}$$

mal $\psi(x,t)$ - benütze Zusammenhang:

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

Schrödinger-Gleichung, 1926 (Nobelpreis 1933)

Lösung $\psi(x,t)$ Wellenfunktion

$\int |\psi(x,t)|^2 dx \dots$ Aufenthaltswahrscheinlichkeit (Wahrscheinlichkeit, Teilchen im Bereich zwischen x und $x+dx$ zu finden) - Wahrscheinlichkeitsinterpretation von M. Born

19.10.2011

Andere Schreibweise (3-dimensional - wir betrachten nur 1-dimensionalen Fall):

$$H\psi(\vec{x},t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x},t) \quad \text{zeitabhängig} \quad (\text{II.1})$$

wobe der Hamilton-Operator $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x) \rightarrow E$ Energie

mit Wahrscheinlichkeitsinterpretation von M. Born: $\int |\psi(\vec{x}, t)|^2 d^3x \dots$ Wahrscheinlichkeit das Teilchen zur Zeit t zwischen \vec{x} und $\vec{x} + d^3x$ zu finden

z.B. Wellenfunktion:

bei A ... wahrscheinlichster Wert

bei B ... $W=0$, Teilchen dort nicht auffindbar

Normierung der Wellenfunktion:

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x, t)|^2 = 1} \quad (\text{II.2})$$

\Rightarrow Wellenfkt hat Abfall im Unendlichen

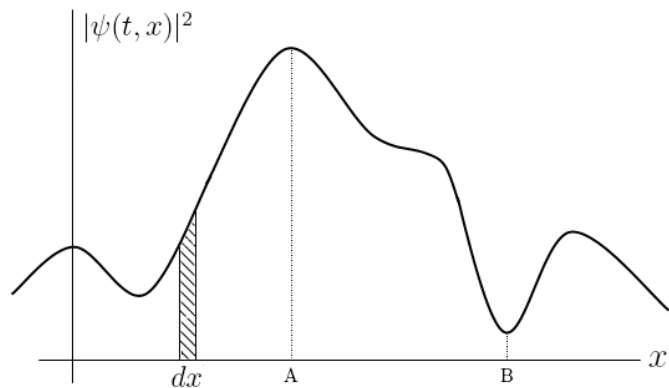


Abbildung II.1.: Beispiel einer Wellenfunktion

Bemerkung:

Wegen der statistischen Interpretation der Wellenfunktion (M. Born) gibt es eine prinzipielle Unbestimmtheit (bei einer einzigen Messung nicht möglich vorauszusagen, welches Ereignis eintreten wird).

Resumé:

Die Schrödingergleichung ist eine Differentialgleichung...

1. ... 1. Ordnung in der Zeit t , $\psi(x, t)$ ist durch Anfangswert $t = t_0$ gegeben (physikalisch wünschenswert).
2. ... linear in ψ - damit gilt das Superpositionsprinzip (auch wünschenswert), also wenn z.B. ψ_1, ψ_2 Lösungen $\Rightarrow \psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2$ auch Lösung.
3. ..., die homogen ist, \Rightarrow die Normierung gilt für alle t !

II.2. Quantenmechanische Korrespondenz

ebene Welle: $\psi = e^{i(kx - \omega t)}$

$$\Rightarrow \underbrace{i\hbar \frac{\partial}{\partial t}} \psi = \hbar \omega \psi = \underline{E} \psi$$

$$\underbrace{-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}} \psi = \hbar k \psi = \underline{p} \psi$$

ordnen den physikalischen Größen Energie und Impuls Operatoren zu: Quantenmechan. Korrespondenz

$$\text{Energie } E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

$$\text{Impuls } p \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\vec{p} \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{x}} = -i\hbar \vec{\nabla}$$

Klassische Physik:

$$\underbrace{E}_{\text{Gesamtenergie}} = \underbrace{\frac{p^2}{2m}}_{\text{kinetische E.}} + \underbrace{V(x)}_{\text{potentielle E.}} = \underbrace{H(x)}_{\text{Hamilton-Funktion}}$$

Übergang zur Quantenmechanik:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x,t) = \left(\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta}_{\triangleq \text{kin. E.}} + \underbrace{V(\mathbb{X})}_{\triangleq \text{pot. E.}} \right) \psi(x,t)$$

Ortsoperator: $\mathbb{X}\psi(x) = x\psi(x)$

Hamilton-Operator: $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x)$, damit hat die Schrödinger-Gleichung die Form:

$$H\psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) \quad (\text{II.3})$$

II.3. Kontinuitätsgleichung

gehen von Schrödinger-Gleichung aus ($i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H\psi$)

komplex konjugierte Gleichung ($H^* = H$, weil wir annehmen dass H immer hermitisch, ist): $-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^* = H\psi^*$

Wahrscheinlichkeitsdichte:

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

differenzieren nach t:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = \psi^* \dot{\psi} + \dot{\psi}^* \psi = (-) \frac{1}{i\hbar} [(H\psi^*)\psi - \psi^* H\psi] = \frac{\hbar}{2mi} [(\Delta\psi^*)\psi - \psi^* \Delta\psi]$$

definieren Wahrscheinlichkeitsstrom:

$$\vec{j}(\vec{x},t) = \frac{\hbar}{2mi} [\psi^* \vec{\nabla} \psi - (\vec{\nabla} \psi^*) \psi]$$

$$\Rightarrow \frac{\partial \rho(\vec{x},t)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{x},t) = 0 \quad (\text{II.4})$$

Kontinuitätsgleichung, \Rightarrow Erhaltungssatz $\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} d^3x |\psi(\vec{x}, t)|^2 = 1 \quad \forall t}$! (Folgt aus Kontinuitätsgleichung durch Integrieren mithilfe des Gauss'schen Integralsatzes: $\int_V d^3x \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = \int_{\partial V} d\vec{f} \cdot \vec{j}$)

II.4. Observable

20.10.2011

2 Konzepte:

1. Zustand eines Systems
repräsentiert durch Wellenfunktion $\psi(x, t)$
2. Observablen
physikalische Größen, die wir messen: Ort, Impuls, Energie, ...
repräsentiert durch Operatoren - hermitisch

QT verbindet beide Konzepte: Zustand \leftrightarrow Observable \Rightarrow Messwert, Erwartungswert

Operatoren:

Lineare Operatoren A: $A\psi_1 = \phi_1$ ($\psi(x) \in \mathbb{L}_2 \Rightarrow \int dx \psi^*(x)\psi(x) < \infty$) $\Rightarrow A(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\phi_1 + c_2\phi_2$ $c_{1,2} \in \mathbb{C}$

Beispiele: $\vec{\nabla}, \Delta, \frac{\partial}{\partial t}, \mathbf{1} \cdot \psi = \psi, \mathbf{0} \cdot \psi = \mathbf{0}$

es gilt $\mathbf{1} \cdot A = A \cdot \mathbf{1}$, aber: $A \cdot B \neq B \cdot A, (A \cdot B) \cdot \psi \neq (B \cdot A) \cdot \psi$

Definition Skalarprodukt von Wellenfunktionen: $\underbrace{\langle \phi | \psi \rangle}_{\text{Dirac-Notation}} := \int dx \phi^*(x) \psi(x)$

$\langle \phi | \dots$ bra, duale vector $| \psi \rangle \dots$ ket, vector (alternative Notation: $(\phi | \psi)$)

Eigenschaften des Skalarprodukts:

- $\langle \phi | \psi \rangle^* = \langle \psi | \phi \rangle$
- $\langle \phi | c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 \rangle = c_1 \langle \phi | \psi_1 \rangle + c_2 \langle \phi | \psi_2 \rangle \dots$ linear in ket
- $\langle c_1 \phi_1 + c_2 \phi_2 | \psi \rangle = c_1^* \langle \phi_1 | \psi \rangle + c_2^* \langle \phi_2 | \psi \rangle \dots$ antilinear in bra
- $\langle \psi | \psi \rangle \geq 0$
- $\langle \psi | \psi \rangle = 0 \Leftrightarrow \psi = 0$

Operator im Skalarprodukt:

- $\langle \phi | A \psi \rangle = \int dx \phi^*(x) A \psi(x)$

Definition Adjungierter Operator: a^\dagger heißt zu A adjungierter Operator, wenn

$$\langle a^\dagger \phi | \psi \rangle = \langle \phi | A \psi \rangle, \text{ das heißt } \int dx (a^\dagger \phi)^*(x) \psi(x) = \int dx \phi^*(x) A \psi(x)$$

also $a^\dagger = (A^T)^*$

dann gilt: $(A \cdot B)^\dagger = B^\dagger \cdot A^\dagger$!

Definition hermitisch, selbstadjungiert: Ein Operator A heißt hermitisch, wenn $a^\dagger = A$, $D(a^\dagger) \supset D(A)$, und selbstadjungiert, wenn $a^\dagger = A$, $D(a^\dagger) = D(A)$
 \Rightarrow Eigenwerte (\Rightarrow Messwerte) reell!

Beispiele:

1. $\mathbb{X} \psi(x) = x \psi(x) \dots$ Ortsoperator
2. $\mathbb{P} \psi(x) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) \dots$ Impulsoperator
3. $H \psi(x) = (-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x)) \psi(x) \dots$ Hamilton-Operator (Energie)

II.5. Erwartungswerte von Observablen

Definition: Ein Zustand in der QM wird durch einen Vektor $|\psi\rangle$ im komplexwertigen Vektorraum mit skalarem Produkt (Hilbertraum) beschrieben.

Definition: Eine Observable in der QM wird durch einen hermiteschen Operator beschrieben.

Definition: Der Erwartungswert von Observablen A im Zustand $|\psi\rangle$:

$$\langle A \rangle = \frac{\langle \psi | A | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

$\langle \psi | \psi \rangle = ||\psi||^2$ Norm ($\langle \psi | \psi \rangle = \int dx |\psi|^2 = 1$)

$\langle \psi | A | \psi \rangle = \langle \psi | A \psi \rangle = \int dx \psi^*(x) A \psi(x)$ ist auch Mittelwert - physikalische Bedeutung!

Beispiele:

1. Erwartungswert der potentiellen Energie $V(x)$

$$\langle V(\mathbb{X}) \rangle = \langle \psi | V(\mathbb{X}) | \psi \rangle = \langle \psi | V(x) | \psi \rangle = \int dx \psi^*(x) V(x) \psi(x) = \boxed{\int_{-\infty}^{\infty} dx V(x) |\psi(x)|^2}$$

klassische Formel für den Erwartungswert von $V(x)$ - Summe über alle möglichen $V(x)$ -Werte, gewichtet mit der Wahrscheinlichkeit $|\psi(x)|^2$

2. Erwartungswert des Impulses p

$$\langle \mathbb{P} \rangle = \langle \psi | \mathbb{P} | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x) (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) \psi(x) = \boxed{\int_{-\infty}^{\infty} dp p |\tilde{\psi}(p)|^2}$$

(2. Schritt: erinnern an Fourier-Transformation: $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \tilde{\psi}(p) e^{\frac{i}{\hbar} px}$ weil $\mathbb{P} \tilde{\psi}(p) = p \tilde{\psi}(p)$, $\hbar k = p$, $\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} px}$)
 $|\tilde{\psi}(p)|^2 \dots$ Wahrscheinlichkeitsdichte für Impuls, $\langle \mathbb{P} \rangle$ entspricht der Mittelwertbildung in der Experimentalphysik

Unschärfe von Observablen

25.10.2011

Definition: folgender Operator: $\bar{A} = A - \langle A \rangle$

Mittelwert von \bar{A}^2 :

$$\langle \bar{A}^2 \rangle = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 - 2A\langle A \rangle + \langle A \rangle^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 =: (\Delta A)^2$$

Schwankung, Unschärfe, Dispersion:

$$\Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2} \quad (\text{II.5})$$

es kann sein, dass $\langle A \rangle = 0 \Rightarrow \Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle} \neq 0$

z.B. Ortsoperator \mathbb{X} für gaußartige Wellenfunktion ($\psi(x) = N e^{-ax^2}$)
 $\langle \mathbb{X} \rangle = 0$, $\langle \mathbb{X}^2 \rangle \neq 0$

Frage: Hat eine physikalische Observable einen scharfen Wert? Antwort: Ja.

Satz: Die Unschärfe ΔA einer Observablen A im Zustand $|\psi\rangle$ verschwindet, wenn $|\psi\rangle$ Eigenvektor von A ist.

Beweis: da $|\psi\rangle$ Eigenvektor von A ist gilt: $A|\psi\rangle = \underbrace{a}_{\text{Eigenwert}} \underbrace{|\psi\rangle}_{\text{Eigenvektor}} \quad a \in \mathbb{R}$

$$\langle A^2 \rangle = \langle \psi | A A | \psi \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle^2 = a^2 \quad \langle A \rangle^2 = \langle \psi | A | \psi \rangle^2 = \langle \psi | a | \psi \rangle^2 = (a \underbrace{\langle \psi | \psi \rangle}_{=1})^2 = a^2$$

$$\Rightarrow \Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2} = \sqrt{a^2 - a^2} = 0$$

II.6. Kommutator von Operatoren

$$A \cdot \underbrace{B|\psi\rangle}_{|\varphi\rangle} = A|\varphi\rangle = |\chi\rangle$$

$$B \cdot A|\psi\rangle = B|\eta\rangle = |\xi\rangle$$

im Speziellen: \mathbb{X}, \mathbb{P}

$$\begin{aligned} \mathbb{P}\mathbb{X}\psi(x) &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \cdot (x\psi(x)) = -i\hbar(\psi(x) + x\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)) = -i\hbar\psi(x) + \mathbb{X}\mathbb{P}\psi(x) \\ \parallel (\mathbb{X} \cdot \mathbb{P} - \mathbb{P} \cdot \mathbb{X})\psi(x) &= i\hbar\psi(x) \quad \parallel \forall \psi(x) \\ \Rightarrow \boxed{\mathbb{X} \cdot \mathbb{P} - \mathbb{P} \cdot \mathbb{X} = i\hbar} &- \text{Operator-Relation} \end{aligned}$$

Definition: Kommutator:

$$\boxed{[A, B] = A \cdot B - B \cdot A}$$

\Rightarrow Kommutator für \mathbb{X} und \mathbb{P} : $\boxed{[\mathbb{X}, \mathbb{P}] = i\hbar}$

3 Dimensionen: $\boxed{[\mathbb{X}_i, \mathbb{P}_j] = i\hbar\delta_{ij}}$

Eigenschaften des Kommutators:

1. $[A, B] = -[B, A]$ - antisymmetrisch
2. $[A, B]$ ist linear in A und B
3. $[A, B]^+ = [B^+, A^\dagger]$ Kommutator von hermiteschen Operatoren ist antihermitisch
4. $[A, B \cdot C] = B[A, C] + [A, B]C$
5. $[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0$ - Jacobi-Identität
6. $e^A B e^{-A} = B + [A, B] + \frac{1}{2!}[A, [A, B]] + \dots$ - Baker-Hausdorff-Formel

II.7. Unschärfe-Relation

Die Unschärfe ist ein Maß für die Quantenmechanische Standardabweichung in den Resultaten von wiederholten Messungen von identisch präparierten Systemen.

1. Unschärferelation zwischen Observablen:

Operator $\bar{A} = A - \langle A \rangle \Rightarrow \langle \bar{A}^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 = (\Delta A)^2$

Theorem: Seien A und B zwei Observablen, dann gilt für jeden Zustand folgende Ungleichung:

$$\boxed{\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle|} \quad (\text{II.6})$$

Beweis: definieren Operator $Z = \frac{\bar{A}}{\Delta A} + i \frac{\bar{B}}{\Delta B}$ (nicht hermitisch)

es gilt: $\langle Z\psi | Z\psi \rangle = \langle \psi | Z^\dagger Z | \psi \rangle \geq 0$ (Länge zum Quadrat)

$$\Rightarrow \langle \psi | \left(\frac{\bar{A}}{\Delta A} - i \frac{\bar{B}}{\Delta B} \right) \cdot \left(\frac{\bar{A}}{\Delta A} + i \frac{\bar{B}}{\Delta B} \right) | \psi \rangle \geq 0$$

$$\langle \psi | \underbrace{\frac{\bar{A}^2}{(\Delta A)^2}}_1 + \underbrace{\frac{i}{\Delta A \Delta B} (\bar{A}\bar{B} - \bar{B}\bar{A})}_1 + \underbrace{\frac{\bar{B}^2}{(\Delta B)^2}}_1 | \psi \rangle \geq 0$$

$$\Rightarrow 2\Delta A \Delta B \geq -i \langle [A, B] \rangle \quad \Rightarrow \Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle|$$

Satz: Wann immer der Kommutator von zwei Observablen A und B nicht verschwindet, gibt es eine Unschärfe oder eine Unschärferelation zwischen den Observablen.

Observablen - komplementär

$$\text{Bsp.: } \mathbb{X}, \mathbb{P} \Rightarrow [\mathbb{X}, \mathbb{P}] = i\hbar \Rightarrow \Delta\mathbb{X} \cdot \Delta\mathbb{P} \geq \frac{\hbar}{2}$$

Bemerkung: Heisenberg-Mikroskop ist eine andere logische Argumentation.

Bemerkung: Zustände ψ , für die die Unschärferelation minimal ist ($\Delta\mathbb{X} \cdot \Delta\mathbb{P} = \frac{\hbar}{2}$) heißen Zustände minimaler Unschärfe, z.B. Gauss-Wellenpaket (harmonischer Oszillator). $\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$ $\langle\mathbb{X}\rangle = \langle\mathbb{P}\rangle = 0$ $\langle\mathbb{X}^2\rangle, \langle\mathbb{P}^2\rangle \neq 0$

2. Energie-Zeit-Unschärferelation

27.10.2011

Physikalische Größen: $\mathbb{X}, \mathbb{P}, H \dots$ Ort, Impuls, Energie

Die Zeit selbst ist keine dynamische Größe in der nichtrelativistischen QM. Ihr wird kein Operator zugeordnet. Die Zeit ist unabhängige Variable, Parameter der Theorie. Die Zeit ist keine Observable.

Δt ist das Zeitintervall, in dem es eine substanzielle Änderung des Systems gibt. Als Maß für die Änderung betrachten wir den Erwartungswert eines Systems \rightarrow zeitliche Ableitung (Änderung) vom EW einer Observablen.

$$\frac{d}{dt}\langle A \rangle = \frac{d}{dt}\langle \psi | A | \psi \rangle = \underbrace{\left\langle \frac{\partial}{\partial t} \psi | A | \psi \right\rangle}_{\langle H \psi | \frac{i}{\hbar}} + \langle \psi | \frac{\partial}{\partial t} A | \psi \rangle + \underbrace{\langle \psi | A | \frac{\partial}{\partial t} \psi \rangle}_{-\frac{i}{\hbar} \langle H \psi |}$$

\Rightarrow (H wird hinter Bra bzw. vor Ket gezogen, erster und dritter Summand sind Kommutator) Relation zwischen Erwartungswerten:

$$\frac{d}{dt}\langle A \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle \psi | [H, A] | \psi \rangle + \langle \psi | \frac{\partial}{\partial t} A | \psi \rangle \quad (\text{II.7})$$

Resultat: zeitliche Änderung des Erwartungswertes wird durch Kommutator mit dem Hamilton-Operator bestimmt.

$$\text{Typischer Fall: } \frac{\partial}{\partial t} A = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dt}\langle A \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H, A] \rangle$$

Wenn $[H, A] = 0$ (A kommutiert mit H) \Rightarrow $\langle A \rangle = \text{const.}$, zugehörige Observable ist Erhaltungsgröße.

erinnere Unschärferelation zwischen Operatoren: $\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle|$

sei jetzt $B = H$ (Hamilton-Operator) $\rightarrow \Delta H = \sqrt{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2} = \Delta E$

$$\Rightarrow \Delta E \cdot \Delta A \geq \frac{\hbar}{2} \left| \frac{d}{dt} \langle A \rangle \right|$$

Definition:

$$\Delta t := \frac{\Delta A}{\left| \frac{d}{dt} \langle A \rangle \right|} \Rightarrow \boxed{\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}} \quad (\text{II.8})$$

Energie-Zeit-Unschärferelation

Bedeutung von Δt : $\Delta A = \left| \frac{d}{dt} \langle A \rangle \right| \Delta t$ $\frac{\Delta A}{\Delta t} = \left| \frac{d}{dt} \langle A \rangle \right|$

Δt ist die Zeit, die verstreicht, wenn sich der Erwartungswert einer Observablen um eine Standardabweichung ΔA ändert. $\Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$

Beispiel: Wenn sich die Observable schnell ändert (Δt klein) $\Rightarrow \Delta E$ Energieunschärfe groß und vice versa.

Wenn eine Observable stabil ist (EW ändert sich nicht - $\frac{d}{dt} \langle A \rangle = 0 \Rightarrow \Delta t \rightarrow \infty$) - System ist stationär $\Rightarrow \Delta E = 0$, keine Energieunschärfe.

II.8. Ehrenfest-Theorem

Die klassische Physik ist als Grenzfall in der QM enthalten, in folgendem Sinn:

gehen aus von Theorem: Relation zwischen EW: $\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H, A] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle$

benötigen: $A = \vec{x}, \vec{p}$ $H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(x)$ (weil $\left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle = 0$ für $A = \vec{x}, \vec{p}$)

$$[H, x_i] = \left[\sum_j \frac{p_j^2}{2m}, x_i \right] = \frac{1}{2m} \sum_j (p_j [p_j, x_i] + [p_j, x_i] p_j) = \frac{1}{2m} (-i\hbar p_i - i\hbar p_i) = \boxed{-i\hbar \frac{p_i}{m} = [H, x_i]}$$

$$[H, p_i] = [V(\vec{x}), -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}] = \boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} V(\vec{x}) = [H, p_i]}$$

erinnern an klassische Kraft: $\vec{K}(\vec{x}) = -\vec{\nabla} V(\vec{x})$

für $A = \vec{x}, \vec{p}$ gilt: $\frac{d}{dt} \langle \vec{x} \rangle = \frac{1}{m} \langle \vec{p} \rangle$ bzw. $\frac{d}{dt} \langle \vec{p} \rangle = -\langle \vec{\nabla} V(\vec{x}) \rangle = \langle \vec{K}(\vec{x}) \rangle$

\Rightarrow Ehrenfest-Theorem (1927) aus Kombination und Ableiten der beiden Gleichungen:

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle \vec{x} \rangle = \langle \vec{K}(\vec{x}) \rangle \quad (\text{II.9})$$

Die klassischen Bewegungsgleichungen sind für die Mittelwerte der Messoperatoren erfüllt.

wir wollen haben: $\langle \vec{K}(\vec{x}) \rangle = \vec{K}(\langle \vec{x} \rangle)$ - gilt im Allgemeinen nicht, gilt aber:

1. für freie Bewegungen
2. für den harmonischen Oszillator
3. approximativ für lokalisierte Wellenpakete

Virial-Satz: $A = x \cdot p$ ('so was wie eine Wirkung')

$$[H, xp] = x \underbrace{[H, p]}_{i\hbar \frac{\partial}{\partial x} V} + \underbrace{[H, x]}_{-i\hbar \frac{p}{m}} p = \frac{\hbar}{i} (2T - x \frac{\partial}{\partial x} V)$$

($\frac{p^2}{2m} = T \dots$ kinetische Energie)

mit Relation der EW:

$$\boxed{\frac{d}{dt} \langle xp \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H, xp] \rangle = \langle 2T - x \frac{\partial}{\partial x} V \rangle} \quad \text{Wirkungsänderung im EW}$$

im stationären Zustand: $\frac{d}{dt} \langle xp \rangle = 0 \Rightarrow \boxed{2\langle T \rangle = \langle x \frac{\partial}{\partial x} V \rangle}$ (das ist der Virialsatz der klassischen Mechanik)

für den harmonischen Oszillator ($V = \frac{m\omega^2}{2} x^2$) erhält man $\langle T \rangle = \langle V \rangle$ (deswegen ist der harmonische Oszillator 'so harmonisch')

3.11.2011

Bemerkungen:

1. Generator für Raumtranslationen

Sei $\psi(x)$ eine Wellenfunktion (das heißt jede Funktion die in Taylorreihe entwickelbar ist), \Rightarrow **Lemma:**

$$\boxed{\psi(x + x_0) = e^{\frac{i}{\hbar} \mathbb{P} x_0} \psi(x)}$$

$$= (1 + \frac{i}{\hbar} \underbrace{\mathbb{P}}_{-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}} x_0 + \frac{1}{2!} (\frac{i}{\hbar})^2 \mathbb{P}^2 x_0^2 + \dots) \psi(x) = (1 + -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} x_0 + \frac{1}{2!} x_0^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \dots) \psi(x) = \psi(x + x_0)$$

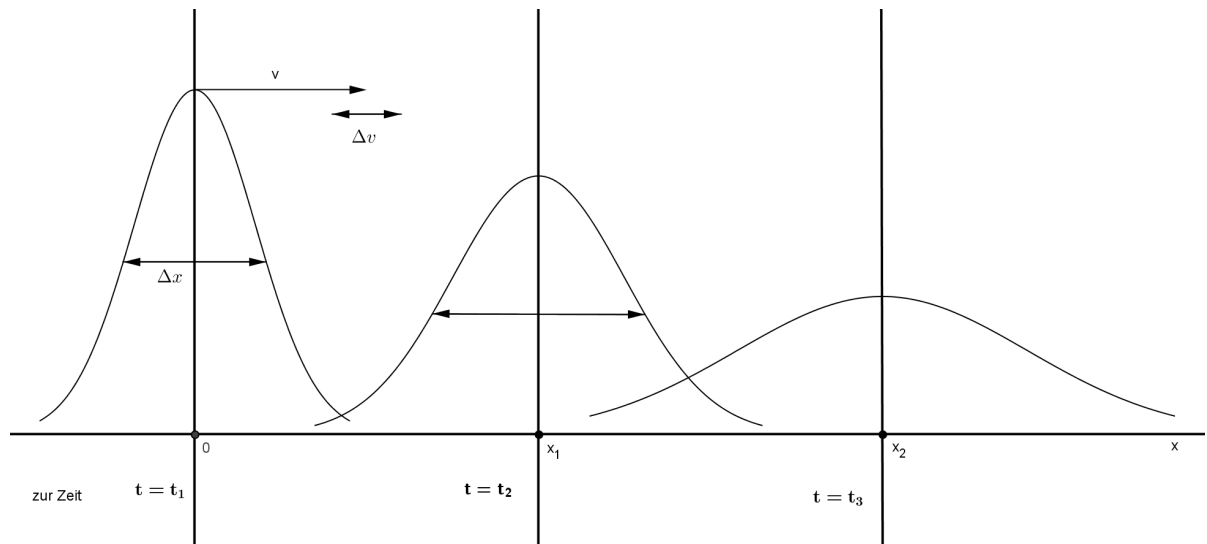
2. Generator für Zeittranslation

$\psi(x, t) \dots$ Lösung der Schrödinger-Gleichung ($i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = H \psi(x, t)$) \Rightarrow **Lemma:**

$$\boxed{\psi(x, t + t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} H t_0} \psi(x, t)}$$

3. Zerfließen des Wellenpakets

Wellenpaket bewegt sich entlang x mit Geschwindigkeit $v = \frac{x}{t}$ (Gruppengeschwindigkeit - entspricht Teilchengeschwindigkeit im Teilchenmodell).



wir wissen: Heisenberg-Unschärfe: $\exists \Delta x$ Ortsunschärfe $\Rightarrow \exists$ auch Δv Geschwindigkeitsunschärfe; für die Ortsunschärfe folgt dann: $\Delta x(t) = \Delta x(0) + t \cdot \Delta v$ - Anstieg der Ortsunschärfe in der Zeit! Das heißt das Wellenpaket zerfließt (verbreitert sich) und der Peak sinkt wegen Normierung der Wellenfunktion (Fläche muss gleich bleiben: $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$)

III. Mathematischer Formalismus der Quantenmechanik

Nur praktisch (einige benötigte Dinge), nicht systematisch.

III.1. Hilbertraum

Alle Objekte der QM sind Elemente vom Hilbertraum (HR). HR ist ein Vektorraum in \mathbb{C} , mit einem Skalarprodukt. HR kan endlichdimensional oder unendlichdimensional sein.

1. im endlichdimensionalen Fall gilt für das Skalarprodukt

$$x \cdot y \in \mathbb{C} \quad x, y \in HR \quad x = \sum_i x_i \underbrace{e_i}_{\text{Basis}}$$

$$x \cdot y = (y \cdot x)^* \quad x \cdot y = \sum_i x_i^* y_i$$

Norm: $\|x\| = \sqrt{x \cdot x} = \sqrt{\sum_i |x_i|^2}$

Operator: $Ax = y \quad y_i = A_{ik} x_k$

Operator, der Vektor aus HR in anderen Vektor aus HR überführt.

2. im unendlichdimensionalen Fall wird der Vektorraum zum Funktionenraum, Vektoren werden \mathbb{C} -wertige Funktionen, Skalarprodukt wird zum Integral über diese Funktionen, $x_i \rightarrow \psi_x = \psi(x)$.

Wichtig für QM:

$$\underbrace{\langle \varphi |}_{\text{dualer V}} \underbrace{ \rangle \psi}_{\text{Vektor}} = \int dx \varphi^*(x) \psi(x)$$

Eigenschaft:

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \langle \psi | \varphi^* \rangle$$

Norm:

$$\|\psi\| = \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle} = \sqrt{\int dx |\psi(x)|^2} < \infty$$

Raum der quadratisch integrierbaren Funktionen: L_2 .

Operator:

$$A|\psi\rangle = |\varphi\rangle \quad |\varphi\rangle \in HR$$

Satz: HR ist vollständiger Funktionenraum mit Skalarprodukt. (Ein Vektor im HR ist also in jede Basis VONS (vollständig orthonormiertes System) entwickelbar!)

Beispiel: Ebene Wellen $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx}$ VONS

$$|e_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx}$$

$$\langle e_{k'}|e_k\rangle = \delta(k' - k) \quad \text{Dirac-Funktion}$$

$$\rightarrow \frac{1}{2\pi} \int dk e^{i(k-k')x} = \delta(k' - k)$$

Wellenfunktion ist Vektor im HR, d.h. entwickelbar in ebene Wellen (diese bilden VONS).

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk \tilde{\psi}(k) e^{ikx}$$

III.2. Dirac-Notation

Vektor im HR: $|\psi\rangle \dots$ ket, adjungierter Vektor: $\langle\psi| \dots$ bra

Skalarprodukt: $\langle\phi|\psi\rangle = \int dx \phi^*(x) \psi(x) \in \mathbb{C} \dots$ bracket

Operator wirkt auf ket: $A|\psi\rangle = |\Psi\rangle \in HR$

$\langle\Psi| = \langle\psi|a^\dagger$ auf bra

zwei Operatoren: (hier anderes Ψ als vorher) $AB|\psi\rangle = |\Psi\rangle \Rightarrow \langle\Psi| = \langle\psi| \underbrace{B^\dagger a^\dagger}_{(AB)^\dagger}$

betrachten folgenden Zustand: $AB|\psi\rangle \underbrace{\langle\phi|C|\phi\rangle}_{\in \mathbb{C}} \in HR$ Man kann auch $|\psi\rangle\langle\phi|$ als Opera-

tor D ansehen. Adjungiert: $\langle\phi|C^\dagger \underbrace{|\phi\rangle\langle\psi|}_{D^\dagger} B^\dagger a^\dagger$.

Das heißt die Multiplikation $|\text{ket}\rangle \times \langle\text{bra}|$ (äußere Multiplikation) ergibt einen Operator: $|\psi\rangle\langle\phi| = D$, der adjungierte Operator ist dann: $D^\dagger = |\phi\rangle\langle\psi|$.

Es gilt: $|\psi\rangle\langle\phi|^\dagger = |\phi\rangle\langle\psi|$ (Multiplikation eines Spaltenvektors mit einem adjungierten Vektor (\rightarrow Spaltenvektor) gibt eine Matrix).

Achtung: $\langle\psi|\phi\rangle \in \mathbb{C}$, aber $|\psi\rangle\langle\phi| \in HR$ ist ein Operator, z.B. $|\psi\rangle\langle\psi|$ heißt *Dichtematrix* von oder *Projektionsoperator* auf Zustand Ψ .

9.11.2011

III.3. Projektionsoperatoren und Entwicklung von Zuständen im VONS

Wir untersuchen als nächstes die Entwicklung des Zustands $|\psi\rangle$ im VONS $\{|\psi_n\rangle\}$:

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle$$

wobei Entwicklungskoeffizient $c_n \dots$ Wahrscheinlichkeitsamplitude für Wahrscheinlichkeit, mit der Zustand $|\psi_n\rangle$ im Zustand $|\psi\rangle$ vorkommt

$$c_n = \langle\psi_n|\psi\rangle$$

$$\left(\langle \psi_m | \psi \rangle = \sum_n c_n \underbrace{\langle \psi_m | \psi_n \rangle}_{=\delta_{mn}} = c_m \right)$$

physikalisch: Übergangsamplitude vom Zustand ψ auf Zustand ψ_n , Wahrscheinlichkeitsamplitude

dann schreibbar als:

$$|\psi\rangle = \sum_n \underbrace{|\psi_n\rangle \langle \psi_n|}_{\text{Operator } P_n} |\psi\rangle$$

dann ist P_n ein Projektionsoperator:

$$P_n := |\psi_n\rangle \langle \psi_n|$$

(projektive Messung von Neumann)

da Operator P_n aus dem Zustand $|\psi\rangle$ den Anteil $|\psi_n\rangle$ herausprojiziert

$$P_n |\psi\rangle = |\psi_n\rangle \underbrace{\langle \psi_n | \psi \rangle}_{c_n} = c_n |\psi_n\rangle$$

$|c_n|^2 = |\langle \psi_n | \psi \rangle|^2 \dots$ Wahrscheinlichkeit, mit der Zustand $|\psi_n\rangle$ im Zustand $|\psi\rangle$ gefunden werden kann

es gilt:

$$P_n^2 = |\psi_n\rangle \underbrace{\langle \psi_n | \psi_n \rangle}_{=1} \langle \psi_n| = |\psi_n\rangle \langle \psi_n| = P_n$$

allgemein gilt: jeder Operator definiert durch $P^2 = P$ heißt Projektionsoperator

klarerweise gilt: $P^\dagger = P$

Projektionsoperatoren sind orthogonal

$$P_m \cdot P_n = 0 \quad \text{für } m \neq n$$

$$P_m \cdot P_n = |\psi_m\rangle \underbrace{\langle \psi_m | \psi_n \rangle}_{=0 \text{ für } m \neq n} \langle \psi_n| = 0 \quad (\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \delta_{mn})$$

\exists Orthogonalrelation, es gilt:

Satz: Die Summe aller Projektionsoperatoren ist vollständig

$$\sum_{n=1}^{\infty} P_n = \sum_{n=1}^{\infty} |\psi_n\rangle \langle \psi_n| = \mathbf{1} \quad \dots \text{ Vollständigkeitsrelation}$$

Der Satz folgt aus folgender Gleichung: $|\psi\rangle = \sum_n \underbrace{|\psi_n\rangle \langle \psi_n|}_{\Rightarrow \mathbf{1}} |\psi\rangle$

$|\psi_n\rangle$ ist der Zustand, der durch die Quantenzahl n charakterisiert wird

$$|\psi_n\rangle \rightarrow |n\rangle \quad \text{verkürzte Schreibweise}$$

Vollständigkeitsrelation für Zustand $\{|n\rangle\}$:

$$\sum_{n=1}^{\infty} |n\rangle \langle n| = \mathbf{1}$$

Beispiel Kugelflächen: $|Y_{lm}\rangle \rightarrow |lm\rangle$

\Rightarrow Vollständigkeitsrelation für Kugelflächen:

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l |lm\rangle \langle lm| = \mathbf{1}$$

IV. Zeitunabhängige Schrödingergleichung

IV.1. Herleitung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = H \psi(x, t)$$

beim Übergang $X \rightarrow x$ gilt auch (da außerdem $\frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m}$):

$$p \rightarrow -i\hbar \frac{d}{dx} \quad p^2 \rightarrow -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} \text{ bzw. } p^2 \rightarrow -\hbar^2 \Delta$$

$$\text{also: } H = \frac{p^2}{2m} + V(x, t) \rightarrow \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V(x, t)$$

Annahme $V(x, t) \equiv V(x) \dots$ Potential zeitunabhängig oder allgemein H zeitunabhängig

$$\text{Separationsansatz: } \psi(x, t) = \psi(x) f(t)$$

setzen in Schrödingergleichung ein:

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x) f(t) = H \psi(x) f(t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} f(t) + V(x) \psi(x) f(t)$$

$$\Rightarrow \text{einerseits: } i\hbar \psi(x) \frac{\partial}{\partial t} f(t) = -\frac{\hbar^2}{2m} f(t) \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + V(x) \psi(x) f(t)$$

$$\cdot \frac{1}{\psi(x)f(t)} \Rightarrow \text{andererseits: } \underbrace{i\hbar \frac{\frac{\partial f(t)}{\partial t}}{f(t)}}_{\text{nur von t abhängig}} = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2}}{\psi(x)} + V(x)}_{\text{nur von x abhängig}}$$

und da man hier statt ∂ auch d verwenden kann und außerdem aus $F(t) = F(x) \Rightarrow F = \text{const.}$ folgt, gilt:

$$i\hbar \frac{\frac{df(t)}{dt}}{f(t)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2}}{\psi(x)} + V(x) = \text{const.} = E$$

Aus einer Gleichung (Schrödingergleichung) haben wir als 2 Gleichungen erhalten:

$$\text{aus } i\hbar \dots = E \Rightarrow i\hbar \frac{df(t)}{dt} = f(t)E \Rightarrow \frac{df}{f} = -\frac{i}{\hbar} E dt \xrightarrow{\int} \ln f = -\frac{i}{\hbar} Et + \text{const} \Rightarrow f(t) = e^{-i\frac{Et}{\hbar} \cdot \text{const}}$$

$$\text{aus } -\frac{\hbar^2}{2m} \dots = E \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x) \psi(x) = E \psi(x) \Rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \psi(x) = E \psi(x)$$

Theorem: Zeitunabhängige Schrödingergleichung:

$$\boxed{H\psi(x) = E\psi(x)} \quad \text{mit} \quad H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

Definition: Ein Zustand wird 'stationär' genannt, falls seine Wellenfunktion durch $\psi(x) = e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$ dargestellt werden kann. Für solche Zustände ist die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(x,t)|^2 = \psi^*(x,t)\psi(x,t) = \psi^*(x)\psi(x) \underbrace{e^{+\frac{iEt}{\hbar}}e^{-\frac{iEt}{\hbar}}}_{=1} = |\psi(x)|^2$ auch unabhängig von der Zeit.

Die Erwartungswerte von Observablen $A(X,P)$ sind auch zeitunabhängig.

$$\langle A(X,P) \rangle = \int dx \psi^*(x) e^{i\frac{Et}{\hbar}} A(x, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) \psi(x) e^{-i\frac{Et}{\hbar}} = \int dx \psi^*(x) A(x, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) \psi(x)$$

Bemerkung 1: $\langle H(X,P) \rangle = \int dx \psi^*(x) H\psi(x) = E \underbrace{\int dx \psi^*(x) \psi(x)}_{<\infty} = 1$ (wenn normiert) \Rightarrow

Energieniveaus eines stationären physikalischen Systems sind zeitunabhängig!

Bemerkung 2: Falls die Wellenfunktionen normiert sind, sind die möglichen Werte einer Konstante E die Energien des Systems. \rightarrow verschiedene Energieniveaus ($E_0 =$ Grundzustand, $E_1 =$ nächster usw.) - falls normiert $\Rightarrow E \in \mathbb{R}$

Lemma - Eigenschaft: Die Lösungen $\psi(x)$ der zeitunabhängigen Schrödingergleichung können immer reell gewählt werden.

Definition: Der Paritätsoperator P ('Spiegelungsoperator' - bezüglich y-Achse) wirkt auf eine Funktion $f(x)$ so, dass das Vorzeichen des Arguments geändert wird:

$$Pf(x) = f(-x)$$

$$\begin{array}{ll} \underbrace{Pf_{\text{gerade}}}_{\text{z.B. } \cos} = +f_{\text{gerade}} & \underbrace{Pf_{\text{ungerade}}}_{\text{z.B. } \sin} = -f_{\text{ungerade}} \\ f_{\text{gerade}}(x) = \psi(x) + \psi(-x) & f_{\text{ungerade}}(x) = \psi(x) - \psi(-x) \end{array}$$

10.11.2011

IV.2. Die Schrödingergleichung als Eigenwertgleichung - stationäre Schrödingergleichung

$$\boxed{H|\psi\rangle = E|\psi\rangle}$$

Anmerkung: allgemeinere Form einer Eigenwertgleichung: $A|\psi\rangle = a|\psi\rangle$ wobei z.B. $A = \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ der Operator und a z.B. ± 1 der Eigenwert ist (die Eigenwerte von σ_z mit zugehörigen Eigenvektoren sind: 1 mit $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ und -1 mit $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$)

da die Schrödingergleichung als Eigenwertgleichung ein Spezialfall der stationären Schrödingergleichung ist, ist sie von der Zeit unabhängig

$$\langle H \rangle = \langle \psi | H | \psi \rangle = \langle \psi | E | \psi \rangle = E \underbrace{\langle \psi | \psi \rangle}_{=1} = E$$

E hat keine Unschärfe:

$$\Delta E = \Delta H = \sqrt{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2} = \sqrt{\underbrace{\langle \psi | H H | \psi \rangle}_{=E^2} - E^2} = 0$$

Theorem: (aus der linearen Algebra) Eigenwerte von hermiteschen Operatoren sind reell und die Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten sind zueinander orthogonal. (wir wollen reelle Eigenwerte \rightarrow deshalb verwenden wir hermitesche Operatoren)

Die Anzahl der Eigenwerte entspricht der Anzahl der Zustände \Rightarrow Spektrum

Vereinfachung der Schreibweise: $H|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle \xrightarrow{|\psi_n\rangle \equiv |n\rangle} H|n\rangle = E_n|n\rangle$

Kronecker-Delta: $\delta_{nm} = \langle n, m \rangle$

Vollständigkeitsrelation: $\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$ vollständige Beschreibung des Systems

IV.3. Entwicklung in stationäre Zustände

Unter Verwendung des Theorems auf S.35 können wir einen gegebenen Zustand in ein vollständiges orthonormales System von Energie-Eigenzuständen entwickeln. beliebiger Zustand durch $|\psi\rangle = \sum_n \langle n | \psi \rangle |n\rangle$ beschrieben

allgemeiner Lösungsweg:

$$|\psi\rangle = c_1 \begin{pmatrix} \vdots \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} \vdots \end{pmatrix} + \dots + c_n \begin{pmatrix} \vdots \end{pmatrix}$$

$$c_n = \langle n | \psi \rangle = \langle n | \underbrace{\int dx |x\rangle\langle x|}_{1 \rightarrow \text{kontinuierl. VONS}} |\psi\rangle = \int dx \underbrace{\langle n | x \rangle}_{\in \mathbb{C}} \underbrace{\langle x | \psi \rangle}_{\in \mathbb{C}} = \int dx \psi^*(x) \psi(x)$$

Beispiel:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = H \psi(x, t) \quad \text{mit der speziellen Lösung:}$$

$$\psi_n(x, t) = \psi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \quad (\text{gesamte Lösung für Schrödingergleichung})$$

allgemeine Lösung: 'Superposition'

$$\psi(x, t) = \sum_n c_n \psi_n(x, t) = \boxed{\sum_n c_n \psi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}}$$

wobei $c_n \dots$ Entwicklungskoeffizienten
betrachten $t = 0$: Skalarprodukt mit ψ_m

$$\int dx \psi_m(x) \psi(x, 0) = \int dx \psi_m(x) \sum_n c_n \psi_n(x) \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar} E_n \cdot 0}}_{=1}$$

$$\Rightarrow \langle \psi_m | \psi(x, 0) \rangle = \sum_n c_n \delta_{nm} \Rightarrow \boxed{c_n = \langle \psi_n | \psi(x, 0) \rangle}$$

das ist die Physikalische Interpretation der Entwicklungskoeffizienten

sei $A \dots$ Observable, die den Zustand $|\psi_n\rangle$ erzeugt: $A|\psi_n\rangle = a_n|\psi_n\rangle$
also ist der Erwartungswert $\langle A \rangle = \langle \psi_n | A | \psi_n \rangle = a_n$ genau der Eigenwert

- eine Messung der Observablen A produziert immer das Resultat a_n , falls der Zustand $|\psi_n\rangle$ war.

$$\Rightarrow \text{Unsicherheit} = 0, \boxed{\Delta A = 0}$$

- Weiters ändert sich nichts am Zustand $|\psi_n\rangle$ bei der Messung.

$$\boxed{|\psi_n\rangle \xrightarrow{A} |\psi_n\rangle}$$

- Was passiert falls das System in einem beliebigen Zustand $|\psi\rangle$ ist?

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle = \sum_m \underbrace{\langle c_m \psi_m |}_{{=c_m^* \langle \psi_m |}} A \sum_n |c_n \psi_n\rangle = \sum_m \sum_n c_m^* c_n \langle \psi_m | A | \psi_n \rangle =$$

$$= \sum_m \sum_n c_m^* c_n a_n \langle \psi_m | \psi_n \rangle = \sum_m \sum_n c_m^* c_n a_n \delta_{mn} = \boxed{\sum_n |c_n|^2 a_n}$$

$\Rightarrow c_n$ sind Wahrscheinlichkeitsamplituden um aus dem allgemeinen Zustand $|\psi\rangle$ in den Eigenzustand $|\psi_n\rangle$ zu kommen.

$\Rightarrow |c_n|^2$ ist die Wahrscheinlichkeit des Übergangs von $|\psi\rangle$ in $|\psi_n\rangle$ bzw. die Wahrscheinlichkeit, mit der man den Messwert a_n findet.

$$\Rightarrow \text{Gesamtwahrscheinlichkeit: } \boxed{\sum_n |c_n|^2 = 1}$$

Damit gilt im Allgemeinen: Die Messung einer Observablen A eines Systems im Zustand $|\psi\rangle$ ändert diesen Zustand in einen Eigenzustand $|\psi_n\rangle$ der Observable. Dies nennt man auch Reduktion oder Kollaps der Wellenfunktion.

IV.4. Endlicher Potentialtopf

gehen aus von Schrödinger-Gleichung:

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

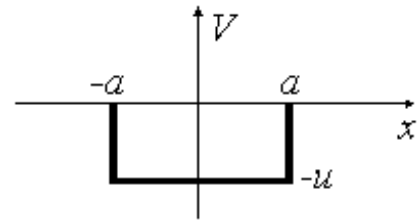
wählen Potential: $V(x) = -u = -V_0$ falls $-a = -L \leq x \leq L = a$,

sonst $V(x) = 0$

studieren Fall: $-V_0 \leq E \leq 0$

\Rightarrow Bindungszustände des Teilchens im Potential

Gebiet I: $(-\infty, -a]$



$$\frac{d^2}{dx^2} \psi = \kappa^2 \psi \quad \kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{-2mE} \in \mathbb{R}, \geq 0$$

$$\psi(x) = A e^{-\kappa x} + B e^{\kappa x}$$

Wegen der Normierung gilt: $A e^{-\kappa x} = 0$

$$\Rightarrow \boxed{\psi(x) = B e^{\kappa x}}$$

Gebiet II: $[-a, a]$

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi = -q^2 \psi \quad q = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E + V_0)} \in \mathbb{R}, \geq 0$$

(weil E nie negativer ist als V_0)

$$\psi(x) = e^{\pm i q x}$$

$$\boxed{\psi(x) = C \cos(qx) + D \sin(qx)}$$

Gebiet III: $[a, \infty)$, wie I

$$\psi(x) = E e^{\kappa x} + F e^{-\kappa x}$$

$E e^{\kappa x} = 0$ aus physikalischen Gründen

$$\Rightarrow \boxed{\psi(x) = F e^{-\kappa x}}$$

trennen gerade und ungerade Lösungen:

gerade Lösungen:

$$\psi^{(+)}(x) = \begin{cases} B e^{\kappa x} & (I) \\ C \cos(qx) & (II) \\ B e^{-\kappa x} & (III) \end{cases}$$

Konstante bei (III) ist B wegen der Stetigkeit von $\psi(x)$ und $\psi'(x)$ (siehe Skizze), die wir verlangen (physikalisch sinnvoll)

ungerade Lösung:

$$\psi^{(-)}(x) = \begin{cases} Be^{\kappa x} & (I) \\ D \sin(qx) & (II) \\ -Be^{-\kappa x} & (III) \end{cases}$$

In den Bereichen (I) und (III) gibt es eine Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens (klassisch: verboten!) \Rightarrow Tunneleffekt

(es gibt eine bestimmte Eindringtiefe, die beim Grundzustand am tiefsten ist)

Es gibt diskrete Energiewerte

$\psi(x)$ und $\psi'(x)$ sind stetig bei $x = L$, also muss gelten:

$$\frac{\psi'(L)}{\psi(L)} = \underbrace{\frac{-Cq \sin(qL)}{C \cos(qL)}}_{(II)} = \underbrace{\frac{-B\kappa e^{-\kappa L}}{Be^{-\kappa L}}}_{(III)}$$

$$\Rightarrow \boxed{q \tan(qL) = \kappa}$$

\Rightarrow Gleichung bestimmt Werte von E , weil $q = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E + V_0)}$

$$\kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{-2mE}$$

graphische Lösung:

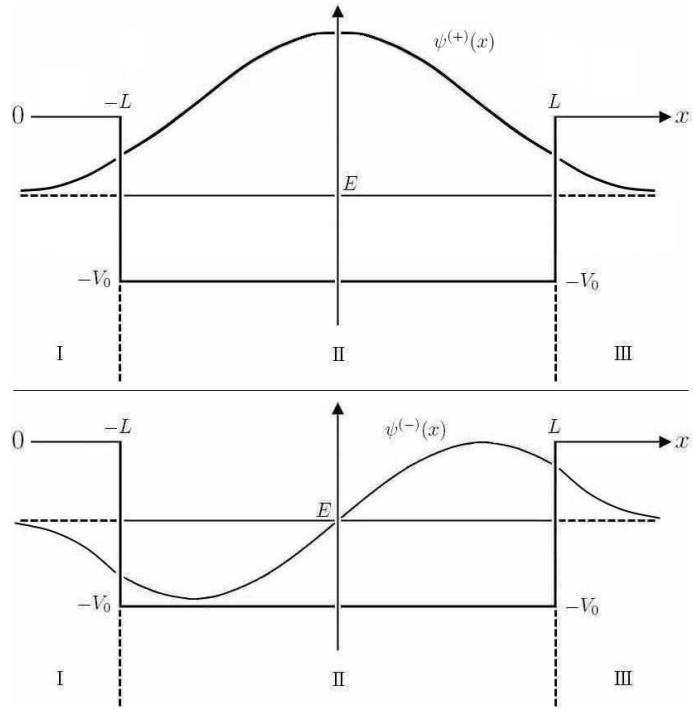
Def: $z = qL$ $z_0 = \frac{L}{\hbar} \sqrt{2mV_0}$

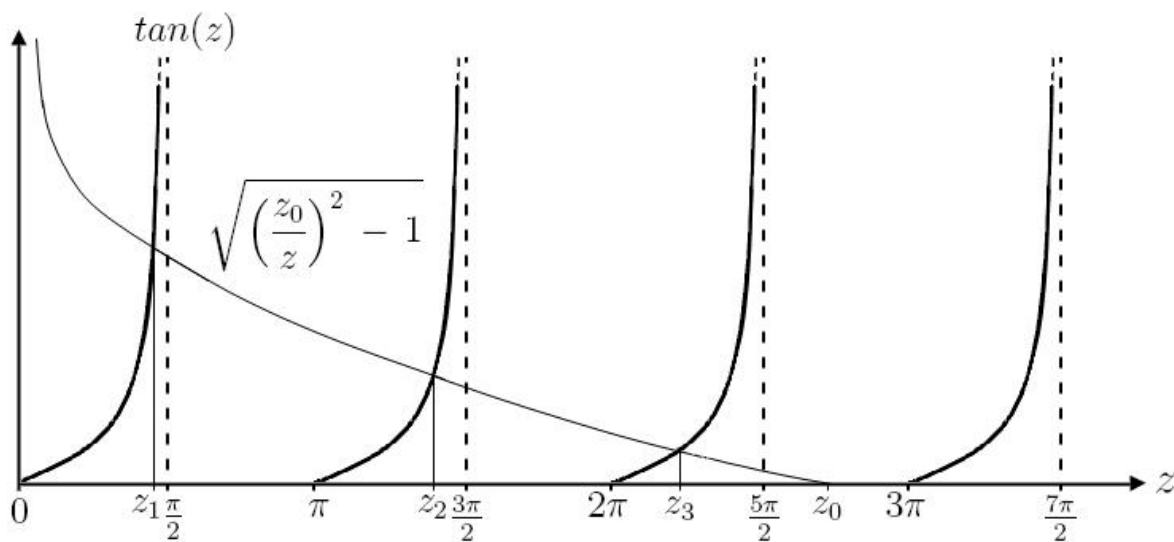
$$\kappa^2 + q^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} = \frac{z_0^2}{L^2}$$

$$\frac{\kappa^2 L^2}{q^2 L^2} = \frac{z_0^2 - z^2}{z^2}$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{\kappa}{q} = \sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1}}$$

$$\boxed{\tan(z) = \sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1}}$$





$z_0 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mV_0} = 8$ (durch Wahl von V_0) \Rightarrow 3 Lösungen: $z_1, z_2, z_3 \Rightarrow E_1, E_2, E_3$ diskrete Werte für Energie

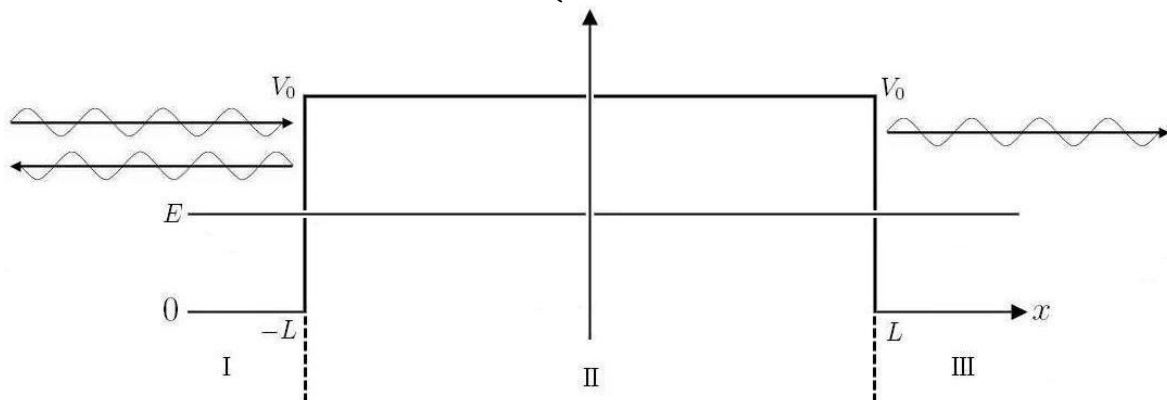
Geht man mit dem Potentialtopf tiefer, so wird z_0 größer werden, dann gibt es mehr Zustände. Also es gibt weitere Energieniveaus (diskrete Zustände).

Geht man mit dem Potentialtopf hinauf, so werden es immer weniger Zustände, aber der letzte Zustand verschwindet nie.

16.11.2011

IV.5. Tunneleffekt

betrachten folgendes Potential: $V(x) = \begin{cases} V_0 & -L \leq x \leq L \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (V_0 > 0)$



wir nehmen an: $E < V_0$: Teilchen incoming

klassisch: einlaufend, wird reflektiert

QM - Schrödinger-Gleichung: $H\psi = E\psi \quad \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \psi(x) = E\psi(x)$

Lösungen $\psi(x)$:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & (I) \\ Ce^{-qx} + \underbrace{De^{qx}}_{0 \text{ aus physikalischen Gründen}} & (II) \\ Fe^{ikx} + \underbrace{Ge^{-ikx}}_{0 \text{ aus physikalischen Gründen}} & (III) \end{cases}$$

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} > 0 \quad q = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} > 0$$

$D = 0$ für genügend großes L und $G = 0$ weil keine Reflexion im Unendlichen stattfindet.

Im Gebiet I: einlaufende Welle und reflektierte Welle, wie klassisch

Im Gebiet II: $\psi(II) \neq 0$ (exponentieller Abfall), das ist klassisch unmöglich

Im Gebiet III: $\psi(III) \neq 0$, klassisch unmöglich, auslaufende Welle mit gleicher Frequenz (Energie) aber geringerer Intensität

dann ist Transmissionswahrscheinlichkeit (Wahrscheinlichkeit, dass Teilchen 'durchtunnelt'):

$$|\psi(L)| = |C|^2 e^{-\frac{4L}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

Transmissionskoeffizient:

$$T(E) = |\psi(L)|_{\text{normiert}}^2 = e^{-\frac{4L}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

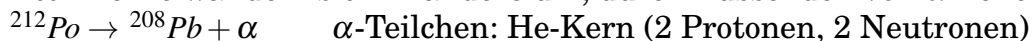
für Potentialberg (verlaufende Kurve, Form ähnlich wie Gaußkurve) von x_1 bis x_2 kann man mit Stufen approximieren:

$$T(E) = e^{-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} dx^2 \sqrt{2m(V(x) - E)}} \quad \text{Gamow-Faktor}$$

Physikalische Beispiele:

1. α -Zerfall in Kernphysik (Gamow 1928) (Abb. IV.1 - S. 42)

Atomkerne wandeln sich in andere um, durch Aussenden von α -Teilchen:



Lebensdauer $\tau = 3 \cdot 10^{-7}$ s, Energie $E_\alpha = 8,9$ MeV

2. Potentialmodell für Elektron im Metall (Abb. IV.2 - S. 42)

im Metall sind quasi freie Elektronen, Potentialtopf ist gute Näherung

oberstes besetztes Energieniveau wird Fermienergie (Fermienergie) genannt

$W = V_0 - E_n = V_0 - E_F$ (bei absolutem Nullpunkt)

3. Kalte Emission von Elektronen aus dem Metall (Abb. IV.3 - S. 43)

Elektronenemission bei Anlegen von elektrischem Feld am Metall, dadurch verändert sich das Potential und die Elektronen tunnelt durch

Kraft des elektrischen Feldes: $eE = F = -\frac{d}{dx}V(x) \Rightarrow V(x) = V_0 - eEx$

($E \dots$ elektrische Feldstärke)

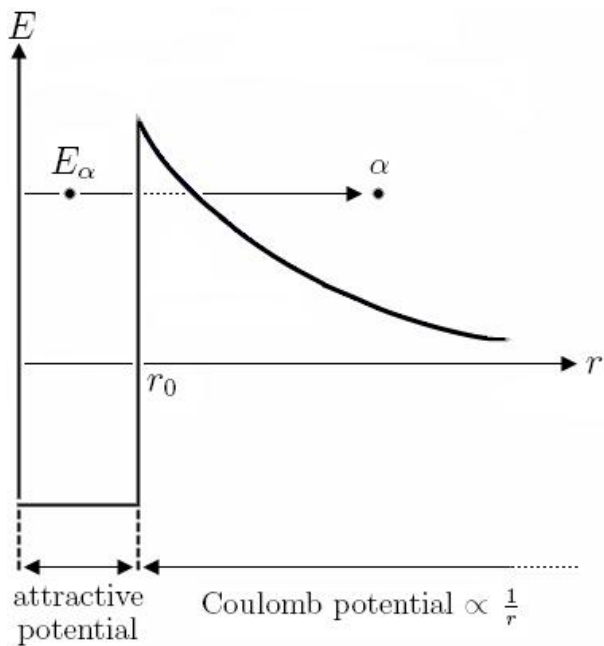
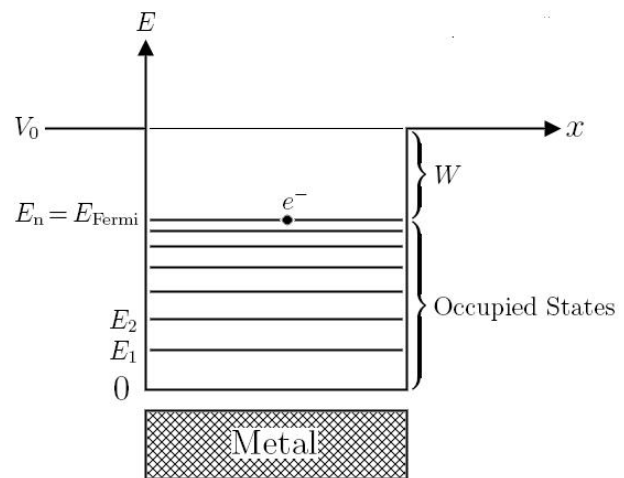
Abbildung IV.1.: α -Zerfall

Abbildung IV.2.: Elektron im Metall

4. Isolator zwischen zwei Metallen (Abb. IV.4 - S. 43)
auch hier gibt es den Tunneleffekt, Elektronen 'tunneln' durch den Isolator

IV.6. Harmonischer Oszillator

Potential: $V = \frac{m\omega^2}{2}x^2$, algebraische Methode zum Lösen der Schrödinger-Gleichung:

gehen aus von Hamilton-Operator: $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2$

lösen Eigenwert-Gleichung: $H\psi = E\psi$

$$\frac{1}{2m}[p^2 + \underbrace{(m\omega x)^2}_{\bar{x}}]\psi = E\psi$$

Operator: $p^2 + \bar{x}^2 = (\bar{x} - ip) \cdot (\bar{x} + ip)$ OK in klass. Physik, aber \neq in QM, da $[X, P] = i\hbar \neq 0$
Wir machen etwas in dieser Art (Faktorisierung), aber werden noch Zusatzterme bekommen. Dazu führen wir folgende Operatoren ein:

$a = \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}(m\omega x + ip)$ Vernichtungsoperator, annihilation-operator

$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}(m\omega x - ip)$ Erzeugungsoperator, creation-operator

$\Rightarrow x$ und p

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

es gelten folgende Kommutator-Relationen:

$$[a, a^\dagger] = 1 \text{ (folgt aus } [x, p] = i\hbar), [a, a] = [a^\dagger, a^\dagger] = 0$$

drücken Hamilton-Operator durch a, a^\dagger aus: $H = \frac{1}{2m}[p^2 + (m\omega x)^2]$

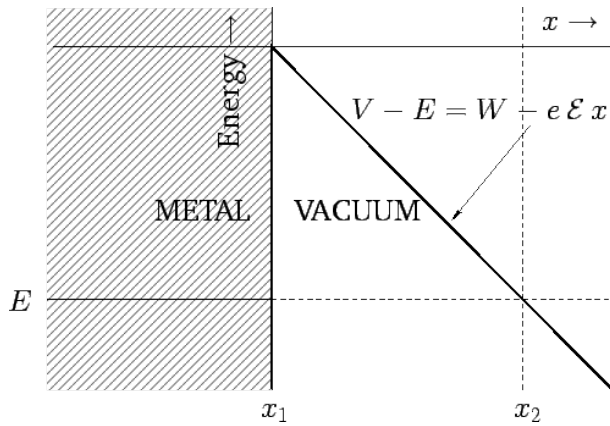


Abbildung IV.3.: Kalte Emission

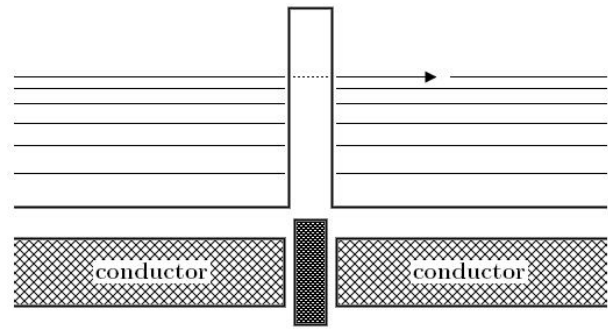


Abbildung IV.4.: Isolator

$$a^\dagger a = \frac{1}{2m\omega\hbar} \{ (m\omega x)^2 - im\omega \underbrace{(px - xp)}_{=[p,x]} + p^2 \}$$

$$aa^\dagger = \frac{1}{2m\omega\hbar} \{ (m\omega x)^2 - im\omega [x, p] + p^2 \}$$

$$\Rightarrow H = \frac{\hbar\omega}{2} [a^\dagger a + aa^\dagger]$$

erinnern: $[a, a^\dagger] = 1 \Rightarrow aa^\dagger = a^\dagger a + 1$

$$\Rightarrow H = \hbar\omega \left[a^\dagger a + \frac{1}{2} \right]$$

Eigenwertgleichung: $H\psi = E\psi$

$$\Rightarrow \hbar\omega \left[a^\dagger a + \frac{1}{2} \right] |\psi\rangle = E |\psi\rangle$$

$N = a^\dagger a$ heißt Teilchenzahloperator oder Besetzungszahloperator

\Rightarrow Kommutatorrelation: $[N, a^\dagger] = a^\dagger$ $[N, a] = -a$

suchen Eigenwerte und Eigenfunktionen von Teilchenzahloperator N

$N|\psi_n\rangle = n|\psi_n\rangle$ (es wird sich herausstellen: $n \in \mathbb{N}_0$) Notation: $|\psi_n\rangle = |n\rangle \Rightarrow N|n\rangle = n|n\rangle$

Eigenwerte: aus Skalarprodukt $n\langle n|n\rangle = \langle n|N|n\rangle = \langle n|a^\dagger a|n\rangle = \langle an|an\rangle \geq 0$

$\Rightarrow \boxed{n \geq 0} \Rightarrow n = 0$ ist niedrigster Wert

für $n = 0 \Rightarrow N|0\rangle = 0$ niedrigster Wert $\Rightarrow |0\rangle$ ist Grundzustand, Vakuum

$a^\dagger a|0\rangle = 0 \Rightarrow \boxed{a|0\rangle = 0}$ das ist eine Bestimmungsgleichung für Grundzustand

$|0\rangle = |\psi_0\rangle \rightarrow \psi_0(x)$ als Wellenfunktion angeschrieben

Grundzustand: $(m\omega x + i\hbar \frac{d}{dx})\psi_0(x) = 0 \Leftrightarrow (\frac{m\omega}{\hbar}x + \frac{d}{dx})\psi_0(x) = 0$

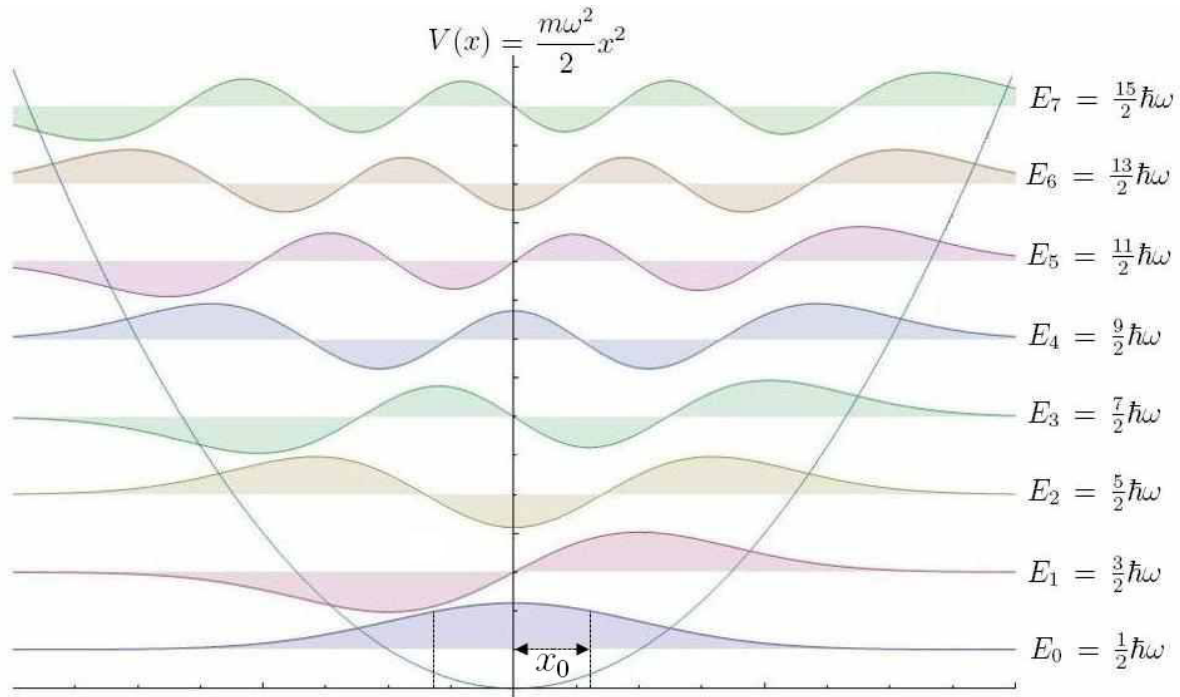
\rightarrow (als Physiker) $\int \frac{d\psi_0}{\psi_0} = \int -\frac{m\omega}{\hbar} x dx \Rightarrow \ln \psi_0 = -\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 + \ln c$

$$\boxed{\psi_0(x) = ce^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}}$$

Normierung:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_0(x)|^2 dx = 1 = |c|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{m\omega}{\hbar} x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}} \Rightarrow c = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}$$

aus Eigenwertgleichung folgt: $N \rightarrow 0 \Rightarrow E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$ Grundzustandsenergie



für $n = 0, 1, 2, \dots \Rightarrow$ Energiespektrum: $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$

22.11.2011

Zusammenfassung:

Hamilton Operator: $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2$

Eigenwertgleichung: $H\psi_n(x) = E_n\psi_n(x) \quad n \in \mathbb{N}_0$

suchen Lösungen mittels algebraischer Methode:

Def. $a = \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}(m\omega x + ip)$ Vernichtungsoperator

$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}(m\omega x - ip)$ Erzeugungsoperator

$\Rightarrow x = \dots(a + a^\dagger) \quad p = \dots(a - a^\dagger)$

diese in $H = \dots$ einsetzen (dabei verwenden: $[a, a^\dagger] = 1$):

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

$N = a^\dagger a \dots$ Teilchenzahl- bzw. Besetzungszahloperator

N erfüllt folgende Eigenwertgleichung: $N|n\rangle = n|n\rangle$

Def. Grundzustand - Vakuum

$a|0\rangle = 0 \Rightarrow N|0\rangle = 0 \Rightarrow \nexists$ Quanten

Grundzustands-Wellenfunktion $\langle x|n\rangle = \psi_n(x)$

aus $p = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ folgt: um $\langle x|a|0\rangle$ auszurechnen muss man a als Funktion von x darstellen, damit ergibt sich daraus $(\frac{m\omega}{\hbar}x + \frac{d}{dx})\psi_0(x) = 0$

$$\Rightarrow \psi_0(x) = N e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

N aus Normierung ($\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_0(x)|^2 dx = 1$)

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}, \Rightarrow N = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}$$

Energien: $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) \Rightarrow \exists$ Grundzustandsenergie E_0

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} > 0$$

$$E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega$$

Lemma: Wenn $|n\rangle$ ein Eigenzustand von N mit Eigenwert n ist (also wenn $N|n\rangle = n|n\rangle$), dann ist a^\dagger angewandt auf n (also $a^\dagger|n\rangle$) Eigenzustand von N mit Eigenwert $(n+1)$.

Beweis: $N(a^\dagger|n\rangle) = (a^\dagger N + a^\dagger)|n\rangle = (n+1)a^\dagger|n\rangle$

(weil $[N, a^\dagger] = a^\dagger \Rightarrow Na^\dagger = a^\dagger N + a^\dagger$) $a^\dagger|n\rangle \rightarrow |n+1\rangle$

□

Proportionalitätsfaktor aus Normierung: $\langle a^\dagger n | a^\dagger n \rangle = \langle n | a a^\dagger | n \rangle = \langle n | a^\dagger a + 1 | n \rangle = (n+1) \langle n | n \rangle = (n+1)$ (weil $[a, a^\dagger] = 1$ und weil $\langle n | n \rangle = 1$ wegen Normierung)

$$\Rightarrow a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$$

Zustand	Eigenwert
Grundzustand $ 0\rangle$	0
1. angeregter Zustand $ 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{1}}a^\dagger 0\rangle$	1
2. angeregter Zustand $ 2\rangle = a^\dagger 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot 1}}(a^\dagger)^2 0\rangle$	2
3. angeregter Zustand $ 3\rangle = a^\dagger 2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3 \cdot 2 \cdot 1}}(a^\dagger)^3 0\rangle$	3
\vdots	\vdots
n. angeregter Zustand: $ n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n 0\rangle$	n

analog für den Vernichtungsoperator a :

Lemma: Wenn $|n\rangle$ Eigenzustand von N mit Eigenwert n ist, dann ist $a|n\rangle$ ein Eigenzustand von N mit Eigenwert $(n-1)$.

$$\Rightarrow a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$$

Wellenfunktion:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} (a^\dagger)^n \psi_0(x)$$

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\frac{m\omega x}{\hbar} - \frac{d}{dx} \right)$$

Wellenfunktionen:

$$\begin{aligned}
n=0 & \quad \psi_0(x) \sim e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} & \text{gerade Funktion} \mid \cdot \left(\frac{m\omega}{\hbar}x - \frac{d}{dx}\right) \\
n=1 & \quad \psi_1(x) \sim x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} & \text{ungerade Funktion, 1 Knoten} \mid \cdot \left(\frac{m\omega}{\hbar}x - \frac{d}{dx}\right) \\
n=2 & \quad \psi_2(x) \sim (x^2 + \text{const.}) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} & \text{gerade Funktion, 2 Knoten} \\
& \vdots
\end{aligned}$$

Polynome sind genau die Hermit-Polynome $H_n(x)$ (diese bilden ein vollständiges System im Funktionenraum)

$$n\psi_n(x) = NH_n(x)e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

23.11.2011

Harmonischer Oszillator

$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ Vernichtungsoperator

$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$ Erzeugungsoperator

$\{|n\rangle\}$ Fock-Raum (vollständiges orthonormiertes System)

erinnern: $\mathbb{X} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^\dagger)$ Ortsoperator

$\mathbb{P} = -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(a - a^\dagger)$ Impulsoperator

bisher: $\langle \mathbb{X} \rangle_{\psi_n} = \langle \psi_n | x | \psi_n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_n^*(x) \cdot \psi_n(x)$ - Funktionen einsetzen, ausrechnen

jetzt, im Fock-Raum:

$$\langle \mathbb{X} \rangle = \langle n | \mathbb{X} | n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle n | a + a^\dagger | n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{n} \langle n | n-1 \rangle + \sqrt{n+1} \langle n | n+1 \rangle) = 0$$

(weil $\langle n | m \rangle = \delta_{nm} \Rightarrow \langle n | n+1 \rangle = 0$ weil $n \neq n+1$)

$\langle \mathbb{P} \rangle = 0$ (gleiche Argumentation)

$\langle \mathbb{X}^2 \rangle = \langle n | \mathbb{X}^2 | n \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle n | a^2 + a^\dagger a + a a^\dagger + (a^\dagger)^2 | n \rangle$ a^2 und $(a^\dagger)^2$ werden wegfallen (sind null), Argument wie oben

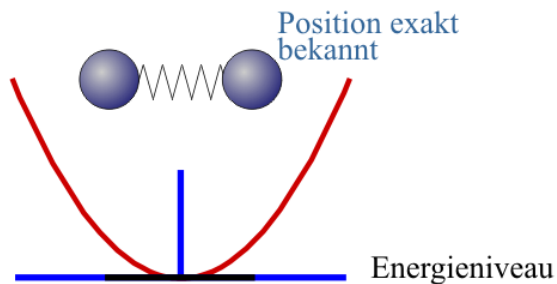
$N = a^\dagger a$ $N|n\rangle = n|n\rangle$ $[a, a^\dagger] = 1 \rightarrow a a^\dagger - a^\dagger a = 1$ und damit:

$$\begin{aligned}
\langle \mathbb{X}^2 \rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle n | \underbrace{a^2}_0 + \underbrace{a^\dagger a}_N + \underbrace{a a^\dagger}_{a^\dagger a + 1 = N+1} + \underbrace{(a^\dagger)^2}_0 | n \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} (2n+1) = \underbrace{\mathbb{X}_0^2}_{:=\mathbb{X}_0^2} (2n+1)
\end{aligned}$$

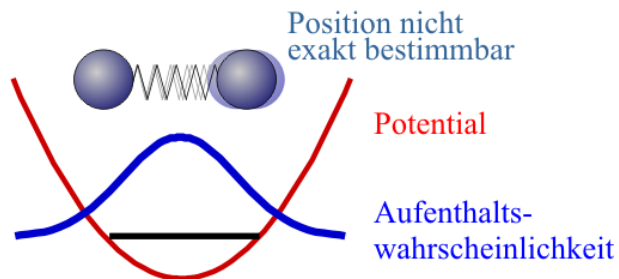
analog $\langle \mathbb{P}^2 \rangle, \Rightarrow \Delta \mathbb{X} \cdot \Delta \mathbb{P} = \dots \geq \frac{\hbar}{2}$

Nullpunktsenergie (Grundzustandsenergie)

**klassischer
Oszillator:**



**quantenmechanischer
Oszillator:**



klassisch: $E = 0$ niedrigste Energie

QM: suchen Grundzustand von Operator, Hamilton: $H = T + V$ (kinet. + potentielle Energie)

$\psi_0 \rightarrow E_0$, wenn E sinkt $\Rightarrow \Delta X$ sinkt

Heisenberg: $\Delta X \cdot \Delta P \geq \frac{\hbar}{2} \Rightarrow \Delta P \geq \frac{\hbar}{2 \Delta X}$

da ΔX sinkt $\Rightarrow \Delta P$ steigt $\Rightarrow E$ steigt und stabilisiert sich

Satz: Die Nullpunktsenergie $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$ ist der kleinste Energiewert, der mit der Heisenberg'schen Unschärferelation verträglich ist.

Übung (kommt vielleicht in UE): Energie eines harmon. Oszillators nur mit Heisenberg berechnen:

$E = \langle H \rangle = \frac{1}{2m} \langle p^2 \rangle + \frac{m\omega^2}{2} \langle X^2 \rangle$, Abschätzung nach unten:

Unschärferelation hier: $\langle X^2 \rangle \cdot \langle P^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$ (weil $\langle X \rangle^2 = \langle P \rangle^2 = 0$)

\Rightarrow (Einsetzen oben) $E = \langle H \rangle \geq \frac{1}{2m} \langle P^2 \rangle + \frac{m\omega^2}{2} \frac{\hbar^2}{4 \langle P^2 \rangle}$

suche Minimum: $\Rightarrow \frac{\partial}{\partial \langle P^2 \rangle} = \frac{1}{2m} - \frac{m\omega^2}{2} \frac{\hbar^2}{4 \langle P^2 \rangle^2} = 0$

$\Rightarrow \langle P^2 \rangle_{\min} \Rightarrow E(\langle P^2 \rangle_{\min}) = E_{\min} = \frac{1}{2} \hbar \omega$

IV.7. Resumee

wichtigste Axiome der QM und physikalische Interpretation

1. Ein Physikalisches System wird vollständig durch einen Vektor $|\psi\rangle$ im Hilbertraum (vollst. VR) beschrieben.
2. Die Physikalischen Größen, Observablen, sind hermitesche Operatoren A im Hilbertraum.
3. Das Resultat einer Messung ist ein Eigenzustand (System ist dann im Eigenzustand), bzw. das Ergebnis selbst ist der Eigenwert, eines Operators: $A|n\rangle = a_n|n\rangle, a_n \in \mathbb{R}$ Eigenwert.

4. Die Wahrscheinlichkeit für einen bestimmten Eigenwert ist gegeben durch $|\langle n|\psi\rangle|^2$ (Übergangswahrscheinlichkeit), $\langle n|\psi\rangle$ heißt auch Übergangswahrscheinlichkeitsamplitude, das ist Projektion von allgemeinem $|\psi\rangle$ auf das vollständige Orthonormalsystem $\{|n\rangle\}$.
5. Jeder allgemeine Zustand ist entwickelbar in vollständiges Orthonormales System, also $|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$, $c_n = \langle n|\psi\rangle$, $|c_n|^2$ ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass Zustand $|n\rangle$ im allgemeinen Zustand $|\psi\rangle$ vorkommt.
6. Der Erwartungswert von Messungen, die mit A beschrieben werden, also $\langle A \rangle = \langle \psi|A|\psi \rangle = \sum_{n,m} c_m^* c_n a_n \underbrace{\langle m|n \rangle}_{\delta_{mn}} = \boxed{\sum_n |c_n|^2 a_n = \langle A \rangle}$, also der Erwartungswert von A ist die Summe der Eigenwerte gewichtet mit $|c_n|^2$, also $|c_n|^2$ ist die Wahrscheinlichkeit, a_n zu messen.
Wenn $A = H$ dann ist $a_n = E_n$, also die 'Anzahl der Klicks' im Experiment.
7. Projektionspostulat: (von Neumann)
Def. Projektionsoperator: $P_n = |n\rangle\langle n|$
Eigenschaften:
 $P_n^2 = P_n$, $P_m \cdot P_n = 0$ - Orthogonalitätsrelation
 $\sum_n P_n = \sum_n |n\rangle\langle n| = 1$ (Einheitsoperator) - Vollständigkeitsrelation
Projektion: $P_n|\psi\rangle = |n\rangle\langle n|\psi\rangle = c_n|n\rangle$
 $1 \cdot |\psi\rangle = \sum |n\rangle\langle n|\psi\rangle = \sum c_n |n\rangle$
8. Die Dynamik oder Zeitentwicklung eines Systems ist gegeben durch die Schrödingergleichung:
 $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) = H\psi(x,t)$ wobei $|\psi(x,t)|^2$ die Wahrscheinlichkeitsdichte ist (Born), und
 $H = T + V = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$ (kinetische + potentielle Energie).
9. Unschärferelation zwischen Meßwerten: $\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle|$ wobei $\Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$

V. Drehimpuls, Spin und Statistik, dreidimensionale Schrödingergleichung

V.1. Drehimpuls

aus der klassischen Mechanik: Drehimpuls $\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p}$

ϵ -Tensor:

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} +1 & \text{Permutation gerade} \\ 0 & \geq 2 \text{ gleiche Indizes} \\ -1 & \text{Permutation ungerade} \end{cases}$$

→ Komponenten des Drehimpulses: $L_i = \epsilon_{ijk} x_j p_k$

(z.B. $L_1 = \epsilon_{123} x_2 p_3 + \epsilon_{132} x_3 p_2 = x_2 p_3 - x_3 p_2$)

klassische Mechanik → QM

$\vec{x}, \vec{p} \rightarrow \vec{\hat{X}}, \vec{\hat{P}} = -i\hbar \vec{\nabla}$ Operatoren

nützen Kommutator aus: $[x_j, p_k] = i\hbar \delta_{jk}$

unter Verwendung der Kommutatorrelationen erhält man die Drehimpuls-Algebra:
(Berechnung siehe UE)

$$[L_i, L_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} L_k$$

$$[L_i, x_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} x_k$$

$$[L_i, p_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} p_k$$

suchen Eigenfunktionen und Eigenwerte des Drehimpuls-Operators:

es gilt Kommutator: $[\vec{L}^2, L_i] = 0$

(weil $[\vec{L}^2, L_i] = L_i [L_i, L_j] + [L_i, L_j] L_i = i\hbar (\epsilon_{ijk} L_i L_k + \epsilon_{ijk} L_k L_i) = 0$)

⇒ \vec{L}^2 und L_i haben gleiche Eigenfunktionen (UE)

wähle: $i = 3 \Rightarrow L_z$

suchen Eigenwerte von \vec{L}^2 und L_z

diese sind charakterisiert durch die Drehimpulsquantenzahl:

$$l = \frac{N}{2} \quad N = 0, 1, 2, 3, \dots$$

(das folgt mathematisch aus der Drehimpuls-Algebra)

$l = 0, 1, 2, \dots$ ganzzahlig - Bosonen (Bose-Teilchen → Bose-Statistik) z.B. Photonen

oder $l = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$ halbzahlig - Fermionen (Fermi-Teilchen → Fermi-Statistik) z.B. Elektronen, Protonen

bezeichnen Eigenwerte von $L_z \rightarrow \mu = \hbar m$

$m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$ m ... magnetische Quantenzahl

z.B. $-1, 0, 1$ oder $-2, -1, 0, 1, 2 \Rightarrow \mu$ hat $(2l+1)$ Werte

Eigenwerte und Eigenfunktionen

$$L_z Y_{lm} = \hbar m Y_{lm}$$

$Y_{lm} \dots$ Eigenfunktionen (Kugelflächenfunktionen, tabelliert, kann man nachschlagen)

$$\text{z.B. } Y_{00} = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int |Y_{00}| d\Omega = 1 \quad Y_{10} = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \cos \theta \quad Y_{1\pm 1} = \pm \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$$

$$\vec{L}^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}$$

$\{Y_{lm}(\theta, \varphi)\}$ bilden ein vollständiges orthonormiertes System
 $\hbar m$ und $\hbar^2 l(l+1)$ sind die Eigenwerte

29.11.2011

V.2. Dreidimensionale Schrödingergleichung

erinnern: Drehimpuls

$$\vec{L} = \underbrace{\vec{x} \times \vec{p}}_{\text{Operatoren}} \quad [x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}$$

Kommutator:

$$[L_i, L_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} L_k \Rightarrow [\vec{L}^2, L_i] = 0 \quad i = 1, 2, 3 \Rightarrow \text{gemeinsame Eigenfunktionen}$$

Eigenwertgleichungen:

$$\vec{L}^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm} \quad L_z Y_{lm} = \hbar m Y_{lm}$$

$$(Y = Y(\Theta, \varphi) \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad m = -l, \dots, 0, \dots, l)$$

$$\text{z.B. } l = 1 \quad m = -1, 0, 1$$

dreidimensionale Schrödingergleichung:

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

dreidimensionaler Laplace-Operator: $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ in kartesischen Koordinaten
in Polarkoordinaten:

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \Theta} \left(\sin \Theta \frac{\partial}{\partial \Theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \Theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

Drehimpuls-Quadrat in Polarkoordinaten:

$$\vec{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \Theta} \left(\sin \Theta \frac{\partial}{\partial \Theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \Theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right)$$

Laplace-Operator:

$$\Delta \cdot \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\vec{L}^2}{2mr^2}$$

⇒ Schrödingergleichung unter der Annahme, dass das Potential kugelsymmetrisch ist ($V(\vec{x}) = V(r)$)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\vec{L}^2}{2mr^2} + V(r) \right] \psi(r, \Theta, \varphi) = E \psi(r, \Theta, \varphi)$$

Ansatz: $\psi(r, \Theta, \varphi) = R_l(r) Y_{lm}(\Theta, \varphi)$

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] R_l(r) Y_{lm}(\Theta, \varphi) = E R_l(r) Y_{lm}(\Theta, \varphi)$$

jetzt (aber nur jetzt!) darf man Y kürzen und erhält:

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] R_l(r) = E R_l(r)$$

außerdem kann man zu einem effektiven Potential zusammenfassen:

$$V_{eff}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$$

(der letzte Term heißt Zentrifugalterm)

z.B. Coulomb-Potential (siehe Abbildung V.1)

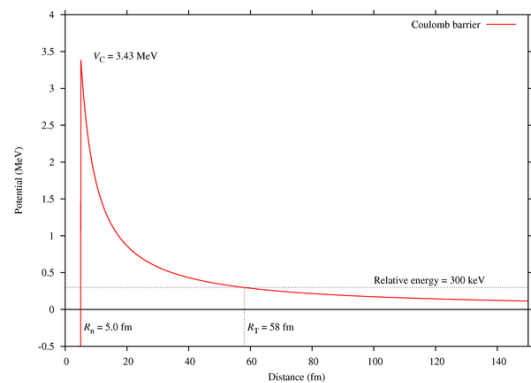


Abbildung V.1.: Coulombpotential

⇒ **einfache Schrödinger-Gleichung**

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + V_{eff}(r) \right] R_l(r) = E R_l(r)$$

Vereinfachung: reduzierte Wellenfunktion

$$\boxed{u_l(r) = r R_l(r)} \quad \frac{\partial}{\partial r} u = u' = R + r R' \quad \frac{\partial^2}{\partial r^2} u = u'' = 2R' + r R''$$

damit: $\left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \right] R = \left[\frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right] R$

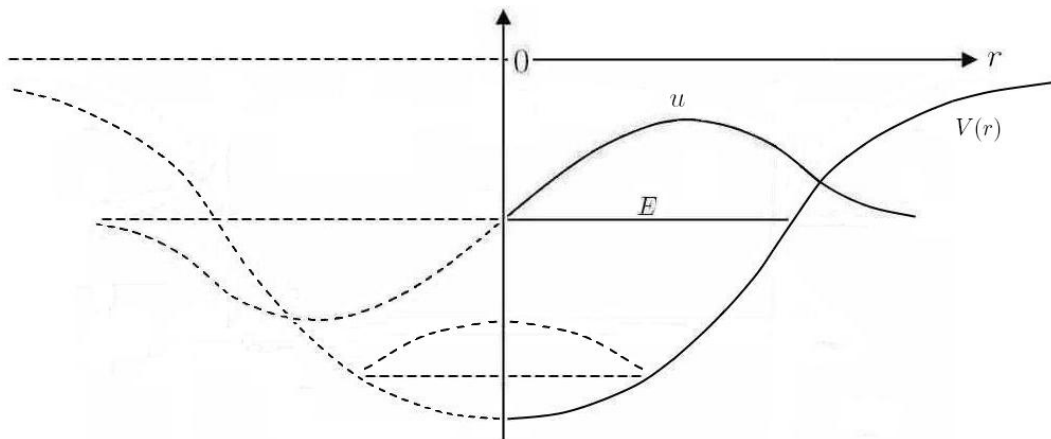
$$\Rightarrow \boxed{u'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_{eff}(r)) u_l(r) = 0}$$

das ist die eindimensionale Schrödingergleichung in der reduzierten Wellenfunktion

⇒ leichter lösbar

$$\text{Normierung: } 1 = \int |\psi(\vec{x})|^2 d^3x = \int_0^\infty |R(r)|^2 r^2 dr \underbrace{\int_{4\pi} d\Omega |Y(\Omega)|^2}_1$$

⇒ Normierungsbedingung: $\int_0^\infty |u_l(r)|^2 dr = 1$



⇒ in drei Dimensionen braucht ein Potential eine gewisse kritische Größe, damit überhaupt Bindungen existieren (es muss in drei Dimensionen nicht immer ein Bindungszustand existieren)

Beispiel Wasserstoff-Atom: Coulomb-Potential

$$V = -\frac{e^2}{r}$$

es gibt unendlich viele Zustände
setzt man dieses V oben ein, so erhält

man: $E = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2}$ entartet für alle l (alle l geben den gleichen Energiewert)

30.11.2011

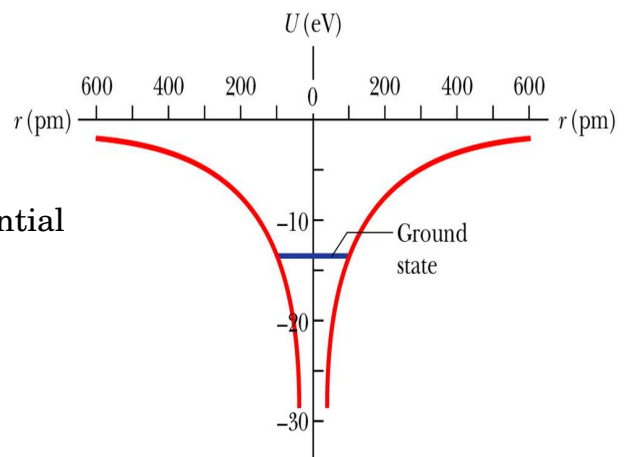


Abbildung V.2.: Coulombpotential H-Atom

V.3. Stern-Gerlach-Experiment - Spin des Elektrons

1. Teilchen im Magnetfeld (klassischer Zugang)

Ein geladenes rotierendes (spinning) Teilchen erzeugt einen magnetischen Dipol (magnetisches Dipolmoment).

$\vec{s} \dots$ Eigendrehimpuls, $\vec{\mu} \dots$ magnetisches Dipolmoment (diese beiden sind parallel)

$\vec{\mu} = \gamma \vec{s}$ wobei $\gamma \dots$ gyromagnetisches Verhältnis (Erklärung siehe Wikipedia, $\frac{e}{2mc}$ wird magnetisches Magneton genannt, glaub das ist die kleinste magnetische Einheit), $\gamma = g \frac{e}{2mc}$, beim Elektron ist $g = 2$

Dieser magnetische Dipol $\vec{\mu}$ wird nun in ein Magnetfeld \vec{B} gegeben ($\vec{\mu}$ und \vec{B} verschieden orientiert).

→ Drehmoment $\vec{\mu} \times \vec{B}$, Dipol richtet sich entlang der Feldlinien aus (Kompass)

Energie (damit verbunden) $H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$

⇒ Hamilton-Operator für ein Teilchen mit Spin:

$$H = -\gamma \vec{S} \cdot \vec{B}$$

2. Stern-Gerlach-Experiment

(1922), Silberatome (sehr kugelsymmetrische Anordnung + ein äußeres Elektron), verwenden inhomogenes Magnetfeld (unten breiter als oben)
Dann wirkt außer dem Drehmoment auch eine Kraft \vec{F} durch das Magnetfeld auf den Dipol $\vec{\mu}$

$$\vec{F} = -\vec{\nabla}V = \vec{\nabla}\vec{\mu}\vec{B} \text{ (weil Potential } V \equiv H \text{ da ruhend)}$$

\vec{B} in z-Richtung: (\hat{z} ... Einheitsvektor in z-Richtung)

$$\vec{B} = B_z \hat{z} = (\underbrace{B}_{hom} + \underbrace{\alpha z}_{inhom}) \hat{z}$$

$$\Rightarrow F_z = \alpha \gamma S_z$$

Spin in z-Richtung ist experimentell durch die Kraft (Ablenkung) durch den Stern-Gerlach-Magnet bestimmbar. Im Experiment wurde eine Aufspaltung in zwei Werte (up, down) beobachtet (Verhältnis 50:50). Also der magnetische Dipol und damit auch der Spin in z-Richtung S_z hat zwei Werte: up, down.

Wir wissen, dass die Eigenwerte des (Eigendrehimpulsoperators) Spins:

$$S_z \eta = m \hbar \eta \quad \eta \dots \text{Eigenfunktion}$$

$m = -s, \dots, s \Rightarrow (2s+1) \text{ Werte} \Rightarrow 2s+1 = 2 \text{ (es gibt nur 2 Werte für } m \text{ laut Experiment)}$

$$\Rightarrow s = \frac{1}{2}$$

(übernehme drehimpuls-Algebra, $l \rightarrow s = \frac{1}{2}$)

Spinmessung mit wiederholten Stern-Gerlach-Magneten

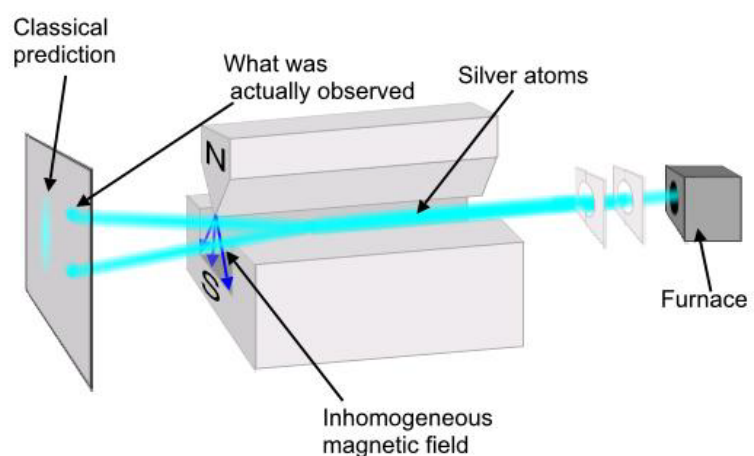
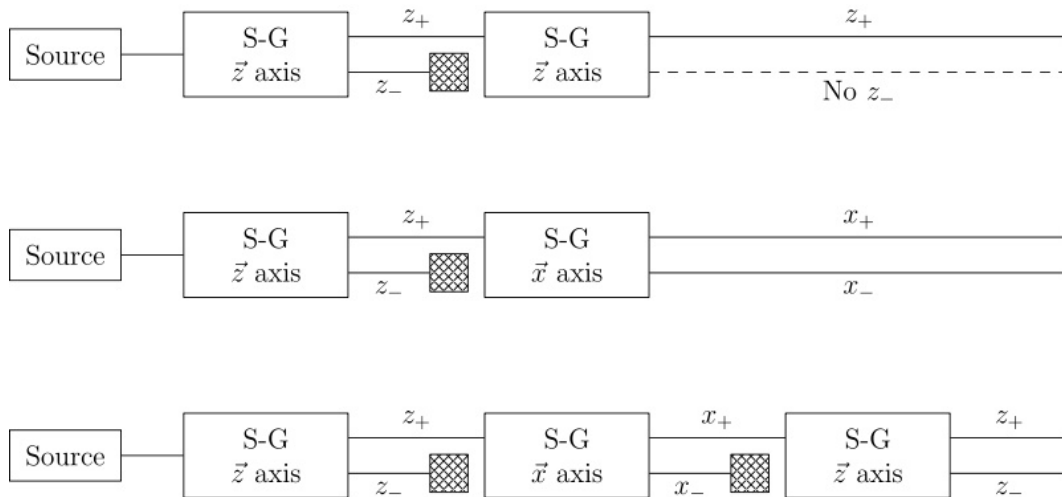


Abbildung V.3.: Stern-Gerlach-Experiment



Wenn der Stern-Gerlach-Magnet um Winkel θ zur z-Achse gedreht wird, dann sind die Wahrscheinlichkeiten für die Werte up und down:

$$P(|\uparrow\rangle) = 1 - \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad P(|\downarrow\rangle) = \sin^2 \frac{\theta}{2}$$

$(|\uparrow\rangle)$ entspricht dem Vektor $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, $(|\downarrow\rangle)$ entspricht $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, der Winkel θ wird von $|\uparrow\rangle$ in Richtung $|\downarrow\rangle$ gemessen) bei $\theta = 90^\circ \Rightarrow \frac{\theta}{2} = 45^\circ \Rightarrow P(up) = P(down)$

Ein Spin $\frac{1}{2}$ -Teilchen wird nach einer Drehung um 4π wieder identisch (Wahrscheinlichkeiten gleich)! (Versuch von Rauch - Atominstytut - Neutroneninterferometrie)

1.12.2011

V.4. Mathematische Formulierung von Spin - Pauli-Matrizen

Elektronen-Spin ist ein Eigendrehimpuls und erfüllt mathematisch gesehen die Drehimpulsalgebra

$\vec{L} \rightarrow \vec{S} \quad l = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots \rightarrow s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$, wir konzentrieren uns auf $s = \frac{1}{2}$
übernehmen Algebra vom Drehimpuls - Spin-Algebra:

$$[S_i, S_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} S_k \quad [\vec{S}^2, S_i] = 0$$

suchen Darstellung im Spinor Raum, Basis im Spino-Raum wird gebildet durch gemeinsame Eigenvektoren von \vec{S}^2 und S_z

erinnern Drehimpuls: $Y_{lm} \equiv |l, m\rangle$, analog für Spin: $|s, m\rangle$, wir betrachten Spin $s = \frac{1}{2}$
Spinoren:

$$\begin{aligned} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &\equiv |\uparrow\rangle \dots \text{spin up} \\ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &\equiv |\downarrow\rangle \dots \text{spin down} \end{aligned}$$

es ist günstig, die Pauli-Matrizen einzuführen:

$$S_i = \frac{\hbar}{2} \sigma_i \quad \vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \quad i = 1, 2, 3$$

⇒ Spin-Algebra:

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k \quad [\vec{\sigma}^2, \sigma_i] = 0$$

Eigenwert-Gleichungen:

$$\sigma_z |\uparrow\rangle = +|\uparrow\rangle \quad \sigma_z |\downarrow\rangle = -|\downarrow\rangle$$

Matrix σ_z hat zwei Eigenwerte, +1 und -1

$$\Rightarrow \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$\{|\uparrow\rangle\}$ bilden VONS:

$$\langle\uparrow|\downarrow\rangle = 0 \quad \langle\uparrow|\uparrow\rangle = \langle\downarrow|\downarrow\rangle = 1$$

Spinor-Darstellung:

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Wie ist \vec{S} oder $\vec{\sigma}$ zu verstehen?

$$\vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{pmatrix}$$

(σ_x, σ_y siehe später)

wobei σ_i Matrizen sind, die im Spinor-Raum wirken ($\vec{\sigma}$ wirkt in einem anderen Raum)

Hamilton

$$H \sim \vec{S} \cdot \vec{B} \sim \underbrace{\vec{\sigma} \cdot \vec{B}}_{\sum_{i=1}^3 \sigma_i B_i} |\uparrow\rangle$$

($\sigma_i B_i \dots$ Linearkombination von Matrizen $\Rightarrow 2 \times 2$ -Matrix)

Definition Leiter-Operatoren (klettern in Spinleiter rauf und runter)

$$\sigma_{\pm} = \sigma_x \pm i\sigma_y$$

$$\sigma_+ |\downarrow\rangle = 2|\uparrow\rangle \quad \sigma_- |\uparrow\rangle = 2|\downarrow\rangle$$

$$\sigma_+ |\uparrow\rangle = 0 \quad \sigma_- |\downarrow\rangle = 0$$

$$\Rightarrow \sigma_+ = 2 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \boxed{\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}}$$

Eigenschaften:

$$\sigma_i^2 = 1 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{tr}(\sigma_i) = 0$$

Spin-Messprozess

1. Teilchen im Zustand $|\uparrow\rangle$, messen Spin entlang z-Achse
(mit einem Stern-Gerlach-Magneten wird in z-Richtung gemessen, ist das hineinkommende Teilchen im Zustand $|\uparrow\rangle$, so wird es nach oben abgelenkt $\rightarrow +1$, ist es im Zustand $|\downarrow\rangle$, so wird es nach unten abgelenkt $\rightarrow -1$)
 $\langle\uparrow|\sigma_z|\uparrow\rangle = +1 \langle\uparrow||\uparrow\rangle = +1$
2. analog für Teilchen im $|\downarrow\rangle$ -Zustand: $\langle\downarrow|\sigma_z|\downarrow\rangle = -\langle\downarrow||\downarrow\rangle = -1$
3. Spinmessung in x-Richtung: beschrieben durch Observable σ_x
(bei der Spinmessung in x-Richtung liegt der Stern-Gerlach-Magnet in x-Richtung, das Teilchen wird entweder nach hinten abgelenkt $\rightarrow +1$ oder nach vorne $\rightarrow -1$)
 $\sigma_x|+\rangle = +|+\rangle \quad \sigma_x|-\rangle = -|-\rangle$

$$\Rightarrow |+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad \text{Eigenvektoren von } \sigma_x$$

4. analog für $\sigma_y \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \quad \text{Eigenvektoren von } \sigma_y$

Allgemeiner Spinzustand ist eine Linearkombination von $|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$:

$$\boxed{|S\rangle = c_1|\uparrow\rangle + c_2|\downarrow\rangle} \quad \text{wobei } c_{1,2} \in \mathbb{C} \text{ und } |c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$$

(Summe der Wahrscheinlichkeitsquadrate = 1)

Spinmessung in x-Richtung durch Operator σ_x (im Zustand $|\uparrow\rangle$)

$\langle\uparrow|\sigma_x|\uparrow\rangle = \langle\uparrow|\downarrow\rangle = 0$ allgemein Erinnerung: Erwartungswert vom Erwartungswert eines Operators A

$$\langle A \rangle = \sum_n |c_n|^2 a_n, \text{ damit } \langle \sigma_x \rangle = \frac{1}{2}(+1) + \frac{1}{2}(-1) = 0$$

6.12.2011

V.5. 2 Teilchen mit Spin

Möglichkeiten: $\uparrow\uparrow \quad \uparrow\downarrow \quad \downarrow\uparrow \quad \downarrow\downarrow$ - 4 Möglichkeiten der Spin Einstellung
jedes Teilchen hat 'seinen' Hilbertraum, wenn man das gemeinsam betrachtet multipliziert man sie mit dem Tensorprodukt: $|\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle$

Skalarprodukt: $H \dots$ Hilbertraum

$$\underbrace{\langle \uparrow |}_{\in H_{adj}} \underbrace{|\uparrow \rangle}_{\in H} = 1 \quad \text{Zahl}$$

äußeres Produkt:

$$|\uparrow\rangle\langle\uparrow| \quad \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Tensorprodukt:

$$\underbrace{|\uparrow\rangle}_{\in H_A} \otimes \underbrace{|\uparrow\rangle}_{\in H_B} \quad \dim H_{\text{Alice}} = d_A \rightarrow 2 \quad \dim H_{\text{Bob}} = d_B \rightarrow 2 \quad (3, 4, \dots \text{ möglich})$$

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ 0 \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \dim(H_A \otimes H_B) = d_A \cdot d_B$$

$$\text{allgemein:} \quad \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} m \\ n \\ r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} am \\ an \\ ar \\ bm \\ bn \\ br \end{pmatrix}$$

Tensorprodukt von Operatoren: z.B.: σ_x wirkt in A, zur Verdeutlichung oft dazugeschrieben, σ_z wirkt in B

$$\sigma_x^A \otimes \sigma_z^B = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\text{allgemein für beliebige Matrix D:} \quad \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \otimes D = \begin{pmatrix} aD & bD \\ cD & dD \end{pmatrix}$$

Regel: für A, B Matrizen und x, y Vektoren: $(A \otimes B)(x \otimes y) = Ax \otimes By$ (A wirkt nur auf x und B nur auf y weil diese jeweils im selben Hilbertraum sind)

2 Spinteilchen:

$$|\uparrow\rangle_A \otimes |\uparrow\rangle_B \equiv |\uparrow\rangle|\uparrow\rangle \equiv |\uparrow\uparrow\rangle \quad (\text{Notation})$$

betrachten nur Spinanteil der Wellenfunktion: \uparrow, \downarrow

totale Wellenfunktion: $|\psi\rangle_{\text{total}} = |\psi\rangle_{\text{Ortsteil}} \otimes |\text{Spin}\rangle$

im Hamilton: $H = \frac{p^2}{2m} + V(x) + H_{\text{Spin}} \quad H_{\text{Spin}} = -\mu \vec{S} \cdot \vec{B}$

Gesamtspin:

$$\vec{S} = \vec{S}^{(A)} + \vec{S}^{(B)}$$

in z-Richtung (\exists 4 Eigenzustände): $S_z |\uparrow\uparrow\rangle = (S_z^{(A)} + S_z^{(B)}) |\uparrow\rangle_A \otimes |\uparrow\rangle_B = \hbar(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}) |\uparrow\uparrow\rangle$

$$\Rightarrow S_z |\uparrow\uparrow\rangle = \hbar |\uparrow\uparrow\rangle \quad S_z |\downarrow\downarrow\rangle = -\hbar |\downarrow\downarrow\rangle \quad S_z |\uparrow\downarrow\rangle = S_z |\downarrow\uparrow\rangle = 0$$

13.12.

System von 2 Teilchen mit Spin

$\uparrow\uparrow, \downarrow\downarrow, \uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow \dots$ 4 einstellige Möglichkeiten

Zustände: $\underbrace{|\uparrow\rangle_A \otimes |\downarrow\rangle_B}_{1 \text{ Zustand}}$ Tensorprodukte im Hilbertraum $H = H_A \otimes H_B$ (Alice-Bob)

Spin total, gesamt $\vec{S} = \vec{S}^{(A)} + \vec{S}^{(B)} \rightarrow \underbrace{s = s_A \pm s_B}_{\text{Eigenwerte}} \rightarrow 1, 0 \quad S = 1 \dots \text{Triplet}, S = 0 \dots \text{Singlet}$

Spin in z-Richtung: $S_Z = S_Z^{(A)} + S_Z^{(B)} \rightarrow m \cdot \hbar = s$

$$m = -s, \dots, +s \quad m\hbar = (m_A + m_B)\hbar \rightarrow \begin{cases} +1 \\ 0 \\ -1 \end{cases}$$

für 0 haben wir eine Entartung: $\begin{cases} (\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow) \text{ Triplet} \\ (\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow) \text{ Singlet} \end{cases}$

für +1: Spin parallel nach $\uparrow\uparrow$

für -1: Spin parallel nach $\downarrow\downarrow$

Tensorproduktregel: $(A \cdot B)(|x\rangle \otimes |y\rangle) = A|x\rangle \otimes B|y\rangle$

$S_Z |\uparrow\rangle_A \otimes |\downarrow\rangle_B = (S_Z^{(A)} + S_Z^{(B)}) |\uparrow\rangle_A \otimes |\downarrow\rangle_B$, wobei $S_Z^{(A)}$ auf $|\uparrow\rangle_A$ wirkt

genauer: $S_Z^{(A)} = S_Z^A \otimes \mathbf{1}_B \quad (4 \times 4) = (2 \times 2) \otimes (2 \times 2)$

analog: $S_Z^{(B)} = \mathbf{1}_A \otimes S_Z^B$

Gesamtspin ist Summe der Teiloperatoren

$$S_Z = S_Z^{(A)} + S_Z^{(B)}$$

Spin-Messung von Alice und Bob

Alice (links) und Bob (rechts) messen mittels Stern-Gerlach-Magneten den Spin in z-Richtung von 2 Teilchen. Dieser Vorgang wird beschrieben durch das Produkt der Teiloperatoren in z-Richtung.

$$\rho_Z^{(A)} \rightarrow \frac{\hbar}{2} \sigma_Z^{(A)} \quad \boxed{\sigma_Z^{(A)} \cdot \sigma_Z^{(B)}}$$

$$\begin{aligned} \sigma_Z^{(A)} \cdot \sigma_Z^{(B)} |\uparrow\rangle_A \otimes |\downarrow\rangle_B &= (\sigma_Z^{(A)} \otimes \mathbf{1}_B) \cdot (\mathbf{1}_A \otimes \sigma_Z^{(B)}) |\uparrow\rangle_A \otimes |\downarrow\rangle_B = \sigma_Z^A \otimes \sigma_Z^B |\uparrow\rangle_A \otimes |\downarrow\rangle_B = \\ &= \underbrace{\sigma_Z^A |\uparrow\rangle_A}_{+1} \otimes \underbrace{\sigma_Z^B |\downarrow\rangle_B}_{-1} = (+1)(-1) \underbrace{|\uparrow\rangle_A}_{\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}} \otimes \underbrace{|\downarrow\rangle_B}_{\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}} = - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Erwartungswert $|\uparrow\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle_A \otimes |\downarrow\rangle_B$

$$\langle \uparrow |_A \otimes \langle \downarrow |_B (\sigma_Z^A \otimes \sigma_Z^B) | \uparrow \rangle_A \otimes | \downarrow \rangle_B = -1$$

$$\langle \uparrow |_A \otimes \langle \uparrow |_B (\sigma_Z^A \otimes \sigma_Z^B) | \uparrow \rangle_A \otimes | \uparrow \rangle_B = +1$$

Wenn wir den Stern-Gerlach-Magneten in x-Richtung drehen \rightarrow kommt nix raus \rightarrow Erwartungswert 0:

Spinmessung von Alice und Bob in x-Richtung ($|\uparrow\downarrow\rangle$)

$$\begin{aligned} \langle \uparrow |_A \otimes \langle \downarrow |_B (\sigma_X^A \otimes \sigma_X^B) | \uparrow \rangle_A \otimes | \downarrow \rangle_B &= \\ = \langle \uparrow | \underbrace{\sigma_X^A | \uparrow \rangle_A}_{|\downarrow\rangle_A} \langle \downarrow | \underbrace{\sigma_X^B | \downarrow \rangle_B}_{|\uparrow\rangle_B} &= \underbrace{\langle \uparrow | \downarrow \rangle_A}_{=0} \underbrace{\langle \downarrow | \uparrow \rangle_B}_{=0} = 0 \end{aligned}$$

14.12.

V.6. Spin und Statistik

Geg.: 2-Teilchen-System - identische Teilchen

Wellenfunktion abhängig von:

- Koordinaten (\vec{x}_1 für Teilchen 1 bzw. \vec{x}_2 für Teilchen 2)
- Zeit

Bezeichnung: $\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t)$

Die Zeitentwicklung des Systems (\rightarrow Dynamik) wird beschrieben durch die Schrödingergleichung:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t) = H \psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t)}$$

Hamiltonoperator:

$$\boxed{H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_2 + V(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t)}$$

wobei gilt:

- Δ_1 bzw. $\Delta_2 \dots$ Laplaceoperator des 1. bzw. 2. Teilchens, kinetische Energie des 1. bzw. 2. Teilchens

- $-\frac{\hbar}{2m}\Delta_1$ bzw. $-\frac{\hbar}{2m}\Delta_2 \dots$ Potential des 1. bzw. 2. Teilchens
- $V(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t) \dots$ potentielle Energie

Interpretation: Wahrscheinlichkeitsdichte: $|\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t)|^2 d^3x_1 d^3x_2$ (für Teilchen 1 im Volumenelement d^3x_1 , für Teilchen 2 im Volumenelement d^3x_2).

Normierung: $\int |\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t)|^2 d^3x_1 d^3x_2 = 1$

für zeitunabhängige Potentiale: $V \equiv V(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$

Stationäre Lösungen: $\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$

wobei $E \dots$ totale Energie des Systems

zeitunabhängige Schrödingergleichung: $H\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = E\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$

Bosonen - Fermionen

Spin:	$s = 0, 1, 2, \dots$	$s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$
Beispiele:	$s = 0 : \underbrace{\pi}_{\text{Pionen}}, K$ $s = 1 : j, \underbrace{W^+, W^-}_{\text{W-Bosonen}}, Z, \underbrace{G}_{\text{Gluonen}}$ $s = 2 : \text{Graviton}$	$s = \frac{1}{2} : e^-, \underbrace{p}_{\text{Protonen}}, \underbrace{n}_{\text{Neutronen}}$
erfüllen:	Bose/Einstein-Statistik kleben aneinander	Fermi/Dirac-Statistik entfernen sich voneinander

Annahme:

Teilchen 1 sei im Zustand $\psi_a(\vec{x}_1)$ mit Quantenzahl a

Teilchen 2 sei im Zustand $\psi_b(\vec{x}_2)$ mit Quantenzahl b

in diesem Fall ist die Wellenfunktion ein Produktzustand für das Totalsystem:

$$\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \psi_a(\vec{x}_1) \cdot \psi_b(\vec{x}_2)$$

einfaches Produkt \rightarrow Wellenfunktion ist faktorisierbar

d.h. wie in der klassischen Physik können wir die Teilchen getrennt betrachten (klassisch wäre: Teilchen 1 hat immer QZ a, nie b und Teilchen 2 hat immer QZ b, nie a)

in QM: Teilchen 1 im Zustand $\psi_a(\vec{x}_1)$, Teilchen 2 im Zustand $\psi_b(\vec{x}_2)$

fundamentaler Unterschied in QM: z.B. bei e^- ist QZ a oder b nicht fix zuordenbar

Quanten sind prinzipiell ununterscheidbar - dem müssen wir Rechnung tragen durch Superposition

Wellenfunktion:

$$\psi_{\pm}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = N[\psi_a(\vec{x}_1)\psi_b(\vec{x}_2) \pm \psi_b(\vec{x}_1)\psi_a(\vec{x}_2)]$$

$N \dots$ Normierung $\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}$ Spin

Bosonen $\rightarrow \psi_+$, Fermionen $\rightarrow \psi_-$

Satz: Zwei Fermionen können nicht in ein und demselben Zustand sein.

Begründung:

$$\text{wenn } \psi_a = \psi_b \text{ wäre } \Rightarrow \psi_{-}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = N[\psi_a(\vec{x}_1)\psi_a(\vec{x}_2) - \psi_a(\vec{x}_1)\psi_a(\vec{x}_2)] = 0$$

Pauli-Verbot: (W. Pauli, 1925) Zwei e^{-} im selben Spin-Zustand können sich nicht am selben Ort aufhalten.

'am selben Ort' entspricht 'im gleichen Orbital'

Also zwei Elektronen im gleichen Orbital müssen verschiedenen Spin haben.

VI. EPR, Relativitätstheorie - Vorträge

15.12.

Vortrag zu EPR von Natalie Romanov, Film zur Quantenmechanik :-D

Vortragsskriptum siehe Anhang 1 (*EPR_Paradoxon_Vortrag.pdf*)

Folien des Vortrags siehe Anhang 2 (*EPR_Paradoxon_Folien.pdf*)

10.1.

Vortrag zu Einstein's Relativitätstheorie von Philipp Köhler

Folien zum Vortrag siehe Anhang 3 (*Relativitaet_Folien.pdf*)

11.1.

Fortsetzung Vortrag

Anmerkung: Da Prof. Bertlmann das nächste Kapitel, Entanglement, mit Nummer VII beschriftet hat, nahm ich an, dass die Vorträge und insbesondere EPR ein eigenes Kapitel darstellen. So stimmt die Nummerierung wieder.

VII. Entanglement

12.1.

verschränkte Quantensysteme; Bell-Ungleichung, Grundlage der Quanteninformati-
on, Nonlocality (Nichtlokalität)

VII.1. Entanglement

Schrödinger (1935): Gesamtsystem aus 2 Teilsystemen

Definition: Verschränkter Zustand (\rightarrow später Entanglement): wenn Gesamtsystem im wohldefinierten Zustand ist, die Teilsysteme aber nicht betrachten System von 2 Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$ (bzw. Photonen mit vertikaler und horizontaler Polarisation)

\Rightarrow Beschreibung mit Tensorprodukt

\rightarrow 4 unabhängige Tensorprodukt-Zustände (Basis 4-dim, 4 Produktzustände)

- $|\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle \equiv |\uparrow\rangle|\uparrow\rangle \equiv |\uparrow\uparrow\rangle$
- $|\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle$
- $|\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle$
- $|\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle$

nennt man auch Separabel (Teilsysteme in genau definiertem Zustand, z.B. Alice immer $|\uparrow\rangle$, Bob immer $|\downarrow\rangle \Rightarrow |\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle$)

z.B. beim dritten Zustand ist $|\downarrow\rangle \in H_A$ von Alice und $|\uparrow\rangle \in H_B$ von Bob (Hilberträume) allgemein: System mit 2 Freiheitsgraden

verschränkte Zustände: Superposition von Produktzuständen (Basis 4-dim Raum \rightarrow Basiswechsel)

$$|\psi^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle \pm |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle)$$

$$|\Phi^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle|\uparrow\rangle \pm |\downarrow\rangle|\downarrow\rangle)$$

Bell-Zustände

$|\psi^\pm\rangle$ und $|\Phi^\pm\rangle$ sind wohldefinierte Quantenzustände \rightarrow Zustände der Teilsysteme sind nicht wohldefiniert

z.B. für $|\psi^\pm\rangle$ mit Alice $|\uparrow\rangle$ und Bob $|\downarrow\rangle$ oder Alice $|\downarrow\rangle$ und Bob $|\uparrow\rangle$ (mit Wahrscheinlichkeit je 50 %)

aber es gibt immer eine Korrelation der Messwerte

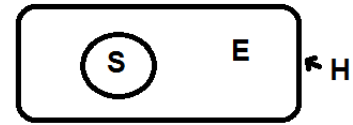
\rightarrow immer wenn Alice $|\uparrow\rangle$ findet, findet Bob $|\downarrow\rangle$

\Rightarrow Grundlage der Quanteninformati

Hilbertraum besteht entweder aus Separabel oder aus Entanglement

$$H = H_S \cup H_E$$

separable Zustände bilden eine konvexe Menge



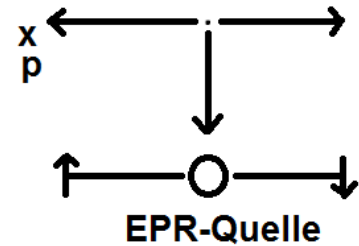
VII.2. EPR-Paradoxon

(Einstein, Podolsky, Rosen) 1935

System mit 2 Teilchen \Rightarrow Korrelation der Messwerte

\Rightarrow EPR hat geschlossen, dass die QM unvollständig ist \rightarrow Realismus fehlt

QM ist vervollständigbar \Rightarrow 30 Jahre später Bell



VII.3. Bell'sche Ungleichungen

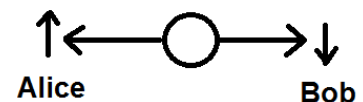
J. S. Bell 1964:

EPR-Paradoxon (Debatte zwischen Einstein und Bohr) kann experimentell entschieden werden

Bell'sches Theorem: In bestimmtem Experiment sind alle LRT (Lokal Realistischen Theorien) mit der QM unverträglich und diese Unverträglichkeit kann man mit der Bell'schen Ungleichung zeigen.

Bell-Ungleichung: wir machen Spinmessungen bei Alice und Bob für verschränkten Zustand

Observable von Alice (\vec{a} zeigt in Richtung des Stern-Gerlach-Magneten):



$$A^{Obs}(\vec{a}) \rightarrow A(\vec{a}, \underbrace{\lambda}_{\text{Realismus}}) = \pm 1, \underbrace{0}_{\text{kein Teilchen}}$$

Observable von Bob:

$$B^{Obs}(\vec{b}) \rightarrow B(\vec{b}, \lambda) = \pm 1, 0$$

λ sagt, dass $A(\vec{a}, \lambda)$ schon vorher gegeben \rightarrow egal ob gemessen wird oder nicht

$\lambda \dots$ verborgener Parameter, hidden variable theory - HVT

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{a} \leftarrow A^{Obs}(\vec{a})$$

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{b} \leftarrow B^{Obs}(\vec{b})$$

Erwartungswert für gemeinsame Spinmessung:

$$E(\vec{a}, \vec{b}) = \int d\lambda \rho(\lambda) A(\vec{a}, \lambda) B(\vec{b}, \lambda) \quad \text{Bell'sche Lokalität}$$

wobei $\rho(\lambda) \dots$ Wahrscheinlichkeitsfunktion; beliebige, normierte ($\int d\lambda \rho(\lambda) = 1$) Verteilungsfunktion

$A(\vec{a}, \lambda)$ - Alice, ist unabhängig von Bobs Messung, A unabhängig von \vec{b} und umgekehrt
 \Rightarrow Ungleichung für den Erwartungswert ableiten:

$$\begin{aligned} E(\vec{a}, \vec{b}) - E(\vec{a}, \underbrace{\vec{b}'}_{\text{Bob ändert Richtung}}) &= \int d\rho A(\vec{a}, \lambda) B(\vec{b}, \lambda) - A(\vec{a}, \lambda) B(\vec{b}', \lambda) = \\ &= \int d\rho \underbrace{A(\vec{a}, \lambda) B(\vec{b}, \lambda)}_{|A \cdot B| \leq 1} [1 \pm A(\vec{a}', \lambda) B(\vec{b}', \lambda)] - \int d\rho \underbrace{A(\vec{a}, \lambda) B(\vec{b}', \lambda)}_{|A \cdot B| \leq 1} [1 \pm A(\vec{a}', \lambda) B(\vec{b}, \lambda)] \end{aligned}$$

(Nullsummenerweiterung) da gilt $|A - B| \leq |A| + |B|$

$$\Rightarrow |E(\vec{a}, \vec{b}) - E(\vec{a}, \vec{b}')| \leq \int d\rho [1 \pm A(\vec{a}', \lambda) B(\vec{b}', \lambda)] + \int d\rho [1 \pm A(\vec{a}', \lambda) B(\vec{b}, \lambda)]$$

$$\int d\rho = 1 \quad \Rightarrow |E(\vec{a}, \vec{b}) - E(\vec{a}, \vec{b}')| \leq 2 \pm |E(\vec{a}', \vec{b}') + E(\vec{a}', \vec{b})|$$

$$\Rightarrow |E(\vec{a}, \vec{b}) - E(\vec{a}, \vec{b}')| + |E(\vec{a}', \vec{b}') + E(\vec{a}', \vec{b})| \leq 2$$

Bell-Ungleichung, gilt für alle LRT; wurde von Clauser, Horne, Shimony, Holt abgeleitet \rightarrow CHSH-Ungleichung

in QM \rightarrow Observable: $\vec{\sigma} \cdot \vec{a} \otimes \vec{\sigma} \cdot \vec{b}$

davon Erwartungswert im Zustand $|\psi^-\rangle$:

$$E_{QM}(\vec{a}, \vec{b}) = \langle \psi^- | \vec{\sigma} \cdot \vec{a} \otimes \vec{\sigma} \cdot \vec{b} | \psi^- \rangle = -\vec{a} \cdot \vec{b} = -\cos(\underbrace{\alpha - \beta}_{\text{eingeschl. Winkel}})$$

wähle Bell-Winkel so, dass:

$$\alpha - \beta = \alpha' - \beta' = 45^\circ = \frac{\pi}{4} \quad \alpha - \beta' = \frac{3\pi}{4} \quad \alpha' - \beta = \frac{\pi}{4}$$

$$\Rightarrow \cos\left(\frac{\pi}{4}\right) = \frac{\sqrt{2}}{2} \quad \cos\left(\frac{3\pi}{4}\right) = -\frac{\sqrt{2}}{2}$$

setzen ein in CHSH:

$$\left| -\frac{\sqrt{2}}{2} - \frac{\sqrt{2}}{2} \right| + \left| -\frac{\sqrt{2}}{2} - \frac{\sqrt{2}}{2} \right| \leq 2$$

$$\text{QM} \quad 2\sqrt{2} \leq 2 \quad \text{LRT}$$

WIDERSPRUCH \Rightarrow QM verletzt Bell-Ungleichung

\Rightarrow Realismus UND Lokalität in QM nicht gegeben \Rightarrow QM nichtlokal (nonlocal)

Experiment: Zeilingergruppe (1998): $S_{exp} = 2,73 \pm 0,002$

Die Natur ist nichtlokal!

VIII. Dichtematrizen

17.1.

Wichtig für Statistik (Mischung von verschiedenen Zuständen)

VIII.1. Allgemeine Eigenschaften

- bisher: Zustand gegeben durch Vektor $|\psi\rangle \in \mathbb{H}$ (Hilbertraum)
→ reiner Zustand (nichts Klassisches dabei)
als Superposition $|\psi\rangle = a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle$
- erinnere: Erwartungswert von Observable A
 $\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle \Rightarrow$ wichtig für Experiment
 $= \sum_n |c_n|^2 a_n = A | \psi_n \rangle = a_n | \psi_n \rangle \quad a_n \in \mathbb{R}$

Um den Erwartungswert von A zu reproduzieren, ist folgende Def. naheliegend:

Definition: Physikalischer Zustand wird durch eine Dichtematrix definiert:

$$D = |\psi\rangle\langle\psi|$$

$$\text{tr} D = \sum_n \langle n | \psi \rangle \langle \psi | n \rangle = \langle \psi | \sum_n | n \rangle \underbrace{\langle n |}_{=P_n} | \psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle$$

$$P_n \dots \text{Projektionsoperator} \quad P_n^2 = P_n \quad \sum_n P_n = 1$$

$$\boxed{\rho = |\psi\rangle\langle\psi|} \quad (3 \times 3)$$

⇒ Eigenschaften von ρ :

- $\rho^\dagger = \rho \Rightarrow$ Eigenwerte sind reell ¹
- $\text{tr} \rho = 1 = \langle \psi | \psi \rangle$
- $\rho^2 = \rho$ reiner Zustand
- $\rho \geq 0$

⇒ Erwartungswert von A :

$$\langle \psi | A | \psi \rangle = \text{tr} \underbrace{|\psi\rangle\langle\psi|}_{\rho} A = \text{tr} \rho A$$

¹† ... adjungiert, entspricht T^* , also transponiert und komplex konjugiert

$$\langle A \rangle = \text{tr} \rho A$$

Erwartungswert

$\langle A \rangle = \sum_n |c_n|^2 a_n$ $n \dots$ Eigenwerte / Messwerte
 $|c_n|^2 \dots$ Wahrscheinlichkeit für a_n (Häufigkeit, mit der der Wert a_n vorkommt)

$$|c_n|^2 = \frac{N_n}{N}$$

Gemischter Zustand

Es gibt N Objekte total: davon sind N_i im reinen Zustand $|\psi_n\rangle$.
 Wahrscheinlichkeit für $|\psi\rangle$:

$$P_i = \frac{N_i}{N}$$

Erwartungswert für Observable A :

$$\langle A \rangle = \sum_i p_i \langle \psi_i | A | \psi_i \rangle = \sum_i p_i a_i$$

führt zur Definition der Dichtematrix:

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \quad \text{Summe aus reinen Zuständen}$$

mit $0 \leq p_i \leq 1$ $\sum_i p_i = 1$

Erwartungswert:

$$\langle A \rangle = \text{tr} \rho A$$

Eigenschaften - gemischte Dichtematrix

- $\rho^\dagger = \rho$
- $\text{tr} \rho = 1$
- $\rho^2 = \sum_i p_i^2 |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \neq \rho$
 $\delta = \text{tr} \rho^2 < 1 \dots$ Maß für Mischung
 $\frac{1}{d} \leq \delta \leq 1$ wobei $d \dots$ Dimension des Vektorraums ($d = 2 \dots$ Spin)
 $\Rightarrow \delta = \frac{1}{2}$ $\delta_{\max} \dots$ maximal gemischt

Gleichung für zeitliche Entwicklung von δ

→ von Neumann-Gleichung, gehen aus von Schrödingergleichung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = H |\psi\rangle \xrightarrow{\text{adjung.}} -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \psi| = \langle \psi| H \quad (H^\dagger = H)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho = i\hbar (|\psi\rangle\langle\psi| + |\psi\rangle\langle\psi|) = H|\psi\rangle\langle\psi| + |\psi\rangle\langle\psi|H = H\rho - \rho H = [H, \rho]$$

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} \rho = \frac{-i}{\hbar} [H, \rho]} \Rightarrow \rho(t)$$

Quantenaussagen zur Diffusionsgleichung

VIII.2. Beispiel Spin

2-dim Raum (2×2 -Matritzen)

$\rho \in HS$ Hilbert-Schmidt-Raum

jede allgemeine 2×2 -Matrix ist gegeben durch $\mathbf{1}, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ (Pauli-Matrizen)

$$\rightarrow \rho = \frac{1}{2}(\mathbf{1} + \underbrace{\vec{a}}_{\text{Gewichtung}} + \vec{\sigma})$$

$tr \sigma_i = 0$ Bloch-Darstellung $\vec{a} \dots$ Bloch-Vektor, beschreibt Kugel

aus $\rho^2 = \rho$ - reiner Zustand

$$\Rightarrow |\vec{a}|^2 = 1 \Rightarrow \text{reine Zustände auf Oberfläche der Kugel}$$

aus $\rho^2 \neq \rho$

$\Rightarrow |\vec{a}|^2 < 1 \Rightarrow$ gemischte Zustände sind innen wenn $|\vec{a}|^2 \rightarrow 0 \Rightarrow$ maximal gemischter Zustand

$$\Rightarrow \rho \Rightarrow \rho_{max} = \frac{1}{2}\mathbf{1}$$

Beispiel: $|\vec{a}|^2 = 1$ $\vec{a} \parallel z$ -Achse

$\rho_{\uparrow} = \frac{1}{2}(\mathbf{1} + \sigma_z)$ nach oben polarisiert

$$\rho_{\uparrow} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = |\uparrow\rangle\langle\uparrow|$$

$$\rho_{\downarrow} = \frac{1}{2}(\mathbf{1} - \sigma_z) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = |\downarrow\rangle\langle\downarrow|$$

$$\boxed{\rho_{max} = \frac{1}{2}(\rho_{\uparrow} + \rho_{\downarrow})}$$

Diese Zerlegung ist nicht eindeutig!

18.1.

Dichtematrix für Spin $\frac{1}{2}$ rein

$$\rho_{\uparrow} = |\uparrow\rangle\langle\uparrow| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\rho_{\downarrow} = |\downarrow\rangle\langle\downarrow| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

gemischt

$$\rho = \sum_i p_i \rho_i^{\text{rein}}, \quad \text{wobei } 0 \leq p_i \leq 1, \quad \sum_i p_i = 1$$

 \Rightarrow maximal gemischte Dichtematrix

$$\rho_{\max} = \frac{1}{2}(\rho_{\uparrow} + \rho_{\downarrow}) = \frac{1}{2}\mathbf{1}$$

2

$$\Rightarrow \rho_{\max}^2 = \frac{1}{4}\mathbf{1} = \frac{1}{2}\rho_{\max} \neq \rho_{\max}$$

\Rightarrow gemischt
und Maß für Mischung:

$$\boxed{\delta = \text{tr} \rho_{\max}^2 = \frac{1}{4} \text{tr} \mathbf{1} = \frac{1}{2}} \quad \text{max mix}$$

Maximal gemischte Dichtematrix zerlegbar in:

$$\rho_{\max} = \frac{1}{2}(\rho_{\uparrow} + \rho_{\downarrow})$$

= ... andere Zerlegung (nicht eindeutig)

Satz

Ein und dieselbe gemischte Dichtematrix ist auf verschiedene Weise zu erhalten (nicht eindeutig).

Physikalische Vorhersagen nur von Dichtematrix abhängig

$$\langle A \rangle = \text{tr} \rho A$$

Also physikalisch können wir verschiedene Zerlegungen die zur selben Dichtematrix führen nicht unterscheiden.

Verschiedene Typen interpretieren wir als verschiedene Ausdrücke ein und derselben unvollständigen Information, die wir über das System haben.

Das führt zum Entropiebegriff in der Quantenphysik (diese misst den Grad der Unbestimmtheit in einem Quantensystem).

² $\mathbf{1}$ Einheitsmatrix

Satz (Thirring) In gemischtem Zustand haben wir nur teilweise Information über das System. Die Entropie misst, wie viel Information zur maximalen Information fehlt (wie weit ρ_{mix} von ρ_{rein} entfernt ist).

von Neumann Entropie:

$$S(\rho) = -\text{tr} \rho \log_2(\rho) \quad \log_2(x) = \frac{\ln x}{\ln 2}$$

(2-dim Raum)

$$S(\rho) = -\sum_i \lambda_i \log_2 \lambda_i \quad \lambda_i \dots \text{Eigenwerte von } \rho$$

Beispiel: $\rho_{max} = \frac{1}{2} \mathbf{1}$ max mix

$$S(\rho_{max}) = -\frac{1}{2} \log_2 \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \log_2 \frac{1}{2} = -\frac{1}{2} \cdot (\log_2 1 - \log_2 2) \cdot 2 = \frac{1}{2} \cdot 2 = 1$$

Beispiel: reiner Zustand: $|\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + e^{i\alpha}|\downarrow\rangle)$

$$\Rightarrow \rho_\alpha = |\alpha\rangle\langle\alpha| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & e^{-i\alpha} \\ e^{i\alpha} & 1 \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{diag}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \boxed{S(\rho_\alpha) = -1 \cdot \underbrace{\log_2(1)}_{=0} - 0 \cdot \log_2(0) = 0}$$

Teil II.

Statistische Physik

I. Thermodynamik

I.1. Wahrscheinlichkeiten

Zufälliges Ereignis:

- Ein Ereignis kann unter bestimmten Bedingungen eintreten oder nicht.
- Die Wahrscheinlichkeit ist eine quantitative Abschätzung eines zufälligen Ereignisses.
- Bei n Ereignissen tritt ein Ereignis mit Wahrscheinlichkeit $w = \frac{1}{n}$ auf.
- m gleiche Ereignisse treten mit Wahrscheinlichkeit $w = \frac{m}{n}$ auf.
- $w = 0 \dots$ unmöglich, $w = 1 \dots$ sicher
- Wahrscheinlichkeiten können addiert (irgend eines von mehreren Ereignissen) und multipliziert (gleichzeitiges Auftreten von mehreren Ereignissen) werden

Beispiel:

5 schwarze, 3 grüne und 2 rote Kugeln:

- Wahrscheinlichkeit für 1 grüne Kugel: $w = \frac{3}{10} = 0,3$
- Wahrscheinlichkeit für 1 grüne oder 1 rote Kugel: $w = \frac{3}{10} + \frac{2}{10} = 0,5$
- Wahrscheinlichkeit für grüne und dann rote Kugel: $w = \frac{3}{10} \cdot \frac{2}{10} = 0,06$

wiederholte Versuche:

n Versuche, bei jedem Versuch ist die Wahrscheinlichkeit für ein Ereignis w
Wahrscheinlichkeit, dass ein bestimmtes Ereignis m mal auftritt:

$$w_{m,n} = \binom{n}{m} w^m (1-w)^{n-m} \text{ (Binomialverteilung), wobei } \binom{n}{m} = \frac{n!}{m!(n-m)!}$$

für große n, m ist die Stirling-Formel eine gute Approximation (auch schon bei z.B. $n = 20$ ganz gute Approximation):

$$n! \stackrel{n \rightarrow \infty}{\approx} \sqrt{2\pi n} n^{n+\frac{1}{2}} e^{-n}$$

Binomialverteilung $\xrightarrow{m, n \text{ groß}}$ Gaußverteilung

$$\Rightarrow w_{m,n} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$$

wobei $\sigma = \sqrt{nw(1-w)} \dots$ Breite der Gaußverteilung, $x = m - nw$, $(x' = \frac{x}{\sigma} = \frac{m-nw}{\sigma})$

I.2. Brownsche Bewegung

Robert Brown (Botaniker): Hat die Bewegung von mikroskopisch kleinen Teilchen in Flüssigkeit untersucht (1827).

Erklärung: Albert Einstein, 1905 - Brownsche Bewegung als Test für molekularkinetische Theorie der Wärme

J. Perrin 1908: Experiment, Brownsche Bewegung gemessen, Einstein-Relationen bestätigt

19.1.

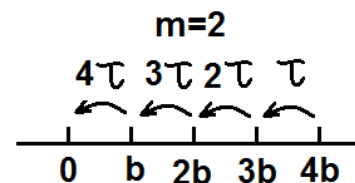
Modell: 1-dim

1. Teilchen zur Zeit $t = 0$ am Ort $x = 0$
2. innerhalb Zeitspanne $t = \tau$ legt Teilchen Wegstrecke $x = \pm b$ zurück
3. jeder neue Schritt vom vorherigen Schritt unabhängig
4. jede Richtung + oder - gleich wahrscheinlich

betrachten folgende Orte: $x_{m,n}(t = n\tau) = (2m - n) \cdot b$

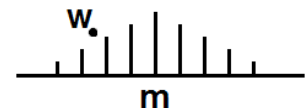
Wahrscheinlichkeit, das Teilchen am Ort $x_{m,n}$ zur Zeit $t = n\tau$ zu finden (Binomialverteilung):

$$w(x_{m,n}) = \binom{n}{m} w^m (1-w)^{n-m}$$



nach jedem Schritt $w = \frac{1}{2}$

$$w(x_{m,n}) = \binom{n}{m} \left(\frac{1}{2}\right)^m \left(\frac{1}{2}\right)^{n-m} \Rightarrow w(x_{m,n}) = 2^{-n} \binom{n}{m}$$



Annahme: n, m groß, auch $n - m$ groß \Rightarrow Binomialverteilung
 \rightarrow Gauß-Verteilung (verwenden Stirling-Formel: $n! \approx \sqrt{2\pi n} n^{n+\frac{1}{2}} e^{-n}$)

$$\text{BV} \rightarrow \text{GV: } w_{m,n} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}, \text{ wobei } \sigma = \sqrt{nw(1-w)} \quad x = \frac{m-nw}{\sigma}$$

hier: $n = \frac{t}{\tau}$ $m - n = \frac{x_{m,n}}{b}$ $w = \frac{1}{2}$ $x = \frac{2m-n}{\sqrt{n}}$ $\sigma = \frac{\sqrt{n}}{2}$

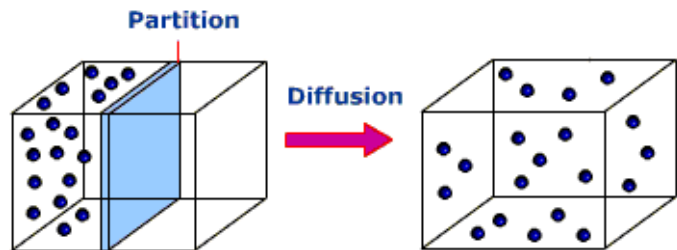
$$\Rightarrow w(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{2}{\sqrt{n}} e^{-\frac{(2m-n)^2}{2n}} \Rightarrow w(x) = \sqrt{\frac{2\tau}{\pi t}} \cdot e^{-\frac{\tau}{2b^2} \frac{x^2}{t}}$$

$\tau, b \dots$ fix vorgegeben, $w \dots$ Wahrscheinlichkeit, Teilchen am Ort x zur Zeit t zu finden

I.3. Diffusion

Übergang von mikro- in makro-Physik: sehr viele Teilchen, jedes führt Brownsche Bewegung aus, es gelten Gesetze für große Zahlen

→ stochastische Bewegung,
Wahrscheinlichkeitsdichte σ ,
Teilchendichte ρ



Diffusion: Durchmischung von zwei Substanzen bis zur vollständigen Durchmischung. Bereiche höhere Konzentration gehen über in Bereiche niedriger Konzentration. Gehen aus von der Wahrscheinlichkeit für große Zahl von Teilchen (diskrete Punkteverteilung → kontinuierliche Punkteverteilung), also $\sum w(x_{m,n}) \rightarrow \int dx \sigma_t(x) \stackrel{\text{normiert}}{=} 1$

$$w(x_{m,n}) \rightarrow \sigma_t = \frac{1}{\sqrt{\pi 4Dt}} \cdot e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \quad \text{wobei } D := \frac{b^2}{2\tau} \dots \text{Diffusionskonstante}$$

$\sigma_t(x)$ ist Wahrscheinlichkeitsdichte, ist normiert ($\int \sigma_t(x) = 1$)

Wahrscheinlichkeitsdichte $\sigma_t(x)$ identifizieren wir physikalisch mit Teilchendichte $\rho_t(x)$
 $\sigma_t(x) \equiv \rho_t(x)$ ist Lösung der Diffusionsgleichung:

$$\frac{d}{dt} \rho_t(x) = D \frac{d^2}{dx^2} \rho_t(x)$$

Lösung: $\rho_t(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi 4Dt}} \cdot e^{-\frac{x^2}{4Dt}}$ für Anfangsbedingung bei $t = 0$ sei $\rho_{t=0}(x) = \delta(x)$ (Delta-Funktion); allgemeine Lösung:

$$\rho_t(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi 4Dt}} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} dx' e^{-\frac{(x-x')^2}{4Dt}} f(x') \quad \text{wobei } \rho_{t=0}(x) = f(x)$$

in 3 Dimensionen:

$$\rho_t(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{(\pi 4Dt)^3}} \cdot e^{-\frac{\vec{x}^2}{4Dt}}$$

(QM von Neumann Gleichung)

$$\frac{d}{dt}\rho_t(\vec{x}) = D\Delta\rho_t(x) \text{ - Diffusionsgleichung}$$

(identisch mit Wärmeleitungsgleichung)

erinnern an Kontinuitätsgleichung: Mechanik - Massenerhaltung:

$$\dot{\rho} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$$

ist erfüllt, wenn Def. Diffusionsdichte

$$\vec{j}_D = -D\vec{\nabla}\rho \quad \overset{\nabla^2 = \Delta}{\Leftrightarrow} \quad \text{Diffusionsgleichung}$$

(1. Fick'sches Gesetz)

(2. Fick'sches Gesetz)

I.4. Beziehung zur Theorie der Wärme

Wärme \rightarrow Eigenbewegung der Teilchen

Diffusion geschieht aufgrund der thermischen Eigenbewegung der Teilchen

Wärmeleitung ist äquivalent zum Diffusionsprozess

Diffusionsgleichung \equiv Wärmeleitungsgleichung

Konzentrationsausgleich durch Diffusion äquivalent zu Wärmeausgleich \rightarrow thermisches Gleichgewicht

betrachten Verhalten von Brown'schen Teilchen unter einer Kraft \vec{F} :

Bremswirkung durch Teilchen \Rightarrow Teilchen erreicht Grenzggeschwindigkeit $\vec{v} = B\vec{F}$, wobei $B \dots$ Beweglichkeit; $v \sim F$ im Medium, keine freie Bewegung!

Definition Beweglichkeitsstromdichte: $\boxed{\vec{j}_B = \rho\vec{v}}$ $\rho \dots$ Teilchendichte $\vec{j}_B = \rho B\vec{F}$

Kraft als Potential V : $\vec{F} = -\vec{\nabla}V \Rightarrow \vec{j}_B = -\rho B\vec{\nabla}V$

es erfolgt Gleichgewicht, wenn Balance zwischen Beweglichkeit und Diffusion herrscht:

$$\Rightarrow \vec{j}_B + \vec{j}_D = 0$$

erinnernd Diffusionsstrom: $\vec{j}_D = -D\vec{\nabla}\rho$, wobei $D \dots$ Diffusionskonstante
interessieren uns für Teilchenzahldichte ρ im Gleichgewicht:

$$\Rightarrow -\rho B\vec{\nabla}V - D\vec{\nabla}\rho = 0$$

das ist eine Differentialgleichung für ρ , lösen: $\int \frac{\vec{\nabla}\rho}{\rho} = -\frac{B}{D} \int \vec{\nabla}V$

$$\ln \rho = -\frac{B}{D}V + \ln c \Rightarrow \boxed{\rho(x) = c \cdot e^{-\frac{B}{D}V(x)}}$$

Die Teilchendichte ist also abhängig vom Potential, dass die Teilchen der Brownschen Bewegung haben.

Vergleichen Resultat mit molekularkinetischer Theorie der Wärme, Wahrscheinlichkeitsdichte der Mikrozustände im thermischen Gleichgewicht ist gegeben durch die Boltzmann-Verteilung: $\rho = c \cdot e^{-\frac{E}{kT}}$, wobei $E \dots$ Energie des Systems, $T \dots$ Temperatur, $k \dots$ Boltzmannkonstante

aus Vergleich folgt: $\frac{B}{D} = \frac{1}{kT} \Rightarrow \boxed{B = \frac{D}{kT}}$ (Einstein'sche Beziehung)

also Beweglichkeit ist Diffusion durch Temperatur; bei kleinen Temperaturen steigt B , damit wird \vec{j}_B groß ('Supraleitung')

\Rightarrow erhalten von Thermodynamik unabhängige Bestimmung der Boltzmann-Konstante
Experiment: Perrin (NP 1926), hat Einstein-Beziehung bestätigt!

II. Entropie

fundamentale Thermodynamik, Zustandsgröße, beschreibt Zahl der Mikrozustände, die durch bestimmten Makrozustand realisiert sind

Entropie ist extensive Größe, wenn z.B. ein Volumen V in V_1 (5 Teilchen) und V_2 (kein Teilchen) geteilt ist, ist die Entropie kleiner, als wenn die Teilchen auf das ganze Volumen V verteilt sind. Entropie steigt wenn das Volumen größer wird.

Entropie - thermodynamische Sicht, Clausius 1865 (phänomenologisch)

statistische Sicht, Boltzmann 1877, Maß für Zustandsdichte der Mikrozustände

II.1. Entropie - thermodynamische Formulierung

$$dS = \frac{\delta Q}{T} \quad \text{bei reversiblen Vorgängen}$$

wobei $S \dots$ Entropie, $dS \dots$ totales Differential, $\delta Q \dots$ Wärmeübertragung (klein) (+ bei Zufuhr, - bei Abfuhr), $T \dots$ Temperatur

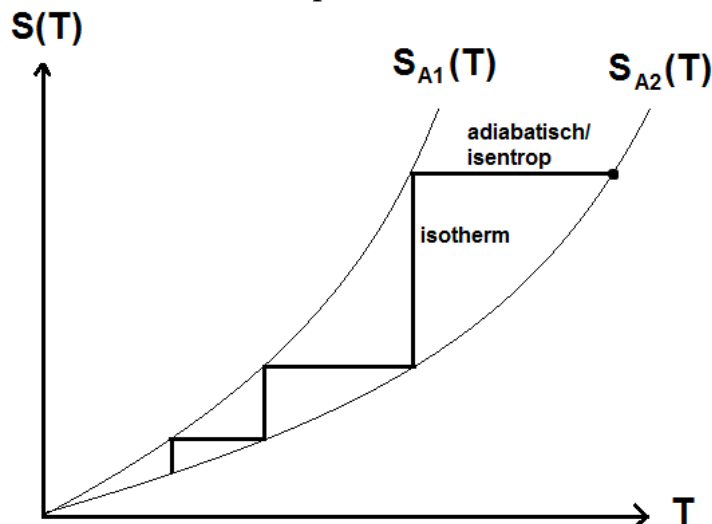
bei irreversiblen Vorgängen: $dS = \frac{\delta Q}{T} + \frac{\delta W_{diss}}{T}$, $\delta W_{diss} \geq 0 \dots$ dissipative Arbeit, die dem System zugeführt wird (Reibungsverluste)

2. Hauptsatz der Wärmelehre: (Clausius) Es gibt keinen Kreisprozess (d.h. zyklisch arbeitende Maschine), mit einziger Wirkung, Wärme vom kälteren zum wärmeren Reservoir zu transportieren

25.1. Nullpunkt der Entropie ist festgelegt durch.

3. Hauptsatz der Wärmelehre: Die (klassische) Entropie wird beim absoluten Nullpunkt der Temperatur $T = 0$ null, also: $S = 0 \Leftarrow T = 0$

\Rightarrow der absolute Nullpunkt kann nicht in endlich vielen Schritten erreicht werden:



A... extensive Größe; \Rightarrow absoluter Nullpunkt nicht erreichbar. (derzeit ca. 10^{-9} K erreicht!)

1. Hauptsatz der Wärmelehre: $dU = \delta Q + \delta W$ (Änderung der inneren Energie = Wärmeänderung + Arbeit); $U \dots$ innere Energie, $W \dots$ Arbeit (am oder vom System geleistet)
 Bemerkung: wenn $dU = 0$ - adiabatische Verschiebung der Wände: $V \rightarrow V + dV$ $S \rightarrow S + dS$ $\delta W = -pdV$

$$\Rightarrow \delta Q = -\delta W \Rightarrow \delta Q = pdV \Rightarrow \text{Entropie } dS = \frac{\delta Q}{T} = \frac{pdV}{T}$$

Zustandsgleichung für ideale Gase: $p \cdot V = NkT \Rightarrow p = \frac{NkT}{V}$

$$\Rightarrow dS = Nk \frac{dV}{V} \quad \int dS = \int Nk \frac{dV}{V} \Rightarrow S = Nk \ln V \Rightarrow S = k \ln V^N$$

$$V^N := \Omega \Rightarrow \boxed{S = k \ln \Omega} \text{ Boltzmann}$$

II.2. Entropie - statistische Formulierung

Makrozustand wird erklärt durch das Verhalten der Mikrozustände der Atome (Mikrokomponenten).

Mikrozustände: Gegeben durch Angabe aller Orte und Impulse der Teilchen. $(\vec{q}, \vec{p}) \dots$ Phasenpunkt, Punkt im Phasenraum $(2 \cdot 3 = 6) \cdot N$ Dimension ($N \dots$ Anzahl der Teilchen im System).

Es gelten die klassisch kanonischen Gleichungen der Mechanik (z.B für zeitliche Entwicklung). Die Zeitliche entwicklung führt für jeden Punkt im Phasenraum zu einer Phasentrajektorie. Alle möglichen zugänglichen Phasentrajektorien bilden das Phasenraumvolumen Ω (bei gegebenen Makro-Randbedingungen).

Entropie: ist ein Maß für das zugängliche Phasenraumvolumen, unter gegebenen Makro-Randbedingungen, also ein Maß für die Anzahl der Mikrozustände.

Je größer die Entropie ist, desto unbestimmter sind die Mikrozustände, also desto weniger Information über die Mikrozustände ist vorhanden.

Fundamentales Postulat der statistischen Physik: Jeder Mikrozustand in einem abgeschlossenen System im Gleichgewicht kommt mit gleicher Wahrscheinlichkeit vor. \Rightarrow abgeschlossenes System hat maximalen Energiewert (Prinzip der maximalen Energie).

Boltzmann-Formel (1877):

$$S = k \cdot \ln \Omega$$

wobei $k \dots$ Boltzmann-Konstante, $\Omega \dots$ Phasenraumvolumen

$S \sim N$ extensive Größe, A, B unabhängige Systeme:

$$\Omega_{\text{Avereinigt}B} = \Omega_A \cdot \Omega_B \Rightarrow S_{\text{Avereinigt}B} = S_A + S_B$$

2. Hauptsatz modernere Formulierung: Ist ein System zu 2 Zeiten 'vorher' und 'nachher' von der Umgebung isoliert, d.h. übt es keinen dauernden Einfluss auf die Umgebung aus, dann gilt im Gleichgewicht, dass $\delta S \geq 0$. Also $\Delta S = S(t_2) - S(t_1) \geq 0$ für $t_2 > t_1$, also warm \rightarrow kalt, und nicht umgekehrt.

Spin Beispiel: $5N$ Spin $\frac{1}{2}$, davon $3N$ Spin \uparrow , $2N$ Spin \downarrow ; Frage: Entropie des Spin-Systems (angenommen $N = 1 \Rightarrow 5$ Spins): Möglichkeiten: $\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow$ $\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow \dots \Rightarrow 10$ Möglichkeiten

$$\Rightarrow \text{Phasenraumvolumen } \Omega = \binom{5N}{2N} = \frac{(5N)!}{(2N)!(3N)!}$$

für $N \rightarrow \infty$: Stirling-Formel ($n! \approx \sqrt{2\pi n} n^{n+\frac{1}{2}} e^{-n}$, für $n \rightarrow \infty$ trägt nur n^n bei)

$$\Rightarrow \Omega = \frac{5N^{5N}}{2N^{2N} 3N^{3N}} = e^{5N \ln 5 + \ln N} e^{-2N \ln 2 + \ln N} e^{-3N \ln 3N} = e^{-5N(-\ln 5 + \frac{2}{5} \ln 2 + \frac{3}{5} \ln 3)}$$

(weil $\ln N$ nicht beiträgt - kann man vernachlässigen, außerdem Trick: $-\ln 5 = -\frac{2}{5} \ln 5 - \frac{3}{5} \ln 5$)

$$\Rightarrow \Omega = e^{-5N(\frac{2}{5} \ln \frac{2}{5} + \frac{3}{5} \ln \frac{3}{5})} \Rightarrow \ln \Omega = -5N(\frac{2}{5} \ln \frac{2}{5} + \frac{3}{5} \ln \frac{3}{5})$$

binäre Entropiefunktion: $h(\eta) = \eta \ln \eta + (1 - \eta) \ln(1 - \eta)$, für $\eta = \frac{2}{5}$ oder $\frac{3}{5} \Rightarrow \ln \Omega = -5N h(\eta) \Rightarrow S = -5N \cdot k \cdot h(\frac{2}{5}) \Rightarrow S = 3,36 Nk$

(bei Beispiel 2) $\Delta S = 207k$

26.1.

III. Thermodynamische Zustandsgrößen und Verteilungen

III.1. Temperatur als Gleichgewichtsgröße

Geg.: 2 Systeme A und B, die voneinander isoliert sind. Jedes System sein in seinem inneren (thermodynamischen) Gleichgewicht.

Charakterisieren Systeme durch: innere Energien U_A, U_B und Entropien S_A, S_B

bringe Systeme in Kontakt: \Rightarrow es gibt Energiefluss zwischen den Systemen

vorher $U_A \rightarrow U_A + u$ nachher vorher $U_B \rightarrow U_B - u$ nachher (u klein)

\Rightarrow es gibt auch eine Entropieänderung (Entropie als Funktion der inneren Energie gesehen: $S = S(U)$)

vorher: $S_A = S(U_A) \rightarrow S(U_A + u)$ nachher vorher $S_B = S(U_B) \rightarrow S(U_B - u)$ nachher

(vorher: Systeme isoliert, nachher: Systeme in Kontakt)

Gesamtentropie: wird maximal

$S = S_A + S_B \rightarrow \max.$, wenn die Steigung der Tangente 0 ist, da $S = S(U) \Rightarrow \frac{dS}{dU} = 0$

Also im Thermodynamischen Gleichgewicht ist die Entropie maximal, $\Rightarrow \boxed{\frac{dS}{dU} = 0} \Rightarrow$

$$\boxed{\frac{dS_A}{dU_A} = \frac{dS_B}{dU_B}} \quad (\text{kein Minus weil einmal } +u, \text{ einmal } -u)$$

$$(S = S_A(U_A + u) + S_B(U_B - u) \stackrel{\text{Taylor}}{=} S_A(U_A) + S_B(U_B) + \underbrace{\left(\frac{dS_A}{dU_A} - \frac{dS_B}{dU_B}\right)}_{\stackrel{!}{=0}} u + \dots)$$

legt nahe, eine thermodynamische Gleichgewichtsgröße zu definieren:

$$(\text{absolute}) \text{ Temperatur } T := \left(\frac{dS(U)}{dU} \right)^{-1}$$

0. Hauptsatz der Thermodynamik: Es gibt bei Energieaustausch von zwei Systemen eine Gleichgewichtsgröße, nämlich die Temperatur. Sind A und B im Gleichgewicht, B und C im Gleichgewicht \Rightarrow A und C sind im Gleichgewicht (also die Relation 'Systeme sind im Gleichgewicht' ist transitiv ;-))

III.2. Boltzmann-Verteilung

Geg.: großes thermodynamisches System mit bestimmten Makro-Randbedingungen (in bestimmtem Makrozustand).

Alle zugehörigen Mikrozustände nehmen ein bestimmtes Phasenraumvolumen Ω_0 ein (\rightarrow Anzahl der möglichen Mikrozustände für diesen Makrozustand).

aus Entropie $S = k \cdot \ln \Omega$ folgt: $\Omega_0 = e^{\frac{S(U)}{k}}$

betrachten kleines Teilsystem mit Energie ε_j mit $\varepsilon_0 = 0$

Aufteilung: kleines System + großes Restsystem, kleines System gibt Energie ab

totale Energie: $U = \underbrace{\varepsilon_j}_{\text{kleines Teilsystem: } j} + \underbrace{(U - \varepsilon_j)}_{\text{großer Rest}}$

betrachte alle möglichen Aufteilungen des Phasenraumvolumens: $\Omega = \sum_j \Omega_j$

für großes Restsystem: Entropie

$$S(U - \varepsilon_j) = S(U) - \underbrace{\frac{dS}{dU}}_{T^{-1}} \varepsilon_j + \dots \quad \forall j$$

für ein bestimmtes Phasenraumvolumen Ω_j folgt:

$$\Omega_j = e^{\frac{1}{k} S(U - \varepsilon_j)} = e^{\frac{S(U)}{k}} \cdot e^{-\frac{dS}{dU} \frac{\varepsilon_j}{k}}$$

$$\Rightarrow \boxed{\Omega_j = e^{\frac{S(U)}{k}} \cdot e^{-\frac{\varepsilon_j}{kT}}}$$

Phasenraumvolumen \sim Wahrscheinlichkeit der Mikrozustände

dann gilt Gleichverteilung der Wahrscheinlichkeiten der Mikrozustände

$$\frac{w(\varepsilon_j)}{w(\varepsilon_0)} = \frac{\Omega_j}{\Omega_0} = e^{\frac{S(U - \varepsilon_j)}{k}} e^{S(U)/k} = \boxed{e^{-\frac{\varepsilon_j}{kT}} = \frac{w(\varepsilon_j)}{w(\varepsilon_0)}} \quad \text{Boltzmann-Verteilung}$$

$$\text{mit } \beta = \frac{1}{kT} \Rightarrow \frac{w(\varepsilon_j)}{w(\varepsilon_0)} = e^{-\beta \varepsilon_j}$$

III.3. Kanonischer Zustand

gehen aus von Systemen, bei denen die Boltzmann-Verteilung gilt (isoliert, kleiner Energieaustausch)

wollen Summe der Wahrscheinlichkeiten auf 1 normieren, dazu ist es günstig, die Zustandssumme einzuführen

$$Z = \sum_j e^{-\beta \varepsilon_j}$$

\Rightarrow Einzelwahrscheinlichkeit:

$$w(\varepsilon_j) = \frac{1}{Z} e^{-\beta \varepsilon_j}$$

Ein Zustand mit dieser Verteilung wird kanonischer Zustand genannt.

Bemerkung: Das ist der Zustand eines kleinen Teilsystems (Totalsystem ist in einem anderen, mikrokanonischen Zustand).

Zustandssumme ist wichtig für Berechnungen des Systems, z.B. innere Energie: logarithmische Ableitung von Z :

$$-\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z = \frac{1}{Z} \sum_j \varepsilon_j e^{-\beta \varepsilon_j} = \sum_j \varepsilon_j w(\varepsilon_j) = \langle \varepsilon \rangle = U$$

IV. Zusammenfassung der Statistik

IV.1. Thermodynamische Gesamtheiten

1. Vollkommen abgeschlossenes System: Gleichgewicht bei fester Energie U und bei fester Teilchenzahl N , so ein Zustand wird mikrokanonische Gesamtheit genannt (eigentlich Idealisierung, in Realität nicht vorhanden)
2. Austausch von Energie möglich: Gleichgewicht bei mittlerer Energie $\langle \epsilon \rangle$, Teilchenzahl konstant, so ein Zustand wird kanonische Gesamtheit genannt (häufigster Fall)
3. System mit durchlässiger Membran, Austausch von Energie und Teilchen möglich: Gleichgewicht bei mittlerer Teilchenzahl $\langle N \rangle$, dieser Zustand wird großkanonische Gesamtheit genannt

IV.2. Thermodynamische Hauptsätze

0. Hauptsatz: Es gibt eine thermodynamische Zustandsgröße, nämlich die Temperatur T , 2 Systeme sind im Gleichgewicht, wenn ihre Temperaturen gleich sind ($T_A = T_B$).

1. Hauptsatz: Es gibt eine Zustandsgröße, genannt innere Energie U , die Änderung dieser Energie ist die zu- oder abgeführte Wärme plus der am System geleisteten Arbeit ($dU = \delta Q + \delta W$).

2. Hauptsatz: Es gibt eine Thermodynamische Zustandsgröße, die Entropie S , die im Mittel immer ansteigt (sofern keine Energie zugeführt wird). Für reversible Prozesse gilt $dS = \frac{\delta Q}{T}, \frac{dS(t)}{dt} \geq 0$ (Wärme vom wärmeren zum kälteren).

3. Hauptsatz: Die Entropie S ist null beim absoluten Nullpunkt $T = 0$, dieser kann nicht mit endlich vielen Schritten erreicht werden.

A. Abbildungsverzeichnis

Die meisten Abbildungen stammen aus dem T2-Skriptum Prof. Bertlmann ¹

Seite	Bild	Quelle
5	1	T2-Skriptum Prof. Bertlmann, S. 2
6	1	T2-Skriptum Prof. Bertlmann, S. 4
7	1	http://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Datei:Fotoelektrischer_Effekt.svg&filetimestamp=20090504084142 , 10.1.2013
8	1	T2-Skriptum Prof. Bertlmann, S. 9
9	1	T2-Skriptum Prof. Bertlmann, S. 10
9	2	http://lp.uni-goettingen.de/get/text/2095 , 10.1.2013
10	1	T2-Skriptum Prof. Bertlmann, S. 11
11	1	T2-Skriptum Prof. Bertlmann, S. 14
11	2	http://analytik.pharmaziestudenten-hd.de/ir/theorie , 10.1.2013
13	1	T2-Skriptum Prof. Bertlmann, S. 18
13	2	selbst erstellt
14	1	http://brane-space.blogspot.co.at/2010/06/more-on-heisenberg-microscope-in.html , 10.1.2013
14	2	selbst erstellt
15	1	http://homepage.swissonline.ch/philipp.wehrli/Physik/Quantentheorie/Doppelspalt/doppelspalt.html , 10.1.2013
15	2	http://homepage.swissonline.ch/philipp.wehrli/Physik/Quantentheorie/Doppelspalt/doppelspalt.html , 10.1.2013
16	1	http://homepage.swissonline.ch/philipp.wehrli/Physik/Quantentheorie/Doppelspalt/doppelspalt.html , 10.1.2013
17	1	T2-Skriptum Prof. Bertlmann, S. 24
18	1	http://www.quantenphysik-schule.de/fullerene.htm , 10.1.2013
20	1	T2-Skriptum Prof. Bertlmann, S. 29
29	1	selbst erstellt
38	1	selbst erstellt
39	1	T2-Skriptum Prof. Bertlmann, S. 79
40	1	T2-Skriptum Prof. Bertlmann, S. 81
40	2	T2-Skriptum Prof. Bertlmann, S. 91
42	1	T2-Skriptum Prof. Bertlmann, S. 94
42	2	T2-Skriptum Prof. Bertlmann, S. 84

¹Bertlmann, Reinhold A.; Friis, Nicolai - Theoretical Physics T2 Quantum Mechanics. Course of Lectures by Reinhold A. Bertlmann. T2-Script of Sommersemester 2008.

https://www.univie.ac.at/physikwiki/index.php/Datei:T2_Skript_final.pdf, 02.02.2012

Seite	Bild	Quelle
43	1	http://farside.ph.utexas.edu/teaching/qmech/lectures/node49.html , 10.1.2013
43	2	T2-Skriptum Prof. Bertlmann, S. 94
44	1	T2-Skriptum Prof. Bertlmann, S. 100
47	1	http://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Datei:Harmoszi_nullpunkt.png&filetimestamp=20100421215407 , 10.1.2013
51	1	http://nu.phys.laurentian.ca/fleurot/fusionrate/ , 10.1.2013
52	1	T2-Skriptum Prof. Bertlmann, S. 134
52	2	http://www.strands.de/default.aspx?L=chemical/chemical.xml&S=19&P=0 , 10.1.2013
53	1	T2-Skriptum Prof. Bertlmann, S. 140
54	1	T2-Skriptum Prof. Bertlmann, S. 142
64	1	selbst erstellt
64	2	selbst erstellt
64	3	selbst erstellt
73	1	selbst erstellt
73	2	selbst erstellt
74	1	http://vonchy.buksna.net/index.php/2010/11/ , 10.1.2013
77	1	selbst erstellt