Theoretische Quantenmechanik
Prof. Dr. Wetterich

Friederike Bock

16. April 2009

Inhaltsverzeichnis

1 Quantenphysik des Zwei-Zustands-Systems **1**

1.1 Statistische Beschreibung der Welt . . . 1
1.2 Zwei-Zustands-System . . . 1
1.3 Wahrscheinlichkeitsamplitude . . . 2
1.4 Normierung der Wellenfunktion . . . 3
1.5 Skalarprodukt zweier Zustandssummen . . . 3
1.6 Operatoren und Erwartungswerte . . . 3
1.6.1 Energie-Operator, Hamilton-Operator, $\hat{H}$ . . . 3
1.6.2 Besetzungszahloperator für Falle 1 . . . 4
1.6.3 Spin- Operator . . . 4
1.7 Quantenmechnik . . . 4
1.8 Spin . . . 5
1.9 Bewegung eines Spins im Magnetfeld . . . 5
1.10 Spin- Präzession . . . 7
1.11 Erhaltung der Normierung . . . 8
1.12 Schwankungsquadrate . . . 9
1.13 Eigenvektoren und Eigenwerte . . . 11
1.14 Messung in der Quantenmechanik . . . 13
1.15 Spin im Magnetfeld: Unschärfe . . . 16
1.16 Oszilationen zwischen Positionen . . . 17
1.17 Zusammenfassung . . . 18

1 Quantenphysik des Zwei-Zustands-Systems

1.1 Statistische Beschreibung der Welt

- Die Physik ist einer stetigen Weiterentwicklung ausgesetzt, in der allerdings Ideen auch gleichzeitig bestehen können.
  So wurden in den vorangegangen Vorlesungen bisher die Punktmechanik (Newton), die deterministische Physik und die statistische Physik betrachtet. Es ist dabei eine konzeptionelle Trendwende zu beobachten
  Früher betrachtete man die statistische Physik als Grenzfall der deterministischen Physik, da die deterministische Physik im Rahmen der Fehler gut genug die Realität beschreiben konnte. Heute ist es genau andersrum und die statistische Physik wird als Ausgangspunkt genutzt in der die deterministische Physik nur ein Grenzfall ist.
  Die deterministischen Gesetze resultieren dabei aus sehr vielen zufälligen Ereignissen.

- Noch weitere Entwicklungen können festgestellt werden so stellt sich vielfach die Frage, ob man eine diskrete oder kontinuierliche Beschreibung anwenden soll, oder ob man eine Erscheinung als Teilchen oder Welle betrachten soll. Früher war es ein ausschließendes oder heute spricht man in der Quantenmechanik von dem Wellen-Teilchen-Dualismus, der beide Aspekte vereint.

- Ebenso stehen sich die Betrachtungen der Wahrscheinlichkeitsverteilung (klassische Mechanik) und der Wahrscheinlichkeitsamplitude (Quantenmechanik) gegenüber.

1.2 Zwei-Zustands-System

Beispiele	Zustände	
2 Energieniveaus	E_1 besetzt	E_2 besetzt
2 Atomfallen	Atom in Falle 1	Atom in Falle 2
Biophysik Ionenkanal	Kanal offen	Kanal zu
Spin in z-Richtung	$s_z = \frac{\hbar}{2}$	$s_z = -\frac{\hbar}{2}$
Bit im Computer	1	0
klassische Wahrscheinlichkeit	p_1	p_2

$$p_i \in \mathbf{R}, \quad p_i \geq 0, \quad \sum_i p_i = 1$$

$$p_1 + p_2 = 1$$

Beobachtungsgrößen

- mittlere Energie: $\langle E \rangle = p_1 E_1 + p_2 E_2$

- mittlere Anzahl von Atomen in Falle: $\langle N_1 \rangle = p_1 * N$

- Ionentransport $\langle T \rangle = t p_1$

- Mittelwert des Spins $\langle S_z \rangle = \frac{\hbar}{2} p_1 - \frac{\hbar}{2} p_2$

1.3 Wahrscheinlichkeitsamplitude

$\equiv$ Wellenfunktion $\equiv$ Zustandsvektor

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}; a, b \in \mathbf{C} \\ |\psi\rangle &= a\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + b\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle \end{aligned}$$

a : Wahrscheinlichkeitsamplitude für Zustand 1
$|a|^2$: Wahrscheinlichkeit für Zustand

$$\begin{aligned} p_1 = |a|^2 \quad &, \quad p_2 = |b|^2 \\ p_1 + p_2 = 1 \quad &\Rightarrow \quad |a|^2 + |b|^2 = 1 \end{aligned}$$

Axiom 1 *In der Quantenmechanik werden (reine) Zustände durch Wahrscheinlichkeitsamplituden beschrieben.*

konjugierter Zustandsvektor

$$\langle\psi| = (a^*, b^*) = |\psi\rangle^\dagger \tag{1.1}$$

$\dagger \equiv$ hermitesche Konjugation = komplexe Konjugation $\circ$ Transposition = $(*) \circ (T)$

$$\begin{aligned} \hat{A} &= \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \\ \hat{A}^T &= \begin{pmatrix} a_{11} & a_{21} \\ a_{12} & a_{22} \end{pmatrix} \\ \hat{A}^* &= \begin{pmatrix} a_{11}^* & a_{12}^* \\ a_{21}^* & a_{22}^* \end{pmatrix} \\ \hat{A}^\dagger &= \begin{pmatrix} a_{11}^* & a_{21}^* \\ a_{12}^* & a_{22}^* \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}^\dagger : \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}^* &= \begin{pmatrix} a^* \\ b^* \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}^\dagger &= (a^*, b^*) \end{aligned}$$

1.4 Normierung der Wellenfunktion

Gesamtwahrscheinlichkeit 1 $\Leftrightarrow$ Normierung

$$\begin{aligned}
\langle\psi|\psi\rangle &= 1 \\
(a^*, b^*)\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} &= a^*a + b^*b \\
&= 1 \\
|\psi\rangle &= \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \\
\langle\psi|\psi\rangle &= \psi_1^*\psi_1 + \psi_2^*\psi_2 \\
&= 1 \\
\text{Übung} & \\
\langle\psi|\phi\rangle &= \langle\phi|\psi\rangle^*
\end{aligned}$$

1.5 Skalarprodukt zweier Zustandssummen

$$\begin{aligned}
\langle\phi|\psi\rangle &= \phi_1^*\psi_1 + \phi_2^*\psi_2 \\
|\psi\rangle &= \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \\
\langle\phi| &= (\phi_1^*, \phi_2^*) \\
\langle\phi|\psi\rangle &= (\phi_1^*, \phi_2^*)\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \\
&= (\phi^*\psi_1 + \phi_2^*\psi_2), \langle\phi|\psi\rangle \in \mathbf{C}
\end{aligned}$$

Norm von $|\psi\rangle$: $\langle\psi|\psi\rangle$

Folglich ist die Norm eines Zustandsvektors gleich dem Skalarprodukt des Zustandsvektors mit sich selbst.

Zustandsvektoren haben die Norm 1, $\langle\psi|\psi\rangle = 1$

1.6 Operatoren und Erwartungswerte

1.6.1 Energie-Operator, Hamilton-Operator, $\hat{H}$

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} \\
\langle E\rangle &= \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle \\
\hat{H}|\psi\rangle &= \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} E_1\psi_1 \\ E_2\psi_2 \end{pmatrix} \\
\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle &= \psi_1^*E_1\psi_1 + \psi_2^*E_2\psi_2 \\
&= E_1\psi_1^*\psi_1 + E_2\psi_2^*\psi_2 \\
&= E_1p_1 + E_2p_2 \\
&= \langle E\rangle
\end{aligned}$$

Allgemein:
In einem Zwei-Zustandssystem werden Operatoren durch 2 x 2 - Matrizen dargestellt.

1.6.2 Besetzungszahloperator für Falle 1

$$\begin{aligned} \hat{N}_1 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \langle N_1 \rangle &= \langle \psi | \hat{N}_1 | \psi \rangle \end{aligned}$$

1.6.3 Spin- Operator

$$\begin{aligned} \hat{S}_z &= \begin{pmatrix} \frac{\hbar}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar}{2} \end{pmatrix} \\ \langle S_z \rangle &= \langle \psi | \hat{S}_z | \psi \rangle \\ &= \frac{\hbar}{2} p_1 - \frac{\hbar}{2} p_2 \end{aligned}$$

Axiom 2 *Physikalische Observablen A werden Operatoren $\hat{A}$ zugeordnet*

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A}$$

Axiom 3 *Der Erwartungswert eines Operators $\hat{A}$ lässt sich wie folgt berechnen*

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

Dies ist eine der grundlegenden Regeln in der Quantenmechanik.

1.7 Quantenmechnik

Bisher wurden nur Tatsachen umschrieben, für die auch die klassischen Wahrscheinlichkeiten gelten.

Quantenmechnik :

A) Zeitentwicklungsgleichungen werden für $|\psi\rangle$ formuliert, nicht für p_1, p_2
Schrödinger-Gleichung

Axiom 4

$$\begin{aligned} \imath\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle &= \hat{H} |\psi\rangle \\ \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle &= |\dot{\psi}\rangle \end{aligned}$$

$|\psi(t)\rangle$: Zeitabhänige Wahrscheinlichkeitsamplitude

B) Weitere wichtige Operatoren können als Matrizen im Zwei-Zustands-System angegeben werden; diese sind oft nicht diagonal

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Spin in x-Richtung

1.8 Spin

(Kernspinresonanz, Magnetspeicher)

$$\begin{aligned}\hat{S}_x &= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\\ \hat{S}_y &= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & -\imath\\ \imath & 0\end{pmatrix}\end{aligned}$$

Pauli Matrizen

$$\begin{aligned}\tau_1 &= \begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\\ \tau_2 &= \begin{pmatrix}0 & -\imath\\ \imath & 0\end{pmatrix}\\ \tau_3 &= \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\\ \hat{S}_x &= \hat{S}_1 = \frac{\hbar}{2}\tau_1\\ \hat{S}_i &= \frac{\hbar}{2}\tau_i\\ \hat{\vec{S}}_i &= \frac{\hbar}{2}\vec{\tau}\\ \vec{\tau} &= \begin{pmatrix}\tau_1\\ \tau_2\\ \tau_3\end{pmatrix}\end{aligned}$$

Erwartungswert von $\langle \hat{S}_x \rangle$

$$\begin{aligned}\langle S_x\rangle &= \langle\psi|\hat{S}_x|\psi\rangle\\ &= \frac{\hbar}{2}\langle\psi|\tau_1|\psi\rangle\\ \tau_1|\psi\rangle &= \begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix}\\ &= \begin{pmatrix}\psi_2\\ \psi_1\end{pmatrix}\\ \langle S_x\rangle &= \frac{\hbar}{2}(\psi_1^*\psi_2 + \psi_2^*\psi_1)\end{aligned}$$

Beispiel

$$\begin{aligned}|\psi\rangle &= \begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix}\\ \Rightarrow \langle S_x\rangle &= 0\end{aligned}$$

1.9 Bewegung eines Spins im Magnetfeld

Kernspinresonanz, Magnetspeicher
Energie für Spin im Magnetfeld

$$
\begin{aligned}
E \sim \vec{S}\vec{B} & \\
\hat{H} &= -\mu_B \vec{\tau}\vec{B} \\
&= \mu_B \sum_{k=1}^{3} B_k \tau_k
\end{aligned}
$$

für Elektron :

$$
\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc} \text{ Bohr'sches Magneton}
$$

Schrödingergleichung

$$
\begin{aligned}
\imath\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle &= \hat{H}|\psi\rangle \\
&= -\mu_B \vec{B}\vec{\tau}|\psi\rangle
\end{aligned}
$$

Vereinfachte Schreibweise

$$
\begin{aligned}
\imath\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} &= H\psi \\
&= -\mu_B \vec{B}\vec{\tau}\psi \text{ Vektorgleichung}
\end{aligned}
$$

Man wähle

$$
\vec{B} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B_z \end{pmatrix} \tag{1.2}
$$

$$
\begin{aligned}
H &= -\mu_B B_z \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\
&= -\hbar\omega \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

ω : Kreisfrequenz

$$
\begin{aligned}
\omega &= \frac{\mu_B B}{\hbar} (B_z = B) \\
&= \frac{eB}{2mc} \\
\imath\hbar \begin{pmatrix} \dot{\psi}_1 \\ \dot{\psi}_2 \end{pmatrix} &= -\hbar\omega \begin{pmatrix} \psi_1 \\ -\psi_2 \end{pmatrix} \\
\dot{\psi}_1 &= \imath\omega\psi_1 \\
\dot{\psi}_2 &= -\imath\omega\psi_2
\end{aligned}
$$

Lösung

$$
\begin{aligned}
\psi_1 &= a e^{\imath\omega t} \\
\psi_2 &= b e^{-\imath\omega t}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
|\psi(t=0)\rangle &= \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \\
|a|^2 + |b|^2 &= 1 \\
|\psi(t)\rangle &= \begin{pmatrix} \psi_1(t) \\ \psi_2(t) \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

Damit is die Wellenfunktion für jeden Zeitpunkt t bekannt. Die Erwartungswerte von $\vec{S}$ können nun mit den Beobachtungen verglichen werden.

1.10 Spin- Präzession

Zwei Anfangszustände

i) Anfangszustand

$$\begin{aligned} |\psi(0)\rangle &= \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \\ \langle S_z\rangle &= \frac{\hbar}{2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \begin{pmatrix}e^{\imath\omega t}\\0\end{pmatrix} \\ \langle\psi(t)| &= (e^{-\imath\omega t},0) \\ \langle S_z\rangle &= \frac{\hbar}{2}\langle\psi(t)\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\psi(t)\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2} \\ \langle S_x\rangle &= \frac{\hbar}{2}\langle\psi(t)\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\psi(t)\rangle \\ &= 0 \\ \langle S_y\rangle &= 0 \end{aligned}$$

Hierbei tritt keine Zeitänderung der Erwartungswerte für diesen Anfangszustand ein.

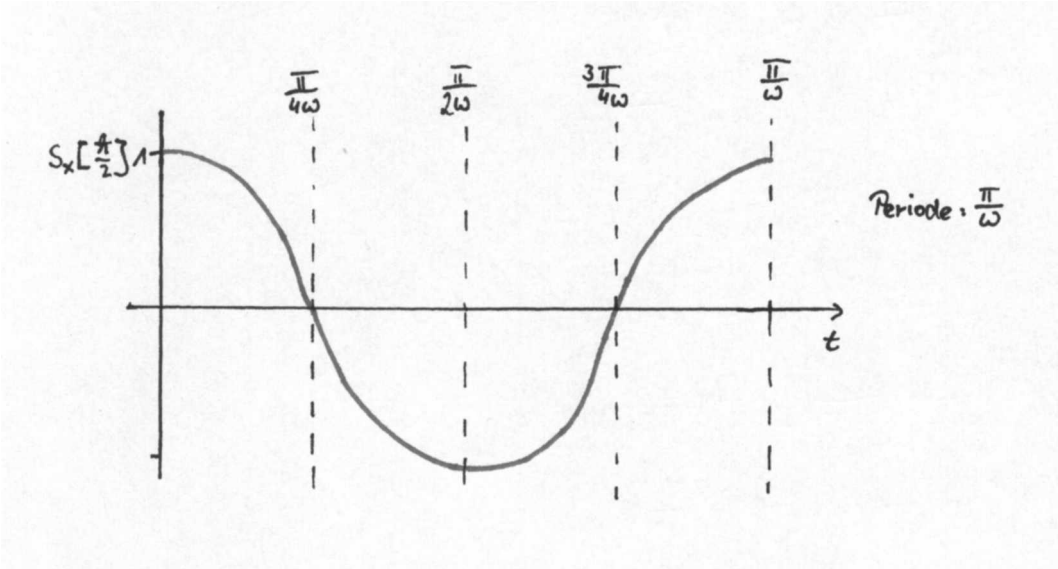
ii) Anfangszustand

$$\begin{aligned} |\psi(0)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} \\ \langle S_x\rangle &= \frac{\hbar}{2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}e^{\imath\omega t}\\e^{-\imath\omega t}\end{pmatrix} \\ \langle\psi(t)| &= \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{\imath\omega t},e^{-\imath\omega t}) \\ \langle S_z\rangle &= \frac{\hbar}{2}\frac{1}{2}(1-1) \\ &= 0 \\ \langle S_x\rangle &= \frac{\hbar}{2}\frac{1}{2}d(e^{2\imath\omega t}-e^{-2\imath\omega t}) \\ &= \frac{\hbar}{2}\cos 2\omega t \\ \langle S_y\rangle &= \frac{\hbar}{2}\frac{1}{2}(-\imath e^{-2\imath\omega t}+\imath e^{2\imath\omega t}) \\ &= -\frac{\hbar}{2}\sin 2\omega t \\ \langle S_x\rangle^2+\langle S_y\rangle^2 &= \frac{\hbar^2}{2} \end{aligned}$$

Für diesen Anfangszustand dreht sich der Vektor in der x-y-Ebene mit der Periode $\frac{\pi}{\omega}$ oder der Kreisfrequenz 2 ω. Der Vektor präzediert, die Präzessionslänge ist $\frac{\hbar}{2}$

$$\begin{pmatrix}\langle S_x\rangle\\\langle S_y\rangle\\\langle S_z\rangle\end{pmatrix} \tag{1.3}$$



1.11 Erhaltung der Normierung

Gesamtwahrscheinlichkeit $p_1 + p_2$ bleibt 1 für alle t

$$\begin{aligned}\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle &= \psi_1^*(t)\psi_1(t) + \psi_2^*(t)\psi_2(t)\\ &= a^* e^{-\imath\omega t} a e^{\imath\omega t} + b^* e^{\imath\omega t} b e^{-\imath\omega t}\\ &= a^* a + b^* b\\ &= 1\end{aligned}$$

Allgemeine Bedingung für $\hat{H}$ für die Erhaltung der Norm:

$$\hat{H}^\dagger = \hat{H} \tag{1.4}$$

Der Hamiltonoperator muss hermitesch sein.

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\langle\psi|\psi\rangle &\overset{!}{=} 0\\ &= \langle\dot{\psi}|\psi\rangle + \langle\psi|\dot{\psi}\rangle\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}|\dot{\psi}\rangle &= \frac{1}{\imath\hbar}\hat{H}|\psi\rangle\\ \langle\dot{\psi}| &= |\dot{\psi}\rangle^\dagger\\ &= -\frac{1}{\imath\hbar}(\hat{H}|\psi\rangle)^\dagger\\ &= -\frac{1}{\imath\hbar}(\hat{H}|\psi\rangle^*)^T\\ &= -\frac{1}{\imath\hbar}|\psi\rangle^\dagger (H^*)^T\\ &= -\frac{1}{\imath\hbar}\langle\psi|H^\dagger\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\langle\psi|\psi\rangle &= \frac{1}{\imath\hbar}(\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle - \langle\psi|\hat{H}^\dagger|\psi\rangle)\\ &= \frac{1}{\imath\hbar}\langle\psi|(\hat{H} - \hat{H}^\dagger)|\psi\rangle\end{aligned}$$

Erhaltene Normierung

$$\hat{H}^\dagger = \hat{H}$$

Linearität des Skalarproduktes

$$\langle\phi|\psi_1\rangle + \langle\phi|\psi_2\rangle \quad = \quad \langle\phi|\psi_1 + \psi_2\rangle$$

Linearität der Multiplikation mit Operator

$$\hat{A}|\psi\rangle + \hat{B}|\psi\rangle \quad = \quad (\hat{A} + \hat{B}|\psi\rangle$$

falls für alle $|\psi\rangle$ gilt

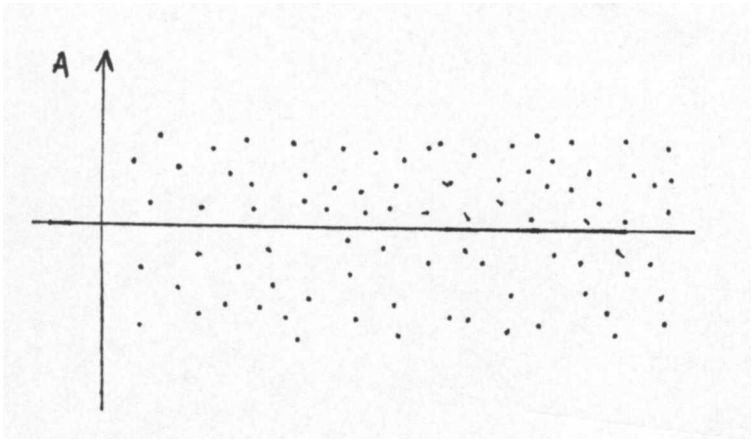
$$\begin{aligned} \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle &= 0 \\ \Rightarrow \hat{A} &= 0 \end{aligned}$$

für irgendein $|\psi\rangle$ folgt nicht $\hat{A} = 0$!

1.12 Schwankungsquadrate

In statistischen Systemen:

$$\langle A^2\rangle \neq \langle A\rangle^2 \text{ Fluktuationen treten auf} \tag{1.5}$$



$$\begin{aligned} \langle A\rangle &= 0 \\ \langle A^2\rangle &\neq 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \triangle A^2 &= \langle (A - \langle A\rangle)^2\rangle \\ &= \langle A^2 - 2A\langle A\rangle + \langle A\rangle^2\rangle \\ &= \langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2 \text{ Schwankungsquadrat} \\ \triangle A^2 &\geq 0 \\ \triangle A &= \sqrt{\triangle A^2} \end{aligned}$$

In der Quantenmechanik

$$\langle A^2 \rangle = \langle \psi | \hat{A}^2 | \psi \rangle$$

Das Quadrat des Operators ist ein Matrixprodukt und ergibt somit wieder einen Operator!

$$\begin{aligned} \text{wenn } A &\rightarrow \hat{A} \\ \text{dann } A^n &\rightarrow \hat{A}^n \end{aligned}$$

(Teil 2 von Axiom 2)

$$\begin{aligned} \hat{S}_x^2 &= \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ \hat{S}_y^2 &= \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 0 & -\imath \\ \imath & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -\imath \\ \imath & 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ \hat{S}_z^2 &= \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Eigenschaft der Paulimatrizen $\tau_i^2 = \mathbf{1}$
Multiplikation eines Vektors mit der Einheitsmatrix lässt diesen unverändert; deshalb nutzt man auch diese Schreibweise

$$\begin{aligned} \hat{S}_x^2 &= \hat{S}_y^2 = \hat{S}_z^2 = \frac{\hbar^2}{4} \\ \tau_i^2 &= 1 \\ \langle \vec{\hat{S}}^2 \rangle &= \langle \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 \rangle \\ &= \frac{3}{4}\hbar^2 \end{aligned}$$

Es gilt die allgemeine Regel für die Drehimpulse

$$\langle L^2 \rangle = l(l+1)\hbar^2 \tag{1.6}$$

Für den Spin ist $l = \frac{1}{2}$, folglich ist der Spin ein halbzahliger innerer Drehimpuls.
2 Beispiele

- Zustand $\binom{1}{0}$

$$\begin{aligned} \langle \hat{S}_z \rangle = \frac{\hbar}{2} \quad &, \quad \langle \hat{S}_x \rangle = \langle \hat{S}_y \rangle = 0 \\ \triangle \hat{S}_z^2 &= \frac{\hbar^2}{4} - \frac{\hbar^2}{4} \\ &= 0 \\ \triangle \hat{S}_x^2 &= \triangle \hat{S}_y^2 = \frac{\hbar^2}{4} \end{aligned}$$

Es ergibt sich folglich ein scharfer Wert für $\hat{S}_z$, während $\hat{S}_x, \hat{S}_y$ beide unscharf sind.

- Zustand $\frac{1}{\sqrt{2}}\binom{1}{1}$

$$\begin{aligned}
\langle S_x\rangle &= \frac{\hbar}{2}\frac{1}{2}(1,1)\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}\\
&= \frac{\hbar}{2}\frac{1}{2}2\\
&= \frac{\hbar}{2}\\
\langle S_x\rangle = \frac{\hbar}{2} \quad &, \quad \langle S_z\rangle = \langle S_y\rangle = 0\\
\triangle S_x^2 &= 0\\
\triangle S_y^2 &= \triangle S_z^2 = \frac{\hbar^2}{4}
\end{aligned}$$

  Es ergibt sich ein scharfer Wert für S_x , während S_y, S_z beide unscharf sind.

1.13 Eigenvektoren und Eigenwerte

$|\psi\rangle$ ist Eigenvektor zu Operator $\hat{A}$, wenn

$$\hat{A}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle,\ \lambda \text{ heit Eigenwert },\ \lambda \in \mathbf{C}$$

dann gilt auch

$$\begin{aligned}
\langle A\rangle &= \lambda\\
\triangle A^2 &= 0
\end{aligned}$$

Ist ein Zustand ein Eigenvektor zu $\hat{A}$ mit Eigenwert λ so hat die dazugehörige Größe einen scharfen Wert λ.
Beweis:

$$\begin{aligned}
\langle A\rangle &= \langle\psi\hat{A}\psi\rangle\\
&= \langle\psi\lambda\psi\rangle\\
&= \lambda\langle\psi\psi\rangle\\
&= \lambda\\
\langle A^2\rangle &= \langle\psi\hat{A}^2\psi\rangle\\
&= \langle\psi\hat{A}\hat{A}\psi\rangle\\
&= \lambda\langle\psi\hat{A}\psi\rangle\\
&= \lambda^2\psi\langle\psi|\psi\rangle\\
&= \lambda^2
\end{aligned}$$

Beispiele:

- $\binom{1}{0}$ ist Eigenvektor zu $\hat{S}_z$ mit $\lambda = \frac{\hbar}{2}$

  Beweis :

$$\begin{aligned}\hat{S}_z|\psi\rangle &= \hat{S}_z\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\\ &= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\\ &= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\\ &= \frac{\hbar}{2}|\psi\rangle\end{aligned}$$

- $\frac{1}{\sqrt{2}}\binom{1}{1}$ ist Eigenvektor zu $\hat{S}_x$ mit $\lambda = \frac{\hbar}{2}$

  Beweis :

$$\begin{aligned}\hat{S}_x|\psi\rangle &= \hat{S}_z\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}\\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}\\ &= \frac{\hbar}{2}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}\\ &= \frac{\hbar}{2}|\psi\rangle\end{aligned}$$

Spektrum eines Operators: Menge seiner Eigenwerte
$\hat{S}_z$ hat Eigenwerte $\frac{\hbar}{2}, -\frac{\hbar}{2}$. Damit ergibt sich das Spektrum $(-\frac{\hbar}{2}, \frac{\hbar}{2})$ und die dazugehörigen Eigenvektoren sind:

$$\begin{aligned}\lambda = \frac{\hbar}{2};\quad |\psi\rangle = \tbinom{1}{0} &= |\uparrow\rangle \text{ Spin up}\\ \lambda = -\frac{\hbar}{2};\quad |\psi\rangle = \tbinom{0}{1} &= |\downarrow\rangle \text{ Spin down}\end{aligned}$$

offensichtlich, da $\hat{S}_z$ bereits Diagonalgestalt hat

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix} \tag{1.7}$$

Eigenwertproblem für $\hat{S}_x$
= Eigenwertproblem für $\tau_1 = \begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix}$

$$
\begin{aligned}
\tau_1\psi &= \lambda\psi \\
\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix} &= \begin{pmatrix}b\\ a\end{pmatrix} \\
&= \lambda\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix}\lambda a\\ \lambda b\end{pmatrix} \\
b &= \lambda a \\
a &= \lambda b \\
a = \lambda^2 a \quad &, \quad \lambda^2 = 1, \lambda = \pm 1 \\
\text{Spektrum von } \tau_1 &: (-1, 1) \\
\text{Spektrum } \hat{S}_x &: (-\frac{\hbar}{2}, \frac{\hbar}{2})
\end{aligned}
$$

Eigenvektoren von τ_1

$$
\begin{aligned}
\lambda = 1 : \begin{pmatrix}b\\ a\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix} \quad &, \quad a = b \\
|\psi\rangle = \begin{pmatrix}a\\ a\end{pmatrix} & \\
\text{Normierung } \langle\psi\psi\rangle &= a^* a + a^* a \\
&= 2|a|^2 \\
&= 1 \\
\Rightarrow |a|^2 &= \frac{1}{2} \\
a &= \frac{e^{\imath\varphi}}{\sqrt{2}}
\end{aligned}
$$

Die Phase von φ kann dabei beliebig gewählt werden. Daraus ergibt sich der Eigenvektor zu $\hat{S}_x$ als $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\binom{1}{1}$ mit dem dazugehörigen Eigenwert $\frac{\hbar}{2}$

$$
\begin{aligned}
\lambda = -1 : \begin{pmatrix}b\\ a\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-a\\ -b\end{pmatrix} \quad &, \quad b = -a \\
|\psi\rangle &= e^{\imath\varphi}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -1\end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

Allgemein gilt : Ist $|\psi\rangle$ ein normierter Eigenvektor so gilt dies auch für $e^{\imath\varphi}|\psi\rangle$

1.14 Messung in der Quantenmechanik

i) Eine Messapparatur analysiert einen bestimmten Operator.

ii) Messergebnisse eines einzelnen Ereignisses sind stets Eigenwerte aus dem Spektrum des Operators.

iii) Die Quantenmechanik macht Aussagen über die statistische Verteilung der Messergebnisse in einem Essemble von Ereignissen.

Verbindung Formalismus $\leftrightarrow$ Experiment
i), iii) sind konzeptionelle Grundlage für $\langle A\rangle$
ii) folgt aus den Axiomen 2 + 3

Beispiel: Stern- Gerlach- Experiment (Analysator für S_z falls ein inhomogenes Magnetfeld in z-Richtung vorliegt.)
Alle Atome landen entweder in Detektor A oder B nichts dazwischen; entweder $s_z = \frac{\hbar}{2}$ oder $-\frac{\hbar}{2}$
Es kommt somit zur Aufspaltung eines Atomstrahls je nach Spin der Atome. Dabei stellt sich die Frage, wie viele nach A und wie viele nach B gehen.

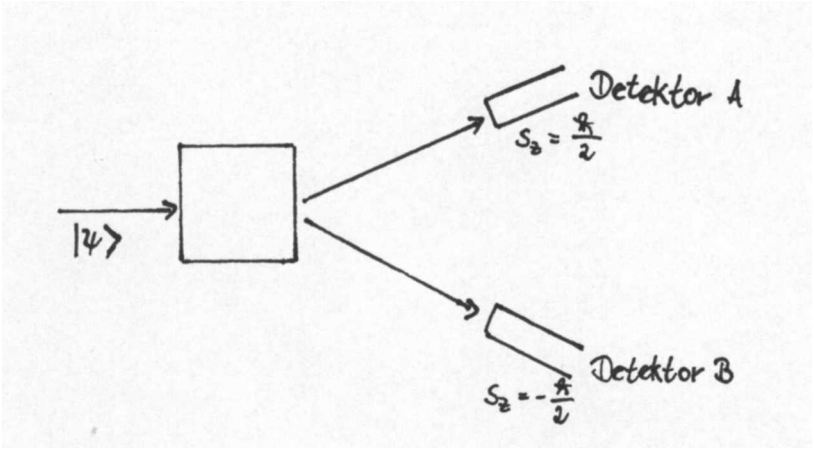
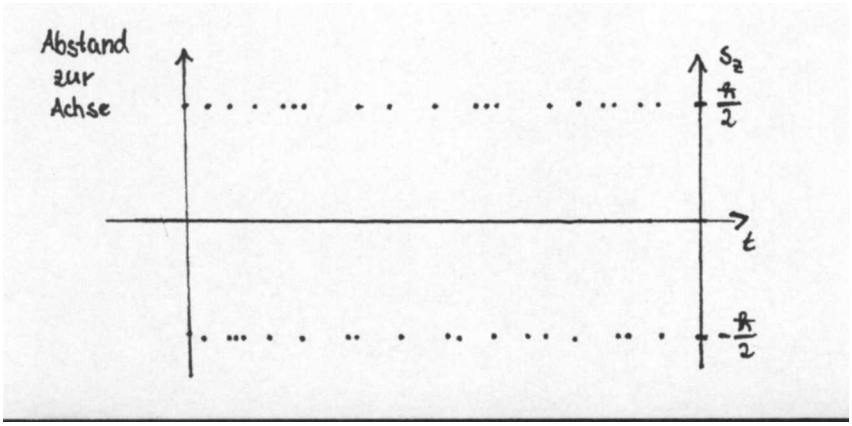


Abbildung 1.1: Aufbau eines Stern-Gerlach-Experimentes in z-Richtung

i) $|\psi\rangle = \binom{1}{0}$: $\triangle S_z = 0, \langle S_z \rangle = \frac{\hbar}{2}$: Alle Teilchen haben den Spin up und gehen nach A.

ii) $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\binom{1}{1}$: $\langle S_z \rangle = 0$: 50 % der Teilchen haben Spin up und gehen nach A und 50 % der Teilchen haben Spin down und gehen nach B.

$\triangle S_z^2 = \frac{\hbar^2}{4}$, da $S_z^2 = \frac{\hbar^2}{4}$.



Folglich stellt sich die Frage ob S_z^2 schwankt.

Nein, $|\psi\rangle$ ist ein Eigenvektor zu $\hat{S}_z^2$ mit Eigenwert $\frac{\hbar^2}{4}$. Damit hat jede Einzelmessung den Wert $S_z^2 = \frac{\hbar^2}{4}$.
$\Rightarrow$ für jede Einzelmessung ergibt sich entweder $S_z^2 = \frac{\hbar}{2}$ oder $S_z^2 = -\frac{\hbar}{2}$
$\Rightarrow$ Alle Messwerte liegen im Spektrum des Operators $\hat{S}_z$

wichtige Bemerkung:

Axiom 5 *In statistischen Systemen verändert eine Messung den Zustand des Systems. Nach der Messung einer Observablen:*
Zustand ist Eigenvektor zum gemessenen Eigenwert.

Muss so sein, da 2 hintereinander ausgeführte Messungen einer Größe dasselbe Resultat ergeben sollen!

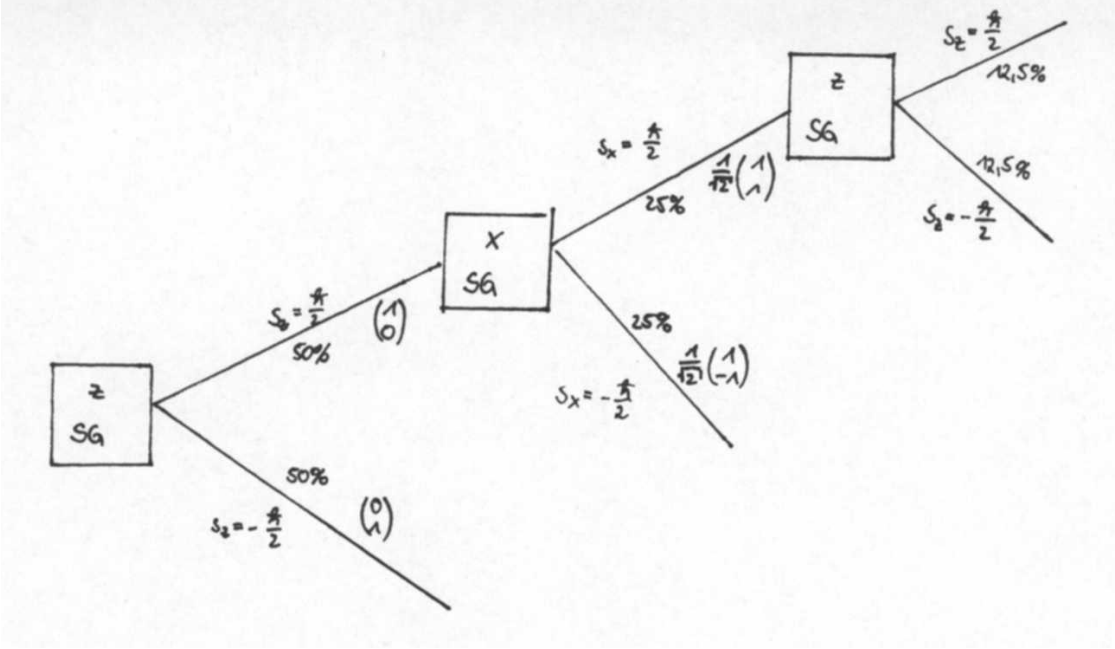


Abbildung 1.2: Hintereinanderausfhren mehrerer Stern-Gerlach-Experimente

Am Schluss genauso viele $S_z = \frac{\hbar}{2}$ und $S_z = -\frac{\hbar}{2}$ obwohl im ersten Stern-Gerlach-Experiment alle $S_z = -\frac{\hbar}{2}$ herausgefiltert werden!
Nach dem x-Stern-Gerlachexperiment: wieder maximale Unschärfe von S_z! Da in S_x -Eigenzustand $\frac{1}{\sqrt{2}}\binom{1}{1}$!

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \text{ blau} \qquad S_x = \tfrac{\hbar}{2} \text{ Kugel}$$
$$S_z = -\frac{\hbar}{2} \text{ grün} \quad S_x = -\tfrac{\hbar}{2} \text{ Kubus}$$

	klassisch	Quantenmechanik
Anfangszustand (100 Objekte)	50 grün, 50 blau 50 Kugel, 50 Kubus ⇒ 25 grüne Kuben 25 grüne Kugeln 25 blaue Kuben 25 blaue Kugeln	
Ergebnis nach Apparat 1 ($S_z = \frac{\hbar}{2}$)	25 blaue Kugeln 25 blaue Kuben	50 $S_z = \frac{\hbar}{2}$
Ergebnis nach Apparat 2 ($S_x = \frac{\hbar}{2}$)	25 blaue Kugeln	25 $S_x = \frac{\hbar}{2}$
Ergebnis nach Apparat 3 ($S_z = -\frac{\hbar}{2}$)	0	12,5 $S_z = \frac{\hbar}{2}$

S_x, S_y, S_z haben keine klassischen Eigenschaften, die vor der Messung schon Bestand haben (wie Farbe und Form der Objekte)
Der Zustand ändert sich durch die Messung, nicht nur durch das *Herausnehmen der Mitglieder des Ensembles, die nicht die gesuchten Eigenschaften haben.*
Hier ist eher die Analogie zur Polarisation des Lichtes zu beobachten → Dies weist auf die Welleneigenschaft hin.

1.15 Spin im Magnetfeld: Unschärfe

Anfangzustand i) $|\psi\rangle = \binom{e^{\imath\omega t}}{0}, \langle S_z\rangle = \frac{\hbar}{2}$

$$\begin{aligned}
\triangle S_z^2 &= \frac{\hbar^2}{4} - \frac{\hbar^2}{4} = 0 \\
\triangle S_x^2 &= \frac{\hbar^2}{4} - 0 = \frac{\hbar^2}{4} \\
\triangle S_y^2 &= \frac{\hbar^2}{4} - 0 = \frac{\hbar^2}{4}
\end{aligned}$$

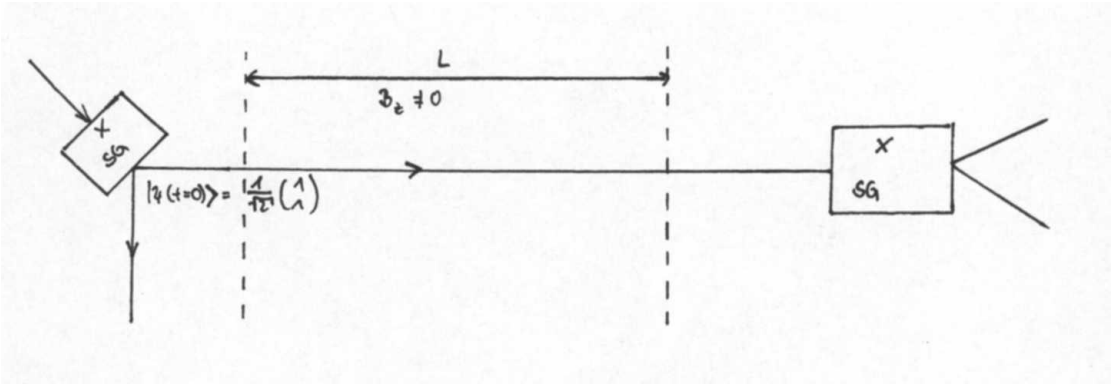
Der Spin-Vektor hat einen scharfen Wert in z-Richtung ($\triangle S_z = 0$!); Unschärfe besteht in x,y- Richtung.

Anfangszustand ii) $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\binom{e^{\imath\omega t}}{e^{-\imath\omega t}}, \langle S_x\rangle = \frac{\hbar}{2}\cos 2\omega t, \langle S_y\rangle = -\frac{\hbar}{2}\sin 2\omega r$

$$\begin{aligned}
\triangle S_z^2 &= \frac{\hbar^2}{4} - 0 = \frac{\hbar^2}{4} \\
\triangle S_x^2 &= \frac{\hbar^2}{4} - \frac{\hbar^2}{4}\cos^2 2\omega t = \frac{\hbar^2}{4}\sin^2 2\omega t \\
\triangle S_y^2 &= \frac{\hbar^2}{4} - \frac{\hbar^2}{4}\sin^2 2\omega t = \frac{\hbar^2}{4}\cos^2 2\omega t
\end{aligned}$$

Zum Zeitpunkt $t = 0$ hat S_x einen scharfen Wert. Für $t = \frac{\pi}{4\omega}$ hat S_y einen scharfen Wert.
Richtung des scharfen Wertes dreht sich;
in den Spinkomponenten orthogonal zum scharfen Wert: Unschärfe!

Gedankenexperiment



Man variere $B_z \Rightarrow$ variere ω

$$t = \frac{L}{v} \tag{1.8}$$

Wobei v die Geschwindigkeit der Atome.

$$\begin{aligned}
\triangle S_x^2 &= \frac{\hbar^2}{4}\sin^2 2\omega\frac{L}{v} \\
&= \frac{\hbar^2}{4}\sin^2 \frac{2L}{v}\frac{\mu_0 B_z}{\hbar} \\
&= \frac{\hbar^2}{4}\sin^2 \frac{eB_z L}{Mvc} \\
&= \frac{\hbar^2}{4}\sin^2 \frac{eB_z L}{Mc^2}\frac{c}{v}
\end{aligned}$$

Folglich variert die Unschärfe mit B!

$$\langle S_x \rangle \quad = \quad \frac{\hbar}{2} \cos \frac{eB_z L}{Mc^2} \frac{c}{v}$$

Neutrino Oszillatoren

$\nu_e = \binom{1}{0}, \nu_\mu = \binom{0}{1}$

$$\hat{H} \sim \begin{pmatrix} mv_e & 0 \\ 0 & mv_\mu \end{pmatrix} + \triangle\tau_1 \tag{1.9}$$

Sonnenneutrinos: Anfangszustand $|\nu_e\rangle = \binom{1}{0}$ (werden zusammen mit Elektronen produziert)
Zeitentwicklung: Oszillation zwischen ν_e und ν_μ
Auf der Erde kommt eine Mischung von ν_e und ν_μ an. Welches in zahlreichen Experimenten nachgewiesen werden konnte!

Ähnliches ist bei Neutrinos aus Kernreaktionen zu beobachten.

Dabei ist die Wahrscheinlichkeit ν_e zu finden wie folgt zu berechnen.

$$P_{\nu_e} = \langle \psi | \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} |\psi\rangle \sim \cos cL$$

Ozillationen zwischen Materie und Antimaterie

$K^0, \bar{K}^0$
$\bar{K}^0$ ist Antiteilchen zu K^0

$$H \sim \begin{pmatrix} m_K & 0 \\ 0 & m_K \end{pmatrix} + \triangle\tau_1$$

$\triangle$ verletzt die Symmetrien

P Parität, Spiegelsymmetrie

C Ladungskonjugation (Teilchen $\rightarrow$ Antiteilchen)

Oszillationen von K^0 nach $\bar{K}^0$ und zurück!

1.16 Oszilationen zwischen Positionen

$|\uparrow\rangle$ Position 1 $\binom{1}{0}$
$|\downarrow\rangle$ Position 2 $\binom{0}{1}$

$$\hat{H} \quad = \quad \frac{\triangle E}{2}\tau_3 + \alpha\tau_1 + const$$

Der Term $\alpha\tau_1$ stellt das Einstrahlen der Resonanzfrequenz oder am Übergang dar. Die Konstante ist irrelevant.
$|\triangle E| \ll |\alpha|$: vernachlässige $\triangle E$ (kleine Störung), für $NH_3 : \triangle E = 0$

Stört in Zustand $|1\rangle$:
Ergebnis: Oszillationen zwischen $|1\rangle$ und $|2\rangle$, Oszillationen der Unschärfe

Mathematische Behandlung analog zu

Spin im Magnetfeld $\begin{pmatrix} B_x \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, mit Anfangszustand $\binom{1}{0}$

oder

Spin im Magnetfeld $\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B_z \end{pmatrix}$, mit Anfangszustand $\frac{1}{\sqrt{2}}\binom{1}{1}$

1.17 Zusammenfassung

Einige einfache Hypothesen zur QM erlauben detaillierte Voraussagen für die Statistik von Beobachtungen im Zweizustandssystem

- Wahrscheinlichkeits-Amplitude = Komponenten des Zustandsvektors $|\psi\rangle$ **Axiom 1**
- Observablen A werden Operatoren $\hat{A}$ zugeordnet **Axiom 2**
  * Mittelwert der Observablen $\langle\hat{A}\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$ **Axiom 3**
  * Ergebnisse von Einzelmessungen um das Spektrum von $\hat{A}$ zu ermitteln
  * Schwankungsquadrat $\triangle A^2 = \langle\psi|\hat{A}^2|\psi\rangle - \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle^2$
  * Nach Messung Eigenzustand von $\hat{A}$ **Axiom 5**
- Schrödingergleichung $\imath\hbar|\dot{\psi}\rangle = \hat{H}|\psi\rangle$ **Axiom 4**

Durch Vielzahl von Experimenten bestätigt! Eine der wichtigen Konsequenzen ist dabei die diskrete Verteilung von Messwerten. Dies kann direkt zur Verallgemeinerung auf N-Zustands-Systeme oder kontinuerliche Systeme angewendet werden. Dann ist auch ein kontinuierliches Spektrum gewisser Operatoren möglich genauso wie eine kontinuierliche Verteilung von Messwerten. Mehr braucht es nicht!

→ Identifiziere für gegebenes System $\hat{A}_k, \hat{H}$

→ Löse Schrödingergleichung