

Einführung in die Quantentheorie für Elektrotechniker

Vorlesung von Prof. em. Dr. Gerhard Grau¹
Institut für Photonik und Quantenelektronik

Universität Karlsruhe, WS 2011/2012

¹Eine Vervielfältigung dieses Typoskripts bedarf der Genehmigung des Autors

Zusammenfassung

Die Vorlesung bietet eine elementare Einführung in die Quantentheorie, die in zunehmendem Maße auch für die praktische Tätigkeit von Ingenieuren relevant wird. So basieren moderne Halbleiterbauelemente (auf dem Gebiet der Optischen Nachrichtentechnik und auch in der Halbleiterelektronik) in ihrer Funktion auf quantenmechanischen Eigenschaften des Elektrons [3] [24] [25]. Dienstintegrierte Breitbandnetze übermitteln Nachrichten durch Lichtsignale (sogenannte photonische Netze); die Erzeugung, Verstärkung und Detektion von Licht erfordert Kenntnisse der Quantennatur des elektromagnetischen Feldes und der mit ihnen wechselwirkenden Ladungen, da die prinzipiellen Grenzen der Übertragungsgüte auf Quantenphänomenen beruhen. Diese Gesichtspunkte werden auch in den Übungen und Anwendungsbeispielen bevorzugt behandelt. Nichtklassische Korrelationen (verschränkte Zustände) finden bereits praktische Anwendungen in der Quantenkryptographie. Eine Diskussion der subtileren Aspekte der Interpretation quantenmechanischer Probleme (wie etwa der verschränkten Zustände) findet man in [23][29][5].

Die Vorlesung gibt eine Einführung in die Problematik der Quantentheorie, in den sogenannten Dirac-(oder Bracket-)Formalismus der Quantentheorie (er bietet den Vorteil, daß sich grundlegende Beziehungen algebraisch anschreiben lassen und somit keine Vorkenntnisse über partielle Differentialgleichungen erfordern; in den Übungen wird gezeigt, wie sich diese Schreibweise auch vorteilhaft zur Lösung mathematischer Probleme einsetzen läßt) und in die Systemdynamik. Die Betonung liegt eher auf der Diskussion von Strukturfragen der Quantentheorie, der Entwicklung einer Anschaulichkeit für quantenmechanische Abläufe und der Formulierung von Problemen, weniger auf der tatsächlichen Durchrechnung konkreter Systeme. Durch diese Einführung sollte der Hörer imstande sein, sich auch in anspruchsvolleren Texten der Quantenelektrodynamik zurechtzufinden.

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung in die Problematik	1
1.1	Wellen und Teilchen	1
1.2	Interferenzexperimente	3
1.2.1	Experiment mit klassischen Teilchen	3
1.2.2	Experiment mit klassischen Wellen	4
1.2.3	Experiment mit Elektronen	6
1.3	Die Unschärferelation	9
1.3.1	Unschärferelation. Komplementarität	11
1.3.2	Messung zu gleichen Zeiten und gleichzeitige Messungen	11
1.3.3	Beugung von Licht an einer Öffnung	13
1.4	Forderungen an einen Formalismus	14
2	Entwicklung des Bracket-Formalismus	16
2.1	Zustände als Vektoren	16
2.1.1	Beziehungen zur Vektorrechnung und Matrizenrechnung	18
2.1.2	Zustandsraum	20
2.2	Dirac-Zustände	20
2.2.1	Realisierbare Zustände als Superposition von Dirac-Kets	21
2.2.2	Allgemeine Schreibweise für Basiskets	22
2.3	Unitäre Basistransformationen	23
2.4	Observable als Operatoren. Darstellungen	25
2.4.1	Das Eigenwertproblem hermitescher Operatoren	26
2.4.2	Observable	28
2.5	Wahrscheinlichkeiten und Erwartungswerte	28
2.6	Verträgliche Messungen. Kommutierende Observable	29
2.6.1	Vollständiger Satz kommutierender Observabler	31
2.6.2	L_{op} für zwei oder mehr kommutierende Observable	31
2.7	Nichtverträgliche Messungen. Kommutatoren	32
2.8	Operatorfunktionen. Projektoren. Spur des Operators	33
2.8.1	Projektionsoperatoren	33
2.8.2	Operatorfunktionen	33
2.8.3	Spur eines Operators	34
2.9	Wahrscheinlichkeiten und Erwartungswerte für reine Zustände und Gemische	34
2.9.1	Gemische	35
2.9.2	Anmerkung zum statistischen Operator	35
2.10	Der Weg von der Ignoranz zum Zustandsket	36
3	Einfache Systeme und Systemdynamik	37
3.1	Nichtklassische Korrelationen von Ereignissen	37
3.1.1	Interferenz am Doppelspalt	37
3.1.2	Die spukhafte Fernwirkung	39
3.1.3	Experimente zur Frage der Komplementarität	40

3.1.4	Der „quantum-eraser“	42
3.2	Ortsdarstellung und Impulsdarstellung	43
3.3	Schrödingergleichung. Harmonischer Oszillator	46
3.4	Das Grundproblem der Dynamik	48
3.5	Das Heisenbergbild	49
3.6	Ehrenfest'sches Theorem. Die Energie-Zeit-Unschärferelation	51
3.7	Das Schrödingerbild	52
3.8	Die Schrödingergleichung für die zeitabhängige Wahrscheinlichkeitsamplitude	54
A	Ableitungen	I
A.1	Ableitung der Unschärferelation	I
A.2	Ableitung einer Vertauschungsrelation	I
A.3	Zeitunabhängige Eigenwerte	II
A.4	Lagrangefunktion und Hamiltonfunktion	III
B	Übungen und Anwendungen	V
B.1	Bracketschreibweise und Integralgleichungen	V
B.2	Der zweidimensionale unitäre Raum	VI
B.2.1	Eine spezielle Basistransformation. Lineare und zirkulare Polarisation von Photonen	VI
B.2.2	Der statistische Operator. Der Polarisationsgrad	IX
B.3	Wellen und Photonen	XII
B.3.1	Wellen in klassischer Beschreibung	XII
B.3.2	Quantisierung von Wellen	XIII
B.3.3	Bosonen. Erzeuger- und Vernichtoperatoren	XIII
B.3.4	Temperaturstrahlung. Bose-Einstein-Verteilung	XV
B.3.5	Kohärente Zustände. Poisson-Verteilung	XVI
B.3.6	Quantenrauschen beim Empfang von Wellen	XVII
B.4	Fermionen	XIX
B.5	Der Oszillator bei großen Quantenzahlen	XXI
B.6	Teilchen am halbdurchlässigen Spiegel	XXIII
B.7	Unmöglichkeit des Klonens von Zuständen	XXIV
B.8	Bell-Zustände. Bell-Zustands-Messungen	XXIV
B.9	Teleportation eines Quantenzustands	XXVI
B.10	Die Bellsche Ungleichung	XXVI
B.11	Die Verletzung der Bellschen Ungleichung mit verschränkten Zuständen	XXVII
	Literaturverzeichnis	XXIX
	Druckfehler, Anmerkungen	XXXII

Kapitel 1

Einführung in die Problematik

1.1 Wellen und Teilchen

Aus unserer alltäglichen Anschauung haben wir Vorstellungen zu den Begriffen „Teilchen“ und „Welle“ entwickelt. Wellen erzeugt man auf der Wasseroberfläche, indem man einen Stein ins Wasser wirft; wirft man zwei Steine ins Wasser, so zeigen die von jedem der beiden hervorgerufenen Wellen Interferenzen. Es erschien uns abwegig, durch die Luft fliegende Kieselsteine als Wellen beschreiben zu wollen (dazu besteht auch keine Notwendigkeit, weil niemand „Kieselsteininterferenzen“ beobachtet hat und erklären muß). Ebenso abwegig erschien es uns, zwei interferierende Wasserwellen als miteinander wechselwirkende Teilstrahlen von „Wasserteilchen“ zu verstehen, und der Versuch, die Interferenz als Folge von Stößen zwischen einzelnen Wasserteilchen zu erfassen, wäre zum Scheitern verurteilt.

Im Mikrokosmos sind die Verhältnisse anders. Es gibt Erscheinungen, die wir als „Teilchen“ oder „Wellen“ ansehen, obwohl wir sie nie im Sinne einer Alltagsanschauung wie Wasserwellen oder Kieselsteine „gesehen“ haben: So sind Elektronen eben Teilchen, elektromagnetische Wellen sind eben Wellen. Warum? Weil uns der Physiklehrer eine Klasse von Experimenten erzählt hat, die zu diesen Schlüssen berechtigen (und wir haben ihm geglaubt). Er hätte uns aber eine ganz andere Klasse von Experimenten sagen können, die zu ganz anderen Schlüssen geführt hätten. Dazu nur zwei Beispiele:

- Beim äußeren Photoeffekt kann Licht (eine Welle) aus einem Festkörper Elektronen (Teilchen) auslösen. Aber: Wenn die Wellenlänge des verwendeten Lichtes eine bestimmte Grenzwellenlänge in Richtung größerer Wellenlängen überschreitet, werden keine Elektronen ausgelöst, ganz egal, wie groß die Lichtintensität gewählt wird. Das ist unverständlich; wenn jedem Elektron eine bestimmte Energie zugeführt werden muß, um es aus dem Festkörper austreten zu lassen, müßte dies durch Erhöhen der Wellenintensität immer möglich sein. Die „Erklärung“ gelingt zwanglos, wenn man sich Licht als einen Strom von Lichtteilchen (Photonen) vorstellt, wobei die Energie der einzelnen Photonen umgekehrt proportional zur Lichtwellenlänge ist: Bei Überschreiten der Grenzwellenlänge reicht die Energie des Lichtteilchens nicht mehr aus, in einem „Stoß“ mit dem Elektron diesem die nötige Austrittsenergie zu verleihen (die kooperative Übertragung der Energie zweier Lichtteilchen auf ein Elektron ist extrem unwahrscheinlich, dazu müßten zwei Photonen und ein Elektron gleichzeitig „zusammenstoßen“). Fazit: Eine Welle (Licht) „benimmt“ sich beim äußeren Photoeffekt so, als bestünde sie aus Teilchen (Photonen).
- Schießt man Elektronen (Teilchen) mit möglichst genau definierter Geschwindigkeit und Richtung durch Kristalle und fängt sie auf einer dahinter angeordneten Folie auf, so entstehen typische symmetrische Muster der Auftreffhäufigkeit dieser Elektronen. Die Muster sind nicht aus der Anwendung der Stoßgesetze oder der elektrostatischen Kräfte zwischen Elektronen und Kristallionen zu erklären (man könnte den Versuch auch mit Neutronen ausführen, bei

denen keine elektrostatischen Kräfte auftreten). Interpretiert man dagegen die Elektronen als Welle mit einer Wellenlänge, die dem mechanischen Impuls der Elektronen umgekehrt proportional ist, so lassen sich die Muster als Interferenzen von Wellen deuten, welche durch regelmäßig angeordnete Hindernisse (Atome im Kristall) gebeugt wurden. Fazit: Teilchen (Elektronen, Neutronen) „benehmen“ sich bei der Beugung am Kristallgitter so, als wären sie Wellen (Materiewellen).

Die Quantentheorie entwickelt einen Formalismus, mit dem sich diese Dualität von Wellenaspekt und Teilchenaspekt quantitativ erfassen läßt. Für den Makrokosmos, in dem Quantenphänomene nicht manifest werden (Kieselsteine und Wasserwellen), liefert sie identische Aussagen wie die klassischen Theorien.

Es erscheint „unanschaulich“, daß sich Teilchen wie Wellen und Wellen wie Teilchen verhalten sollen; daher ist eine kurze Kritik der „Anschauung“ angebracht. „Anschaulich“ erscheint uns etwas, was auf Kategorien zurückgeführt wird, die wir aus unserer täglichen Anschauung kennen: elastische Federn, Stöße, Wasserwellen, Kieselsteine. Wohlgermerkt: Das sind nicht notwendige Dinge, die wir „verstanden“ haben, sondern vielfach haben wir uns nur daran gewöhnt, mit den Begriffen zu operieren, ohne sie je verstanden zu haben (was ist eine Feder? Das glaubt jeder zu wissen, der auf einem Diwan gehopst ist oder an einem Expander gezogen hat). Es ist ganz natürlich, daß auf den Mikrokosmos (einen Bereich, der sich unserer täglichen Anschauung entzieht) jene Begriffe nicht passen, die wir aus dem Umgang mit dem Alltag entwickelt haben (Wellen, Teilchen). Daher ist auch Verzweigung unangebracht (was sind sie nun? Wellen oder Teilchen? Sie können doch nicht beides sein!). Aus dem Zur-Kennntnis-Nehmen von experimentellen Befunden im Mikrokosmos können wir uns mit den Spielregeln anfreunden, uns an sie gewöhnen (wie man Spielregeln für Skat oder Monopoly akzeptiert), dafür eine „Anschauung“ in dem Sinne entwickeln, daß wir prognostizieren können, wie sich eine hypothetische Situation im Mikrokosmos weiter entwickeln wird, genauso, wie wir voraussagen können, was passiert, wenn wir einen Stein aus der Hand fallen lassen (er wird eben zu Boden fallen).

Eine Warnung ist vonnöten: Wir müssen damit rechnen, daß es auch andere Begriffe (außer „Welle“ und „Teilchen“) gibt, die sich nicht naiv und ungestraft aus dem Alltag in den Mikrokosmos übertragen lassen. Nehmen wir den Begriff „Bahn“ (einer Lokomotive, eines geworfenen Steins, etc): Steine und Lokomotiven werden wir durch unsere Beobachtung ihrer Bewegung auch durch noch so „scharfe“ Blicke nicht in ihrer Bewegung merklich beeinflussen können. Im Mikrokosmos ist das anders. Um Elektronen zu „sehen“, müssen wir sie mit Lichtteilchen „bewerfen“, deren Energie möglicherweise größer ist, als die des Elektrons. Das Elektron wird bei der ersten Beobachtung aus seiner „Bahn“ geworfen, bei einer folgenden Beobachtung ist das Elektron nicht dort, wo es gewesen wäre, wenn wir die erste Beobachtung nicht versucht hätten. Der Begriff „Bahn“ muß vielleicht ganz aufgegeben werden: Der Mond zieht seine Bahn um die Erde. Aber: Zieht ein Elektron seine Bahn um ein Proton (Wasserstoffatom)? Wie wollte man sie registrieren? Dazu folgende Überlegung: Ein Wasserstoffatom hat einen Durchmesser von ungefähr $1\text{\AA} = 10^{-8}$ cm. Wollten wir die Bahn auf 1% genau vermessen, müßte man Distanzen von $10^{-2}\text{\AA} = 10^{-10}$ cm auflösen. Da man mit Licht aber Details nur bis in die Größenordnung der verwendeten Lichtwellenlänge auflösen kann, müßten wir Licht der Wellenlänge 10^{-10} cm verwenden: Dem entspricht eine Photonenenergie (Energie der Lichtteilchen) von ungefähr 1,24 MeV. Da die Ionisierungsenergie eines Wasserstoffatoms nur 13,6 eV beträgt, ist leicht einzusehen, was passiert: Wenn wir mit einem Photon der Energie 1 MeV auf ein H-Atom werfen, treffen wir vielleicht das Elektron und „sehen“ einen einzigen Punkt seiner Bahn; damit haben wir aber auch das H-Atom demoliert, und eine weitere Messung ist unmöglich! Alles, was wir tun können, ist folgendes: Wir nehmen immer wieder und immer wieder ein heiles H-Atom, messen, wo das Elektron ist, und notieren uns die Lage, wo wir bei den einzelnen Atomen das Elektron gesehen haben. Das Ergebnis ist keine „Bahn“, sondern eine Wahrscheinlichkeitsdichte $w(\vec{r})$, das Elektron an einer Stelle \vec{r} relativ zum Proton anzutreffen (wie in Extremsituationen der Begriff einer Orbitalbewegung eines lokalisierten Elektrons aufrechterhalten werden kann, wird in [34] diskutiert).

1.2 Interferenzexperimente

Die für den Mikrokosmos relevanten Zusammenhänge zwischen den Erscheinungsformen „Welle“ und „Teilchen“ desselben „Etwas“ sollen anhand nachstehend beschriebener Experimente näher untersucht werden. Die Versuchsanordnung zeigt Abb. 1.1: Aus einer Quelle Q werden klassische Teilchen, klassische Wellen oder dem Mikrokosmos zuzuordnende „Zwitter“ (z.B. Elektronen) abgegeben, welche durch Spalte 1, 2 in einem Schirm S in eine Registrierebene R gelangen.

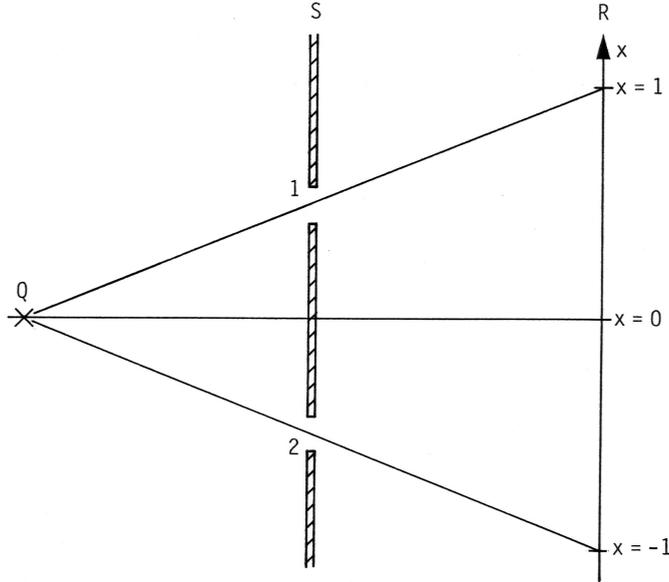


Abbildung 1.1: Q: Quelle für klassische Teilchen, klassische Wellen oder Wellen-Teilchen-Zwitter. S: Schirm mit zwei Spalten 1, 2. R: Registrierebene mit längs der x-Achse verschieblichen Detektoren

1.2.1 Experiment mit klassischen Teilchen

Bei jedem Experiment werden nacheinander N Teilchen von der stark streuenden Quelle Q emittiert. Die Teilchen seien unzerbrechlich, es sei ausgeschlossen, daß sie sich auf ihrer Bahn gegenseitig beeinflussen (also, daß etwa ein vom Schirm abprallendes Teilchen das nächste Teilchen aus der Quelle trifft und ablenkt). Die beiden Spalte 1, 2 sind symmetrisch zur Verbindungslinie zwischen der Quelle Q und dem Punkt $x = 0$ in der Registrierebene. Im Mittel werden N_1 Teilchen durch Spalt 1, N_2 Teilchen durch Spalt 2 und N_0 Teilchen durch keinen der beiden Spalte fliegen. Es lassen sich Teilchendichten $n(x)$ (Teilchen pro Länge in x -Richtung) und Wahrscheinlichkeitsdichten $w(x)$ für das Auftreffen von Teilchen an der Stelle x definieren, sowie eine Wahrscheinlichkeit w_0 , daß das Teilchen weder durch Spalt 1 noch durch Spalt 2 gelangt.

Ist nur Spalt 1 geöffnet, so gelangen N_1 der ausgesandten N Teilchen in die Registrierebene, und es gilt

$$n_1(x) = Nw_1(x), \quad N_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} n_1(x) dx = N \int_{-\infty}^{+\infty} w_1(x) dx. \quad (1.1)$$

Für den Fall, daß nur Spalt 2 geöffnet wird, erreichen N_2 der von der Quelle abgegebenen N Teilchen die Registrierebene:

$$n_2(x) = Nw_2(x), \quad N_2 = \int_{-\infty}^{+\infty} n_2(x) dx = N \int_{-\infty}^{+\infty} w_2(x) dx. \quad (1.2)$$

Die Prognose für die Teilchendichte in der Registrierebene im Fall, daß beide Spalte geöffnet sind, lautet folgendermaßen: Da die Teilchen einander nicht beeinflussen, wird die lokale Teilchendichte $n_{12}(x)$ die Summe der Teilchendichten sein, welche bei Durchgang durch Spalt 1 und Spalt 2 zu erwarten sind, das heißt

$$\begin{aligned} n_{12}(x) &= Nw_{12}(x) = n_1(x) + n_2(x) = N[w_1(x) + w_2(x)], \\ \int_{-\infty}^{+\infty} n_{12}(x)dx &= N \int_{-\infty}^{+\infty} w_{12}(x)dx = N_1 + N_2 \\ w_{12}(x) &= w_1(x) + w_2(x). \end{aligned} \quad (1.3)$$

Die lokale Auftreffwahrscheinlichkeit $w_{12}(x)$ ist die Summe der Wahrscheinlichkeiten $w_1(x), w_2(x)$ (in der Normierung, wie sie Gl. 1.1–Gl. 1.3 zu entnehmen ist). Ferner gilt natürlich

$$\begin{aligned} N &= N_1 + N_2 + N_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} n_1(x)dx + \int_{-\infty}^{+\infty} n_2(x)dx + N_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} n_{12}(x)dx + N_0 \\ &= N \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} w_1(x)dx + \int_{-\infty}^{+\infty} w_2(x)dx + w_0 \right\}. \end{aligned} \quad (1.4)$$

Die prinzipiellen Verläufe der Teilchendichten sind in Abb. 1.2 dargestellt.

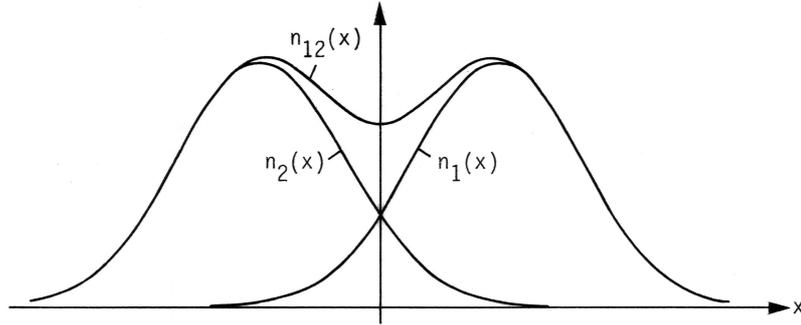


Abbildung 1.2: Verlauf der Teilchendichten in der Registrierebene. $n_1(x)$: Transmission durch Spalt 1. $n_2(x)$: Transmission durch Spalt 2. $n_{12}(x)$: Transmission durch beide Spalte

1.2.2 Experiment mit klassischen Wellen

In Abb. 1.1 sei Q eine Wellenquelle, welche die Leistung P aussendet. In der Registrierebene seien keine Anzeichen für einen Teilchencharakter feststellbar (die Detektoren registrieren eine Intensität $I(x)$, welche sich bei Veränderung von P kontinuierlich ändern läßt). Im Mittel wird durch den Spalt 1 die Leistung P_1 , durch den Spalt 2 die Leistung P_2 transmittiert. Die Leistung P_0 verfehlt die beiden Spalte. Anstelle von Teilchendichten $n(x)$ werden nun Intensitäten $I(x)$ registriert, welche auch durch (auf die Gesamtleistung P der Quelle) normierte Intensitäten $w(x)$ ausgedrückt werden können.

Ist nur Spalt 1 geöffnet, so registriert man analog zu Gl. 1.1 die Intensität

$$I_1(x) = Pw_1(x), \quad P_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} I_1(x)dx = P \int_{-\infty}^{+\infty} w_1(x)dx. \quad (1.5)$$

Analoge Beziehungen gelten für den Fall, daß nur Spalt 2 geöffnet ist:

$$I_2(x) = Pw_2(x), \quad P_2 = \int_{-\infty}^{+\infty} I_2(x) dx = P \int_{-\infty}^{+\infty} w_2(x) dx. \quad (1.6)$$

Die Prognose, daß sich bei Öffnung beider Spalte analog zu Gl. 1.3 eine Intensität $I_{12}(x)$ registrieren läßt, welche man durch Addition der Intensitäten $I_1(x)$ und $I_2(x)$ erhält, stellt sich nach Durchführung des Experiments als falsch heraus. Es gilt nämlich

$$I_{12}(x) = Pw_{12}(x) \neq I_1(x) + I_2(x) = P[w_1(x) + w_2(x)], \quad (1.7)$$

d. h. $w_{12}(x) \neq w_1(x) + w_2(x)$.

Tatsächlich ergibt sich für die Intensitätsverläufe das in Abb. 1.3 dargestellte Ergebnis. Jedem, der mit Wellen zu tun gehabt hat, ist „klar“ (das heißt: er hat sich daran gewöhnt), daß bei

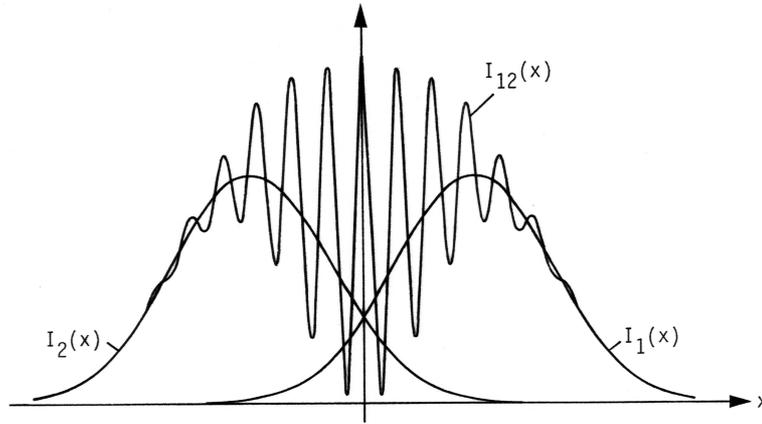


Abbildung 1.3: Verlauf der Intensitäten in der Registrierebene. $I_1(x)$ bei Transmission durch Spalt 1, $I_2(x)$ bei Transmission durch Spalt 2, $I_{12}(x)$ bei Transmission durch beide Spalte

Wellen die Feldstärken superponiert werden müssen, und daß sich Intensitäten durch Quadrieren der Feldstärken ergeben. Die Prognose ist falsch, weil dieser Umstand nicht beachtet wurde.

Wir beschreiben also die Wellen in der Registrierebene durch eine Feldstärke

$$\psi(x, t) = \sqrt{2} \Re \{ \psi(x) e^{j\omega t} \} = \sqrt{2} |\psi(x)| \Re \{ e^{j[\omega t + \delta(x)]} \}, \quad (1.8)$$

welche so normiert sei, daß für die Intensität $I(x)$ gilt

$$I(x) = P|\psi(x)|^2. \quad (1.9)$$

Mit diesen Definitionen ändert sich in den Fällen, daß nur ein Spalt geöffnet ist, gar nichts. Gl. 1.5 und Gl. 1.6 lauten nun

$$I_1(x) = Pw_1(x) = P|\psi_1(x)|^2, \quad P_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} I_1(x) dx = P \int_{-\infty}^{+\infty} w_1(x) dx = P \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_1(x)|^2 dx, \quad (1.10)$$

$$I_2(x) = Pw_2(x) = P|\psi_2(x)|^2, \quad P_2 = \int_{-\infty}^{+\infty} I_2(x) dx = P \int_{-\infty}^{+\infty} w_2(x) dx = P \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_2(x)|^2 dx.$$

Im Fall, daß beide Spalte geöffnet sind, müssen zunächst die Teilfelder $\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$ zu einem Gesamtfeld $\psi_{12}(x)$ überlagert werden,

$$\psi_{12}(x) = \psi_1(x) + \psi_2(x), \quad (1.11)$$

aus dem dann die Intensität $I_{12}(x)$ ermittelt wird; mit Gl. 1.10 erhält man

$$\begin{aligned} I_{12}(x) &= Pw_{12}(x) = P|\psi_{12}(x)|^2 = P|\psi_1(x) + \psi_2(x)|^2 \\ &= I_1(x) + I_2(x) + 2\sqrt{I_1(x)I_2(x)} \cos[\delta_1(x) - \delta_2(x)] \\ &\neq I_1(x) + I_2(x) = P[w_1(x) + w_2(x)]. \end{aligned} \quad (1.12)$$

Der Interferenzterm gibt die Verhältnisse von Abb. 1.3 prinzipiell richtig wieder. In der Nähe von $x = 0$ gilt im Fall $I_1(0) = I_2(0)$, $\delta_1(0) = \delta_2(0)$

$$I_{12}(0) = 4I_1(0), \quad (\text{konstruktive Interferenz}). \quad (1.13)$$

Es gibt aber benachbarte Stellen $x = \pm \varepsilon$, an denen $\delta_1(\pm \varepsilon) - \delta_2(\pm \varepsilon) = \pm \pi$ erfüllt ist, und an denen somit näherungsweise

$$I_{12}(\pm \varepsilon) \approx 0, \quad (\text{destruktive Interferenz}) \quad (1.14)$$

gilt. Streng genommen sind die Teilfelder $\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$ für den Fall, daß beide Spalte offen sind, nicht mehr identisch mit den Feldern $\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$, die sich ergeben, wenn nur ein Spalt offen steht. Vernachlässigt man diesen Effekt, so gilt angenähert (siehe Abb. 1.5)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{I_1(x)I_2(x)} \cos[\delta_1(x) - \delta_2(x)] dx \approx 0, \quad (1.15)$$

so daß in Analogie zu Gl. 1.4 auch gilt

$$P = P_1 + P_2 + P_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} I_1(x) dx + \int_{-\infty}^{+\infty} I_2(x) dx + P_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} I_{12}(x) dx + P_0. \quad (1.16)$$

1.2.3 Experiment mit Elektronen

Aus der Quelle Q in Abb. 1.1 werden nun Elektronen entlassen. In der Registrierebene angeordnete Detektoren stellen fest, daß es sich tatsächlich um unteilbare, individuell registrierbare Teilchen handelt.

Mit denselben Bezeichnungen wie in Gl. 1.1–Gl. 1.4 würde man bei der Transmission durch den Spalt 1, durch den Spalt 2 oder durch beide Spalte die in Abb. 1.2 dargestellten Ergebnisse erwarten. Tatsächlich registriert man aber für die Teilchendichten $n_1(x)$, $n_2(x)$ und $n_{12}(x)$ Verläufe, die sich mit denen von $I_1(x)$, $I_2(x)$ und $I_{12}(x)$ aus dem Experiment mit klassischen Wellen decken.

Das Dilemma scheint unlösbar: In der Registrierebene werden eindeutig Teilchen empfangen. Diese Teilchen müssen durch einen der beiden Spalte gekommen sein. Weil aber ein Interferenzmuster in der Teilchendichte $n_{12}(x)$ gemessen wurde, müßten sich die Elektronen in der Schirmebene wie Wellen verhalten haben, also „gleichzeitig“ auf eine obskure Weise als Partialwellen durch die Spalte geflogen sein. Die Interferenz dieser Wellen müßte eine räumliche Modulation der Auftreffwahrscheinlichkeit in der Registrierebene bewirkt haben, so daß an Stellen hoher Auftreffwahrscheinlichkeit häufiger (ganze, unteilbare) Elektronen ankommen als an Stellen niedriger Auftreffwahrscheinlichkeit.

Diese „geheimnisvolle“ Umwandlung von Teilchen in Wellen und wieder in Teilchen (auf dem Weg von der Quelle durch den Schirm in die Registrierebene) ist mit unseren Alltagsvorstellungen über Wellen und Teilchen nicht vereinbar. Es ist angebracht, die Frage zu stellen: Auf welchem Weg sind die Elektronen tatsächlich an die Stelle x gelangt, durch Spalt 1 oder durch Spalt 2?

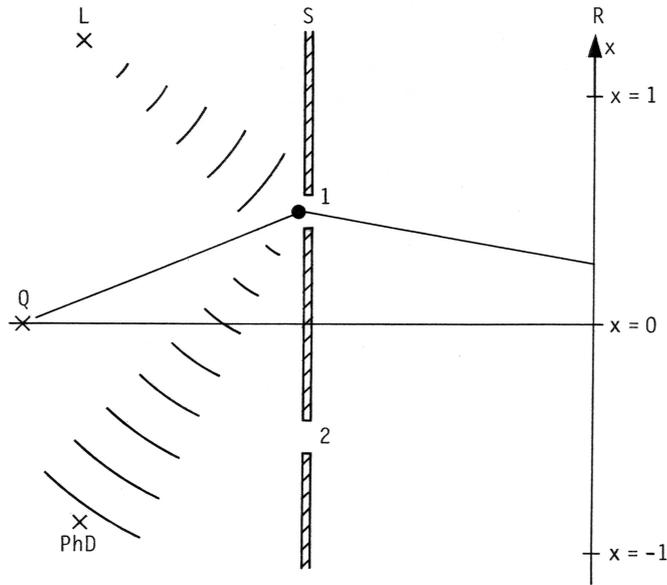


Abbildung 1.4: Anordnung von Abb. 1.1, ergänzt durch eine Lichtquelle L und einen Photodetektor PhD zur Erlangung der Welcher-Weg-Information

Wir versuchen, die Frage durch einen „Welcher-Weg-Detektor“ (im folgenden kurz als WW-Detektor bezeichnet) zu lösen. Abb. 1.4 zeigt die Anordnung. Nach einigem Experimentieren mit der Beleuchtung der beiden Spalte stellen wir fest: Wenn die Wellenlänge der Lichtquelle zu groß gewählt wird, erzeugt zwar ein durch die Spalte fliegendes Elektron einen Lichtblitz von reflektiertem Licht in der Schirmebene, aber die räumliche Ausdehnung der Lichterscheinung ist so groß, daß sich nicht entscheiden läßt, ob das Elektron durch Spalt 1 oder durch Spalt 2 gekommen ist. Wenn die Intensität des Lichtes zu klein gewählt wird, kann es vorkommen, daß in der Registrierebene ein Elektron ankommt, ohne daß vorher in der Schirmebene ein Lichtblitz registriert wurde (das Elektron ist „ungesehen“ durchgeschlüpft).

Wird die Wellenlänge des Lichtes hinreichend klein gemacht und eine hinreichend große Lichtintensität eingestellt, so läßt sich erreichen, daß wir von jedem Elektron, welches die Registrierebene erreicht, eindeutig angeben können, durch welchen Spalt es gekommen ist. Für die Teilchendichten $n_1(x)$, $n_2(x)$ und $n_{12}(x)$ registrieren wir die Kurven von Abb. 1.5, also keine Interferenz! Wenn wir dagegen den WW-Detektor entfernen (oder, wie oben besprochen, Lichtwellenlänge und Lichtintensität so einstellen, daß eine WW-Information nicht erreicht werden kann), so erhält man bei Transmission durch beide Spalte die Teilchendichte $n'_{12}(x)$, also volle Interferenz (siehe Abb. 1.5).

Eigentlich ist das Ergebnis befriedigend: Es zeigt, daß Elektronen weder Teilchen „sind“, noch, daß sie Wellen „sind“. Sie verkörpern in sich beide Erscheinungsformen. Es liegt an uns, sie so zu behandeln, daß sie das eine oder das andere Verhalten zeigen. Wenn wir sie durch Installieren eines WW-Detektors dazu zwingen, ihre Teilchennatur zu manifestieren, dann benehmen sie sich auch wie Teilchen: Sie interferieren nicht. Wenn wir dagegen in der Schirmebene keine Information erlangen können, daß es sich um Teilchen handelt, dann benehmen sie sich dort wie Wellen, deren Interferenz in der Registrierebene die räumliche Auftreffwahrscheinlichkeit moduliert. Der Detektor in der Registrierebene zwingt die Elektronen wieder in ihr Teilchenbild und registriert ganze Elektronen.

Die Interferenz kann quantitativ nur wiedergegeben werden, wenn man eine mathematische Beschreibung analog der Behandlung klassischer Wellen wählt, also in Anlehnung an Gl. 1.8–Gl. 1.12.

Man postuliert somit: Für jedes Ereignis gibt es eine diesem Ereignis zugeordnete komplexe

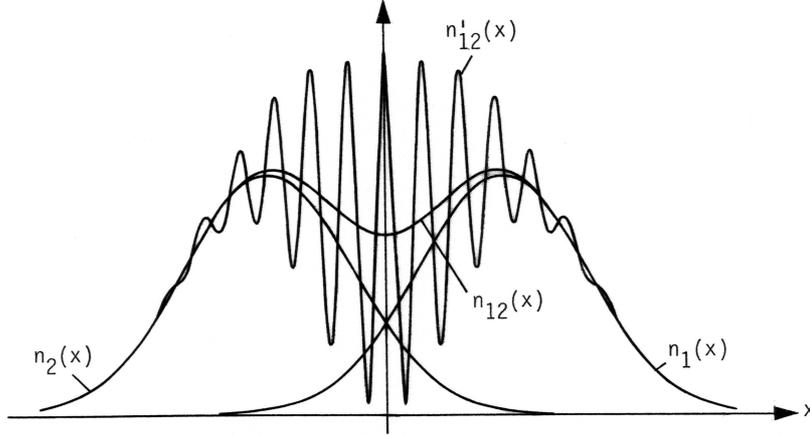


Abbildung 1.5: Teilchendichten bei der Transmission von Elektronen durch einen Doppelspalt. $n_1(x)$ bei Transmission durch Spalt 1. $n_2(x)$ bei Transmission durch Spalt 2. $n_{12}(x)$ bei Transmission durch beide Spalte und vollständiger WW-Information. $n'_{12}(x)$ bei Transmission durch beide Spalte und fehlender WW-Information

Zahl (Wahrscheinlichkeitsamplitude = WA oder Wahrscheinlichkeitsdichteamplitude = WDA). Die Wahrscheinlichkeit (oder Wahrscheinlichkeitsdichte), mit der das Ereignis eintritt, erhält man als Quadrat des Absolutbetrags der WA (oder WDA). Wenn ein Ereignis über mehrere, für unsere normalen Vorstellungen einander logisch ausschließende Wege abgelaufen sein kann, ohne daß wir eine WW-Information registriert haben, dann ist die WA (oder WDA) für dieses Ereignis die Superposition der WA (oder WDA), welche den einzelnen Wegen zugeordnet sind.

Ist $\psi_1(x)$ die WDA dafür, daß ein Elektron aus der Quelle Q durch Spalt 1 an die Stelle x gelangt, und ist $\psi_2(x)$ die WDA, daß ein Elektron aus Q über Spalt 2 an die Stelle x gelangt, so wird das Ereignis, daß ein Elektron aus Q durch einen der beiden Spalte (ohne daß ein WW-Detektor installiert wurde) nach x gelangte, durch die WDA

$$\psi_{12}(x) = \psi_1(x) + \psi_2(x) \quad (1.17)$$

beschrieben, die entsprechenden Wahrscheinlichkeitsdichten sind somit

$$\begin{aligned} w_1(x) &= |\psi_1(x)|^2 \\ w_2(x) &= |\psi_2(x)|^2 \\ w_{12}(x) &= |\psi_{12}(x)|^2 = |\psi_1(x) + \psi_2(x)|^2 \\ &= w_1(x) + w_2(x) + 2\sqrt{w_1(x)w_2(x)} \cos[\delta_1(x) - \delta_2(x)]. \end{aligned} \quad (1.18)$$

Die Gleichungen sind analog zu Gl. 1.11, Gl. 1.12. Die WA (oder WDA) hat keine unmittelbare physikalische Bedeutung, ihre Zusammensetzung hat aber Einfluß auf die berechneten (und registrierbaren) Wahrscheinlichkeiten für das Eintreten eines Ereignisses. Welchen Gleichungen genügen die WA (oder WDA)? Wie ändern sie sich als Funktion des Ortes und der Zeit in der Dynamik von Systemen? Diese Fragen werden später zu beantworten sein.

Interferenzexperimente der hier beschriebenen Art sind sowohl mit einzelnen Photonen [12] als auch mit einzelnen Elektronen [25][45] durchgeführt worden. Es ist zu beachten, daß das Vektorpotential \vec{A} und das Skalarpotential φ die Phase der Wahrscheinlichkeitsamplituden beeinflussen [1][31][25][45] und damit den Ausgang von Interferenzexperimenten bestimmen: \vec{A} und φ haben somit eine unmittelbare physikalische Bedeutung (und sind nicht, wie in Texten der klassischen Elektrodynamik noch heute vielfach behauptet wird, bloß Hilfsmittel zur Berechnung der elektromagnetischen Felder).

Gibt es überhaupt klassische Wellen und Teilchen? Warum gibt es keine Kieselsteininterferenzen oder Quanten der Wasserwellen?

Natürlich unterliegen auch Kieselsteine und Wasserwellen den Gesetzen der Quantentheorie. Nach Abschn. 1.1 ist die Materiewellenlänge eines Teilchens umgekehrt proportional zu seinem Impuls. Für ein Elektron, welches die Potentialdifferenz von 1 V durchlaufen hat, berechnet man eine Materiewellenlänge $\lambda = h/(mv) = 12 \text{ \AA}$. Die Materiewellenlänge selbst langsam fliegender Kieselsteine ist viele Zehnerpotenzen kleiner. Eine räumliche Modulation der Kieselsteindichte (siehe $n'_{12}(x)$ in Abb. 1.5) erfolgt mit so kurzer Periode, daß jeder Kieselsteindetektor über viele Perioden mittelt und im Effekt den Verlauf von $n_{12}(x)$ registriert: Kieselsteininterferenzen sind unmeßbar. Ähnlich sind bei Wasserwellen die Energiequanten so klein, daß eine Körnigkeit der Intensität $I(x)$ nicht registrierbar ist.

1.3 Die Unschärferelation

Es könnte sein, daß der WW-Detektor von Abb. 1.4 das System zu stark stört. Würde durch die Beleuchtung die relative Phase φ zwischen den WDA $\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$ von Elektron zu Elektron statistisch geändert (Gleichverteilung im Intervall $0 \leq \varphi < 2\pi$), so müßte man Gl. 1.17 ersetzen durch

$$\psi_{12}(x) = \psi_1(x) + \psi_2(x)e^{j\varphi}, \quad w(\varphi) = \frac{1}{2\pi} \quad \text{in} \quad 0 \leq \varphi < 2\pi. \quad (1.19)$$

Für die Wahrscheinlichkeiten würde resultieren (Querstriche bedeuten eine Mittelung über die Zufallsgröße φ)

$$\begin{aligned} w_1(x) &= |\psi_1(x)|^2 \\ w_2(x) &= |\psi_2(x)|^2 \\ w_{12}(x) &= \overline{|\psi_{12}(x)|^2} = w_1(x) + w_2(x) + 2\sqrt{w_1(x)w_2(x)} \overline{\cos[\delta_1(x) - \delta_2(x) - \varphi]} \\ &= w_1(x) + w_2(x). \end{aligned} \quad (1.20)$$

Es ergäbe sich dementsprechend keine Interferenz. Ideal wäre es, wenn die WW-Entscheidung getroffen werden könnte, ohne die Elektronen auf ihrem Weg von der Quelle in die Registrierebene durch zusätzliche Einrichtungen stören zu müssen.

Dazu folgendes Gedankenexperiment: In der Anordnung von Abb. 1.6 werde der auf reibungslosen Rollen in x -Richtung verschiebbliche Schirm S mit dem Doppelspalt symmetrisch zur Verbindungslinie zwischen Quelle und der Stelle $x = 0$ in der Registrierebene R eingestellt, und zwar so, daß er sich in Ruhe befindet. Ein Elektron mit dem Impuls p , welches auf dem Weg durch Spalt 1 (durch Spalt 2) an die Stelle $x = 0$ gelangt, überträgt (Impulserhaltung zwischen Schirm und Elektron!) auf den Schirm den Impuls

$$p_S = \pm 2p \sin \alpha. \quad (1.21)$$

Läßt man das Experiment in völliger Dunkelheit (keine Störung des Elektrons durch Licht!) ablaufen, und schaltet das Licht erst wieder ein, wenn das Elektron bereits im Detektor in der Registrierebene gelandet ist, so sieht man aus der Bewegung des Schirms, durch welchen Spalt das Elektron geflogen ist: Bewegt sich der Schirm nach oben, ging es durch Spalt 1; bewegt sich der Schirm nach unten, ging es durch Spalt 2. Diese Entscheidung aufgrund der Bewegungsrichtung des Schirms ist allerdings nur dann möglich, wenn der Schirm zu Beginn des Experiments einen Impuls in x -Richtung hatte, dessen Betrag kleiner ist als p_S von Gl. 1.21. Man muß den Schirm daher zu Beginn jedes Elektronenstarts so justiert haben, daß für den Betrag Δp_S des Schirm-Impulses gilt

$$\Delta p_S < 2p \sin \alpha. \quad (1.22)$$

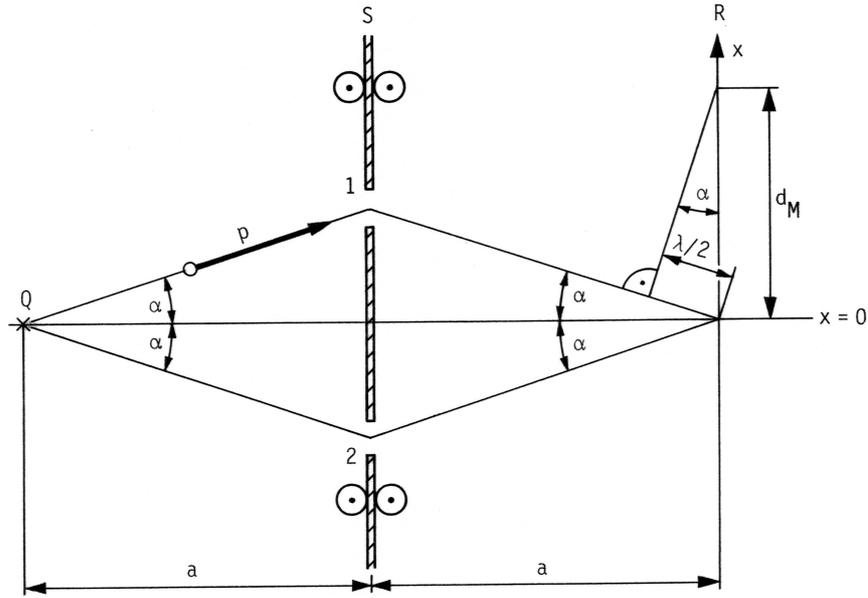


Abbildung 1.6: Registrierung der Elektroneninterferenz bei $x = 0$. S ist der auf reibungslosen Rollen verschiebbare Schirm mit dem Doppelspalt, Q ist die Elektronenquelle

Aber auch die Lage des Schirms muß genau kontrolliert werden. Bei symmetrischer Einstellung des Doppelspalts zur Position $x = 0$ entsteht an dieser Stelle durch die Interferenz der Materiewellen ein Maximum der Auftreffwahrscheinlichkeit (siehe auch Abb. 1.5). Das nächste Interferenzmaximum (siehe Abb. 1.6, in der Nähe von $x = 0$ sind die Materiewellen als ebene Wellen vorausgesetzt) wäre im Abstand

$$d_M = \frac{\lambda}{2 \sin \alpha} = \frac{h}{2p \sin \alpha}, \quad \text{da} \quad \lambda = \frac{h}{p}. \quad (1.23)$$

Dabei ist λ die Materiewellenlänge, welche umgekehrt proportional zum Impuls p des Elektrons ist. Der Proportionalitätsfaktor $h = 6,6260755 \cdot 10^{-34} \text{ Ws}^2$ ist das Plancksche Wirkungsquantum. Um von Versuch zu Versuch das Interferenzmaximum an der Stelle $x = 0$ entstehen zu lassen, muß gefordert werden, daß die Abweichung Δx_S des Schirms von der symmetrischen Einstellung sehr klein ist im Vergleich zu d_M von Gl. 1.23:

$$\Delta x_S \ll d_M = \frac{h}{2p \sin \alpha}. \quad (1.24)$$

Kombiniert man Gl. 1.22 und Gl. 1.24, so ergibt sich eine Forderung für die Impulsunsicherheit Δp_S und die Lageunsicherheit Δx_S des Schirms, die man vor Beginn jedes Elektronenübergangs von Q nach $x = 0$ zu erfüllen hat, wenn man sowohl die WW-Information als auch die Interferenzfigur erhalten möchte:

$$\Delta x_S \Delta p_S \ll h. \quad (1.25)$$

Beim tatsächlichen Versuch stellt sich heraus, daß die Forderung von Gl. 1.25 nicht zu erfüllen ist. Es gelingt zwar, eine Einstellung $\Delta x_S \ll d_M$ zu erreichen (hohe Präzision bei der Positionierung des Schirms), und dementsprechend erscheint auch nach vielen Versuchen eine Teilchendichte wie $n'_{12}(x)$ von Abb. 1.5. Beim Anschalten des Lichtes nach Eintreffen des Elektrons im Detektor stellt sich aber in allen diesen Fällen heraus, daß sich der Schirm so schnell nach oben oder nach unten bewegt, daß offenbar $\Delta p_S > 2p \sin \alpha$ war und somit keine WW-Information vorliegt. Alternativ kann man auch den Impuls des Schirms sehr präzise auf $\Delta p_S < 2p \sin \alpha$ einstellen: Allerdings

stellt sich dann heraus, daß es irgendwie nicht gelungen ist, den Schirm genau zu positionieren; mit den von Versuch zu Versuch anders positionierten Interferenzmaxima ergibt sich nach vielen Versuchen eine glatte Kurve für die Teilchenhäufigkeit (siehe $n_{12}(x)$ in Abb. 1.5). Damit liegt zwar die WW-Information vor, aber es kann keine Interferenz beobachtet werden.

1.3.1 Unschärferelation. Komplementarität

Es zeigt sich, daß es Paare von physikalischen Größen gibt, die nicht gleichzeitig auf einen bestimmten Wert eingestellt werden können. Solche Paare sind z. B. die x -Koordinate und der Impuls p_x in x -Richtung. Mit einer geeigneten Definition der Unsicherheiten Δx , Δp_x (siehe Abschn. A.1) gilt

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,05457267 \cdot 10^{-34} \text{Ws}^2. \quad (1.26)$$

Gl. 1.26 wird als Unschärferelation oder Unbestimmtheitsrelation bezeichnet. Sie verhindert, daß man gleichzeitig über den Teilchenaspekt ($\Delta x \rightarrow 0$, genaue Lokalisierung eines Systems) und über den Wellenaspekt ($\Delta \lambda = \Delta(h/p) \rightarrow 0$, d. h. $\Delta p \rightarrow 0$, genaue Kenntnis der Materiewellenlänge) präzise informiert sein kann.

Eine Folge davon ist, daß physikalisch beobachtbare Größen (sogenannte Observable) in der Quantentheorie nicht mehr als Produkt einer Maßzahl mit einer Einheit beschrieben werden können. Für die z -Komponente L_z eines Bahndrehimpulses gilt z. B.

$$L_z = xp_y - yp_x. \quad (1.27)$$

Wegen der Unschärferelation können die Observablenpaare x , p_x und y , p_y nie gleichzeitig präzisiert werden. Dadurch würde es unmöglich, die z -Komponente L_z des Drehimpulses auf einen exakten Wert einzustellen! Wenn aber Messen überhaupt einen Sinn haben kann, muß es immer möglich sein, eine einzige beliebige Observable auf einen genauen Wert zu fixieren. Außerdem gibt es Observable, die nur ganz bestimmte diskrete Werte annehmen können (man bezeichnet dies als diskretes Meßwertspektrum). Eine Beschreibung von Observablen in der Quantentheorie muß in der Lage sein, sowohl verträgliche Messungen (d. h. die Observablen sind gleichzeitig präzise einstellbar, sie unterliegen keiner Unschärferelation) als auch nichtverträgliche Messungen (die Observablen unterliegen einer Unschärferelation) darzustellen, und für diese Observablen außerdem das richtige Meßwertspektrum liefern (z. B. die Energiewerte, die ein Elektron in einem Wasserstoffatom annehmen kann).

Die sogenannte Komplementarität (Teilchenbild und Wellenbild als entgegengesetzte Endpunkte auf unserer Kenntnisskala) ist hier anhand der Gültigkeit der Unschärferelation erläutert worden. In den letzten Jahren sind Apparaturen vorgeschlagen worden [39][40][42][41][12], mit denen die Welcher-Weg-Information gewonnen werden kann, ohne daß dabei eine Unschärferelation verletzt wird: Trotzdem läßt sich in diesen Fällen die Interferenz nicht beobachten (darüber mehr in Abschn. 3.1). Die Komplementarität scheint daher das fundamentale Prinzip zu sein. Bei der Berechnung von Apparaturen, welche gleichzeitig WW-Detektion und Interferenz ermöglichen sollen, stellt sich — wie in dem oben diskutierten Fall des verschieblichen Schirms — oft heraus, daß die Unschärferelation für das Mißlingen verantwortlich ist; in neuester Zeit jedoch scheint es so zu sein, daß ohne Verletzung einer Unschärferelation durch nichtklassische Korrelationen in der Meßapparatur die gleichzeitige Kenntnis über Teilchenaspekt und Wellenaspekt ausgeschlossen ist.

1.3.2 Messung zu gleichen Zeiten und gleichzeitige Messungen

Der Titel drückt scheinbar zweimal dasselbe aus. Das ist nicht der Fall, wie im folgenden erläutert wird.

Die Unschärferelation der Form Gl. 1.26, also

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (\text{Messung zu gleichen Zeiten}), \quad (1.28)$$

gilt nicht (wie früher einführend unpräzise behauptet wurde) für „gleichzeitige“ Messungen von x und p_x , sondern für Messungen zu gleichen Zeiten. Wie das zu verstehen ist, erläutert der Meßvorgang: Es versuche jemand, ein System in die Lage x_0 mit dem Impuls p_{x0} zu bringen. Jedesmal, wenn er glaubt, das geschafft zu haben (das ist der Zeitpunkt $t = t_0$), wird eine Messung durchgeführt, und zwar entweder eine Messung von x oder eine Messung von p_x (aber in keinem Fall eine gleichzeitige Messung von x und p_x).

Nach sehr vielen Messungen kann (als empirischer Grenzwert der relativen Häufigkeit) eine Wahrscheinlichkeitsdichte $w_x(x)$ für die x -Messung und eine Wahrscheinlichkeitsdichte $w_{p_x}(p_x)$ für eine p_x -Messung angegeben werden. Es ist zu beachten, daß von Einstellungsversuch zu Einstellungsversuch des Systems auf die Werte x_0, p_{x0} die relative Präzision, mit der man die Werte x_0, p_{x0} einzustellen versucht, nicht geändert wird. Wenn der „System-Einsteller“ (man nennt dies auch, ein System in einem definierten Zustand präparieren) keine systematischen Fehler bei der Einstellung begeht, wird sich herausstellen, daß die Werte x_0, p_{x0} wenigstens als Erwartungswert eingehalten werden:

$$\begin{aligned} x_0 &= \int_{-\infty}^{+\infty} x w_x(x) dx = \bar{x}, & p_{x0} &= \int_{-\infty}^{+\infty} p_x w_{p_x}(p_x) dp_x = \bar{p}_x, \\ & & \int_{-\infty}^{+\infty} w_x(x) dx &= \int_{-\infty}^{+\infty} w_{p_x}(p_x) dp_x = 1. \end{aligned} \quad (1.29)$$

Beide Observable werden aber endliche Streuungen aufweisen. Definiert man die Größen $\Delta x, \Delta p_x$ durch

$$\begin{aligned} \Delta x &= \sigma_x, & \sigma_x^2 &= \int_{-\infty}^{+\infty} (x - x_0)^2 w_x(x) dx = \overline{(x - \bar{x})^2}, \\ \Delta p_x &= \sigma_{p_x}, & \sigma_{p_x}^2 &= \int_{-\infty}^{+\infty} (p_x - p_{x0})^2 w_{p_x}(p_x) dp_x = \overline{(p_x - \bar{p}_x)^2}, \end{aligned} \quad (1.30)$$

so gilt für die so gewonnenen Größen $\Delta x, \Delta p_x$ die Unschärferelation Gl. 1.26. Abb. 1.7 zeigt ein mögliches Ergebnis für so eine Meßreihe, bei der offenbar die Einstellung des Impulswertes p_{x0} präziser erfolgte als die Einstellung der Lagekoordinate x_0 . Wenn eine der Unsicherheiten verschwindet, beispielsweise $\Delta p_x \rightarrow 0$, so zeigen die Wahrscheinlichkeitsdichten das Verhalten

$$\begin{aligned} w_{p_x}(p_x) &= \lim_{\sigma_{p_x} \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{p_x}^2}} \exp\left[-\frac{(p_x - p_{x0})^2}{2\sigma_{p_x}^2}\right] = \delta(p_x - p_{x0}), \\ w_x(x) &= \lim_{\sigma_x \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_x^2}} \exp\left[-\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma_x^2}\right] = \frac{1}{\int_{-\infty}^{+\infty} dx}. \end{aligned} \quad (1.31)$$

Der Impuls ist genau bekannt, der Ort völlig unbekannt. Die Grenzwerte in Gl. 1.31 sind als verallgemeinerte Grenzwerte zu verstehen.

Wenn man nach jeder Präparation des Systems auf die Werte x_0, p_{x0} zum Zeitpunkt $t = t_0$ dagegen eine Kontrollmessung des Wertepaares x, p_x (gleichzeitige Messung von x, p_x !) vornimmt, so erhält man nach vielen Messungen eine Verbundwahrscheinlichkeitsdichte $w(x, p_x)$, aus der sich analog Gl. 1.30 Werte $\Delta x, \Delta p_x$ definieren lassen. Es läßt sich zeigen ([19, S.662–666] und darin angegebene Literatur), daß das Produkt der so gewonnenen Unschärfen doppelt so groß ist

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar, \quad (\text{gleichzeitige Messungen}). \quad (1.32)$$

Gl. 1.32 ist für die Kommunikation im optischen Spektralbereich (Optische Nachrichtentechnik) relevant, da dort die „Körnigkeit“ der elektromagnetischen Strahlung beim Empfang mit einem

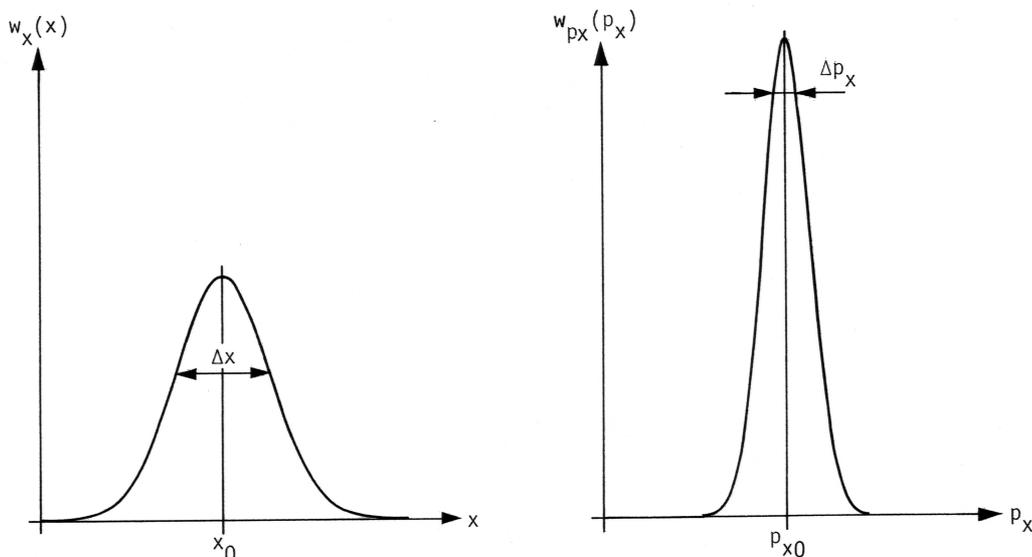


Abbildung 1.7: Wahrscheinlichkeitsdichten $w_x(x)$, $w_{p_x}(p_x)$ als Ergebnis von Messungen zu gleichen Zeiten nach einer Präparation des Systems bei x_0 , p_{x0} , wobei die Impulseinstellung präziser erfolgte als die Ortseinstellung

Photodetektor merklich ist: einer Wellenlänge von $\lambda = 1,24 \mu\text{m}$ entspricht eine Photonenenergie von 1 eV. Das Empfangsproblem besteht (sehr vereinfacht ausgedrückt) darin, einen Zeiger nach Betrag und Phase zu messen, oder alternativ zwei orthogonale Komponenten des Zeigers zu messen. Es stellt sich heraus, daß diese Observablenpaare nicht verträglich meßbar sind, sondern einer Unschärferelation Gl. 1.32 unterliegen. Das Signal (der Zeiger) läßt sich daher prinzipiell nicht exakt rekonstruieren. Der Endpunkt des Zeigers liegt irgendwo innerhalb eines Gebietes der ungefähren Größe h (was bei hohen Quantenzahlen und kleiner Quantenenergie $\hbar\omega$ im konventionellen elektronischen System nicht auffällt): Dadurch werden die prinzipiell nicht vermeidbaren minimalen Unsicherheiten beim Empfang elektromagnetischer Signale determiniert (sogenanntes Quantenrauschen).

1.3.3 Beugung von Licht an einer Öffnung

Die Unschärferelation kann oft dazu verwendet werden, die Größenordnung eines Effektes abzuschätzen. In Abb. 1.8 trifft eine ebene Welle auf einen Schirm mit einem Spalt der Breite d . Im Teilchenbild ist eine ebene Welle der Wellenlänge λ ein Strom von Photonen, deren Impuls den Betrag $p = h/\lambda$ besitzt. Die Richtung des Impulses zeigt in Richtung der Normale auf die Phasenfronten. Nach der Unschärferelation ist die Position der Photonen völlig unbestimmt, da der Impuls exakt bekannt ist. Nach dem Spalt ist die Situation anders: Transmittierte Photonen müssen durch den Spalt gekommen sein, ihre Lageunsicherheit Δx in x -Richtung ist daher auf $\Delta x = d$ begrenzt. Dem muß eine Unsicherheit des Photonenimpulses $\Delta p_x = p \sin \alpha$ (siehe Abb. 1.8) entsprechen. Setzt man anstelle der exakten Unschärferelation hier $\Delta x \Delta p_x \approx h$ an (es werden die Ortsunsicherheit Δx und die Impulsunsicherheit Δp_x hier nicht exakt definiert), so erhält man

$$\Delta x \Delta p_x = d \cdot \frac{h \sin \alpha}{\lambda} \approx h \quad \longrightarrow \quad \sin \alpha \approx \alpha = \frac{\lambda}{d}. \quad (1.33)$$

Die Beugung ist somit eine Folge der Unschärferelation: Der Spalt hat eine „Ortsmessung“ der Photonen vorgenommen (vorher war deren Lage auf der Wellenfront unbekannt) und eine dementsprechende Impulsunsicherheit verursacht.

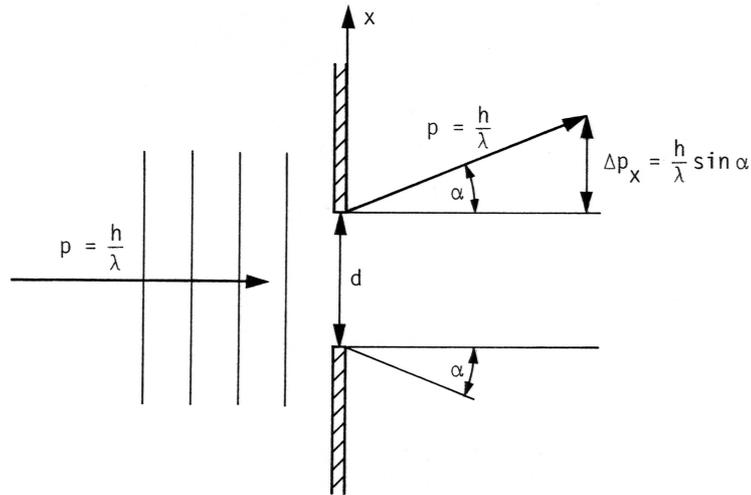


Abbildung 1.8: Beugung einer ebenen Welle an einem Spalt der Breite d , Impuls der Photonen $p = h/\lambda$

1.4 Forderungen an einen Formalismus

Aus den bisherigen qualitativen Betrachtungen ergeben sich einige Forderungen an einen Formalismus, der Quantenphänomene erfassen will:

Wahrscheinlichkeitsamplituden: Für jedes Ereignis, welches einen Anfangszustand in einen Endzustand überführt (für jeden Endzustand, der in einem Anfangszustand als Möglichkeit latent enthalten ist), ist eine Wahrscheinlichkeitsamplitude (=WA) oder Wahrscheinlichkeitsdichteamplitude (=WDA) zu definieren. Die WA (oder WDA) sind komplexe Zahlen. Definiert man Wahrscheinlichkeiten (=W) oder Wahrscheinlichkeitsdichten (=WD) für das Eintreten des Ereignisses als $W = |\text{WA}|^2$, $\text{WD} = |\text{WDA}|^2$, so ist damit die Erfassung von Interferenzen möglich: Kann nämlich ein Ereignis E auf verschiedenen Wegen E_i ($i = 1, 2, \dots, n$) eintreten, die einander paarweise logisch ausschließen, und ist keine Einrichtung vorhanden, aus der eine „Welcher-Weg-Information“ (WW-Information) ableitbar ist, so braucht man nur die WA für das Eintreten des Ereignisses E als geeignete lineare Superposition der WA der Teilereignisse E_i ansetzen:

$$\text{WA}(E) = \sum_{i=1}^n \text{WA}(E_i), \quad W(E) = |\text{WA}(E)|^2. \quad (1.34)$$

Messungen: Bei der Messung einer beobachtbaren physikalischen Größe (einer Observablen) wird ein reeller Meßwert gewonnen. Im allgemeinen läßt sich über das Meßergebnis vor der Messung nur eine Wahrscheinlichkeitsaussage machen. Sicher ist nur, daß der Meßwert irgendeiner aus der Gesamtheit der möglichen Meßwerte (dem Meßwertespektrum) sein wird. Das Meßwertespektrum kann eine endliche oder unendliche Anzahl diskreter Meßwerte enthalten und/oder Meßwerte (nicht-abzählbar unendlich viele) aus einem Wertebereich enthalten (sogenanntes diskretes und/oder kontinuierliches Spektrum).

Wenn ein Meßwert (z. B. der Meßwert m_1) gemessen wurde, dann muß sich bei einer Kontrollmessung derselben Observablen im Zeitabstand $\Delta t \rightarrow 0$ (wenn Messen überhaupt einen Sinn haben soll) mit absoluter Sicherheit derselbe Meßwert m_1 ergeben. Aufgrund der ersten Messung hat man das System mit der Eigenschaft m_1 „präpariert“, es ist in einen Zustand gelangt, in dem es mit Sicherheit die Eigenschaft m_1 besitzt. Die Kontrollmessung muß im Abstand $\Delta t \rightarrow 0$ erfolgen, weil nur dann sichergestellt ist, daß das System nicht zufolge

äußerer Einflüsse zwischen der ersten Messung und der Kontrollmessung seine Eigenschaften geändert hat.

Verträgliche Messungen: Zwei Observable heißen verträglich, wenn folgendes gilt: Mißt man für die erste Observable den Meßwert m_1 , für die zweite Observable den Meßwert n_1 (wobei die Messungen gleichzeitig, oder aber in beliebiger Reihenfolge im Abstand $\Delta t \rightarrow 0$ nacheinander ausgeführt werden können), dann erhält man bei Kontrollmessungen im Abstand $\Delta t \rightarrow 0$ (egal, ob sie für die beiden Observablen gleichzeitig oder in beliebiger Reihenfolge nacheinander erfolgen) mit absoluter Gewißheit wieder die Meßwerte m_1, n_1 . Das System befindet sich in einem Zustand, in dem es sicher die Eigenschaften m_1, n_1 besitzt (es wurde mit den Eigenschaften m_1, n_1 „präpariert“). Für verträgliche Observable existiert somit keine Unschärferelation.

Nichtverträgliche Messungen: Mißt man für eine Observable den Meßwert m_1 , und im Abstand $\Delta t \rightarrow 0$ für eine zweite Observable den Meßwert n_1 , so wird bei einer Kontrollmessung im Abstand $\Delta t \rightarrow 0$ für die erste Observable im allgemeinen ein Meßwert $m_2 \neq m_1$ resultieren (obwohl zufällig mit $W < 1$ auch m_1 wieder auftreten könnte). Analoges gilt auch für die Messung, wenn man die Reihenfolge der Observablen vertauscht. Das System befindet sich nach der letzten Messung in einem Zustand, in dem nur der Meßwert der zuletzt gemessenen Observablen sicher ist (in unserem Beispiel für Meßwerte in der Reihenfolge $m_1, n_1, m_2 \neq m_1$ nach der dritten Messung die Eigenschaft m_2).

Mißt man die beiden Observablen gleichzeitig, so erhält man ein Meßwertpaar m_1, n_1 . Bei einer Kontrollmessung einer der beiden Observablen erhält man weder m_1 noch n_1 mit absoluter Sicherheit. Bei einer gleichzeitigen Kontrollmessung der beiden Observablen erhält man im allgemeinen ein Meßwertpaar $m_2 \neq m_1, n_2 \neq n_1$ (obwohl zufällig mit $W < 1$ auch das Meßwertpaar m_1, n_1 auftreten könnte). Nach einer gleichzeitigen Messung der beiden nichtverträglichen Observablen mit dem Ergebnis m_1, n_1 kann also weder m_1 noch n_1 als eine sichere Eigenschaft des Systems angesehen werden. Für die Observablen gilt eine Unschärferelation, wobei man wie in Abschn. 1.3 zwischen Messungen zu gleichen Zeiten und gleichzeitigen Messungen zu unterscheiden hat.

Observable: Für Observable müssen geeignete mathematische Konstrukte gefunden werden, welche die bei den Messungen diskutierten Möglichkeiten darzustellen gestatten (wie anhand von Gl. 1.27 diskutiert wurde, ist die Darstellung einer physikalischen Größe als Produkt von Maßzahl und Einheit ungeeignet).

Die Meßwerte müssen reell sein: Mit der Zusammenfassung mehrerer reeller Größen zu einer Verbundgröße (Beispiel: Zusammenfassung von Kophasalkomponente und Quadraturkomponente zu einem komplexen Zeiger in der Elektrotechnik) muß man vorsichtig sein, weil diese Teilgrößen ja nicht unbedingt verträglich meßbar sein müssen.

Die Observable muß ihr Meßwertspektrum irgendwie „enkodiert“ erhalten. Zu jedem Meßwert muß es einen zugehörigen Zustand geben, in dem dieser Wert der Observablen mit Sicherheit gemessen werden kann.

Die mathematischen Konstrukte für Observable müssen die Möglichkeit bieten, daß man sie für verträglich meßbar oder aber für nicht verträglich meßbar deklarieren kann (durch eine geeignete Beziehung zwischen den mathematischen Konstrukten, welche diese Observablen repräsentieren).

Systemdynamik: Wenn ein System sich zufolge äußerer oder innerer Einflüsse zeitlich verändert, dann müssen sich offenbar die WA (WDA) und damit die W (WD) zeitlich ändern. Es sind geeignete Beziehungen zu finden, welche diese zeitlichen Änderungen erfassen. Angewendet auf den Makrokosmos müssen diese Beziehungen zu identischen Aussagen führen wie die Bewegungsgleichungen der klassischen Mechanik.

Kapitel 2

Entwicklung des Bracket-Formalismus

Die folgenden Entwicklungen benutzen den von Dirac eingeführten Bracket-Formalismus. Zur Vertiefung seien die Bücher [17][32][33] genannt, spezielle Anwendungen in der Quantenelektronik und Optischen Nachrichtentechnik enthält [19] und die darin zitierte Literatur. Nützliche Übungsaufgaben sind in [18] durchgerechnet. Eine leicht verständliche Einführung in den Formalismus und spezielle Anwendungen bieten [15][16].

2.1 Zustände als Vektoren

Die WA (oder WDA) für ein Ereignis ist eine komplexe Zahl und wird nach Dirac durch eine Klammer (englisch: bracket) mit der Schreibweise $\langle e | a \rangle$ bezeichnet. Das Symbol „ a “ steht dafür symbolisch für alles, was über den Anfangszustand ausgesagt werden kann, das Symbol „ e “ für alles, was den Endzustand spezifiziert. Daraus folgt unmittelbar

$$\begin{aligned}\langle \varphi | \varphi \rangle &= 1, \quad \varphi \text{ beliebig,} \\ \langle \varphi | \psi \rangle &= 0, \quad \text{für ein unmögliches Ereignis.}\end{aligned}\tag{2.1}$$

Da $W = |\text{WA}|^2$, $WD = |\text{WDA}|^2$, bedeutet $\langle \varphi | \varphi \rangle = 1$ die Trivialität, daß etwas ganz gewiß so ist, wie es eben ist (der Endzustand, spezifiziert durch das Symbol „ φ “, ist in demselben Anfangszustand, eben „ φ “, mit der Wahrscheinlichkeit eins enthalten). Es kann sein, daß ein Endzustand „ e “ aus einem Anfangszustand „ a “ über einen Zwischenzustand „ z “ erreicht wird. Die W , daß „ a “ in „ e “ übergeht, $w(e \leftarrow a)$, ist gleich dem Produkt der W , daß „ a “ in „ z “ übergeht, $w(z \leftarrow a)$, mit der W , daß „ z “ in „ e “ resultiert, $w(e \leftarrow z)$, da sowohl der Übergang $a \rightarrow z$, als auch der $z \rightarrow e$ erfolgen muß. Man kann auch für die WA (oder WDA) das Produkt ansetzen:

$$\begin{aligned}\langle e | a \rangle &= \langle e | z \rangle \langle z | a \rangle, \\ w(e \leftarrow a) &= |\langle e | a \rangle|^2 = w(e \leftarrow z)w(z \leftarrow a) = |\langle e | z \rangle|^2 |\langle z | a \rangle|^2 = |\langle e | z \rangle \langle z | a \rangle|^2.\end{aligned}\tag{2.2}$$

Gibt es eine Reihe von Zwischenzuständen „ i “ ($i = 1, 2, \dots$), über die ein Anfangszustand „ a “ in einen Endzustand „ e “ übergehen kann, und kann nicht entschieden werden, über welchen Zwischenzustand „ i “ das Ereignis ablief (keine WW-Information), so gilt für die WA in Anwendung der Superposition (= „Entweder-Oder“) Gl. 1.31 und der „Sowohl-AlsAuch“-Überlegung Gl. 2.2

$$\begin{aligned}\langle e | a \rangle &= \langle e | 1 \rangle \langle 1 | a \rangle + \langle e | 2 \rangle \langle 2 | a \rangle + \dots \\ &= \sum_i \langle e | i \rangle \langle i | a \rangle.\end{aligned}\tag{2.3}$$

Diese Schreibweise ist ein gutes Beispiel dafür, daß eine geeignet gewählte symbolische Darstellung neue, suggestive Interpretationen zuläßt. Teilt man eine Bracket (eine Klammer) in ihre beiden Bestandteile, also $\langle e|a\rangle$ in $\langle e|$ und $|a\rangle$, bezeichnet $\langle e|$ als Bra, $|a\rangle$ als Ket, so läßt sich jeder Ket als Symbol für einen Anfangszustand, jeder Bra als Symbol für einen Endzustand interpretieren, und ihre Aneinanderreihung in der Reihenfolge Bra-Ket gibt eine komplexe Zahl $\langle e|a\rangle$, eine Bracket, welche die WA (oder WDA) für das Ereignis ist (dafür, daß ein Ende „e“ in einem Anfang „a“ latent als Möglichkeit enthalten ist). Es muß aber zu jedem Ket $|\varphi\rangle$ (einem Anfangszustand, spezifiziert durch „ φ “) auch einen entsprechenden Bra $\langle\varphi|$ geben (dasselbe So-Sein, spezifiziert durch „ φ “, aber nicht als Anfangszustand betrachtet, sondern als Endzustand eines Ereignisses).

$$\left. \begin{array}{l} |\varphi\rangle \\ \langle\psi| \end{array} \right\} \left. \begin{array}{l} \text{Ket, Anfangszustand,} \\ \text{Bra, Endzustand,} \end{array} \right\} \langle\psi|\varphi\rangle \quad \text{Bracket (WA, WDA),} \quad (2.4)$$

$$\langle\varphi|\varphi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle = 1.$$

Da in Gl. 2.3 der Bra $\langle e|$ und der Ket $|a\rangle$ von der Summe unabhängig sind, kann man auch schreiben

$$\langle e|a\rangle = \langle e| \left\{ \sum_i |i\rangle\langle i| \right\} |a\rangle. \quad (2.5)$$

Der Ausdruck in der geschweiften Klammer muß offenbar die Rolle eines Einheitsoperators \underline{I} spielen (wenn Gl. 2.5 richtig sein soll), der auf Kets von links operiert (und sie nicht verändert), auf Bras dagegen von rechts operiert (und sie dabei nicht ändert). Es gilt (man beachte, daß Gebilde der Form $|\varphi\rangle\langle\psi|$ keine Brackets, also keine komplexen Zahlen sind!)

$$\sum_i |i\rangle\langle i| = \underline{I}, \quad (\text{Vollständigkeitsrelation}), \quad (2.6)$$

mit

$$\underline{I}|a\rangle = |a\rangle, \quad \langle e|\underline{I} = \langle e|. \quad (2.7)$$

Die Bedeutung der Vollständigkeitsrelation wird weiter unten erläutert. Aus Gl. 2.5 folgt aber auch

$$|a\rangle = \sum_i |i\rangle\langle i|a\rangle, \quad \langle e| = \sum_j \langle e|j\rangle\langle j|, \quad (2.8)$$

und ferner — da jedem Ket „ φ “ ein mit demselben Symbol bezeichneter Bra entsprechen muß —

$$\langle a| = \sum_k \langle a|k\rangle\langle k|, \quad |e\rangle = \sum_m |m\rangle\langle m|e\rangle. \quad (2.9)$$

Gl. 2.8 und Gl. 2.9 haben eine interessante Interpretation: Jeder Ket (Anfangszustand) kann als eine lineare Superposition elementarer Kets $|i\rangle$ aufgefaßt werden, die mit komplexen Zahlen $\langle i|a\rangle$ multipliziert werden. Die Zahlen $\langle i|a\rangle$ sind die WA, mit denen der Zustand $|a\rangle$ zum Zustand $\langle i|$ führt. Somit ist jeder Zustandsket als Vektor in einem linearen Vektorraum interpretierbar, der sich in Komponenten zerlegen läßt: Diese Komponenten werden durch einen vollständigen (siehe Gl. 2.6) Satz von einander paarweise ausschließenden (das ist noch zu beweisen!) Zuständen $|i\rangle$ gebildet, die jeweils mit komplexen Zahlen zu multiplizieren sind (= Länge der Komponenten in Richtung von $|i\rangle$), welche gleich den WA sind, mit denen $|i\rangle$ in $|a\rangle$ enthalten ist. Analoge Überlegungen gelten für die Bras (Endzustände), die als Vektoren in einem linearen Bra-Raum aufgefaßt werden können. Setzt man auf der linken Seite von Gl. 2.3 den Bra $\langle e|$ und den Ket $|a\rangle$ aus Gl. 2.8 ein, so folgt wegen

$$\langle e|a\rangle = \sum_j \sum_i \langle e|j\rangle\langle j|i\rangle\langle i|a\rangle = \sum_i \langle e|i\rangle\langle i|a\rangle \quad (2.10)$$

die Orthogonalitätsrelation

$$\langle j|i\rangle = \delta_{ij}, \quad (\text{Orthogonalitätsrelation}). \quad (2.11)$$

Jeder Ket (Bra) kann nach einem vollständigen, Gl.2.6, und orthogonalen, Gl.2.11, Satz von Zuständen entwickelt werden. „Orthogonal“ bedeutet, daß die Zustände $|i\rangle$ einander paarweise ausschließen, weil die WA der Form $\langle i|j\rangle$, $i \neq j$ verschwinden (es ist unmöglich, daß ein Elektron durch Loch 1 gekommen ist, wenn es durch Loch 2 gekommen ist). Eine Frage ist noch zu klären: Besteht ein Zusammenhang zwischen der komplexen Zahl $\langle i|a\rangle$ und der komplexen Zahl $\langle a|i\rangle$? Wir verabreden folgende Kurzschrift:

$$\langle i|a\rangle = a_i. \quad (2.12)$$

Wenn $\langle i|a\rangle$ die WA ist, daß der Endzustand $\langle i|$ im Anfangszustand $|a\rangle$ enthalten ist, ist $|\langle i|a\rangle|^2$ die entsprechende Wahrscheinlichkeit. Wenn man mit den $\langle i|$ alle möglichen, einander paarweise ausschließenden Endzustände erfaßt hat, die vom Anfangszustand $|a\rangle$ erreicht werden können, dann ist trivialerweise die Wahrscheinlichkeit eins, daß *irgendeiner* der Endzustände erreicht wird: Die Summe der Einzelwahrscheinlichkeiten ist eins:

$$\sum_i |\langle i|a\rangle|^2 = \sum_i \langle i|a\rangle \langle i|a\rangle^* = 1. \quad (2.13)$$

Da aber für jeden Zustand nach Gl.2.1 $\langle \varphi|\varphi\rangle = 1$ gilt, erhält man mit $\langle a|$ aus Gl.2.9 und $|a\rangle$ aus Gl.2.8 unter Verwendung von Gl.2.11

$$\langle a|a\rangle = 1 = \sum_k \sum_i \langle a|k\rangle \langle k|i\rangle \langle i|a\rangle = \sum_i \langle a|i\rangle \langle i|a\rangle = \sum_i \langle i|a\rangle \langle a|i\rangle. \quad (2.14)$$

Vergleich von Gl.2.13 mit Gl.2.14 liefert die gesuchte Beziehung

$$\begin{aligned} \langle i|a\rangle &= a_i = \langle a|i\rangle^*, \\ \langle a|i\rangle &= a_i^* = \langle i|a\rangle^*, \end{aligned} \quad \text{allgemein:} \quad \langle \varphi|\psi\rangle = \langle \psi|\varphi\rangle^*. \quad (2.15)$$

2.1.1 Beziehungen zur Vektorrechnung und Matrizenrechnung

Es soll die Bedeutung der Beziehungen zwischen Bras und Kets noch in Analogie zur Vektorrechnung diskutiert werden (der Einfachheit halber werden hier Vektoren gewählt, die nur 2 Komponenten haben). Bei Beschränkung auf zwei Möglichkeiten lauten Gl.2.8 und Gl.2.9

$$\begin{aligned} |a\rangle &= |1\rangle a_1 + |2\rangle a_2, & \langle a| &= a_1^* \langle 1| + a_2^* \langle 2|, \\ |e\rangle &= |1\rangle e_1 + |2\rangle e_2, & \langle e| &= e_1^* \langle 1| + e_2^* \langle 2|. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Als Kurzschrift für Gl.2.16 werde vereinbart, daß man die Komponenten eines Kets in einer Spaltenmatrix, die eines Bras in einer Zeilenmatrix arrangiert. Es gilt somit die Entsprechung

$$\begin{aligned} |a\rangle &\hat{=} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}, & \langle a| &\hat{=} (a_1^* \ a_2^*), \\ |e\rangle &\hat{=} \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \end{pmatrix}, & \langle e| &\hat{=} (e_1^* \ e_2^*). \end{aligned} \quad (2.17)$$

Ferner gilt für die Basiskets und Basisbras (sie spielen die Rolle von Einheitsvektoren in Richtung der Koordinatenachsen im Ket-Raum und im Bra-Raum)

$$\begin{aligned} |1\rangle &\hat{=} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, & \langle 1| &\hat{=} (1 \ 0), \\ |2\rangle &\hat{=} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, & \langle 2| &\hat{=} (0 \ 1). \end{aligned} \quad (2.18)$$

Da

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}^\dagger = (a_1^* \ a_2^*), \quad (a_1^* \ a_2^*)^\dagger = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}, \quad (2.19)$$

läßt sich die Beziehung zwischen den Matrizen von Gl. 2.19 wegen Gl. 2.17 auf Bras und Kets übertragen: Bras und Kets sind zueinander adjungierte (hermitesch konjugierte) Gebilde:

$$\{|a\rangle\}^\dagger = \langle a|, \quad \{\langle a|\}^\dagger = |a\rangle. \quad (2.20)$$

Für Matrizenprodukte (Matrizen werden durch kalligraphische Großbuchstaben bezeichnet) gilt die Beziehung

$$(ABC \dots \mathcal{Y}\mathcal{Z})^\dagger = \mathcal{Z}^\dagger \mathcal{Y}^\dagger \dots \mathcal{C}^\dagger \mathcal{B}^\dagger \mathcal{A}^\dagger. \quad (2.21)$$

Mit Gl. 2.20 und Gl. 2.21 ist somit die Beziehung Gl. 2.15 selbstverständlich: Da $\langle \psi | \varphi \rangle$ eine komplexe Zahl ist, gilt

$$\langle \psi | \varphi \rangle^* = \langle \psi | \varphi \rangle^\dagger = (\{\langle \psi | \} \{ | \varphi \rangle \})^\dagger = \{ | \varphi \rangle \}^\dagger \{ \langle \psi | \}^\dagger = \langle \varphi | \psi \rangle, \quad (2.22)$$

oder, in Matrixschreibweise

$$\begin{aligned} \left\{ (\psi_1^* \ \psi_2^*) \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} \right\}^* &= \left\{ (\psi_1^* \ \psi_2^*) \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} \right\}^\dagger = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix}^\dagger (\psi_1^* \ \psi_2^*)^\dagger = (\varphi_1^* \ \varphi_2^*) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \\ &= \varphi_1^* \psi_1 + \varphi_2^* \psi_2. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Die Orthogonalitätsrelation Gl. 2.11 stellt sich mit Gl. 2.18 als die Orthogonalität der Einheitsvektoren in Richtung der Koordinatenachsen in einem kartesischen Koordinatensystem heraus. Die Zerlegung eines Kets (oder Bras) in Komponenten (siehe Gl. 2.8, hier im Spezialfall Gl. 2.16) lautet in Matrixschreibweise

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} a_1 + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} a_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (1 \ 0) \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} (0 \ 1) \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} a_1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \left\{ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right\} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Damit ist auch die Bedeutung der Vollständigkeitsrelation Gl. 2.6 klar:

$$\begin{aligned} \underline{I} &= |1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2|, \\ \underline{I} &\hat{=} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle\langle 1| \hat{=} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad |2\rangle\langle 2| \hat{=} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Die Gebilde $|i\rangle\langle i|$ spielen die Rolle von Projektionsoperatoren, sie ordnen einem Ket $|a\rangle$ dessen Projektion auf die $|i\rangle$ -Achse zu, nämlich

$$\{|i\rangle\langle i|\}|a\rangle = |i\rangle \langle i|a\rangle = |i\rangle a_i. \quad (2.26)$$

Ein Vektor läßt sich erst dann in Komponenten zerlegen, wenn man über einen vollständigen, orthogonalen Satz von Basisvektoren $|i\rangle$ verfügt, und somit alle Projektionsoperatoren $|i\rangle\langle i|$ auf die Basisachsen kennt. Nach Gl. 2.24 ist die Summe aller Projektoren der Einheitsoperator.

2.1.2 Zustandsraum

Die Zustände (Anfangs- und Endzustände = Kets und Bras) lassen sich als Vektoren in linearen Vektorräumen auffassen. Eine vollständige, orthogonale Basis in solchen Räumen bildet einen vollständigen Satz von Zuständen, die einander paarweise ausschließen. Die Länge der Projektion eines Zustandskets $|\varphi\rangle$ auf die Basisachse $|i\rangle$ (gegeben durch die komplexe Zahl $\langle i|\varphi\rangle = \varphi_i$) ist die Wahrscheinlichkeitsamplitude, mit der dieser Basiszustand $|i\rangle$ in dem Systemzustand $|\varphi\rangle$ vertreten ist. Damit läßt sich schon jetzt sagen, daß die Dynamik in einem Quantensystem durch eine Relativbewegung (Drehung) von Systemket $|\varphi\rangle$ und Basisachsen beschrieben sein muß, weil sich dabei die Längen der Projektionen auf die Basisachsen zeitlich ändern. Weil aber die Wahrscheinlichkeit, *irgendeinen* der möglichen Basiszustände anzutreffen, eins sein muß, hat der Systemket $|\varphi\rangle$ unveränderlich die Länge eins (siehe Gl. 2.14)

$$\langle \varphi|\varphi\rangle = \sum_i |\langle i|\varphi\rangle|^2 = \sum_i |\varphi_i|^2 = 1. \quad (2.27)$$

Eine später zu klärende Frage wird sein, wie man vollständige und orthogonale Systeme von Basiszuständen findet.

2.2 Dirac-Zustände

Ein System (z.B. ein Massenpunkt) sei in seiner Lage auf die x -Achse beschränkt, $-\infty < x < \infty$. Das System sei im Zustand $|\varphi\rangle$. Eine Position im Intervall $i\Delta x \leq x < (i+1)\Delta x$, ($i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$), werde durch den Zustand $|x_i\rangle$ bezeichnet. Diese Zustände sind vollständig und orthogonal (wenn das System im Intervall i liegt, kann es nicht im Intervall $j \neq i$ sein), es gibt abzählbar unendlich viele Zustände $|x_i\rangle$, welche eine Vollständigkeits- und eine Orthogonalitätsrelation erfüllen:

$$\sum_{i=-\infty}^{+\infty} |x_i\rangle\langle x_i| = \underline{1}, \quad \langle x_i|x_j\rangle = \delta_{ij}. \quad (2.28)$$

Jeder Systemzustand $|\varphi\rangle$ kann bezüglich dieser Basis in Komponenten entwickelt werden,

$$|\varphi\rangle = \underline{1}|\varphi\rangle = \sum_{i=-\infty}^{+\infty} |x_i\rangle\langle x_i|\varphi\rangle. \quad (2.29)$$

Die komplexen Zahlen $\langle x_i|\varphi\rangle$ sind die WA dafür, das System bei einer Ortsmessung im Intervall $i\Delta x \leq x < (i+1)\Delta x$ anzutreffen. Will man die Präzision der Lokalisierung immer größer machen, sodaß schließlich alle Punkte in $-\infty < x < \infty$ zugelassen sind, ergibt sich folgende Schwierigkeit: Die Punkte in $-\infty < x < \infty$ sind nicht-abzählbar unendlich viele. Man löst das Problem folgendermaßen (sehr vereinfacht ohne mathematische Strenge dargestellt): Man schreibt Gl. 2.29 für immer feinere Unterteilung der x -Achse in der Form

$$|\varphi\rangle = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \sum_{i=-\infty}^{+\infty} \frac{|x_i\rangle\langle x_i|}{\sqrt{\Delta x}\sqrt{\Delta x}} |\varphi\rangle \Delta x, \quad (2.30)$$

postuliert, daß ein sinnvoller Grenzwert

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{|x_i\rangle}{\sqrt{\Delta x}} = |x\rangle \quad (2.31)$$

existiert und bezeichnet den Ket $|x\rangle$ als Dirac-Ket (man beachte, daß $|x_i\rangle$ und $|x\rangle$ verschiedene Dimension haben). Es wird — leider — üblicherweise keine Schreibweise verwendet, die es erlauben würde, „normale“ Kets von Dirac-Kets zu unterscheiden. Wenn im Ket-Symbol $| \)$ ein Zeichen

steht, das in der Mathematik üblicherweise für eine kontinuierliche Variable verwendet wird, also z. B. x , dann ist der Ket $|x\rangle$ vermutlich ein Dirac-Ket. Damit erhält Gl. 2.30 die Form

$$|\varphi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle \langle x|\varphi\rangle dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle dx \langle x|\varphi\rangle. \quad (2.32)$$

Das Vorziehen der Größe dx im Integral bedeutet nicht, daß über die komplexen Zahlen $\langle x|\varphi\rangle$ nicht integriert wird: Aus dieser Form läßt sich nun sofort ablesen (durch Vergleich der beiden Seiten in Gl. 2.32), daß für Dirac-Kets eine Vollständigkeitsrelation der Form

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle dx \langle x| = \underline{I} \quad (2.33)$$

gilt. Die komplexe Zahl $\langle x|\varphi\rangle$ ist für jeden Wert von x in $-\infty < x < \infty$ definiert (also eine Funktion von x) und hat die Bedeutung einer WDA, das System bei einer Ortsmessung an der Stelle x anzutreffen. In Anlehnung an die Bezeichnung von Gl. 2.12 verwendet man die Schreibweise

$$\begin{aligned} \langle i|\varphi\rangle = \varphi_i & \quad \text{WA, } |i\rangle \text{ normaler Ket,} \\ \langle x|\varphi\rangle = \varphi(x) & \quad \text{WDA, } |x\rangle \text{ Dirac-Ket.} \end{aligned} \quad (2.34)$$

Multipliziert man Gl. 2.32 von links mit dem Dirac-Bra $\langle x' |$ und verwendet die Bezeichnungsweise von Gl. 2.34, so folgt

$$\langle x'|\varphi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x'|x\rangle \langle x|\varphi\rangle dx = \varphi(x') = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x'|x\rangle \varphi(x) dx. \quad (2.35)$$

Soll die Beziehung Gl. 2.35 richtig sein, so muß sich das System von komplexen Zahlen $\langle x'|x\rangle$ (eine Funktion von zwei Veränderlichen mit $-\infty < x < \infty$, $-\infty < x' < \infty$) so verhalten wie die Dirac-Funktion $\delta(x - x') = \delta(x' - x)$. Kombiniert man diese Erkenntnis mit Gl. 2.33, so erhält man für Dirac-Kets die Vollständigkeits- und Orthogonalitätsrelation in der Form

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle dx \langle x| = \underline{I}, \quad \langle x|x'\rangle = \delta(x - x'). \quad (2.36)$$

2.2.1 Realisierbare Zustände als Superposition von Dirac-Kets

Ein Dirac-Ket kann kein realisierbarer Systemzustand sein, da Systemzustände die „Länge“ eins haben müssen: $\langle \varphi|\varphi\rangle = 1$ bedeutet ja, daß etwas eben mit der Wahrscheinlichkeit eins so ist, wie es ist. Der Dirac-Ket $|x\rangle$ kann daher kein Systemzustand sein, der die Bedeutung hat „ich halte mich exakt an der Stelle x auf“. Diese Bedeutung hat der Zustand

$$\begin{aligned} |\text{Position } x\rangle &= \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{\Delta x}} \int_{x-\Delta x/2}^{x+\Delta x/2} |x'\rangle dx', & (\text{Ket}), \\ \langle \text{Position } x| &= \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{\Delta x}} \int_{x-\Delta x/2}^{x+\Delta x/2} dx'' \langle x''| = \{|\text{Position } x\rangle\}^\dagger, & (\text{Bra}). \end{aligned} \quad (2.37)$$

Daß dieser Zustand auf eins normiert ist, weist man mit Hilfe von Gl. 2.36 leicht nach:

$$\begin{aligned}
\langle \text{Position } x | \text{Position } x \rangle &= \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta x} \int_{x-\Delta x/2}^{x+\Delta x/2} \int_{x-\Delta x/2}^{x+\Delta x/2} \langle x'' | x' \rangle dx' dx'' \\
&= \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta x} \int_{x-\Delta x/2}^{x+\Delta x/2} dx' = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta x} \Delta x = 1.
\end{aligned} \tag{2.38}$$

2.2.2 Allgemeine Schreibweise für Basiskets

Ein vollständiger und orthogonaler Satz von Basiskets (= Koordinatenachsen im Raum der Zustände) kann sowohl normale (abzählbare) Kets als auch Dirac-Kets enthalten. Betrachtet man z. B. die Zustände $|E\rangle$ eines Wasserstoffatoms, welche die Bedeutung haben „ich habe exakt die Energie E “, dann nimmt E bestimmte diskrete (abzählbare) Werte für gebundene Zustände an ($E < 0$), aber beliebige kontinuierliche Werte $E \geq 0$ jenseits der Ionisierungsgrenze. Es ist oft nicht zweckmäßig, von vornherein auf normale Kets und Dirac-Kets zu spezialisieren. Man vereint Gl. 2.28 und Gl. 2.36 in der Schreibweise

$$\begin{aligned}
\sum_i |i\rangle \langle i| &= \underline{I}, & \langle i|j\rangle &= \delta(i,j) = \delta(j,i) \\
|\varphi\rangle &= \underline{I}|\varphi\rangle = \sum_i |i\rangle \langle i|\varphi\rangle = \sum_i |i\rangle \varphi(i), \\
\langle\psi| &= \langle\psi| \underline{I} = \sum_j \langle\psi|j\rangle \langle j| = \sum_j \psi^*(j) \langle j|, \\
\langle\psi|\varphi\rangle &= \sum_j \sum_i \psi^*(j) \langle j|i\rangle \varphi(i) = \sum_{j,i} \psi^*(j) \delta(j,i) \varphi(i) di dj \\
&= \sum_i \psi^*(i) \varphi(i) di.
\end{aligned} \tag{2.39}$$

Zur Verdeutlichung sollen die Beziehungen von Gl. 2.39 noch getrennt für den diskreten und den kontinuierlichen Fall der Variablen i angeschrieben werden:

$$\begin{aligned}
\sum_i |i\rangle \langle i| &= \underline{I} & \int |i\rangle \langle i| &= \underline{I} \\
\langle i|j\rangle &= \delta_{ij} & \langle i|j\rangle &= \delta(i-j) \\
|\varphi\rangle &= \sum_i |i\rangle \langle i|\varphi\rangle = \sum_i |i\rangle \varphi_i & |\varphi\rangle &= \int |i\rangle \langle i|\varphi\rangle = \int |i\rangle \varphi(i) \\
\langle\psi| &= \sum_j \langle\psi|j\rangle \langle j| = \sum_j \psi_j^* \langle j| & \langle\psi| &= \int \langle\psi|j\rangle \langle j| = \int \psi^*(j) \langle j|.
\end{aligned} \tag{2.40}$$

Für die Wahrscheinlichkeitsamplitude $\langle \psi | \varphi \rangle$ folgt im diskreten Fall

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \sum_j \sum_i \psi_j^* \langle j | i \rangle \varphi_i = \sum_i \psi_i^* \varphi_i = (\psi_1^* \psi_2^* \dots) \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (2.41)$$

Bras und Kets können bei der Berechnung von WA, siehe auch Gl. 2.22, Gl. 2.23, durch die Zeilen- und Spaltenmatrizen ersetzt werden, deren Elemente die WA bezüglich der im Zustandsraum gewählten Basis sind. In dem Fall, daß als Basiskets Dirac-Kets verwendet werden, erhält man für die Wahrscheinlichkeitsamplitude $\langle \psi | \varphi \rangle$

$$\begin{aligned} \langle \psi | \varphi \rangle &= \iint \psi^*(j) dj \langle j | i \rangle di \varphi(i) = \int \psi^*(i) \varphi(i) di \\ &= \left(\psi^*(i) \quad \rightarrow \quad \boxed{\text{di}} \quad \dots \right) \begin{pmatrix} \varphi(i) \\ \downarrow \\ \boxed{\text{di}} \\ \vdots \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.42)$$

Ein Integral über das Produkt einer Funktion $\psi^*(i)$ mit einer Funktion $\varphi(i)$ läßt sich somit ebenfalls als Matrizenprodukt interpretieren: Die Funktionswerte $\psi^*(i)$ werden als Zeilenmatrix mit einer Zeile und kontinuierlichem Spaltenindex i (nicht-abzählbar unendlich viele Spalten) aufgefaßt, die Funktionswerte $\varphi(i)$ als Spaltenmatrix mit einer Spalte und kontinuierlichem Zeilenindex i (nicht-abzählbar unendlich viele Zeilen). Die Funktionswerte aus einem infinitesimalen Intervall di werden multipliziert, $\psi^*(i)\varphi(i)di$ und über alle Werte von i aufsummiert.

2.3 Unitäre Basistransformationen

Im Raum der Zustände werden zwei verschiedene Basissysteme betrachtet. Der Einfachheit halber soll hier angenommen werden, daß beide Basissysteme aus einer abzählbaren Menge von Basiskets (keine Dirac-Kets) bestehen, obwohl die folgenden Überlegungen natürlich auch für den Fall zutreffen, daß eines oder beide Basissysteme von Dirac-Kets aufgespannt werden. Beide Basissysteme sind vollständig und orthogonal:

$$\begin{aligned} \sum_{\ell} |\ell\rangle \langle \ell| &= \underline{I}, & \langle \ell | m \rangle &= \delta_{\ell m}, & \text{Basis 1,} \\ \sum_{\lambda} |\lambda\rangle \langle \lambda| &= \underline{I}, & \langle \lambda | \mu \rangle &= \delta_{\lambda \mu}, & \text{Basis 2.} \end{aligned} \quad (2.43)$$

Man könnte (als Beispiel) damit folgende Vorstellung verbinden: Ein Massenpunkt sei längs der x -Achse ($-\infty < x < \infty$) verschieblich. Die Zustände $|\ell\rangle$ sollen die Bedeutung der Zustände $|x_i\rangle$ von Gl. 2.28 für $i = \ell$ besitzen ($|x_\ell\rangle$ bedeutet: Der Massenpunkt befindet sich im Intervall $\ell\Delta x \leq x < (\ell+1)\Delta x$). Die Zahl $\langle \ell | \varphi \rangle$ ist somit die WA dafür, diesen durch den Zustandsket $|\varphi\rangle$ beschriebenen Massenpunkt in einem ganz bestimmten Intervall der x -Achse anzutreffen. Man könnte sich auch dafür interessieren, welchen Impuls p_x der Massenpunkt in x -Richtung besitzt ($-\infty < p_x < \infty$). Die Zustände $|\lambda\rangle$ sollen bedeuten, daß der Impuls des Massenpunktes im Intervall $\lambda\Delta p \leq p_x < (\lambda+1)\Delta p$ liegt. Die Zahl $\langle \lambda | \varphi \rangle$ ist somit die WA dafür, diesen durch

den Zustandsket $|\varphi\rangle$ beschriebenen Massenpunkt bei einer Impulsmessung in dem korrespondierenden Intervall der Impulswerte anzutreffen. Der Zustandsket $|\varphi\rangle$ läßt sich bezüglich beider Basissysteme entwickeln.

$$\begin{aligned} |\varphi\rangle &= \underline{I}|\varphi\rangle = \sum_{\ell} |\ell\rangle \langle \ell|\varphi\rangle, & \text{Basis 1,} \\ |\varphi\rangle &= \underline{I}|\varphi\rangle = \sum_{\lambda} |\lambda\rangle \langle \lambda|\varphi\rangle, & \text{Basis 2.} \end{aligned} \quad (2.44)$$

Die Bezeichnung $\langle \ell|\varphi\rangle = \varphi_{\ell}$, $\langle \lambda|\varphi\rangle = \varphi_{\lambda}$, siehe Gl. 2.12, wäre aber nicht eindeutig, da für $\ell = 1$, $\lambda = 1$ die Zahlen φ_1 nicht ausdrücken können, ob es sich um WA für die Lokalisierung oder für die Impulsmessung handelt. Daher werden die WA durch ein sich auf das verwendete Basissystem beziehendes Superskript unterschieden:

$$\begin{aligned} \langle \ell|\varphi\rangle &= \varphi_{\ell}^{(1)}, & \text{Basis 1,} \\ \langle \lambda|\varphi\rangle &= \varphi_{\lambda}^{(2)}, & \text{Basis 2.} \end{aligned} \quad (2.45)$$

Die Transformation der WA zwischen den beiden Basissystemen erhält man, indem man die erste Beziehung in Gl. 2.44 mit dem Bra $\langle \lambda|$ von links multipliziert, die zweite Beziehung von links mit dem Bra $\langle \ell|$. Man erhält

$$\begin{aligned} \langle \lambda|\varphi\rangle &= \sum_{\ell} \langle \lambda|\ell\rangle \langle \ell|\varphi\rangle & \longrightarrow & \varphi_{\lambda}^{(2)} = \sum_{\ell} \langle \lambda|\ell\rangle \varphi_{\ell}^{(1)}, \\ \langle \ell|\varphi\rangle &= \sum_{\lambda} \langle \ell|\lambda\rangle \langle \lambda|\varphi\rangle & \longrightarrow & \varphi_{\ell}^{(1)} = \sum_{\lambda} \langle \ell|\lambda\rangle \varphi_{\lambda}^{(2)}. \end{aligned} \quad (2.46)$$

Die Transformation zwischen den WA $\varphi_{\ell}^{(1)}$, $\varphi_{\lambda}^{(2)}$ erfolgt durch ein System $\langle \lambda|\ell\rangle$ von komplexen Zahlen, die für jedes Wertepaar ℓ, λ definiert sind: Man kann diese Zahlen als Komponenten einer Transformationsmatrix \mathcal{T} auffassen (Matrixelemente der Matrix \mathcal{T} sind die Zahlen $\langle \lambda|\ell\rangle = T_{\lambda\ell}$). Mit der Bezeichnung

$$\begin{aligned} \text{Matrix } \mathcal{T} : & \quad \text{Matrixelemente} & T_{\lambda\ell} = \langle \lambda|\ell\rangle, \\ \text{Matrix } \mathcal{T}^{\dagger} : & \quad \text{Matrixelemente} & T_{\ell\lambda}^{\dagger} = T_{\lambda\ell}^* = \langle \ell|\lambda\rangle. \end{aligned} \quad (2.47)$$

lauten die Transformationsbeziehungen Gl. 2.46

$$\varphi_{\lambda}^{(2)} = \sum_{\ell} T_{\lambda\ell} \varphi_{\ell}^{(1)}, \quad \varphi_{\ell}^{(1)} = \sum_{\lambda} T_{\ell\lambda}^{\dagger} \varphi_{\lambda}^{(2)}. \quad (2.48)$$

Durch Eliminieren von $\varphi_{\lambda}^{(2)}$ oder $\varphi_{\ell}^{(1)}$ folgen die Gleichungen

$$\begin{aligned} \varphi_{\lambda}^{(2)} &= \sum_{\ell} T_{\lambda\ell} \sum_{\mu} T_{\ell\mu}^{\dagger} \varphi_{\mu}^{(2)} & \longrightarrow & \sum_{\mu} \left(\sum_{\ell} T_{\lambda\ell} T_{\ell\mu}^{\dagger} - \delta_{\lambda\mu} \right) \varphi_{\mu}^{(2)} = 0 \\ \varphi_{\ell}^{(1)} &= \sum_{\lambda} T_{\ell\lambda}^{\dagger} \sum_{m} T_{\lambda m} \varphi_m^{(1)} & \longrightarrow & \sum_{m} \left(\sum_{\lambda} T_{\ell\lambda}^{\dagger} T_{\lambda m} - \delta_{\ell m} \right) \varphi_m^{(1)} = 0. \end{aligned} \quad (2.49)$$

Daraus resultieren durch die Transformationskoeffizienten die Beziehungen (in Matrixschreibweise, \mathcal{E} ist die Einheitsmatrix)

$$\mathcal{T}\mathcal{T}^{\dagger} = \mathcal{T}^{\dagger}\mathcal{T} = \mathcal{E}. \quad (2.50)$$

Die Transformation der WA zwischen zwei Basissystemen erfolgt somit durch eine unitäre Matrix, da $\mathcal{T}^{-1} = \mathcal{T}^{\dagger}$. Die Matrix \mathcal{T} enthält die Information über die relative Lage der Basiskets in den

beiden Basissystemen (Analogie im dreidimensionalen kartesischen Raum: Die Drehmatrix, welche das eine Dreibein der Basisvektoren in das andere Dreibein überführt). Für den Fall, daß beide Basissysteme aus Dirac-Kets (ℓ, λ kontinuierliche Variable) bestehen, hat die „Transformationsmatrix“ Gl. 2.47 nicht-abzählbar unendlich viele Zeilen und Spalten; die Matrixelemente $T_{\lambda\ell}$ sind eine Funktion $T(\lambda, \ell)$ von zwei Variablen:

$$\begin{aligned} \text{Matrix } \mathcal{T} : \quad & \text{Matrixelemente} \quad T(\lambda, \ell) = \langle \lambda | \ell \rangle, \\ \text{Matrix } \mathcal{T}^\dagger : \quad & \text{Matrixelemente} \quad T^\dagger(\ell, \lambda) = T^*(\lambda, \ell) = \langle \ell | \lambda \rangle. \end{aligned} \quad (2.51)$$

Die Unitarität dieser „Matrizen“ ist sinngemäß aus Gl. 2.49 abzulesen:

$$\begin{aligned} \int T(\lambda, \ell) T^\dagger(\ell, \mu) d\ell &= \delta(\lambda - \mu) \\ \int T^\dagger(\ell, \lambda) T(\lambda, m) d\lambda &= \delta(\ell - m). \end{aligned} \quad (2.52)$$

Für die WDA gelten in diesem Fall die aus Gl. 2.48 abzulesenden Transformationsbeziehungen

$$\varphi^{(2)}(\lambda) = \int T(\lambda, \ell) \varphi^{(1)}(\ell) d\ell, \quad \varphi^{(1)}(\ell) = \int T^\dagger(\ell, \lambda) \varphi^{(2)}(\lambda) d\lambda. \quad (2.53)$$

Man beachte, daß Gl. 2.53 mit $T(\lambda, \ell) = \exp(2\pi i \lambda \ell)$ die Fouriertransformation darstellt, wobei ℓ die Bedeutung der Frequenz, λ die Bedeutung der Zeit besitzt.

2.4 Observable als Operatoren. Darstellungen

Ein linearer Operator \underline{L} verändert einen Ket $|\varphi\rangle$ im Ketraum durch eine Drehstreckung in einen Ket $|\psi\rangle$:

$$\underline{L}|\varphi\rangle = |\psi\rangle. \quad (2.54)$$

Adjungiert man Gl. 2.54 unter Beachtung der Regeln von Gl. 2.21 und Gl. 2.22, so folgt die korrespondierende Relation im Bra-Raum, die durch den adjungierten Operator L^\dagger vermittelt wird:

$$\{\underline{L}|\varphi\rangle\}^\dagger = \{|\psi\rangle\}^\dagger = \langle\varphi| \underline{L}^\dagger = \langle\psi|. \quad (2.55)$$

Allgemein operieren lineare Operatoren auf Kets von links und resultieren in einem drehgestreckten Ket, sie operieren auf Bras von rechts und resultieren in einem drehgestreckten Bra. Führt man eine Basis

$$\sum_i |i\rangle \langle i| = \underline{I}, \quad \langle i|j\rangle = \delta(i, j) \quad (2.56)$$

ein, definiert Matrixelemente der Operatoren \underline{L} , \underline{L}^\dagger bezüglich dieser Basis durch

$$\begin{aligned} \langle i|\underline{L}|j\rangle &= L_{ij} \quad (\text{diskreter Fall}), \text{ oder } = L(i, j) \quad (\text{kontinuierlicher Fall}), \\ \langle i|\underline{L}^\dagger|j\rangle &= \langle j|\underline{L}|i\rangle^* = L_{ij}^\dagger = L_{ji}^*, \end{aligned} \quad (2.57)$$

so resultiert aus der abstrakten Beziehung Gl. 2.54 für die gewählte Basis Gl. 2.56 eine Beziehung zwischen den WA (oder WDA)

$$\begin{aligned} \langle i|\underline{L}|\varphi\rangle &= \langle i|\psi\rangle = \langle i|\underline{L}\underline{I}|\varphi\rangle = \sum_j \langle i|\underline{L}|j\rangle \langle j|\varphi\rangle \\ &= \psi(i) = \sum_j L(i, j) \varphi(j) dj. \end{aligned} \quad (2.58)$$

Die Bezeichnung „linearer Operator“ stellt die Komponenten $\psi(i)$ des Kets $|\psi\rangle$ als Linearkombination der Komponenten $\varphi(j)$ des Kets $|\varphi\rangle$ dar. Definiert man einen dem abstrakten Operator \underline{L} entsprechenden Operator L_{op} , der die Eigenschaft besitzt, die Komponenten $\psi(i)$ aus den Komponenten $\varphi(i)$ zu liefern, also

$$\psi(i) = L_{\text{op}}\varphi(i), \quad (2.59)$$

so folgt durch Vergleich mit Gl. 2.58, daß dieser Operator definiert ist durch

$$L_{\text{op}}\varphi(i) = \sum_j L(i, j)\varphi(j) = \langle i|\underline{L}|\varphi\rangle. \quad (2.60)$$

Dazu ein einfaches Beispiel aus der Mathematik: Die Matrixelemente des Operators seien für eine Basis aus Dirac-Kets durch

$$L(i, j) = \frac{d}{dj}\delta(i - j) = -\frac{d}{di}\delta(i - j) \quad (2.61)$$

gegeben. Aus Gl. 2.60 folgt

$$-\int \frac{d}{di}\{\delta(i - j)\}\varphi(j)dj = -\frac{d}{di}\int \delta(i - j)\varphi(j)dj = -\frac{d}{di}\varphi(i) = L_{\text{op}}\varphi(i). \quad (2.62)$$

Kombiniert man Gl. 2.58 und Gl. 2.59 für eine Basis aus Dirac-Kets

$$\psi(x) = L_{\text{op}}\varphi(x) = \int L(x, y)\varphi(y)dy \quad (2.63)$$

so sieht man, daß eine Differentialgleichung (L_{op} , $\psi(x)$ bekannt, $\varphi(x)$ gesucht) äquivalent als Integralgleichung formuliert werden kann (Matrixelemente $L(x, y)$ bekannt, $\psi(x)$ bekannt, $\varphi(y)$ gesucht). Das äquivalente abstrakte Problem zeigt Gl. 2.54: \underline{L} , $|\psi\rangle$ sind gegeben, $|\varphi\rangle$ ist gesucht. Die Lösung ist einfach: Man nimmt den zu \underline{L} inversen Operator \underline{L}^{-1} . Die Lösung lautet

$$|\varphi\rangle = \underline{L}^{-1}|\psi\rangle. \quad (2.64)$$

Übliche lineare Differentialgleichungen, Integralgleichungen oder Integrodifferentialgleichungen bedeuten somit: Es hat jemand einen abstrakten Vektor (einen Ket) drehgestreckt und gibt die Prozedur und das Ergebnis bekannt. Gesucht ist der Ket $|\varphi\rangle$, von dem man ausgegangen ist, und dazu muß man die Drehstreckung rückgängig machen.

2.4.1 Das Eigenwertproblem hermitescher Operatoren

Ein Operator ist hermitesch (= selbstadjungiert), wenn gilt

$$\underline{L} = \underline{L}^\dagger. \quad (2.65)$$

Für seine Matrixelemente gilt somit nach Gl. 2.57

$$L_{ij} = L_{ij}^\dagger = L_{ji}^*. \quad (2.66)$$

Die Matrix eines hermiteschen Operators enthält in der Hauptdiagonale somit nur reelle Elemente. Das Eigenwertproblem

$$\underline{L}|\ell\rangle = \ell|\ell\rangle \quad (2.67)$$

fragt nach jenen Kets $|\ell\rangle$ (das sind die Eigenkets des Operator \underline{L}), welche bei Anwendung von \underline{L} sich bis auf eine multiplikative Konstante ℓ (den zum Eigenket $|\ell\rangle$ gehörenden Eigenwert ℓ) reproduzieren. Bildet man in Gl. 2.67 die Bracket mit dem Bra $\langle\ell|$, so folgt

$$\begin{aligned} \ell &= \frac{\langle\ell|\underline{L}|\ell\rangle}{\langle\ell|\ell\rangle}, \\ \ell^* &= \frac{\langle\ell|\underline{L}|\ell\rangle^*}{\langle\ell|\ell\rangle^*} = \frac{\langle\ell|\underline{L}|\ell\rangle^\dagger}{\langle\ell|\ell\rangle^\dagger} = \frac{\langle\ell|\underline{L}^\dagger|\ell\rangle}{\langle\ell|\ell\rangle} = \frac{\langle\ell|\underline{L}|\ell\rangle}{\langle\ell|\ell\rangle} = \ell. \end{aligned} \quad (2.68)$$

Die Eigenwerte selbstadjungierter Operatoren sind reell. Adjungiert man Gl. 2.67,

$$\{\underline{L}|\ell\rangle\}^\dagger = \langle\ell|\underline{L}^\dagger = \langle\ell|\underline{L} = \{\ell|\ell\rangle\}^\dagger = \ell^* \langle\ell| = \ell \langle\ell|, \quad (2.69)$$

so stellt sich heraus, daß der Operator \underline{L} Eigenbras $\langle\ell|$ besitzt, die den Eigenkets $|\ell\rangle$ entsprechen und zu denselben Eigenwerten gehören. Für unitäre Basistransformationen im Ket-Raum mit dem Transformationsoperator \underline{T}

$$\underline{T}\underline{T}^\dagger = \underline{T}^\dagger\underline{T} = \underline{I} \quad (2.70)$$

folgt aus der Eigenwertgleichung

$$\begin{aligned} \underline{L}\underline{I}|\ell\rangle &= \underline{L}\underline{T}^\dagger\underline{T}|\ell\rangle = \ell|\ell\rangle, \\ \{\underline{T}\underline{L}\underline{T}^\dagger\}\{\underline{T}|\ell\rangle\} &= \ell\{\underline{T}|\ell\rangle\}. \end{aligned} \quad (2.71)$$

Aus Gl. 2.71 liest man ab, daß die auf die neue Basis transformierten Eigenkets, das sind die Kets $\underline{T}|\ell\rangle$, Eigenkets des transformierten Operators

$$\underline{L}' = \underline{T}\underline{L}\underline{T}^\dagger \quad (2.72)$$

sind, und daß die Eigenwerte unverändert bleiben (die reellen Eigenwerte hermitescher Operatoren sind invariant gegen Basistransformationen). Schreibt man die Eigenwertgleichung Gl. 2.67 für zwei verschiedene Eigenwerte an,

$$\begin{aligned} \underline{L}|\ell'\rangle &= \ell'|\ell'\rangle, \\ \underline{L}|\ell''\rangle &= \ell''|\ell''\rangle, \end{aligned} \quad (2.73)$$

bildet die Brackets mit den Eigenbras $\langle\ell''|$, $\langle\ell'|$ und adjungiert eine der beiden Gleichungen unter Berücksichtigung der Hermitezität des Operators und des Umstands, daß die Eigenwerte reell sind

$$\begin{aligned} \langle\ell''|\underline{L}|\ell'\rangle &= \ell' \langle\ell''|\ell'\rangle, \\ \langle\ell'|\underline{L}|\ell''\rangle &= \ell'' \langle\ell'|\ell''\rangle \longrightarrow \langle\ell''|\underline{L}|\ell'\rangle = \ell'' \langle\ell''|\ell'\rangle, \end{aligned} \quad (2.74)$$

so folgt daraus die Beziehung

$$(\ell' - \ell'') \langle\ell''|\ell'\rangle = 0. \quad (2.75)$$

Die zu verschiedenen Eigenwerten gehörenden Eigenkets sind orthogonal (die WA oder WDA $\langle\ell'|\ell''\rangle$ ist null, die beiden Zustände schließen einander aus). Hat man das Eigenwertproblem eines hermiteschen Operators gelöst und alle orthogonalen Eigenzustände gefunden, können diese als Basiskets im Ket-Raum (oder Bra-Raum) dienen, da sie ein vollständiges und orthogonales System bilden.

$$\begin{aligned} \underline{L}|\ell\rangle &= \ell|\ell\rangle, \\ \sum_{\ell} |\ell\rangle d\ell \langle\ell| &= \underline{I}, \quad \langle\ell'|\ell''\rangle = \delta(\ell', \ell''). \end{aligned} \quad (2.76)$$

Man nennt die Basiskets, welche durch Lösung des Eigenwertproblems des Operators \underline{L} gefunden wurden, die L -Darstellung. Mit jedem hermiteschen Operator läßt sich somit eine Darstellung gewinnen, und diese Darstellungen müssen durch unitäre Transformationen ineinander überführbar sein. Mit Hilfe von Gl. 2.76 ergibt sich, daß die Matrixelemente eines hermiteschen Operators bezüglich der durch ihn begründeten Darstellung die einer Diagonalmatrix sind, wobei die Elemente in der Hauptdiagonale gerade die Eigenwerte des Operators darstellen:

$$L_{\ell'\ell''} = \langle\ell'|\underline{L}|\ell''\rangle = \ell'' \langle\ell'|\ell''\rangle = \ell'' \delta(\ell', \ell'') = \ell' \delta(\ell', \ell''). \quad (2.77)$$

Die abstrakte Eigenwertgleichung Gl. 2.67 kann für eine Basis von Dirac-Kets unter Verwendung von Gl. 2.58–Gl. 2.60 in die aus der Mathematik bekannte Differentialgleichung (oder Integralgleichung) für Eigenfunktionen umgewandelt werden. Die Eigenfunktion $\ell(x) = \langle x | \ell \rangle$ ist die WDA dafür, bei einem System im Zustand $|\ell\rangle$ die Eigenschaft x zu messen:

$$\begin{aligned} \underline{L}|\ell\rangle &= \ell|\ell\rangle \\ \langle x|\underline{L}|\ell\rangle &= \ell\langle x|\ell\rangle = L_{\text{op}}\ell(x) = \int L(x, x')\ell(x')dx' = \ell\ell(x). \end{aligned} \quad (2.78)$$

2.4.2 Observable

Observable werden in der Quantentheorie durch hermitesche Operatoren repräsentiert. Für jede klassische Größe L wird ein hermitescher Operator $\underline{L} = \underline{L}^\dagger$ definiert, dessen reelle Eigenwerte die Gesamtheit der möglichen Meßwerte dieser Größe darstellen (das Meßwertspektrum). Die Eigenwerte können diskrete und/oder kontinuierliche Werte annehmen. Die Eigenwerte lassen sich durch Diagonalisieren der Matrix des Operators finden, siehe Gl. 2.77. Sie sind unabhängig davon, welche Darstellung (welches Basissystem) zur Beschreibung des Systems gewählt wurde, weil sie invariant gegen unitäre Basistransformationen sind. Jeder Systemzustand $|\varphi\rangle$ kann nach einer beliebigen Darstellung Gl. 2.76 entwickelt werden,

$$|\varphi\rangle = \underline{I}|\varphi\rangle = \int_{\ell} |\ell\rangle d\ell \langle \ell | \varphi \rangle = \int_{\ell} |\ell\rangle d\ell \varphi(\ell). \quad (2.79)$$

$\varphi(\ell)$ ist die WA (oder WDA) dafür, bei einer Messung der physikalischen Größe L (repräsentiert durch den Operator $\underline{L} = \underline{L}^\dagger$) an einem System im Zustand $|\varphi\rangle$ den Meßwert ℓ zu erhalten. Aus der Eigenwertgleichung Gl. 2.67 folgt ferner, daß für Operatorfunktionen $f(\underline{L})$, die in eine Potenzreihe nach (positiven und negativen ganzzahligen) Potenzen von \underline{L} entwickelt werden können, die Beziehung gilt (für beliebige Operatoren gilt $\underline{L}^0 = \underline{I}$)

$$f(\underline{L})|\ell\rangle = f(\ell)|\ell\rangle. \quad (2.80)$$

Für Operatorfunktionen $f(\underline{L})$ gilt in ihrer eigenen Darstellung (der L -Darstellung) die sogenannte Spektraldarstellung. Man gewinnt sie unter Beachtung von Gl. 2.76 aus Gl. 2.80

$$\begin{aligned} f(\underline{L}) &= \underline{I}f(\underline{L})\underline{I} = \int_{\ell} \int_{\ell'} |\ell\rangle d\ell \langle \ell | f(\underline{L}) | \ell' \rangle d\ell' \langle \ell' | \\ &= \int_{\ell} \int_{\ell'} |\ell\rangle d\ell f(\ell') \langle \ell | \ell' \rangle d\ell' \langle \ell' | \\ &= \int_{\ell} \int_{\ell'} |\ell\rangle d\ell f(\ell') \delta(\ell, \ell') d\ell' \langle \ell' | \\ &= \int_{\ell} |\ell\rangle f(\ell) d\ell \langle \ell |. \end{aligned} \quad (2.81)$$

Anmerkung: Daraus folgt sofort, daß für einen Operator, der einen Eigenwert $\ell = 0$ besitzt, kein inverser Operator existiert ($f(\underline{L}) = \underline{L}^{-1}$, $f(\ell) = \ell^{-1} = 1/\ell \rightarrow 1/0!$). Ein Eigenwert $\ell = 0$ bedeutet nach Gl. 2.76, daß der Operator den entsprechenden Eigenket $|\ell\rangle$ zum Null-Ket macht, also auf eine zu diesem Ket orthogonale Ebene (Hyperebene) projiziert. Wenn man das Ergebnis einer Projektion und die Projektionsrichtung kennt, kann aber keine eindeutige Umkehrung gefunden werden, weil die Komponente des ursprünglichen Vektors in Projektionsrichtung nicht rekonstruierbar ist.

2.5 Wahrscheinlichkeiten und Erwartungswerte

Die physikalische Bedeutung der Eigenwerte von Observablen (hermiteschen Operatoren) wurde in Abschn. 2.4 erläutert. Die Bedeutung der zugehörigen Eigenkets wird anhand der Bedeutung

für Prognosen über den Ausgang einer Messung klar. Die Wahrscheinlichkeit (oder Wahrscheinlichkeitsdichte), für ein im Zustand $|\varphi\rangle$ befindliches System bei einer Messung der Observablen \underline{L} den Meßwert ℓ zu erhalten, ist wegen Gl. 2.79

$$w(\ell) = |\langle \ell | \varphi \rangle|^2. \quad (2.82)$$

Im Fall eines diskreten Spektrums sind die Eigenkets nach Gl. 2.76 auf die Länge eins normierbar, sie sind infolgedessen mögliche Systemzustände. Ist das System im Zustand $|\varphi\rangle = |\ell'\rangle$, so resultiert für $w(\ell)$

$$|\varphi\rangle = |\ell'\rangle \longrightarrow w(\ell) = \delta_{\ell\ell'} = \begin{cases} 1, & \text{falls } \ell = \ell', \\ 0, & \text{falls } \ell \neq \ell'. \end{cases} \quad (2.83)$$

Befindet sich ein System in einem Eigenzustand einer Observablen \underline{L} so läßt sich für eine Messung der Observablen \underline{L} prognostizieren, daß man mit Sicherheit den entsprechenden Eigenwert ℓ erhalten wird. Hat man andererseits bei einer Messung am System im Zustand $|\varphi\rangle \neq |\ell\rangle$ das Meßergebnis ℓ erhalten, so muß sich bei einer Kontrollmessung im Abstand $\Delta t \rightarrow 0$, siehe Abschn. 1.4, mit absoluter Sicherheit derselbe Meßwert ℓ ergeben. Als Folge der Messung mit dem Ergebnis ℓ hat sich der Systemzustand von $|\varphi\rangle$ auf den Zustand $|\ell\rangle$ geändert (das System wurde mit der Eigenschaft ℓ „präpariert“). Im Fall eines kontinuierlichen Spektrums sind die Eigenkets Dirac-Kets, also keine realisierbaren Systemzustände. Realisierbare Zustände haben die Form von Gl. 2.37. Dafür lautet die Prognose (eine Wahrscheinlichkeitsdichte)

$$|\varphi\rangle = \frac{1}{\sqrt{\Delta\ell}} \int_{\ell' - \Delta\ell/2}^{\ell' + \Delta\ell/2} |\ell''\rangle d\ell'' \longrightarrow w(\ell) = \begin{cases} 1/\Delta\ell & \text{für } \ell' - \Delta\ell/2 < \ell < \ell' + \Delta\ell/2, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (2.84)$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte hat für $\Delta\ell \rightarrow 0$ den Charakter einer Diracfunktion $\delta(\ell - \ell')$. Ist ℓ eine Zufallsgröße, $f(\ell)$ eine Funktion dieser Zufallsgröße und $w(\ell)$ die W (oder WD) für das Auftreten von ℓ , so ist der Erwartungswert dieser Funktion durch

$$\overline{f(\ell)} = \int_{\ell} f(\ell) w(\ell) d\ell \quad (2.85)$$

definiert. Der klassischen Funktion $f(\ell)$ entspricht in der Quantentheorie die entsprechende Operatorenfunktion $f(\underline{L})$, für $w(\ell)$ ist aus Gl. 2.82 einzusetzen. Befindet sich ein System im Zustand $|\varphi\rangle$, so erhält man einen Meßwert ℓ der Observablen \underline{L} mit der Wahrscheinlichkeit $w(\ell)$. Bei sehr vielen Messungen von \underline{L} , die an Systemen im Zustand $|\varphi\rangle$ durchgeführt werden, erhält man für die Funktion $f(\underline{L})$ nach Gl. 2.85, Gl. 2.82 den Erwartungswert (er wird durch die in spitze Klammern gesetzte Operatorenfunktion bezeichnet)

$$\begin{aligned} \langle f(\underline{L}) \rangle &= \int_{\ell} f(\ell) |\langle \ell | \varphi \rangle|^2 d\ell = \int_{\ell} f(\ell) \langle \ell | \varphi \rangle \langle \varphi | \ell \rangle d\ell \\ &= \langle \varphi | \left\{ \int_{\ell} |\ell\rangle f(\ell) d\ell \langle \ell| \right\} | \varphi \rangle = \langle \varphi | f(\underline{L}) | \varphi \rangle. \end{aligned} \quad (2.86)$$

Die letzte Form folgt mit der Spektraldarstellung Gl. 2.81 der Operatorfunktion $f(\underline{L})$. Da $\underline{L} = \underline{L}^\dagger$, $\{f(\underline{L})\}^\dagger = f(\underline{L})$ (nur reelle Funktionen $f(\ell)$ sind hier zugelassen) ist der Erwartungswert $\langle f(\underline{L}) \rangle$ eine reelle Größe.

2.6 Verträgliche Messungen. Kommutierende Observable

Es gebe zwei voneinander entkoppelte Welten. In ihnen existierende Gebilde werden durch den Index $i = 1, 2$ unterschieden. In jeder Welt existieren Operatoren, Zustände, Eigenwertprobleme

und Darstellungen, welche eine Basis für die Zustände bilden, also Beziehungen der Art

$$\begin{aligned} \underline{L}_i |l_i\rangle &= l_i |l_i\rangle \quad \longrightarrow \quad \int_{\ell_i} |l_i\rangle d\ell_i \langle l_i| = \underline{I}_i, & \langle \ell'_i | \ell''_i \rangle &= \delta(\ell'_i, \ell''_i) \\ \underline{L}_i |\varphi_i\rangle &= |\psi_i\rangle, & i &= 1, 2. \end{aligned} \quad (2.87)$$

Aus Ökonomiegründen entschließt sich ein Beobachter, eine Schreibweise einzuführen, welche die Vorgänge in beiden Welten erfaßt (das kann kein realer Beobachter sein, denn über ihn bestünde zweifellos eine Verkopplung der beiden Welten). Er definiert Kets und Bras $|\varphi_1, \varphi_2\rangle, \langle \varphi_1, \varphi_2|$, in denen die Kets (Bras) von Welt 1 jeweils an erster Stelle, die von Welt 2 jeweils an zweiter Stelle genannt werden. Damit läßt sich eine WA definieren, daß sowohl in Welt 1 $|\varphi_1\rangle$ in $\langle \psi_1|$ übergeht, als auch in Welt 2 der Endzustand $\langle \psi_2|$ im Anfangszustand $|\varphi_2\rangle$ enthalten ist:

$$\langle \psi_1, \psi_2 | \varphi_1, \varphi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \varphi_1 \rangle \langle \psi_2 | \varphi_2 \rangle. \quad (2.88)$$

Jeder Operator aus Welt 1 ist mit jedem Operator aus Welt 2 vertauschbar: Da die Operatoren jeweils nur auf die Zustände operieren, die in ihrer Welt liegen, gilt nämlich mit Gl. 2.87

$$\begin{aligned} \underline{L}_1 |\varphi_1, \varphi_2\rangle &= |\psi_1, \varphi_2\rangle \quad \longrightarrow \quad \underline{L}_2 \underline{L}_1 |\varphi_1, \varphi_2\rangle = \underline{L}_2 |\psi_1, \varphi_2\rangle = |\psi_1, \psi_2\rangle, \\ \underline{L}_2 |\varphi_1, \varphi_2\rangle &= |\varphi_1, \psi_2\rangle \quad \longrightarrow \quad \underline{L}_1 \underline{L}_2 |\varphi_1, \varphi_2\rangle = \underline{L}_1 |\varphi_1, \psi_2\rangle = |\psi_1, \psi_2\rangle, \\ &\text{d. h. } (\underline{L}_1 \underline{L}_2 - \underline{L}_2 \underline{L}_1) |\varphi_1, \varphi_2\rangle = 0. \end{aligned} \quad (2.89)$$

Das gilt für beliebige Kets $|\varphi_1, \varphi_2\rangle$ und somit verschwindet der Operator

$$[\underline{L}_1, \underline{L}_2] = \underline{L}_1 \underline{L}_2 - \underline{L}_2 \underline{L}_1 = 0. \quad (2.90)$$

Die eckige Klammer bezeichnet den sogenannten Kommutator zweier Operatoren. Operatoren aus Welt 1 sind mit solchen aus Welt 2 vertauschbar. Wenn zwei Operatoren kommutieren (vertauschbar sind), dann haben sie auch simultane Eigenzustände (d. h. es gibt Zustände, die sowohl Eigenzustände des einen als auch des anderen Operators sind). Für die als $|\ell_1, \ell_2\rangle$ bezeichneten Zustände gilt

$$\begin{aligned} \underline{L}_1 |\ell_1, \ell_2\rangle &= \ell_1 |\ell_1, \ell_2\rangle, \\ \underline{L}_2 |\ell_1, \ell_2\rangle &= \ell_2 |\ell_1, \ell_2\rangle, \\ (\underline{L}_1 \underline{L}_2 - \underline{L}_2 \underline{L}_1) |\ell_1, \ell_2\rangle &= (\ell_1 \ell_2 - \ell_2 \ell_1) |\ell_1, \ell_2\rangle = 0. \end{aligned} \quad (2.91)$$

Aus den simultanen Eigenkets kann eine Basis für beide Welten gebildet werden

$$\int_{\ell_1} \int_{\ell_2} |\ell_1, \ell_2\rangle d\ell_1 d\ell_2 \langle \ell_1, \ell_2| = \underline{I}, \quad \langle \ell'_1, \ell'_2 | \ell''_1, \ell''_2 \rangle = \delta(\ell'_1, \ell''_1) \delta(\ell'_2, \ell''_2), \quad (2.92)$$

bezüglich derer beliebige Kets (welche Anteile in beiden Welten besitzen) sich entwickeln lassen:

$$|\varphi\rangle = \underline{I} |\varphi\rangle = \int_{\ell_1, \ell_2} |\ell_1, \ell_2\rangle d\ell_1 d\ell_2 \langle \ell_1, \ell_2 | \varphi \rangle = \int_{\ell_1, \ell_2} |\ell_1, \ell_2\rangle d\ell_1 d\ell_2 \varphi(\ell_1, \ell_2). \quad (2.93)$$

$\varphi(\ell_1, \ell_2)$ ist die WA (oder WDA), bei einem System im Zustand $|\varphi\rangle$ bei Messung von \underline{L}_1 den Meßwert ℓ_1 , bei Messung von \underline{L}_2 den Meßwert ℓ_2 zu erhalten. Somit ist die Wahrscheinlichkeit (oder Wahrscheinlichkeitsdichte) dafür

$$w(\ell_1, \ell_2) = |\langle \ell_1, \ell_2 | \varphi \rangle|^2.$$

Für ein diskretes Spektrum sind die Kets $|\ell'_1, \ell'_2\rangle$ mögliche Zustände $|\varphi\rangle$. Für sie resultiert

$$w(\ell_1, \ell_2) = \begin{cases} 1, & \text{falls } \ell_1 = \ell'_1, \ell_2 = \ell'_2, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (2.94)$$

Befindet sich ein System in einem simultanen Eigenzustand der Observablen $\underline{L}_1, \underline{L}_2, |\varphi\rangle = |\ell_1, \ell_2\rangle$, so erhält man mit Gewißheit bei einer Messung von $\underline{L}_1, \underline{L}_2$ (egal, in welcher Reihenfolge) das Meßwertpaar ℓ_1, ℓ_2 . Hat man andererseits bei einem System im Zustand $|\varphi\rangle$ die Observable \underline{L}_1 mit dem Ergebnis ℓ_1 gemessen, und erhält man bei einer im Abstand $\Delta t \rightarrow 0$ durchgeführten Messung von \underline{L}_2 das Ergebnis ℓ_2 (die Reihenfolge könnte auch vertauscht werden), so befindet sich das System nach der zweiten Messung im Zustand $|\ell_1, \ell_2\rangle$. Kontrollmessungen im Abstand $\Delta t \rightarrow 0$ liefern sicher die Meßwerte ℓ_1, ℓ_2 . Sind zwei Observable verträglich meßbar (siehe auch Abschn. 1.4), so werden sie in der Quantentheorie durch zwei hermitesche, kommutierende Operatoren dargestellt (sie haben simultane Eigenzustände zu reellen Eigenwerten).

2.6.1 Vollständiger Satz kommutierender Observabler

Jeder Operator \underline{L} kommutiert trivialerweise mit Funktionen $f(\underline{L})$ (wie besprochen, sind nur solche Funktionen zugelassen, die nach positiven und negativen ganzzahligen Potenzen inklusive der Potenz Null von \underline{L} entwickelt werden können). Sucht man für ein System alle Observablen, die paarweise verträglich meßbar sind (damit sind auch alle verträglich meßbar) und repräsentiert sie durch paarweise nichttriviale kommutierende, hermitesche Operatoren, so können die simultanen Eigenkets dieses sogenannten vollständigen Satzes kommutierender Observabler als Basiskets für eine Beschreibung der Systemzustände dienen. Die Erweiterung von Gl. 2.91–Gl. 2.94 auf diesen Fall ist offenkundig (daher werden die Beziehungen nicht mehr angeschrieben). Bildet ein *einzig*er Operator einen vollständigen Satz kommutierender Observabler, dann spricht man von einer maximalen Observablen, da durch eine einzige Messung der Systemzustand festliegt. In allen anderen Fällen spricht man von entarteten Eigenwerten. Bilden die beiden Operatoren $\underline{L}_1, \underline{L}_2$ einen vollständigen Satz kommutierender Observabler, und hat \underline{L}_1 eine Anzahl n_1 von Eigenwerten ℓ_1 , \underline{L}_2 eine Anzahl n_2 von Eigenwerten ℓ_2 , so liegt durch eine Messung von \underline{L}_1 mit dem Ergebnis ℓ_1 der Zustand noch nicht fest, da jeder der Zustände $|\ell_1, \ell_2\rangle$ (n_2 mögliche Werte für ℓ_2) noch in Frage kommt: Man sagt, die Eigenwerte ℓ_1 sind n_2 -fach entartet. Die Eigenwertspektren der Operatoren des vollständigen Satzes kommutierender Observabler werden durch die nichtverschwindenden Kommutatoren mit den restlichen Observablen des Systems festgelegt (siehe später Abschn. 3.2). Bei der Quantisierung klassischer Systeme kann es sein, daß nicht alle für die Quantentheorie erforderlichen Observablen erfaßt werden: Es gibt inhärent quantenmechanische Observable (z. B. den Elektronenspin), die in klassischen Experimenten nicht zu beobachtbaren Effekten führen. Für die „richtige“ Einführung solcher zusätzlicher Observabler, die zur zutreffenden Beschreibung von Quantenphänomenen geeignet sind, gibt es in der Regel Nobelpreise.

2.6.2 L_{op} für zwei oder mehr kommutierende Observable

Der in Anwendung auf WA (oder WDA) in Gl. 2.59 definierte Operator L_{op} muß auf den Fall mehrerer kommutierender Observabler erweitert werden. Als Beispiel wird angenommen, daß die Observablen $\underline{L}_1, \underline{L}_2$ einen vollständigen Satz kommutierender Observabler bilden. Der allgemeinste Operator \underline{L} kann sicher nicht in der Form des Produktes $f(1)g(2)$ geschrieben werden, wobei im Argument von f nur Operatoren aus Welt 1, im Argument von g nur Operatoren aus Welt 2 vorkommen. Dazu ein Beispiel

$$\underline{L} = \underline{L}_1 \underline{L}_2 + \underline{M}_1 \underline{M}_2 + \dots \neq f(1)g(2) = g(2)f(1). \quad (2.95)$$

Daher muß die Definition von Matrixelementen eines Operators \underline{L} bezüglich der Basis von Gl. 2.92 vorgenommen werden:

$$L(\ell'_1, \ell'_2; \ell''_1, \ell''_2) = \langle \ell'_1, \ell'_2 | \underline{L} | \ell''_1, \ell''_2 \rangle. \quad (2.96)$$

Für den Spezialfall $\underline{L} = \underline{M}_1 \underline{M}_2$ läßt sich Gl. 2.96 mit den Rechenregeln von Gl. 2.88 und Gl. 2.89 auf die früher in Gl. 2.57 definierten Matrixelemente zurückführen. Mit

$$\left. \begin{aligned} \underline{M}_1 | \ell''_1, \ell''_2 \rangle &= | \varphi_1, \ell''_2 \rangle, \\ \underline{M}_2 | \ell''_1, \ell''_2 \rangle &= | \ell''_1, \varphi_2 \rangle, \end{aligned} \right\} \underline{M}_1 \underline{M}_2 | \ell''_1, \ell''_2 \rangle = | \varphi_1, \varphi_2 \rangle \quad (2.97)$$

folgt

$$\begin{aligned}
L(\ell'_1, \ell'_2; \ell''_1, \ell''_2) &= \langle \ell'_1, \ell'_2 | \underline{M}_1 \underline{M}_2 | \ell''_1, \ell''_2 \rangle = \langle \ell'_1, \ell'_2 | \varphi_1, \varphi_2 \rangle = \langle \ell'_1 | \varphi_1 \rangle \langle \ell'_2 | \varphi_2 \rangle \\
&= \langle \ell'_1 | \underline{M}_1 | \ell''_1 \rangle \langle \ell'_2 | \underline{M}_2 | \ell''_2 \rangle \\
&= M_1(\ell'_1, \ell''_1) M_2(\ell'_2, \ell''_2).
\end{aligned} \tag{2.98}$$

Damit lassen sich die Beziehungen Gl. 2.58–Gl. 2.60 erweitern:

$$\begin{aligned}
\underline{L} | \varphi \rangle &= | \psi \rangle, \\
\langle \ell_1, \ell_2 | \underline{L} | \varphi \rangle &= \langle \ell_1, \ell_2 | \psi \rangle = \langle \ell_1, \ell_2 | \underline{L} \underline{I} | \varphi \rangle = \iint_{\ell'_1, \ell'_2} \langle \ell_1, \ell_2 | \underline{L} | \ell'_1, \ell'_2 \rangle d\ell'_1 d\ell'_2 \langle \ell'_1, \ell'_2 | \varphi \rangle \\
&= \psi(\ell_1, \ell_2) = \iint_{\ell'_1, \ell'_2} L(\ell_1, \ell_2; \ell'_1, \ell'_2) \varphi(\ell'_1, \ell'_2) d\ell'_1 d\ell'_2, \\
\psi(\ell_1, \ell_2) &= L_{\text{op}} \varphi(\ell_1, \ell_2), \\
L_{\text{op}} \varphi(\ell_1, \ell_2) &= \iint_{\ell'_1, \ell'_2} L(\ell_1, \ell_2; \ell'_1, \ell'_2) \varphi(\ell'_1, \ell'_2) d\ell'_1 d\ell'_2 = \langle \ell_1, \ell_2 | \underline{L} | \varphi \rangle.
\end{aligned} \tag{2.99}$$

Für den Fall von Dirac-Kets $|\ell_1, \ell_2\rangle$ kann man, wie früher in Gl. 2.63, die abstrakte Drehstreckung $\underline{L}|\varphi\rangle = |\psi\rangle$ als partielle Differentialgleichung oder als Integralgleichung schreiben:

$$\psi(x, y) = L_{\text{op}} \varphi(x, y) = \iint L(x, y; x', y') \varphi(x', y') dx' dy'. \tag{2.100}$$

2.7 Nichtverträgliche Messungen. Kommutatoren

Aufgrund der Diskussion in Abschn. 2.6 ist klar, daß für nichtverträglich meßbare Observable (siehe Abschn. 1.4) gefordert werden muß, daß sie keine simultanen Eigenzustände besitzen. Eine notwendige und hinreichende Bedingung ist, daß der Kommutator nicht verschwindet:

$$[\underline{L}, \underline{M}] = \underline{L} \underline{M} - \underline{M} \underline{L} = j\underline{C}. \tag{2.101}$$

Wenn \underline{L} , \underline{M} hermitesch sind, ist auch \underline{C} hermitesch. Definiert man (der Erwartungswert von Funktionen von Observablen für einen Systemzustand $|\varphi\rangle$ wurde in Gl. 2.86 definiert)

$$(\Delta L)^2 = \langle \underline{L}^2 \rangle - \langle \underline{L} \rangle^2, \quad (\Delta M)^2 = \langle \underline{M}^2 \rangle - \langle \underline{M} \rangle^2, \tag{2.102}$$

so gilt eine Unschärferelation für Messungen zu gleichen Zeiten, siehe Abschn. 1.3, welche die Form

$$\Delta L \cdot \Delta M \geq \frac{1}{2} |\langle \underline{C} \rangle| \tag{2.103}$$

besitzt. Die Ableitung ist in Abschn. A.1 angegeben. Eine klassische Observable L , welche das Produkt zweier klassischer Observabler A , B ist, also $L = AB$, kann in der Quantentheorie nicht durch den Operator $\underline{L} = \underline{A} \underline{B}$ ersetzt werden: Sind nämlich $\underline{A} = \underline{A}^\dagger$, $\underline{B} = \underline{B}^\dagger$ hermitesche Operatoren, so ist $\underline{L} = \underline{A} \underline{B}$ nicht hermitesch, falls $[\underline{A}, \underline{B}] \neq 0$ gilt. In diesem Fall definiert man in der Quantentheorie einen symmetrisierten Operator

$$\underline{L} = \frac{1}{2} (\underline{A} \underline{B} + \underline{B} \underline{A}) = \frac{1}{2} [\underline{A}, \underline{B}]_+, \tag{2.104}$$

für den $\underline{L} = \underline{L}^\dagger$ gilt. Der Ausdruck $[\underline{A}, \underline{B}]_+$ wird als Antikommutator bezeichnet.

2.8 Operatorfunktionen. Projektoren. Spur des Operators

In diesem Abschnitt werden einige Sätze über Operatoren aufgeführt, die zu einer kompakteren Schreibweise von Beziehungen in der Quantentheorie führen.

2.8.1 Projektionsoperatoren

Ein Operator \underline{P} , der einen Ket $|\varphi\rangle$ des Ket-Raums in einen niedrigerdimensionalen Teilraum projiziert (Ergebnisket: $|\psi\rangle$), wird als Projektionsoperator (oder Projektor) bezeichnet. Da eine nochmalige (oder mehrmalige) Anwendung von \underline{P} den Ergebnis-Ket $|\psi\rangle$ nicht mehr verändert, ist jede positive Potenz von \underline{P} gleich dem Operator \underline{P} (er wird deshalb auch als idempotent bezeichnet). Speziell gilt

$$\underline{P} = \underline{P}^2 \longrightarrow \underline{P}(\underline{P} - \underline{I}) = 0. \quad (2.105)$$

In Anwendung von Gl. 2.80 läßt sich zeigen: Erfüllt ein Operator eine algebraische Gleichung, so erfüllen seine Eigenwerte dieselbe algebraische Gleichung. Die Eigenwerte von \underline{P} lauten daher

$$p(p - 1) = 0 \longrightarrow p_1 = 1, \quad p_2 = 0. \quad (2.106)$$

Zum Eigenwert $p_1 = 1$ gehören alle Kets, die bereits zur Gänze im Unterraum liegen (sie werden bei der Projektion nicht geändert), zum Eigenwert $p_2 = 0$ gehören alle Kets, die auf den Unterraum orthogonal stehen (sie werden bei der Projektion in den Nullket verwandelt). Bilden beispielsweise die Operatoren \underline{L} , \underline{M} einen vollständigen Satz kommutierender Observabler mit n_ℓ verschiedenen Eigenwerten ℓ , n_m verschiedenen Eigenwerten m , so wird die Basis durch die Kets $|\ell, m\rangle$ gebildet: Der Ket-Raum ist von der Dimension $n_\ell n_m$. Wird nun \underline{L} mit dem Ergebnis ℓ' gemessen, so kann der Zustandsket nur mehr im n_m -dimensionalen Unterraum liegen, der von den Kets $|\ell', m\rangle$ aufgespannt wird. Diese Projektion wird durch den Projektor auf den Eigenraum des Eigenwertes ℓ' vermittelt. Für diskrete Spektren:

$$\underline{P}_{\text{ER}(\ell')} = \sum_m |\ell', m\rangle \langle \ell', m|. \quad (2.107)$$

Die Verallgemeinerung auf den Fall, daß der vollständige Satz kommutierender Observabler aus mehr als zwei Operatoren besteht, ist offenkundig.

2.8.2 Operatorfunktionen

Als Operatorfunktionen sind solche zugelassen, welche in eine Potenzreihe entwickelt werden können. Für sie gilt die Spektraldarstellung Gl. 2.81, die mit den Projektoren auf einen Eigenket

$$\underline{P}_{|\ell\rangle} = |\ell\rangle \langle \ell| \quad (2.108)$$

in der Form

$$f(\underline{L}) = \int \underline{P}_{|\ell\rangle} f(\ell) d\ell \quad (2.109)$$

geschrieben werden kann. Für $f(\underline{L}) = \underline{I}$ folgt daraus die Vollständigkeitsrelation. Ist $f(\ell)$ keine Funktion, die in eine Potenzreihe entwickelbar ist (eine symbolische Funktion $s(\ell)$, z. B. $\delta(\ell)$, $\text{sgn}(\ell)$, $H(\ell)$ etc), so kann man wegen Gl. 2.109 verabreden, einen Ausdruck der Form

$$\int \underline{P}_{|\ell\rangle} s(\ell) d\ell = (\text{Definition, Abkürzung}) = s(\underline{L}) \quad (2.110)$$

mit dem Symbol $s(\underline{L})$ abzukürzen. Die Ableitung einer Operatorfunktion nach einem Operator ist wie folgt definiert

$$\frac{\partial f(\underline{L}, \underline{M}, \underline{N}, \dots)}{\partial \underline{L}} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{f(\underline{L} + \varepsilon \underline{I}, \underline{M}, \underline{N}, \dots) - f(\underline{L}, \underline{M}, \underline{N}, \dots)}{\varepsilon}. \quad (2.111)$$

Man beachte, daß die üblichen Rechenregeln versagen, wenn man es mit nichtkommutierenden Operatoren zu tun hat, also $\exp(\underline{A} + \underline{B}) \neq \exp(\underline{A}) \exp(\underline{B})$, wenn $[\underline{A}, \underline{B}] \neq 0$.

2.8.3 Spur eines Operators

Als Spur eines Operators wird die Summe der Diagonalelemente seiner Matrix (in einer beliebigen Darstellung) bezeichnet: Sie ist invariant gegen Basistransformationen und stellt somit für Observable die Summe aller Eigenwerte dar (es gibt ja eine Darstellung, welche die Matrix zur Diagonalmatrix macht).

$$\text{Sp}\{\underline{M}\} = \int_{\ell} M(\ell, \ell) d\ell = \int_{\ell} \langle \ell | \underline{M} | \ell \rangle d\ell. \quad (2.112)$$

Die Spur eines Produktes von Operatoren ist invariant gegen zyklische Vertauschungen,

$$\text{Sp}\{\underline{A} \underline{B} \underline{C}\} = \text{Sp}\{\underline{B} \underline{C} \underline{A}\} = \text{Sp}\{\underline{C} \underline{A} \underline{B}\}. \quad (2.113)$$

Damit läßt sich die Invarianz der Spur gegen Basistransformationen nachweisen (man ersetzt die Operatoren durch transformierte Operatoren gemäß Gl. 2.72). Speziell ist

$$\text{Sp}\{|\varphi\rangle\langle\psi|\} = \int_{\ell} \langle \ell | \varphi \rangle \langle \psi | \ell \rangle d\ell = \int_{\ell} \langle \psi | \ell \rangle d\ell \langle \ell | \varphi \rangle = \langle \psi | \underline{I} | \varphi \rangle = \langle \psi | \varphi \rangle. \quad (2.114)$$

2.9 Wahrscheinlichkeiten und Erwartungswerte für reine Zustände und Gemische

Jetzt können die in Abschn. 2.5 in Gl. 2.82 und Gl. 2.86 dargelegten, experimentell überprüfbar Beziehungen für Wahrscheinlichkeiten und Erwartungswerte so formuliert werden, daß ihre Invarianz gegen Basistransformationen manifest wird (physikalische Aussagen müssen von der zufällig gewählten mathematischen Beschreibung unabhängig sein). Ein vollständiger Satz kommutierender Observabler bestehe aus den Operatoren $\underline{L}, \underline{M}, \dots, \underline{Z}$. Das System sei im Zustand $|\varphi\rangle$. Eine Basis bilden die simultanen Eigenkets $|\ell, m, \dots, z\rangle$. Die Wahrscheinlichkeit, bei einer Messung von \underline{L} den Wert ℓ zu erhalten, ist (beachte Gl. 2.107, Gl. 2.114)

$$\begin{aligned} w(\ell) &= |\langle \ell, m, \dots, z | \varphi \rangle|^2 \quad (m, \dots, z \text{ beliebig}) \\ &= \int_m \dots \int_z \langle \varphi | \ell, m, \dots, z \rangle dm \dots dz \langle \ell, m, \dots, z | \varphi \rangle = \langle \varphi | \underline{P}_{\text{ER}(\ell)} | \varphi \rangle \\ &= \text{Sp}\{\underline{P}_{|\varphi}\} \underline{P}_{\text{ER}(\ell)}. \end{aligned} \quad (2.115)$$

Für den Erwartungswert einer Observablenfunktion erhält man analog (man beachte die Spektraldarstellung Gl. 2.109)

$$\begin{aligned} \langle f(\underline{L}) \rangle &= \int_{\ell} f(\ell) w(\ell) d\ell = \int_{\ell} \dots \int_z \langle \varphi | \ell, m, \dots, z \rangle f(\ell) d\ell dm \dots dz \langle \ell, m, \dots, z | \varphi \rangle \\ &= \langle \varphi | f(\underline{L}) | \varphi \rangle = \text{Sp}\{\underline{P}_{|\varphi}\} f(\underline{L}). \end{aligned} \quad (2.116)$$

Damit steht auch die Invarianz der Erwartungswerte gegen Basistransformationen fest.

2.9.1 Gemische

Es trifft oft zu, daß — nicht aus inhärent quantenmechanischen Gründen, sondern aus Gründen der „Faulheit“ oder wegen der Schwierigkeit der Messungen — der Zustandsket $|\varphi\rangle$ des Systems nicht bekannt ist. Zur Auswahl sollen noch orthonormierte Kets $|\varphi_\alpha\rangle$ zur Verfügung stehen, die mit den Wahrscheinlichkeiten w_α tatsächlich den Systemket φ darstellen. Man bezeichnet diese Situation (im Gegensatz zum reinen Zustand) als Gemisch.

$$|\varphi_\alpha\rangle \quad \text{mit} \quad w_\alpha, \quad \sum_\alpha w_\alpha = 1, \quad \langle \varphi_\alpha | \varphi_\beta \rangle = \delta_{\alpha\beta}. \quad (2.117)$$

Es wird ein sogenannter statistischer Operator $\underline{\rho}$ definiert:

$$\underline{\rho} = \sum_\alpha |\varphi_\alpha\rangle w_\alpha \langle \varphi_\alpha|. \quad (2.118)$$

Die für das Gemisch relevanten Prognosen erhält man, indem man $w(\ell)$ und $\langle f(\underline{L}) \rangle$ von Gl. 2.115, Gl. 2.116 für einen Zustand $|\varphi_\alpha\rangle$ berechnet und dann mit den Wahrscheinlichkeiten w_α gewichtet (man beachte dabei Gl. 2.118):

$$\begin{aligned} w(\ell) &= \sum_\alpha w_\alpha \text{Sp}\{\underline{P}_{|\varphi_\alpha\rangle} \underline{P}_{\text{ER}(\ell)}\} = \text{Sp}\{\underline{\rho} \underline{P}_{\text{ER}(\ell)}\}, \\ \langle f(\underline{L}) \rangle &= \sum_\alpha w_\alpha \text{Sp}\{\underline{P}_{|\varphi_\alpha\rangle} f(\underline{L})\} = \text{Sp}\{\underline{\rho} f(\underline{L})\}. \end{aligned} \quad (2.119)$$

Der statistische Operator hat die Eigenschaft

$$\text{Sp}(\underline{\rho}) = \sum_\alpha w_\alpha = 1, \quad \text{Sp}(\underline{\rho}^2) = \sum_\alpha w_\alpha^2 \leq 1. \quad (2.120)$$

Wenn es sich um einen reinen Zustand handelt, ist $\underline{\rho}$ ein Projektor:

$$\underline{\rho} = |\varphi\rangle \langle \varphi| = \underline{\rho}^2, \quad \text{Sp}(\underline{\rho}) = \text{Sp}(\underline{\rho}^2) = 1. \quad (2.121)$$

2.9.2 Anmerkung zum statistischen Operator

Ein Gemisch kann auch simuliert werden, indem man die in Frage kommenden Zustände $|\varphi_\alpha\rangle$ mit statistisch gleichverteilten Phasen zu einem (normierten) Ket $|\varphi\rangle$ superponiert, die Prognosen nach Gl. 2.115, Gl. 2.116 berechnet und anschließend über die Phasen mittelt. Beispiel: Es seien die Zustände $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle$ je mit der Wahrscheinlichkeit $1/2$ vertreten. Statt den statistischen Operator

$$\underline{\rho} = \frac{1}{2}(|\varphi_1\rangle \langle \varphi_1| + |\varphi_2\rangle \langle \varphi_2|), \quad \langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle = 0 \quad (2.122)$$

zu definieren, kann man den Ket

$$|\varphi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\varphi_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{j\delta}|\varphi_2\rangle, \quad w(\delta) = \frac{1}{2\pi} \quad \text{in} \quad 0 \leq \delta < 2\pi, \quad (2.123)$$

definieren. Verwendet man $\underline{\rho}$ aus Gl. 2.122 in Gl. 2.119, so erhält man dieselben Ergebnisse, wenn man $|\varphi\rangle$ von Gl. 2.123 in Gl. 2.115, Gl. 2.116 einsetzt und anschließend über die gleichverteilte Zufallsvariable δ mittelt.

2.10 Der Weg von der Ignoranz zum Zustandsket

Ein vollständiger Satz kommutierender Observabler bestehe aus den Operatoren \underline{L} , \underline{M} , ..., \underline{Z} . Die im Ket-Raum gewählte Basis besteht aus den simultanen Eigenkets $|\ell, m, \dots, z\rangle$, sie ist vollständig und orthogonal,

$$\int_{\ell} \int_m \dots \int_z |\ell, m, \dots, z\rangle d\ell dm \dots dz \langle \ell, m, \dots, z | = \underline{I} \quad (2.124)$$

$$\langle \ell, m, \dots, z | \ell', m', \dots, z' \rangle = \delta(\ell, \ell') \delta(m, m') \dots \delta(z, z').$$

Bei völliger Ignoranz über das System läßt sich nur sagen, daß alle Zustände mit gleicher Wahrscheinlichkeit vertreten sind. Die Anzahl der möglichen Zustände ist gerade $\text{Sp}(\underline{I})$ — siehe Vollständigkeitsrelation! Damit ist $\underline{\rho}$ von Gl. 2.118

$$\underline{\rho} = \frac{\underline{I}}{\text{Sp}(\underline{I})} \quad (\text{völlige Ignoranz}). \quad (2.125)$$

Nach der ersten Messung, z. B. der Observablen \underline{L} mit dem Ergebnis ℓ' , sind alle Kets möglich, die im Eigenraum des Eigenwertes ℓ' liegen. Die Anzahl dieser Kets ist $\text{Sp}(\underline{P}_{\text{ER}(\ell')})$. Somit ist

$$\underline{\rho} = \frac{\underline{P}_{\text{ER}(\ell')}}{\text{Sp}(\underline{P}_{\text{ER}(\ell')})}. \quad (2.126)$$

Mit jeder weiteren Messung reduziert sich die Anzahl der zur Konkurrenz zugelassenen Kets, bis schließlich nach Messung aller kommutierenden Observablen (Registrierung aller verträglich meßbaren Quantenzahlen ℓ', m', \dots, z') ein reiner Zustand vorliegt

$$\underline{\rho} = |\ell', m', \dots, z'\rangle \langle \ell', m', \dots, z'|. \quad (2.127)$$

Ein weiterer interessierender Fall ist jener, daß der Zustandsket $|\varphi\rangle$ bekannt ist, bevor eine Messung durchgeführt wird. Wie ändert sich der Zustand, wenn die Observable \underline{L} mit dem Ergebnis ℓ' gemessen wurde? Durch die Messung wurde offenbar der Ket $|\varphi\rangle$ in den Eigenraum des Eigenwertes ℓ' projiziert. Der Zustand $|\psi\rangle$ nach der Messung ist proportional zu dieser Projektion. Der Proportionalitätsfaktor (er kann reell angesetzt werden, da eine absolute Phase bei einer WA nicht observabel ist) muß so bestimmt werden, daß $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ gilt. Somit ist nach der Messung

$$|\psi\rangle = \frac{\underline{P}_{\text{ER}(\ell')}|\varphi\rangle}{\sqrt{\langle \varphi | \underline{P}_{\text{ER}(\ell')}^2 | \varphi \rangle}} = \frac{\underline{P}_{\text{ER}(\ell')}|\varphi\rangle}{\sqrt{\langle \varphi | \underline{P}_{\text{ER}(\ell')} | \varphi \rangle}} = \frac{\underline{P}_{\text{ER}(\ell')}|\varphi\rangle}{\sqrt{\text{Sp}\{\underline{P}_{|\varphi\rangle} \underline{P}_{\text{ER}(\ell')}\}}}. \quad (2.128)$$

War vor der Messung der Observablen \underline{L} mit dem Ergebnis ℓ' nicht der Zustandsket $|\varphi\rangle$, sondern der statistische Operator $\underline{\rho}$ des Systems bekannt, so folgt in Anwendung von Gl. 2.128 auf Gl. 2.118 für den statistischen Operator $\underline{\rho}'$ nach der Messung (beachte: $\underline{P} = \underline{P}^2$)

$$\underline{\rho}' = \frac{\underline{P}_{\text{ER}(\ell')} \underline{\rho} \underline{P}_{\text{ER}(\ell')}}{\text{Sp}\{\underline{\rho} \underline{P}_{\text{ER}(\ell')}\}}. \quad (2.129)$$

Ohne Beweis wird der statistische Operator für ein (durch eine Temperatur T beschriebenes) System im thermischen Gleichgewicht angegeben:

$$\underline{\rho} = \frac{\exp(-\beta \underline{H})}{\text{Sp}(\exp(-\beta \underline{H}))}, \quad \beta = \frac{1}{kT}. \quad (2.130)$$

\underline{H} ist der Hamiltonoperator (Energieoperator) des Systems. $\underline{\rho}$ von Gl. 2.130 maximiert die Entropie unter der Bedingung, daß die mittlere Energie $\text{Sp}(\underline{\rho} \underline{H})$ gegeben ist [17, S.258].

Kapitel 3

Einfache Systeme und Systemdynamik

3.1 Nichtklassische Korrelationen von Ereignissen

Der in Kap. 2 entwickelte Formalismus soll im folgenden auf die Behandlung der in Abschn. 1.2 beschriebenen Interferenzexperimente sowie auf zwei weitere Experimente angewendet werden, deren Ablauf verblüffend ist, und deren Ausgang zu noch anhaltender Diskussion über die Interpretation der Quantentheorie geführt hat.

3.1.1 Interferenz am Doppelspalt

Für die Anordnung von Abb. 1.1 läßt sich der Zustand $|Q\rangle$ eines Elektrons, welches die Quelle Q verlassen hat, nach drei Kets entwickeln: $|\psi_0\rangle$ sei der Zustand eines Elektrons, welches beide Spalte verfehlt, $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ sollen die Zustände von Elektronen bezeichnen, welche den Schirm durch Spalt 1 bzw. durch Spalt 2 passieren. Diese Zustände sind vollständig (zur Beschreibung der Elektronen, welche die Quelle verlassen haben) und orthogonal:

$$\sum_{i=0}^2 |\psi_i\rangle\langle\psi_i| = \underline{I}, \quad \langle\psi_i|\psi_j\rangle = \delta_{ij} \quad (i, j = 0, 1, 2). \quad (3.1)$$

Betrachtet man nur jene Elektronen, welche einen der beiden Spalte durchlaufen haben, so beschränkt man sich auf einen Unterraum, der durch die Kets $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ aufgespannt wird, und dem der Projektor

$$\underline{P} = \sum_{i=1}^2 |\psi_i\rangle\langle\psi_i| = \underline{I} - |\psi_0\rangle\langle\psi_0| \quad (3.2)$$

entspricht.

Da alle Elektronen, welche einen der beiden Spalte durchlaufen haben, irgendwo in $-\infty < x < \infty$ in der Registrierebene landen, sind die Dirac-Kets $|x\rangle$, welche Gl. 2.36 erfüllen, nämlich

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle dx \langle x| = \underline{I}, \quad \langle x|x'\rangle = \delta(x-x') \quad (3.3)$$

vollständig zur Beschreibung der Verhältnisse im Unterraum von Gl. 3.2, aber nicht vollständig zur Beschreibung aller Elektronen, welche die Quelle verlassen haben: Es gilt ja $\langle x|\psi_0\rangle = 0$,

die WDA, daß ein Elektron, welches nicht durch einen Spalt lief, in der Registrierebene landet, verschwindet. Es gilt

$$|\psi_i\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle dx \langle x|\psi_i\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle dx \psi_i(x), \quad i = 1, 2, \quad (3.4)$$

$$\langle \psi_i|\psi_i\rangle = 1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_i(x)|^2 dx.$$

Hat ein Elektron den Spalt i passiert (Zustand $|\psi_i\rangle$), so ist die Wahrscheinlichkeit eins, daß es irgendwo in $-\infty < x < \infty$ landet (Integral über die $|\text{WDA}|^2 = |\psi_i(x)|^2$).

Ein Elektron, welches entweder durch Spalt 1 oder durch Spalt 2 läuft, ohne daß eine Einrichtung installiert wurde, welche eine Messung „auf welchem Weg“ erlaubt, befindet sich in einem Zustand der Superposition von $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$:

$$|\psi\rangle = c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle. \quad (3.5)$$

Da auch $|\psi\rangle$ als realisierbarer Zustand normiert sein muß, $\langle \psi|\psi\rangle = 1$, folgt mit Gl. 3.1 die Bedingung

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1. \quad (3.6)$$

Eine spezielle Wahl (die der symmetrischen Anordnung von Abb. 1.1 entspricht, in der die Elektronen gleichwahrscheinlich durch die Spalte 1, 2 laufen und die Materiewellen gleiche Phase haben) wäre

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\psi_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\psi_2\rangle. \quad (3.7)$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte einer Landung an der Stelle x ist in Anwendung von Gl. 2.115

$$w(x) = \text{Sp}\{\underline{P}_{|\psi\rangle} \underline{P}_{|x\rangle}\} = \text{Sp}\{|\psi\rangle \langle \psi|x\rangle \langle x|\} = |\langle x|\psi\rangle|^2 \quad (3.8)$$

$$= \frac{1}{2}|\langle x|\psi_1\rangle + \langle x|\psi_2\rangle|^2 = \frac{1}{2}[|\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2 + 2\Re \psi_1(x)\psi_2^*(x)].$$

Der Zustand $|\psi\rangle$ ist eine sogenannte kohärente Superposition der Zustände $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$, das heißt, daß die Wahrscheinlichkeitsamplituden c_1, c_2 mit definierten Beträgen und Phasen auftreten (das ist dann der Fall, wenn keine WW-Information vorliegt): In diesem Fall kommt es zur Interferenz.

In Abschn. 1.2 wurde erläutert, daß die Interferenz verschwindet, wenn WW-Information verfügbar ist. Wie wäre dieser Sachverhalt zu beschreiben? Wir wissen jetzt, daß die Elektronen mit der Wahrscheinlichkeit $1/2$ durch Spalt 1, mit der Wahrscheinlichkeit $1/2$ durch Spalt 2 kommen. Aber dieses „entweder-oder“ unterscheidet sich vom oben besprochenen: Wir können zwar nicht vorhersagen, durch welchen Spalt ein aus der Quelle startendes Elektron fliegen wird, aber wir messen eindeutig, daß es durch Spalt 1 (oder Spalt 2) fliegt: Es sind also zwei Zustände ($|\psi_1\rangle$ und $|\psi_2\rangle$) zur Auswahl vorhanden, von denen wir wissen, daß sie tatsächlich auftreten, aber jeweils mit den Wahrscheinlichkeiten $1/2$. Das entspricht der in Abschn. 2.9 besprochenen Situation eines Gemischs. Unsere Kenntnis über das System läßt sich nicht durch einen Zustandsket der Form Gl. 3.7 erfassen (keine kohärente Superposition). Es trifft der statistische Operator Gl. 2.117, Gl. 2.118 zu:

$$\underline{\rho} = \sum_{i=1}^2 |\psi_i\rangle \frac{1}{2} \langle \psi_i|, \quad \langle \psi_i|\psi_j\rangle = \delta_{ij}, \quad i, j = 1, 2. \quad (3.9)$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte einer Landung an der Stelle x ist nun in Anwendung von Gl. 2.119

$$w(x) = \text{Sp}\{\underline{\rho} \underline{P}_{|x\rangle}\} = \text{Sp}\{\underline{\rho}|x\rangle \langle x|\} = \langle x|\underline{\rho}|x\rangle = \quad (3.10)$$

$$= \frac{1}{2}(\langle x|\psi_1\rangle \langle \psi_1|x\rangle + \langle x|\psi_2\rangle \langle \psi_2|x\rangle) = \frac{1}{2}[|\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2].$$

Es tritt keine Interferenz auf.

3.1.2 Die spukhafte Fernwirkung

In Richtung ϑ (siehe auch Abb. 3.1) linear polarisierte Photonen werden durch den Ket $|\vartheta\rangle$

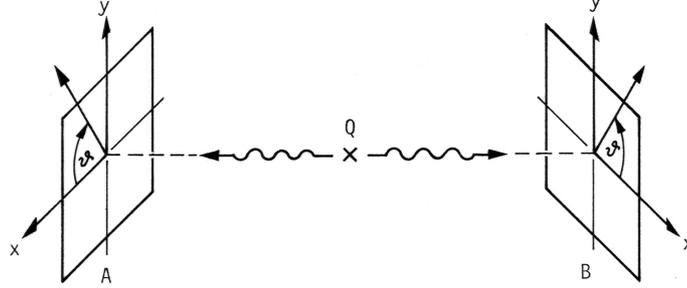


Abbildung 3.1: Photonenquelle Q, verdrehbare Analysatoren für linear polarisierte Zustände bei A, B

bezeichnet. Die WA dafür, daß ein $|\vartheta_1\rangle$ -Photon einen in Richtung ϑ_2 eingestellten Analysator für linear polarisiertes Licht passiert, ist $\langle \vartheta_2 | \vartheta_1 \rangle$:

$$\langle \vartheta_2 | \vartheta_1 \rangle = \cos(\vartheta_1 - \vartheta_2), \quad |\langle \vartheta_2 | \vartheta_1 \rangle|^2 = \cos^2(\vartheta_1 - \vartheta_2). \quad (3.11)$$

Daraus resultiert für viele Photonen, daß unter dem Winkel ϑ_1 linear polarisiertes Licht einen unter dem Winkel ϑ_2 eingestellten Analysator (er fragt nach dem Endzustand $\langle \vartheta_2 |$) mit einem Leistungsanteil $\cos^2(\vartheta_1 - \vartheta_2)$ passiert. Es gilt somit

$$\langle \vartheta | \vartheta \rangle = 1, \quad \langle \vartheta | \vartheta \pm \pi/2 \rangle = 0. \quad (3.12)$$

Sendet eine Quelle Q (siehe Abb. 3.1) in Richtung A ein Photon im Zustand $|\vartheta_A\rangle$, in Richtung B gleichzeitig ein Photon im Zustand $|\vartheta_B\rangle$, so soll diese Aussage für beide Photonen durch den Ket $|\vartheta_A, \vartheta_B\rangle$ ausgedrückt werden (siehe Abschn. 2.6, Beschreibung von Welt 1 und Welt 2). Die Photonen sollen von der Quelle in entgegengesetzte Richtungen entlassen werden, und zwar so, daß ihr Zustand folgendem Ket entspricht:

$$\begin{aligned} |\psi_0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|0,0\rangle + |\pi/2, \pi/2\rangle), & \langle \psi_0 | \psi_0 \rangle &= 1, \\ \langle \vartheta_A, \vartheta_B | \vartheta'_A, \vartheta'_B \rangle &= \langle \vartheta_A | \vartheta'_A \rangle \langle \vartheta_B | \vartheta'_B \rangle = \cos(\vartheta_A - \vartheta'_A) \cos(\vartheta_B - \vartheta'_B). \end{aligned} \quad (3.13)$$

Die WA, daß ein unter dem Winkel ϑ_A bei A und ein unter dem Winkel ϑ_B bei B eingestellter Analysator die Photonen im Zustand $|\psi_0\rangle$ transmittieren, ist somit

$$\begin{aligned} \langle \vartheta_A, \vartheta_B | \psi_0 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle \vartheta_A, \vartheta_B | 0,0 \rangle + \langle \vartheta_A, \vartheta_B | \pi/2, \pi/2 \rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\cos \vartheta_A \cos \vartheta_B + \sin \vartheta_A \sin \vartheta_B) = \frac{1}{\sqrt{2}} \cos(\vartheta_A - \vartheta_B). \end{aligned} \quad (3.14)$$

Werden beide Analysatoren auf denselben Winkel ϑ eingestellt, $0 \leq \vartheta < 2\pi$, so gilt

$$\langle \vartheta, \vartheta | \psi_0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad |\langle \vartheta, \vartheta | \psi_0 \rangle|^2 = \frac{1}{2}, \quad (3.15)$$

für orthogonale Einstellung gilt

$$\langle \vartheta, \vartheta \pm \pi/2 | \psi_0 \rangle = 0, \quad |\langle \vartheta, \vartheta \pm \pi/2 | \psi_0 \rangle|^2 = 0. \quad (3.16)$$

Es stellt sich heraus, daß — unabhängig von der (parallelen) Einstellung der Analysatoren — entweder beide Photonen transmittiert werden, und zwar mit der Wahrscheinlichkeit $1/2$, oder

aber, daß beide Photonen nicht transmittiert werden (ebenfalls mit der Wahrscheinlichkeit $1/2$). Nach Gl. 3.16 ist es unmöglich, daß eines transmittiert wird, das andere dagegen nicht (weil die Wahrscheinlichkeit null ist, daß eine Transmission bei orthogonalen Analysatoren erfolgt; es kann somit nicht passieren, daß sich ein Photon als x -polarisiert, eines als y -polarisiert erweist).

Es muß somit aus einer Messung bei A (z. B. Transmission) augenblicklich der Schluß erlaubt sein, daß — falls man bei B einen Analysator aufstellen würde — sich ein Photon an der beliebig weit entfernten Stelle B im selben Polarisationszustand befindet. Wäre das Ergebnis der Messung bei A, daß keine Transmission erfolgt (auch das ist ja mit der Wahrscheinlichkeit $1/2$ möglich), dann wäre der augenblickliche Schluß, daß auch bei B keine Transmission erfolgen würde.

Einstein hat das (in einem anderen Gedankenexperiment) als „spukhafte Fernwirkung“ bezeichnet, da nicht einzusehen sei, wie eine bei A gemessene Eigenschaft die Eigenschaften in einem anderen Raumbereich bei B bestimmen kann, ohne daß A mit B in Wechselwirkung steht (ohne daß genügend Zeit vorhanden ist, ein Signal zwischen den beiden Stellen A, B laufen zu lassen). Das Problem ist als Einstein-Podolsky-Rosen-Paradox bekannt [8][4][47], ein verwandtes Problem ist das von „Schrödingers Katze“ [38][22].

Das Experiment von Abb. 3.1 ist tatsächlich durchgeführt worden [43], und zwar auch für den Fall, daß die Analysatoren bei A, B erst eingestellt werden, nachdem beide Photonen die Quelle Q verlassen haben (um ein etwaiges „Signal“ von den Analysatoren an die Quelle der Photonen auszuschließen). Der Ausgang des Experiments ist durch Gl. 3.13-Gl. 3.16 richtig beschrieben, er bedeutet nicht, daß von A nach B eine Signalübertragung mit Überlichtgeschwindigkeit möglich ist [30][23][29][5]. Die Ursache, daß das Experiment so verläuft, wie es verläuft, liegt in der kohärenten Superponierbarkeit von Zuständen wie in Gl. 3.13. Es läßt sich zeigen [30], daß keine klassische Information, die man den beiden Photonen bei Verlassen der Quelle Q mit auf den Weg gibt (etwa, wie sie sich zu verhalten haben, wenn die Analysatoren bei A und B bestimmte Orientierungen aufweisen) einen Ausgang des Experiments prognostizieren kann, der mit den Vorhersagen der Quantentheorie übereinstimmt und damit dem tatsächlichen Ausgang des Experiments gleicht. Zustände der Art von Gl. 3.13 bezeichnet man als „verschränkte Zustände (entangled states)“.

Das hat Folgerungen für die Interpretation des Zustandskets $|\varphi\rangle$: Die „richtige“ Aussage ist, daß $|\varphi\rangle$ die komplette Information enthält, die über das System zu erlangen ist, und daß trotzdem im allgemeinen der Ausgang eines Experiments ungewiß ist.

Ein anderer Standpunkt (siehe auch [2]) deutet $|\varphi\rangle$ als Repräsentant nicht für ein einzelnes System, sondern als Repräsentant für ein Ensemble von Systemen, die voneinander abweichen. Diese Abweichungen werden durch „verborgene Variable“ beschrieben, die wir nicht kennen. Die Wahrscheinlichkeitsaussagen sind somit eine Folge unserer Ignoranz über diese verborgenen Variablen. In [4] wurde aber gezeigt, daß es keine lokale Theorie (lokal heißt: Eine Messung in A ist unabhängig von dem, was in B passiert) mit verborgenen Variablen geben kann, welche die Vorhersagen der Quantentheorie dupliziert (wie bereits oben erwähnt: man kann den Photonen beim Start keine a-priori-Information darüber mitgeben, wie sie sich in A, B zu verhalten haben).

Für das Verhalten von Photonen ist die Frage entscheidend, wann sie unterscheidbar (nicht interferenzfähig) und wann sie nicht unterscheidbar (interferenzfähig) sind. Diese Frage wird z. B. in [20, S.218] sowie in [26][28] diskutiert. Neuere Experimente zeigen [44], daß eine Messung der Eigenschaften elektromagnetischer Felder möglich ist, ohne daß dabei Photonen vernichtet werden (wie das in einem Photodetektor der Fall ist).

3.1.3 Experimente zur Frage der Komplementarität

In Abschn. 1.3 wurde das Verhältnis von Komplementarität zur Unschärferelation bereits erwähnt. Es gibt Vorschläge, wie man eine „Welcher-Weg-Information“ erhalten kann, ohne dabei durch eine Unschärferelation eingeschränkt zu sein (Literatur zu diesem Problem sind die Arbeiten [9] [10] [11] [35] [39] [40] [42]; leicht lesbare Einführungen findet man in [12] [36] [41]; [46] beschreibt ein tatsächlich durchgeführtes Experiment).

Das Prinzip ist in Abb. 3.2 dargestellt. Es soll zuerst der (erwartete) experimentelle Befund erläutert werden, anschließend wird eine stark vereinfachte mathematische Beschreibung versucht.

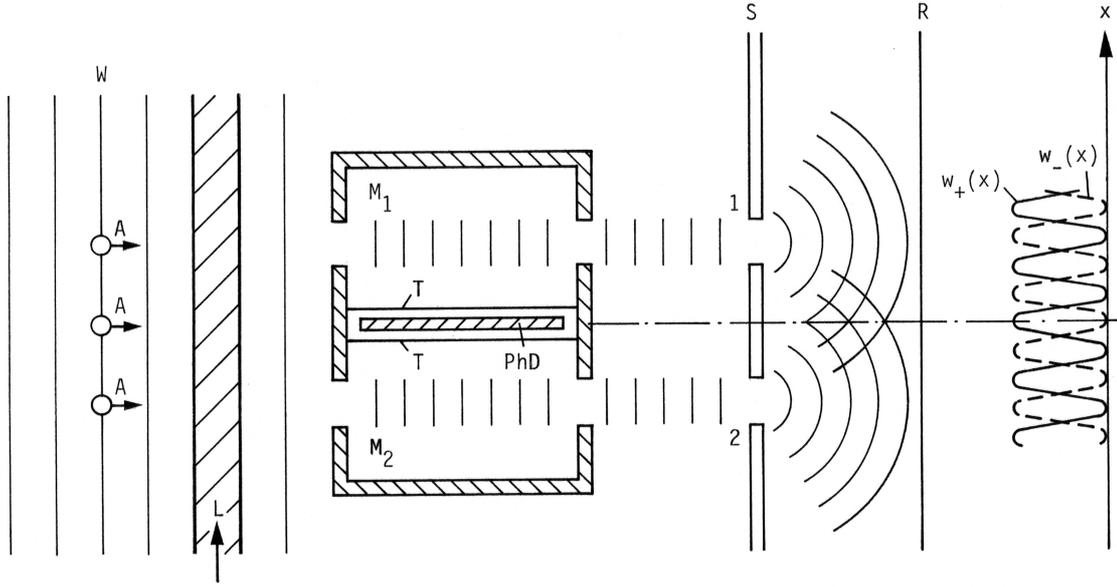


Abbildung 3.2: Der Quantum-Eraser: A Atome; L Laserstrahl; M_1 und M_2 Resonatoren für Mikrowellenphotonen; T entfernbare Trennwände der Resonatoren; PhD Photodetektor für Mikrowellenphotonen; S Schirm mit zwei Spalten 1,2. R Registrierebene zur Detektion von Interferenzen; $w_+(x), w_-(x)$ komplementäre Wahrscheinlichkeitsdichten für das Auftreffen von Atomen am Ort x , mit $w_+(x) + w_-(x) = \text{const}$; W Wellenfront der Materiewelle des Atomstrahls

Ein Atomstrahl mit genau definiertem Impuls (eine Materiewelle, da die Lage der Atome A auf der Wellenfront W völlig unbekannt ist) wird durch einen Laserstrahl L in einen hochangeregten, langlebigen Zustand versetzt. Beim Durchlaufen von Mikrowellenresonatoren M_1, M_2 können die Atome ein Mikrowellenphoton abgeben. Es läßt sich nachweisen (siehe die oben zitierte Literatur), daß dadurch der Impuls der Atome nicht wesentlich beeinflusst wird, es liegt somit auch beim Durchlaufen des Doppelspalts noch eine ungestörte Materiewelle vor, die zur Interferenz in der Registrierebene R führen müßte. Da sich aber feststellen läßt, ob im oberen oder unteren Resonator ein Photon deponiert wurde (ohne die Welleneigenschaften der Atome zu stören), verfügt man über WW-Information *und* Interferenz.

Tatsächlich ergibt sich keine Interferenz (obwohl keine Unschärferelation bemüht werden muß). Davon kann man sich leicht überzeugen. Die Zustände

$$|\psi_i, n_1, n_2\rangle, \quad i = 1, 2 \quad (3.17)$$

bezeichnen Atome, die durch den Spalt i laufen, daß im Resonator M_1 die Anzahl n_1 Photonen, im Resonator M_2 die Anzahl n_2 Photonen vorhanden ist. Vor dem Versuch mit jedem Atom seien beide Resonatoren leer ($n_1 = n_2 = 0$). Damit sind unter der zutreffenden Voraussetzung, daß ein Atom beim Durchlaufen eines Resonators mit Sicherheit ein Mikrowellenphoton emittiert, folgende Zustände zugelassen:

$$\begin{aligned} &|\psi_1, 1, 0\rangle, \quad |\psi_2, 0, 1\rangle, \\ &\langle \psi_i, n_1, n_2 | \psi_j, n'_1, n'_2 \rangle = \delta_{ij} \delta_{n_1 n'_1} \delta_{n_2 n'_2}. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Der Zustand der Atome ist eine lineare Superposition dieser beiden Zustände, wenn man nicht schon vor dem Durchlaufen des Doppelspalts in einem der Resonatoren nachgesehen hat, ob ein Photon abgegeben wurde:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_1, 1, 0\rangle + |\psi_2, 0, 1\rangle). \quad (3.19)$$

Ein Atom, welches an der Stelle x gelandet ist, kann daher entweder zum Endzustand $\langle x, 1, 0 |$ oder $\langle x, 0, 1 |$ führen. Diese Zustände spannen einen Raum auf, auf welchen der Projektor

$$\underline{P} = |x, 1, 0\rangle \langle x, 1, 0| + |x, 0, 1\rangle \langle x, 0, 1| \quad (3.20)$$

projiziert. Die Wahrscheinlichkeitsdichte einer Landung an der Stelle x ist somit in Anwendung von Gl. 2.115 und unter Beachtung von Gl. 3.18–Gl. 3.20 (mit der Bezeichnung $\psi_i(x) = \langle x | \psi_i \rangle$)

$$\begin{aligned} w(x) &= \text{Sp}\{\underline{P}_{|\psi\rangle} \underline{P}\} = \text{Sp}\{|\psi\rangle \langle \psi | \underline{P}\} = \langle \psi | \underline{P} | \psi \rangle \\ &= \frac{1}{2} [|\langle x, 1, 0 | \psi_1, 1, 0 \rangle|^2 + |\langle x, 0, 1 | \psi_2, 0, 1 \rangle|^2] = \frac{1}{2} [|\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2]. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Alle anderen Terme geben wegen der Orthogonalität der beteiligten Zustände verschwindende Wahrscheinlichkeitsamplituden. Wegen der bestehenden Korrelationen in der Meßapparatur (in den Zuständen $|\psi_1, n_1, n_2\rangle$) kann keine Interferenz beobachtet werden, obwohl beim Gewinnen der WW-Information keine Störung der Atome erfolgte. Komplementarität gilt auch dann, wenn keine Unschärferelation relevant ist.

3.1.4 Der „quantum-eraser“

Interessant ist folgende Frage: Was geschieht, wenn man — nachdem das Atom bereits an einer Stelle x gelandet ist — die beiden Trennwände T in Abb. 3.2 entfernt? Dabei werden die beiden Resonatoren M_1, M_2 verkoppelt, und das darin befindliche elektromagnetische Feld kann in symmetrische Felder (sie haben ein Maximum an der Stelle des Photodetektors, ein Photon würde absorbiert werden) oder in antisymmetrische Felder eingeteilt werden (in diesem Fall würde das Photon nicht absorbiert, das Feld besitzt an der Stelle des Detektors den Wert null). Unabhängig davon, ob nun das Photon absorbiert wird oder nicht: Mit dem Verkoppeln der beiden Resonatoren wurde die WW-Information „ausradiert“ (daher die Bezeichnung quantum-eraser), weil sich ja nicht mehr feststellen läßt, ob das Photon ursprünglich im Resonator M_1 oder im Resonator M_2 abgelegt wurde. Damit müßte eigentlich (keine WW-Information!) die Interferenz beobachtbar sein. Aber: Wie kann das geschehen, da doch die Atome bereits gelandet sind und in Gl. 3.21 berechnet wurde, daß keine Interferenz stattfindet?

Dieselbe Rechnung wird nochmals durchgeführt. Bildet man die Linearkombinationen

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|1, 0\rangle \pm |0, 1\rangle) = |\pm\rangle, \quad \text{d. h.} \quad \begin{cases} |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle + |-\rangle), \\ |0, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle - |-\rangle), \end{cases} \quad (3.22)$$

sowie

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_1\rangle \pm |\psi_2\rangle) = |\psi_{\pm}\rangle, \quad \text{d. h.} \quad \begin{cases} |\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_+\rangle + |\psi_-\rangle), \\ |\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_+\rangle - |\psi_-\rangle), \end{cases} \quad (3.23)$$

so erhält man durch Einsetzen in Gl. 3.19 nach kurzer Rechnung für den Zustand der Atome, welche durch den Doppelspalt laufen, den Ausdruck

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_1, 1, 0\rangle + |\psi_2, 0, 1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_+, +\rangle + |\psi_-, -\rangle). \quad (3.24)$$

Wenn das Atom an der Stelle x gelandet ist, werden die Trennwände entfernt, und es wird festgestellt, ob der Photodetektor ein Photon absorbiert (in diesem Fall ist das Feld im symmetrischen $|+\rangle$ -Zustand) oder aber, ob das Photon nicht absorbiert wird (in diesem Fall ist das Feld im antisymmetrischen $|-\rangle$ -Zustand).

Wenn der $|+\rangle$ -Zustand vorliegt, ist der Endzustand des Systems durch den Bra $\langle x, + |$ gegeben, der Punkt, an dem das Atom gelandet ist, wird mit einem Pluszeichen markiert und

gehört zu einer Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\begin{aligned}
w_+(x) &= |\langle x, + | \psi \rangle|^2 = \frac{1}{2} |\langle x, + | \psi_+, + \rangle + \langle x, + | \psi_-, - \rangle|^2 = \frac{1}{2} |\langle x, + | \psi_+, + \rangle|^2 \\
&= \frac{1}{2} |\langle x | \psi_+ \rangle|^2 = \frac{1}{4} |\langle x | \psi_1 \rangle + \langle x | \psi_2 \rangle|^2 = \frac{1}{4} |\psi_1(x) + \psi_2(x)|^2 \\
&= \frac{1}{4} [|\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2 + 2 \Re \psi_1(x) \psi_2^*(x)].
\end{aligned} \tag{3.25}$$

Die mit dem Pluszeichen markierten Endlagen zeigen somit Interferenz, siehe Abb. 3.2.

Wenn der $| - \rangle$ -Zustand vorliegt, ist der Endzustand des Systems durch den Bra $\langle x, - |$ gegeben, der Punkt, an dem das Atom gelandet ist, wird mit einem Minuszeichen markiert und gehört zu einer Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\begin{aligned}
w_-(x) &= |\langle x, - | \psi \rangle|^2 = \frac{1}{2} |\langle x, - | \psi_+, + \rangle + \langle x, - | \psi_-, - \rangle|^2 = \frac{1}{2} |\langle x, - | \psi_-, - \rangle|^2 \\
&= \frac{1}{2} |\langle x | \psi_- \rangle|^2 = \frac{1}{4} |\langle x | \psi_1 \rangle - \langle x | \psi_2 \rangle|^2 = \frac{1}{4} |\psi_1(x) - \psi_2(x)|^2 \\
&= \frac{1}{4} [|\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2 - 2 \Re \psi_1(x) \psi_2^*(x)].
\end{aligned} \tag{3.26}$$

Aus Gl. 3.21, Gl. 3.25 und Gl. 3.26 folgt

$$w(x) = \frac{1}{2} [|\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2] = w_+(x) + w_-(x). \tag{3.27}$$

Die ursprünglich vorhandene WW-Information hat wegen der Komplementarität von Welle und Teilchen zu der Wahrscheinlichkeitsdichte $w(x)$ geführt, welche keine Interferenz zeigt.

Daran kann natürlich der Umstand nichts ändern, daß man nachträglich (durch Verkopplung der Resonatoren) die WW-Information vernichtet hat: Wenn man aber die im System gespeicherte Information geschickt nutzt (ob ein $| + \rangle$ - oder $| - \rangle$ -Zustand des Feldes vorliegt), kann man die auftreffenden Atome in zwei Klassen einteilen, die jede für sich Interferenz zeigen.

Ein mit Photonen durchgeführtes Experiment [46] hat bestätigt, daß sich ein quantum-eraser tatsächlich realisieren läßt.

3.2 Ortsdarstellung und Impulsdarstellung

Als einfachstes Beispiel wird die Quantisierung eines längs der x -Achse verschieblichen Massenpunktes betrachtet. Es sollen keine inhärent quantenmechanischen Observablen (z. B. Spin) bei der Quantisierung hinzutreten.

Alle klassischen Größen sind somit durch die Lage (x -Koordinate) und durch den Impuls in x -Richtung (mit p bezeichnet) bestimmt und als $f(x, p)$ darstellbar.

Bei der Quantisierung ersetzt man x, p durch hermitesche Operatoren, welche nicht vertauschbar sind (weil das Experiment zeigt, daß sie nicht verträglich meßbar sind). Man setzt

$$\underline{x} = \underline{x}^\dagger, \quad \underline{p} = \underline{p}^\dagger, \quad [\underline{x}, \underline{p}] = j\hbar \underline{I}. \tag{3.28}$$

Nach Gl. 2.103 führt der Kommutator auf die (experimentell bestätigte) Unschärferelation für Messungen zu gleichen Zeiten

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{1}{2} \hbar.$$

Wie in Abschn. A.2 gezeigt wird, folgt aus dem Kommutator von Gl. 3.28 für Funktionen $f(\underline{x}, \underline{p})$

$$[\underline{x}, f(\underline{x}, \underline{p})] = j\hbar \frac{\partial f(\underline{x}, \underline{p})}{\partial \underline{p}}, \quad [f(\underline{x}, \underline{p}), \underline{p}] = j\hbar \frac{\partial f(\underline{x}, \underline{p})}{\partial \underline{x}}. \tag{3.29}$$

Als vollständiger Satz kommutierender Observabler kann daher entweder \underline{x} oder \underline{p} gewählt werden. Es soll hier der Operator \underline{x} gewählt werden. Aus der Lösung seines Eigenwertproblems

$$\underline{x} |x\rangle = x |x\rangle \tag{3.30}$$

resultiert eine vollständige, orthogonale Basis (die x -Darstellung) zur Entwicklung beliebiger Systemkets $|\varphi\rangle$.

Das Eigenwertspektrum von \underline{x} wird durch den Kommutator mit \underline{p} festgelegt. Man definiert zweckmäßigerweise einen unitären Operator (x_0 ist ein reeller Parameter)

$$\underline{T}(x_0) = \exp\left(\frac{x_0 \underline{p}}{j\hbar}\right), \quad \underline{T}\underline{T}^\dagger = \underline{T}^\dagger \underline{T} = \underline{I}, \quad (3.31)$$

für den in Anwendung von Gl. 3.29 gilt

$$[\underline{x}, \underline{T}] = \underline{x}\underline{T} - \underline{T}\underline{x} = x_0 \underline{T}. \quad (3.32)$$

Wendet man \underline{T} von links auf die Eigenwertgleichung Gl. 3.30 an, so erhält man unter Beachtung von Gl. 3.32

$$\begin{aligned} \underline{T}|x\rangle &= (\underline{x}\underline{T} - x_0 \underline{T})|x\rangle = x \underline{T}|x\rangle \\ \text{d. h.} \quad \underline{x}\{\underline{T}|x\rangle\} &= (x + x_0)\{\underline{T}|x\rangle\}. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Durch Vergleich mit Gl. 3.30 sieht man, daß $\underline{T}|x\rangle$ proportional zum Eigenket $|x + x_0\rangle$ sein muß, der zum Eigenwert $x + x_0$ gehört. \underline{T} wird daher als Translationsoperator bezeichnet. Da x reell ist, ebenso x_0 , kann jeder Punkt in $-\infty < x < \infty$ erreicht werden: Die Eigenwerte von \underline{x} sind kontinuierlich in $-\infty < x < \infty$, die Eigenkets sind Dirac-Kets. Es gilt

$$\underline{T}(x_0)|x\rangle = |x + x_0\rangle, \quad \langle x + x_0 | x + x_0 \rangle = \langle x | \underline{T}^\dagger \underline{T} | x \rangle = \langle x | x \rangle. \quad (3.34)$$

Die Basis in der x -Darstellung ist somit

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle dx \langle x| = \underline{I}, \quad \langle x | x' \rangle = \delta(x - x'). \quad (3.35)$$

Da später noch eine andere Basis verwendet werden soll, werden aus Gründen, die in Abschn. 2.3 besprochen wurden, die WDA in der x -Darstellung mit

$$\langle x | \varphi \rangle = \varphi^{(x)}(x) \quad (3.36)$$

bezeichnet. Jeder beliebige Systemket kann entwickelt werden

$$|\varphi\rangle = \underline{I}|\varphi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle dx \langle x | \varphi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle dx \varphi^{(x)}(x). \quad (3.37)$$

Alle Probleme können gelöst werden, wenn bekannt ist, wie Operatorfunktionen $f(\underline{x}, \underline{p})$ auf einen Ket $|\varphi\rangle$ wirken; wegen der Zerlegung Gl. 3.37 muß daher die Wirkung auf einen Ket $|x\rangle$ berechnet werden.

Für Funktionen $f(\underline{x})$ mit reellen Koeffizienten folgt wegen

$$\underline{x}|x\rangle = x|x\rangle \rightarrow f(\underline{x})|x\rangle = f(x)|x\rangle, \quad \langle x | f(\underline{x}) = f(x)\langle x | \quad (3.38)$$

mit Gl. 2.58–Gl. 2.60

$$\begin{aligned} f(\underline{x})|\varphi\rangle &= |\psi\rangle, \\ \langle x | f(\underline{x})|\varphi\rangle &= f(x)\langle x | \varphi \rangle = \langle x | \psi \rangle \\ &= \psi^{(x)}(x) = f(x_{\text{op}})\varphi^{(x)}(x) = f(x)\varphi^{(x)}(x), \end{aligned} \quad (3.39)$$

und somit

$$x_{\text{op}} = x. \quad (3.40)$$

Die Wirkung von \underline{p} auf $|x\rangle$ ergibt sich aus Gl. 3.34 für $x_0 = dx$ (eine infinitesimale Größe):

$$\begin{aligned} \underline{I}(dx)|x\rangle &= (\underline{I} + \frac{dx \underline{p}}{j\hbar} + \dots)|x\rangle = |x + dx\rangle, \\ \underline{p}|x\rangle &= j\hbar \lim_{dx \rightarrow 0} \frac{|x + dx\rangle - |x\rangle}{dx} = j\hbar \frac{d}{dx}|x\rangle, \\ f(\underline{p})|x\rangle &= f(j\hbar \frac{d}{dx})|x\rangle, \\ \langle x|f(\underline{p}) &= f(-j\hbar \frac{d}{dx})\langle x|. \end{aligned} \quad (3.41)$$

Daraus erhält man die gesuchte Antwort:

$$\begin{aligned} f(\underline{p})|\varphi\rangle &= |\psi\rangle \\ \langle x|f(\underline{p})|\varphi\rangle &= f(-j\hbar \frac{d}{dx})\langle x|\varphi\rangle = \langle x|\psi\rangle \\ &= \psi^{(x)}(x) = f(p_{\text{op}})\varphi^{(x)}(x) = f(-j\hbar \frac{d}{dx})\varphi^{(x)}(x), \end{aligned} \quad (3.42)$$

und somit

$$p_{\text{op}} = -j\hbar \frac{d}{dx}. \quad (3.43)$$

Allgemein gilt daher

$$\begin{aligned} f(\underline{x}, \underline{p})|\varphi\rangle &= |\psi\rangle, \\ \langle x|f(\underline{x}, \underline{p})|\varphi\rangle &= f(x_{\text{op}}, p_{\text{op}})\varphi^{(x)}(x) = f(x, -j\hbar \frac{d}{dx})\varphi^{(x)}(x) = \psi^{(x)}(x). \end{aligned} \quad (3.44)$$

Ganz analog hätte sich auch durch Lösung des Eigenwertproblems für den Impulsoperator \underline{p} als Basis eine p -Darstellung entwickeln lassen, mit

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} |p\rangle dp \langle p| &= \underline{I}, & \langle p|p'\rangle &= \delta(p - p'), \\ |\varphi\rangle = \underline{I}|\varphi\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} |p\rangle dp \langle p|\varphi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |p\rangle dp \varphi^{(p)}(p), \\ f(\underline{x}, \underline{p})|\varphi\rangle &= |\psi\rangle \\ \langle p|f(\underline{x}, \underline{p})|\varphi\rangle &= f(x_{\text{op}}, p_{\text{op}})\varphi^{(p)}(p) = f(j\hbar \frac{d}{dp}, p)\varphi^{(p)}(p) = \psi^{(p)}(p). \end{aligned} \quad (3.45)$$

$\varphi^{(x)}(x)$ ist die WDA, bei einem Lokalisierungsversuch das durch $|\varphi\rangle$ beschriebene System an der Stelle x zu finden, $\varphi^{(p)}(p)$ ist die WDA, bei einer Impulsmessung den Wert p zu erhalten.

Diese WDA könnten ineinander umgerechnet werden, wenn die unitäre Transformation (siehe Abschn. 2.3) zwischen x -Darstellung und p -Darstellung bekannt ist, also die „Matrix“ mit den Elementen $\langle x|p\rangle$.

Als Spezialfall von Gl. 3.44 erhält man

$$\langle x|\underline{p}|p\rangle = p_{\text{op}}\langle x|p\rangle = -j\hbar \frac{d}{dx}\langle x|p\rangle = p\langle x|p\rangle, \quad (3.46)$$

und durch Integration

$$\langle x | p \rangle = c \cdot \exp\left(2\pi j \frac{p}{h} x\right). \quad (3.47)$$

Die Integrationskonstante wird durch die Forderung nach Unitarität festgelegt. Man verwendet entweder Gl. 2.51, Gl. 2.52, oder sieht unmittelbar

$$\begin{aligned} \langle x | x' \rangle &= \delta(x - x') = \langle x | \underline{I} | x' \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x | p \rangle dp \langle p | x' \rangle \\ &= c^2 h \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[2\pi j \frac{p}{h}(x - x')\right] d\left(\frac{p}{h}\right) = c^2 h \delta(x - x'), \end{aligned} \quad (3.48)$$

und somit

$$\langle x | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{h}} \exp\left(2\pi j \frac{p}{h} x\right). \quad (3.49)$$

Die gesuchten Transformationsgleichungen sind

$$\begin{aligned} \varphi^{(x)}(x) &= \langle x | \varphi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x | p \rangle dp \langle p | \varphi \rangle = \frac{1}{\sqrt{h}} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^{(p)}(p) \exp\left(2\pi j \frac{p}{h} x\right) dp, \\ \varphi^{(p)}(p) &= \langle p | \varphi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle p | x \rangle dx \langle x | \varphi \rangle = \frac{1}{\sqrt{h}} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^{(x)}(x) \exp\left(-2\pi j \frac{p}{h} x\right) dx. \end{aligned} \quad (3.50)$$

Die WDA $\varphi^{(x)}(x)$, $\varphi^{(p)}(p)$ sind ein Fourierpaar.

3.3 Schrödingergleichung. Harmonischer Oszillator

Für einen längs der x -Achse in $-\infty < x < \infty$ verschieblichen Massenpunkt sei das Eigenwertproblem des Energieoperators \underline{H} zu lösen (abweichend von der Bezeichnungsweise von Gl. 2.67 werden die Eigenkets aus historischen Gründen mit $|\psi_n\rangle$, die Eigenwerte durch E_n bezeichnet)

$$\underline{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle. \quad (3.51)$$

Die klassische Hamiltonfunktion (Gesamtenergie) eines im Potential $V(x)$ bewegten Massenpunktes der Masse m lautet

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + V(x). \quad (3.52)$$

Der Hamiltonoperator resultiert, wenn man x , p durch hermitesche Operatoren mit dem Kommutator Gl. 3.28 ersetzt.

Die Funktion $\langle x | \psi_n \rangle = \psi_n(x)$ ist somit die WDA dafür, bei dem System mit genau bekannter Energie E_n (entsprechend dem Eigenket $|\psi_n\rangle$) bei einer Ortsmessung den Massenpunkt an der Stelle x anzutreffen.

Aus Gl. 3.51 folgt mit Gl. 3.52 und Gl. 3.44

$$\begin{aligned} \langle x | H(\underline{x}, \underline{p}) | \psi_n \rangle &= E_n \langle x | \psi_n \rangle = \left\langle x \left| \frac{p^2}{2m} + V(\underline{x}) \right| \psi_n \right\rangle \\ &= \left[\frac{p_{\text{op}}^2}{2m} + V(x_{\text{op}}) \right] \psi_n(x) = \left[\frac{1}{2m} \left(-j\hbar \frac{d}{dx} \right)^2 + V(x) \right] \psi_n(x) = E_n \psi_n(x), \end{aligned} \quad (3.53)$$

und daraus die stationäre (zeitfreie) Schrödingergleichung für die sogenannte Schrödingerfunktion $\psi_n(x)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_n(x)}{dx^2} + [V(x) - E_n]\psi_n(x) = 0, \quad (3.54)$$

$$\langle \psi_n | \psi_n \rangle = 1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \psi_n | x \rangle dx \langle x | \psi_n \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n(x)|^2 dx.$$

Lösungen von Gl. 3.54 existieren für ganz bestimmte Werte von E_n (Eigenwerte des Energieoperators).

Für einen harmonischen Oszillator ist die potentielle Energie

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2x^2, \quad \omega^2 = \frac{k}{m}, \quad (3.55)$$

wobei k die Federkonstante bedeutet. Die Schrödingerfunktion genügt daher der Differentialgleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_n(x)}{dx^2} + \left(\frac{1}{2}m\omega^2x^2 - E_n\right)\psi_n(x) = 0, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n(x)|^2 dx = 1. \quad (3.56)$$

Es läßt sich zeigen, daß Lösungen für

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.57)$$

existieren. Energie kommt in Portionen $\hbar\omega$, die in einem Oszillator nicht unterscheidbar sind (n Portionen, man kann nicht von der ersten, zweiten ... Portion sprechen).

Die niedrigste Energie $E_0 = \hbar\omega/2$ (die Nullpunktsenergie) kann dem Oszillator nicht entzogen werden. Sie ist eine Folge der Unschärferelation (die Energie $E = 0$ hätte ein Oszillator, der an der Stelle $x = 0$ mit dem Impuls $p = 0$ sitzt: Diese Aussage ist wegen der Unschärferelation nicht möglich).

Im Zustand $|\psi_0\rangle$ ist die WDA

$$\psi_0(x) = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right), \quad (3.58)$$

wie man durch Einsetzen in Gl. 3.56 leicht verifiziert. Die damit berechneten Erwartungswerte von x , p stimmen mit der klassischen Vorstellung eines in Ruhe befindlichen Oszillators überein:

$$\begin{aligned} \langle \underline{x} \rangle &= \langle \psi_0 | \underline{x} | \psi_0 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \psi_0 | x \rangle dx \langle x | \underline{x} | \psi_0 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0^*(x) x_{\text{op}} \psi_0(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} x |\psi_0(x)|^2 dx = 0 \\ \langle \underline{p} \rangle &= \langle \psi_0 | \underline{p} | \psi_0 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \psi_0 | x \rangle dx \langle x | \underline{p} | \psi_0 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0^*(x) p_{\text{op}} \psi_0(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0^*(x) \left[-j\hbar \frac{d\psi_0(x)}{dx} \right] dx = 0. \end{aligned} \quad (3.59)$$

Für die Varianzen berechnet man analog

$$\left. \begin{aligned} \langle \underline{x}^2 \rangle &= (\Delta x)^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} \\ \langle \underline{p}^2 \rangle &= (\Delta p)^2 = \frac{m\hbar\omega}{2} \end{aligned} \right\} \quad \text{d. h.} \quad \Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}. \quad (3.60)$$

Der Grundzustand $|\psi_0\rangle$ des harmonischen Oszillators ist ein Zustand minimaler Unschärfe. Die Energie ist unter Beachtung von Gl. 3.60

$$\begin{aligned} \langle \underline{H} \rangle &= \frac{1}{2m} \langle \underline{p}^2 \rangle + \frac{1}{2} m \omega^2 \langle \underline{x}^2 \rangle \\ &= \frac{(\Delta p)^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 (\Delta x)^2 = \frac{1}{4} \hbar \omega + \frac{1}{4} \hbar \omega = \frac{1}{2} \hbar \omega = E_0. \end{aligned} \quad (3.61)$$

3.4 Das Grundproblem der Dynamik

Experimentell überprüfbare physikalische Aussagen beruhen auf berechneten Wahrscheinlichkeiten (oder Wahrscheinlichkeitsdichten), die als Absolutbetragsquadrate von WA oder WDA berechnet werden.

Die WA (oder WDA), bei einer Messung an einem System im Zustand $|\varphi\rangle$ für eine Observable \underline{A} den Eigenwert λ' zu erhalten, ist durch $\langle \lambda' | \varphi \rangle$ gegeben. Das ist (siehe Abb. 3.3) die Projektion des Zustandskets $|\varphi\rangle$ auf den Ket $|\lambda'\rangle$, der Eigenket des Operators \underline{A} zum Eigenwert λ' ist. Die

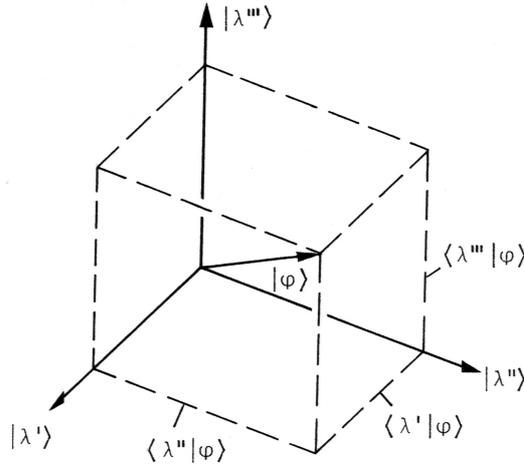


Abbildung 3.3: Basissystem aus Eigenkets λ einer Observablen \underline{A} . Die Wahrscheinlichkeitsamplituden $\langle \lambda | \varphi \rangle$ sind die Projektionen des Zustandskets $|\varphi\rangle$ auf die $|\lambda\rangle$ -Achsen des Basissystems (Λ -Darstellung)

Gesamtheit der Eigenkets bildet einen vollständigen und orthonormierten Satz von Basisvektoren,

$$\underline{A}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle, \quad \int_{\lambda} |\lambda\rangle d\lambda \langle \lambda| = \underline{I}, \quad \langle \lambda' | \lambda'' \rangle = \delta(\lambda', \lambda''). \quad (3.62)$$

„Dynamik“ bedeutet, daß sich die Projektionen von $|\varphi\rangle$ auf die Basisachsen zeitlich ändern: Sie kann daher durch eine Relativbewegung (Rotation) zwischen Zustandsket und Basis erfaßt werden. Die Zeitabhängigkeit kann in Quantensystemen (bei gleicher Relativbewegung zwischen Zustandsket und Basis) daher durch eine der nachstehend kurz beschriebenen Methoden erfaßt werden:

- Im Heisenbergbild ist der Zustandsket $|\varphi_H\rangle$ raumfest. Die Operatoren, welche die zur Definition von Basissystemen geeigneten Observablen beschreiben, sind zeitabhängig, haben zeitabhängige Eigenkets, aber zeitunabhängige Eigenwerte (der Index „H“ bedeutet im folgenden: Heisenbergbild):

$$\begin{aligned} \underline{\Lambda}_H(t)|\lambda_H(t)\rangle &= \lambda|\lambda_H(t)\rangle, \\ \int_{\lambda} |\lambda_H(t)\rangle d\lambda \langle \lambda_H(t)| &= \underline{I}, \quad \langle \lambda'_H(t)|\lambda''_H(t)\rangle = \delta(\lambda', \lambda''). \end{aligned} \quad (3.63)$$

Zeitunabhängige Eigenwerte (Ableitung siehe Abschn. A.3) haben nur sogenannte nicht explizit zeitabhängige Observable (sie werden zum Unterschied von explizit zeitabhängigen Observablen $\underline{L}(t)$ mit $\underline{\Lambda}(t)$ bezeichnet). Unter expliziter Zeitabhängigkeit in einem System versteht man eine solche, welche durch eine von außerhalb des Systems kommende Steuerung verursacht wird. Beispiele dafür sind: Ein Pendel, dessen Länge nach einem festen Programm zeitabhängig geändert wird; eine Federkonstante oder eine Masse, die durch einen „Zauberer“ zeitabhängig verändert wird; ein Wasserstoffatom, bei dem die Größe der Elementarladung durch Zauberkraft geändert wird. Gerade im letzten Fall ist einzusehen, daß dadurch auch die Energieniveaus des Atoms geändert würden (und damit wären die Eigenwerte des Energieoperators für dieses „seltsame“ Wasserstoffatom ebenfalls zeitabhängig). Für Observable $\underline{\Lambda}$, die nicht explizit zeitabhängig sind, ändert sich dagegen das Eigenwertspektrum (und damit das Spektrum der möglichen Meßwerte) nicht.

- Das Schrödingerbild betrachtet die Basisachsen als raumfest, der Zustandsket $|\varphi_S(t)\rangle$ bewegt sich. Wenn die Basisachsen (als Eigenkets einer nicht explizit zeitabhängigen Observablen $\underline{\Lambda}$) zeitlich konstante Lage haben sollen, müssen diese Operatoren im Schrödingerbild (Index „S“) selbst zeitunabhängig sein; die Basis liegt fest durch

$$\begin{aligned} \underline{\Lambda}_S|\lambda_S\rangle &= \lambda|\lambda_S\rangle, \\ \int_{\lambda} |\lambda_S\rangle d\lambda \langle \lambda_S| &= \underline{I}, \quad \langle \lambda'_S|\lambda''_S\rangle = \delta(\lambda', \lambda''). \end{aligned} \quad (3.64)$$

Selbstverständlich sind die Eigenwertspektren von $\underline{\Lambda}_H(t)$ und $\underline{\Lambda}_S$ identisch. Wenn ein Operator, der eine Observable repräsentiert, im Schrödingerbild zeitabhängig ist, dann ist diese Zeitabhängigkeit durch eine explizite Zeitabhängigkeit verursacht. $|\varphi_S(t)\rangle$, der Zustandsket, ist zeitabhängig.

- Im Wechselwirkungsbild bewegt sich sowohl das Basissystem als auch der Zustandsket. Das kann für die mathematische Behandlung von zeitabhängigen Problemen mit den Methoden der Störungsrechnung zweckmäßig sein, obwohl vordergründig diese Betrachtungsweise im Vergleich zum Schrödingerbild oder Heisenbergbild komplizierter erscheint.

Aus Abb. 3.3 ist aber klar, daß die WA (oder WDA) unabhängig vom verwendeten Bild sein müssen, ebenso Erwartungswerte

$$\varphi(\lambda, t) = \langle \lambda_H(t)|\varphi_H\rangle = \langle \lambda_S|\varphi_S(t)\rangle, \quad \langle \underline{L}_H(t)\rangle = \langle \underline{L}_S(t)\rangle. \quad (3.65)$$

$\varphi(\lambda, t)$ ist die WA (oder WDA) dafür, bei Messung der Observablen $\underline{\Lambda}$ am System im Zustand $|\varphi\rangle$ zum Zeitpunkt t den Meßwert λ zu erhalten.

3.5 Das Heisenbergbild

Der Grundgedanke ist folgender: Die klassischen Bewegungsgleichungen der physikalischen Größen werden als Operatorengleichungen für die Observablen interpretiert; die Lösungen für nicht explizit

zeitabhängige Observable $\underline{\Lambda}_H(t)$ werden zur Konstruktion einer Basis $|\lambda_H(t)\rangle$ im Ket-Raum gemäß Gl. 3.63 verwendet.

Zur Darlegung des Prinzips wird ein System mit einem Freiheitsgrad betrachtet. Die (generalisierte) Koordinate sei x , der dazu kanonisch konjugierte Impuls sei p (siehe auch Abschn. A.4 für eine kurze Wiederholung von Lagrange-Funktion und Hamiltonfunktion).

Jede physikalische Größe L kann somit als Funktion von $x(t), p(t)$ und einer allfälligen expliziten Zeitabhängigkeit t ausgedrückt werden. Das gilt auch für die Hamiltonfunktion H , welche in einfachen Fällen die Bedeutung der Gesamtenergie besitzt:

$$\begin{array}{ll}
 x(t) & \text{generalisierte Koordinate,} \\
 p(t) & \text{kanonisch konjugierter Impuls,} \\
 L(x(t), p(t), t) & \text{explizit zeitabhängige Größe,} \\
 \Lambda(x(t), p(t)) & \text{nicht explizit zeitabhängige Größe,} \\
 H(x(t), p(t), t) & \text{Hamiltonfunktion.}
 \end{array} \tag{3.66}$$

Für zwei Funktionen $F(x, p, t)$ und $G(x, p, t)$ wird eine sogenannte Poissonklammer durch folgenden Ausdruck definiert:

$$[F, G] = \frac{\partial F}{\partial x} \frac{\partial G}{\partial p} - \frac{\partial F}{\partial p} \frac{\partial G}{\partial x}. \tag{3.67}$$

Unter Verwendung dieser Definition erhält man die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen

$$\begin{aligned}
 \frac{dx}{dt} &= \dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} = [x, H] \\
 \frac{dp}{dt} &= \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} = [p, H] \\
 \frac{dL}{dt} &= \frac{\partial L}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial L}{\partial p} \frac{dp}{dt} + \frac{\partial L}{\partial t} = \frac{\partial L}{\partial x} \frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial L}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial x} + \frac{\partial L}{\partial t} = [L, H] + \frac{\partial L}{\partial t} \\
 \frac{d\Lambda}{dt} &= \frac{\partial \Lambda}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial \Lambda}{\partial p} \frac{dp}{dt} = \frac{\partial \Lambda}{\partial x} \frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial \Lambda}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial x} = [\Lambda, H] \\
 \frac{dH}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial t}.
 \end{aligned} \tag{3.68}$$

Ist H nicht explizit zeitabhängig, dann ist die Hamiltonfunktion konstant.

Der Übergang zur Quantentheorie erfolgt dadurch, daß man $x(t), p(t)$ in Gl. 3.66 als hermitesche Operatoren $\underline{x}_H(t), \underline{p}_H(t)$ interpretiert, welche die Vertauschungsrelation Gl. 3.28 erfüllen. Wegen Gl. 3.29 gilt dann auch

$$\frac{\partial \underline{H}_H}{\partial \underline{p}_H} = \frac{1}{j\hbar} [\underline{x}_H, \underline{H}_H], \quad -\frac{\partial \underline{H}_H}{\partial \underline{x}_H} = \frac{1}{j\hbar} [\underline{p}_H, \underline{H}_H]. \tag{3.69}$$

Die Schreibweise \underline{H}_H ist die Abkürzung für $\underline{H}_H(t) = H(\underline{x}_H(t), \underline{p}_H(t), t)$. Die ersten beiden Bewegungsgleichungen von Gl. 3.68 lauten somit

$$\begin{aligned}
 \frac{d\underline{x}_H}{dt} &= \frac{\partial \underline{H}_H}{\partial \underline{p}_H} = \frac{1}{j\hbar} [\underline{x}_H, \underline{H}_H], \\
 \frac{d\underline{p}_H}{dt} &= -\frac{\partial \underline{H}_H}{\partial \underline{x}_H} = \frac{1}{j\hbar} [\underline{p}_H, \underline{H}_H].
 \end{aligned} \tag{3.70}$$

Die Übersetzung der Gleichung für dL/dt bereitet Schwierigkeiten: Es kommen zwei Summanden vor, die aus Produkten bestehen: Für klassische Größen ist die Reihenfolge der Terme in den Produkten beliebig, aber die entsprechenden Operatoren sind nicht vertauschbar, und somit ist der Übergang nicht eindeutig.

Beachtet man dagegen, daß beim Übergang zur Quantentheorie, siehe Gl. 3.70, der klassischen Poissonklammer in der Quantentheorie ein Kommutator korrespondiert,

$$[x, H] \quad (\text{klassisch}) \quad \longrightarrow \quad \frac{1}{j\hbar} [x_H, H_H] \quad (\text{quantenmechanisch}), \quad (3.71)$$

so kann man versuchen, diese Korrespondenz auch in den folgenden Gleichungen anzuwenden (damit berechnete Werte stimmen tatsächlich mit gemessenen Werten überein), d. h.:

$$\begin{aligned} \frac{dL_H}{dt} &= \frac{1}{j\hbar} [L_H, H_H] + \frac{\partial L_H}{\partial t}, \\ \frac{d\Lambda_H}{dt} &= \frac{1}{j\hbar} [\Lambda_H, H_H], \\ \frac{dH_H}{dt} &= \frac{\partial H_H}{\partial t}. \end{aligned} \quad (3.72)$$

Sind die Lösungen $\Lambda_H(t)$ bekannt, so lassen sich die entsprechenden Eigenwertprobleme lösen und Darstellungen (Basissysteme) im Ket-Raum gemäß Gl. 3.63 finden.

Wie in Abschn. A.3 gezeigt wird, könnte man die zeitabhängigen Eigenkets $|\lambda_H(t)\rangle$ auch als Lösungen von

$$\frac{d|\lambda_H(t)\rangle}{dt} = -\frac{1}{j\hbar} H(x_H(t), p_H(t), t) |\lambda_H(t)\rangle \quad (3.73)$$

erhalten.

Die Ausdrücke für Wahrscheinlichkeiten und Erwartungswerte erhält man aus Gl. 2.118, indem man beachtet, daß der statistische Operator $\underline{\rho}_H$ im Heisenbergbild zeitunabhängig ist (er setzt sich ja gemäß Gl. 2.117 aus einer Auswahl von zeitunabhängigen Zustandskets $|\varphi_{H\alpha}\rangle$ zusammen), und daß die Projektoren auf Eigenräume von Eigenwerten wegen der Zeitabhängigkeit der Basiskets $|\lambda_H(t)\rangle$ natürlich ebenfalls zeitabhängig sind:

$$\begin{aligned} w(\lambda, t) &= \text{Sp} \{ \underline{\rho}_H P_{\text{ER}(\lambda)}(t) \}, \\ \langle f(L_H(t)) \rangle &= \text{Sp} \{ \underline{\rho}_H f(L_H(t)) \}. \end{aligned} \quad (3.74)$$

3.6 Ehrenfest'sches Theorem. Die Energie-Zeit-Unschärferelation

Die zeitliche Änderung des Erwartungswertes ist der Erwartungswert jenes Operators, welcher der zeitlichen Änderung einer Observablen korrespondiert: Dieser Umstand wird als Ehrenfest'sches Theorem bezeichnet. Die Erwartungswerte der Operatoren stimmen mit den klassischen Größen überein (in Gl. 3.59 wurde z. B. gezeigt, daß die Erwartungswerte $\langle \underline{x} \rangle = 0$, $\langle \underline{p} \rangle = 0$, mit den klassischen Werten $x = 0$, $p = 0$ eines in Ruhe befindlichen Oszillators übereinstimmen).

Nach Gl. 3.72 wird mit $\overset{\circ}{\Lambda}_H$ jener Operator bezeichnet, welcher der zeitlichen Änderung der Observablen Λ_H korrespondiert (diese Bezeichnung resultiert in Anlehnung an die klassische Bezeichnung $\dot{\Lambda}$ für zeitliche Änderungen einer klassischen Größe $\Lambda(t)$):

$$\overset{\circ}{\Lambda}_H = \frac{1}{j\hbar} [\Lambda_H, H_H]. \quad (3.75)$$

„Zufällig“ ist $\overset{\circ}{\Lambda}_H$ im Heisenbergbild identisch mit der Ableitung $d\Lambda_H/dt$.

In Anwendung von Gl. 3.74 folgt mit Gl. 3.72

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \Lambda_H(t) \rangle &= \frac{d}{dt} \text{Sp} \{ \underline{\rho}_H \Lambda_H(t) \} = \text{Sp} \{ \underline{\rho}_H \frac{d\Lambda_H(t)}{dt} \} \\ &= \text{Sp} \{ \underline{\rho}_H \cdot \frac{1}{j\hbar} [\Lambda_H, H_H] \} = \text{Sp} \{ \underline{\rho}_H \overset{\circ}{\Lambda}_H \} = \langle \overset{\circ}{\Lambda}_H \rangle. \end{aligned} \quad (3.76)$$

Damit ist das Ehrenfestsche Theorem bewiesen.

Das bedeutet natürlich nicht, daß klassische und quantenmechanische Vorhersagen übereinstimmen. Identifiziert man klassische Werte mit quantenmechanischen Erwartungswerten, so liefert die klassische Gleichung z. B.

$$\frac{dx(t)}{dt} = \frac{\partial H(x(t), p(t), t)}{\partial p(t)} = \frac{d}{dt} \langle \underline{x}_H(t) \rangle = \frac{\partial H(\langle \underline{x}_H(t) \rangle, \langle \underline{p}_H(t) \rangle, t)}{\partial \langle \underline{p}_H(t) \rangle}. \quad (3.77)$$

Die quantenmechanische Gleichung, siehe Gl. 3.70, liefert dagegen

$$\left\langle \frac{d\underline{x}_H(t)}{dt} \right\rangle = \frac{d}{dt} \langle \underline{x}_H(t) \rangle = \left\langle \frac{\partial H(\underline{x}_H(t), \underline{p}_H(t), t)}{\partial \underline{p}_H(t)} \right\rangle \neq \frac{\partial H(\langle \underline{x}_H(t) \rangle, \langle \underline{p}_H(t) \rangle, t)}{\partial \langle \underline{p}_H(t) \rangle}. \quad (3.78)$$

Für eine Observable $\underline{\Lambda}(t)$ wird eine charakteristische Zeit τ_Λ dadurch definiert, daß sich in der Zeit τ_Λ der Erwartungswert der Observablen gerade um eine Standardabweichung $\Delta\Lambda$ (Definition in Gl. 2.102) verschiebt; mit Gl. 3.76 folgt

$$\Delta\Lambda = \frac{d\langle \underline{\Lambda}_H(t) \rangle}{dt} \cdot \tau_\Lambda = \langle \overset{\circ}{\underline{\Lambda}}_H \rangle \tau_\Lambda. \quad (3.79)$$

$\langle \underline{\Lambda}_H(t) \rangle$ ist eine bildunabhängige physikalische Aussage, daher wäre der Index „H“ am Operator nicht nötig.

In Anwendung von Gl. 2.103 folgt aber aus Gl. 3.75 mit Gl. 3.79 die Unschärferelation

$$\Delta\Lambda \cdot \Delta H \geq \frac{1}{2} |\langle \hbar \overset{\circ}{\underline{\Lambda}}_H \rangle| = \frac{\hbar \Delta\Lambda}{2 \tau_\Lambda} \quad (3.80)$$

und somit

$$\tau_\Lambda \Delta H \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (3.81)$$

Diese Beziehung wird als „Energie-Zeit-Unschärferelation“ bezeichnet, obwohl die Zeit in der Quantentheorie die Rolle eines Parameters spielt und nicht durch einen hermiteschen Operator als Observable definiert wurde.

Gl. 3.81 besagt, daß die Kenntnis der Energie eines Systems mit einer Unsicherheit ΔH behaftet ist, welche durch die Zeiten τ_Λ festgelegt werden, mit denen sich die Erwartungswerte einer Observablen $\underline{\Lambda}$ gerade um eine Standardabweichung $\Delta\Lambda$ ändern.

In grober Abschätzung kann man z. B. sofort sagen: Bei einem Atom im Grundzustand (es ändert sich nichts) ist die Energie genau bekannt ($\Delta H = 0$, $\tau_\Lambda = \infty$). Geht ein angeregtes Atom unter Photonenemission innerhalb einer Zeit τ (τ ist die Lebensdauer) in den Grundzustand über, dann ist die Energieunsicherheit des angeregten Atoms von der Größenordnung $\Delta H \approx h/\tau$, und damit ist h/τ auch die Energieunsicherheit $\Delta H = h\Delta f$ des emittierten Photons: Viele Atome emittieren daher eine Linie der Linienbreite $\Delta f \approx 1/\tau$.

3.7 Das Schrödingerbild

Im Schrödingerbild (siehe Abschn. 3.4) wird die Basis als raumfest betrachtet, die Observablen (deren Eigenkets als Basisvektoren dienen) müssen daher zeitunabhängig sein (explizit zeitabhängige Observable haben auch zeitabhängige Eigenwerte und werden nicht zur Konstruktion einer Basis verwendet).

An die Stelle der Bewegungsgleichungen Gl. 3.70, Gl. 3.72, Gl. 3.73 treten daher die Beziehungen

$$\frac{d\underline{x}_S}{dt} = \frac{d\underline{p}_S}{dt} = \frac{d\underline{\Lambda}_S}{dt} = 0, \quad \frac{d\underline{L}_S}{dt} = \frac{\partial \underline{L}_S}{\partial t}, \quad \frac{d\underline{H}_S}{dt} = \frac{\partial \underline{H}_S}{\partial t}, \quad \frac{d|\lambda_S\rangle}{dt} = 0. \quad (3.82)$$

Zeitliche Änderungen einer Observablen $\underline{\Lambda}_S$ werden mit dem in Gl. 3.75 definierten Operator berechnet, im Schrödingerbild mit

$$\overset{\circ}{\underline{\Lambda}}_S = \frac{1}{j\hbar} [\underline{\Lambda}_S, \underline{H}_S]. \quad (3.83)$$

Die Zeitabhängigkeit der physikalischen Größen wird durch einen zeitabhängigen Schrödingerket $|\varphi_S(t)\rangle$ erfaßt, für den eine Bewegungsgleichung gefunden werden muß.

Nimmt man an, daß für $t < 0$ das Heisenbergbild gilt, für $t \geq 0$ das Schrödingerbild (zum Zeitpunkt $t = 0$ hört die Bewegung der Basis auf, und es beginnt sich für $t > 0$ der bis dahin raumfeste Zustandsket zu bewegen), so läßt sich zu jedem Zeitpunkt das Heisenbergbild mit einem unitären Operator $\underline{U}(t)$ in das Schrödingerbild umrechnen. Man setzt an:

$$\begin{aligned} |\varphi_H\rangle &= \underline{U}(t)|\varphi_S(t)\rangle, \\ |\lambda_H(t)\rangle &= \underline{U}(t)|\lambda_S\rangle, \\ \langle\varphi_H|\varphi_H\rangle &= \langle\varphi_S(t)|\varphi_S(t)\rangle = \langle\varphi_S(t)|\underline{U}^\dagger(t)\underline{U}(t)|\varphi_S(t)\rangle, \\ \text{d. h. } \underline{U}^\dagger(t)\underline{U}(t) &= \underline{U}(t)\underline{U}^\dagger(t) = \underline{I}, \quad \underline{U}(0) = \underline{I}. \end{aligned} \quad (3.84)$$

Aus der Eigenwertgleichung für $\underline{\Lambda}_H(t)$ folgt in Anwendung von Gl. 3.84 auch die Transformation der Operatoren:

$$\begin{aligned} \underline{\Lambda}_H(t)|\lambda_H(t)\rangle &= \lambda|\lambda_H(t)\rangle, \\ \underline{U}^\dagger(t)\underline{\Lambda}_H(t)\underline{U}(t)\underline{U}^\dagger(t)|\lambda_H(t)\rangle &= \lambda\underline{U}^\dagger(t)|\lambda_H(t)\rangle, \\ \underline{\Lambda}_S|\lambda_S\rangle &= \lambda|\lambda_S\rangle, \\ \text{d. h. } \underline{\Lambda}_S &= \underline{U}^\dagger(t)\underline{\Lambda}_H(t)\underline{U}(t). \end{aligned} \quad (3.85)$$

Die Bewegungsgleichung für den Transformationsoperator $\underline{U}(t)$ folgt z. B. aus Gl. 3.73 unter Beachtung von Gl. 3.84 und Gl. 3.85

$$\begin{aligned} \frac{d|\lambda_H(t)\rangle}{dt} &= \frac{d\underline{U}(t)}{dt}|\lambda_S\rangle = -\frac{1}{j\hbar}H(\underline{x}_H(t), \underline{p}_H(t), t)\underline{U}(t)|\lambda_S\rangle, \\ \left[\frac{d\underline{U}(t)}{dt} + \frac{1}{j\hbar}\underline{H}_H(t)\underline{U}(t) \right] |\lambda_S\rangle &= 0 \quad \longrightarrow \quad \frac{d\underline{U}(t)}{dt} = -\frac{1}{j\hbar}\underline{H}_H(t)\underline{U}(t). \end{aligned} \quad (3.86)$$

Für einen nicht explizit zeitabhängigen Hamiltonoperator ist $\underline{H}_H = \underline{H}_S = \text{const}$ und die Lösung lautet

$$\underline{U}(t) = \exp\left(-\frac{\underline{H}t}{j\hbar}\right), \quad \underline{U}(t)\underline{U}^\dagger(t) = \underline{U}^\dagger(t)\underline{U}(t) = \underline{I}, \quad \text{da } \underline{H} = \underline{H}^\dagger. \quad (3.87)$$

Die gesuchte Gleichung für den Schrödingerket folgt aus Gl. 3.84. Man beachte, daß als Folge von Gl. 3.85 und dem Umstand, daß Operatorfunktionen in Potenzreihen entwickelt werden können, die Schreibweise

$$\begin{aligned} \underline{U}^\dagger(t)\underline{L}_H(t)\underline{U}(t) &= \underline{U}^\dagger(t)L(\underline{x}_H(t), \underline{p}_H(t), t)\underline{U}(t) \\ &= L(\underline{U}^\dagger(t)\underline{x}_H(t)\underline{U}(t), \underline{U}^\dagger(t)\underline{p}_H(t)\underline{U}(t), t) \\ &= L(\underline{x}_S, \underline{p}_S, t) = \underline{L}_S(t) \end{aligned} \quad (3.88)$$

gilt. Somit folgt aus Gl. 3.84 mit Gl. 3.86

$$\begin{aligned} \frac{d|\varphi_H\rangle}{dt} &= 0 = \frac{d\underline{U}(t)}{dt}|\varphi_S(t)\rangle + \underline{U}(t)\frac{d|\varphi_S(t)\rangle}{dt} \\ &= -\frac{1}{j\hbar}\underline{H}_H(t)\underline{U}(t)|\varphi_S(t)\rangle + \underline{U}(t)\frac{d|\varphi_S(t)\rangle}{dt} \end{aligned} \quad (3.89)$$

und unter Beachtung von Gl. 3.88 die gesuchte Gleichung

$$\frac{d|\varphi_S(t)\rangle}{dt} = \frac{1}{j\hbar} \underline{H}_S(t) |\varphi_S(t)\rangle = \frac{1}{j\hbar} H(\underline{x}_S, \underline{p}_S, t) |\varphi_S(t)\rangle. \quad (3.90)$$

Da im Schrödingerbild der Zustandsket $|\varphi_S(t)\rangle$ zeitabhängig ist, ist nach Gl. 2.118 auch der statistische Operator $\rho_S(t)$ zeitabhängig (er besteht aus einer Auswahl zeitabhängiger Zustandskets $|\varphi_{S\alpha}(t)\rangle$). Die Schrödingeroperatoren $\underline{L}_S(t)$ für Observable sind nach Gl. 3.82 nur dann zeitabhängig, wenn sie eine explizite Zeitabhängigkeit besitzen. Wahrscheinlichkeiten und Erwartungswerte berechnen sich in Anwendung von Gl. 2.119 aus (Projektoren auf Basiskets $|\lambda_S\rangle$ sind zeitunabhängig!)

$$\left. \begin{aligned} w(\lambda, t) &= \text{Sp}\{\rho_S(t) P_{\text{ER}(\lambda)}\}, \\ \langle f(\underline{L}_S(t)) \rangle &= \text{Sp}\{\rho_S(t) f(\underline{L}_S(t))\}, \end{aligned} \right\} \frac{d\rho_S(t)}{dt} = -\frac{1}{j\hbar} [\rho_S(t), \underline{H}_S(t)]. \quad (3.91)$$

Die nach Gl. 3.74 und Gl. 3.91 berechneten Werte stimmen natürlich überein, wie man mit der Transformation von Gl. 3.88 und Beachtung von Gl. 2.113 leicht nachweist.

3.8 Die Schrödingergleichung für die zeitabhängige Wahrscheinlichkeitsamplitude

Wegen der Bildunabhängigkeit der in Gl. 3.65 definierten zeitabhängigen WA (oder WDA) ist es zweckmäßig, eine Bewegungsgleichung für $\varphi(\lambda, t)$ zu entwickeln. Unter Verwendung von Gl. 3.90 und der Schreibweise von Gl. 2.58–Gl. 2.60 erhält man

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi(\lambda, t)}{\partial t} &= \frac{d}{dt} \langle \lambda_S | \varphi_S(t) \rangle = \langle \lambda_S | \frac{d|\varphi_S(t)\rangle}{dt} = \frac{1}{j\hbar} \langle \lambda_S | H(\underline{x}_S, \underline{p}_S, t) | \varphi_S(t) \rangle \\ &= \frac{1}{j\hbar} \int_{\lambda'} \langle \lambda_S | H(\underline{x}_S, \underline{p}_S, t) | \lambda'_S \rangle d\lambda' \langle \lambda'_S | \varphi_S(t) \rangle \\ &= \frac{1}{j\hbar} \int_{\lambda'} H(\lambda, \lambda', t) \varphi(\lambda', t) d\lambda' \\ &= \frac{1}{j\hbar} H(x_{\text{op}}^{(\lambda)}, p_{\text{op}}^{(\lambda)}, t) \varphi(\lambda, t). \end{aligned} \quad (3.92)$$

$x_{\text{op}}^{(\lambda)}, p_{\text{op}}^{(\lambda)}$ sind analog zu Gl. 2.59 und Gl. 2.60 für die λ -Darstellung definiert:

$$L_{\text{op}}^{(\lambda)} \varphi(\lambda) = L_{\text{op}}^{(\lambda)} \langle \lambda | \varphi \rangle = \langle \lambda | \underline{L} | \varphi \rangle = \int_{\lambda'} \langle \lambda | \underline{L} | \lambda' \rangle d\lambda' \langle \lambda' | \varphi \rangle = \int_{\lambda'} L(\lambda, \lambda') \varphi(\lambda') d\lambda'. \quad (3.93)$$

Als Beispiel für eine Lösung dieser Gleichung soll der Massenpunkt im Potential $V(x)$ von Abschn. 3.3 betrachtet werden. Mit der Wahl $\lambda = x$ erhält man eine Differentialgleichung für $\varphi(x, t)$, das ist die WDA dafür, bei einer Messung des Ortes diesen Massenpunkt (der durch den Ket $|\varphi\rangle$ beschrieben wird) an der Stelle x zu finden. Für die x -Darstellung gilt mit Gl. 3.53–Gl. 3.56

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi(x, t)}{\partial t} &= \frac{1}{j\hbar} H(x_{\text{op}}^{(x)}, p_{\text{op}}^{(x)}, t) \varphi(x, t) \\ &= \frac{1}{j\hbar} \left[\frac{(p_{\text{op}}^{(x)})^2}{2m} + V(x_{\text{op}}^{(x)}) \right] \varphi(x, t) = \frac{1}{j\hbar} \left[\frac{1}{2m} \left(-j\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 + V(x) \right] \varphi(x, t) \\ &= \frac{1}{j\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \varphi(x, t), \\ \text{Nebenbedingung: } &\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(x, t)|^2 dx = 1. \end{aligned} \quad (3.94)$$

Eine Lösung dieser partiellen Differentialgleichung erhält man mit einem Separationsansatz (Bernoulli-Ansatz)

$$\varphi(x, t) = \sum_n f_n(t) \psi_n(x). \quad (3.95)$$

Durch Einsetzen in die Differentialgleichung folgt

$$\frac{j\hbar}{f_n(t)} \frac{df_n(t)}{dt} = \frac{\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right) \psi_n(x)}{\psi_n(x)} = E_n, \quad (3.96)$$

wobei E_n eine Separationskonstante bedeutet. Die Lösungsbausteine müssen daher folgende Gleichungen erfüllen:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_n(x)}{dx^2} + [V(x) - E_n] \psi_n(x) &= 0, & \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n(x)|^2 dx &= 1, \\ f_n(t) &= \exp\left(-j \frac{E_n t}{\hbar}\right). \end{aligned} \quad (3.97)$$

Die Werte E_n haben (man vergleiche mit Gl. 3.54) die Bedeutung der Eigenwerte des Energieoperators. Die allgemeinste Lösung ist somit

$$\varphi(x, t) = \sum_n c_n \exp\left(-j \frac{E_n t}{\hbar}\right) \psi_n(x). \quad (3.98)$$

Kennt man die Energie des Massenpunktes genau (E_n ist gegeben), so ist die WDA einer Lokalisierung durch

$$\varphi(x, t) = \exp\left(-j \frac{E_n t}{\hbar}\right) \psi_n(x) \quad (3.99)$$

gegeben. Die Wahrscheinlichkeitsdichte, den Massenpunkt an einer Stelle x zu lokalisieren, stellt sich daher als zeitunabhängig heraus:

$$w(x) = |\varphi(x, t)|^2 = |\psi_n(x)|^2. \quad (3.100)$$

Man nennt die Zustände bekannter Energie daher auch stationäre Zustände.

Speziell für einen harmonischen Oszillator mit den Energieeigenwerten von Gl. 3.57 erhält man für genau bekannte Energie E_n

$$\varphi(x, t) = \exp\left(-j \frac{\omega t}{2}\right) \exp(-jn\omega t) \psi_n(x). \quad (3.101)$$

Anhang A

Ableitungen

A.1 Ableitung der Unschärferelation

Für beliebige Kets $|\varphi\rangle, |\psi\rangle$ gilt die Schwarzsche Ungleichung

$$\langle\varphi|\varphi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\geq|\langle\varphi|\psi\rangle|^2. \quad (\text{A.1})$$

Für die Operatoren

$$\underline{A}=\underline{L}-\langle\underline{L}\rangle\underline{I}, \quad \underline{B}=\underline{M}-\langle\underline{M}\rangle\underline{I} \quad (\text{A.2})$$

gilt wegen Gl. 2.101

$$\begin{aligned} [\underline{L},\underline{M}]&=[\underline{A},\underline{B}]=j\underline{C}, \\ \underline{A}\underline{B}&=\frac{1}{2}[\underline{A},\underline{B}]+\frac{1}{2}(\underline{A}\underline{B}+\underline{B}\underline{A})=\frac{1}{2}j\underline{C}+\frac{1}{2}(\underline{A}\underline{B}+\underline{B}\underline{A}). \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Für $\underline{L}=\underline{L}^\dagger, \underline{M}=\underline{M}^\dagger$ sind auch die Operatoren $\underline{A}, \underline{B}$ hermitesch. Für die Zustände

$$|\varphi\rangle=\underline{A}|\varphi_0\rangle, \quad |\psi\rangle=\underline{B}|\varphi_0\rangle \quad (\text{A.4})$$

folgt aus Gl. A.1 unter Beachtung von Gl. 2.102

$$\begin{aligned} \langle\varphi_0|\underline{A}^2|\varphi_0\rangle\langle\varphi_0|\underline{B}^2|\varphi_0\rangle&=(\Delta L)^2(\Delta M)^2 \\ &\geq\frac{1}{4}|j\langle\varphi_0|\underline{C}|\varphi_0\rangle+\langle\varphi_0|\underline{A}\underline{B}+\underline{B}\underline{A}|\varphi_0\rangle|^2. \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Da Erwartungswerte hermitescher Operatoren reell sind, ist der Term auf der rechten Seite von Gl. A.5 von der Form $|a+jb|^2$, mit a, b reell. Wählt man den Zustand $|\varphi_0\rangle$ so, daß

$$\underline{B}|\varphi_0\rangle=j\underline{A}|\varphi_0\rangle, \quad (\text{A.6})$$

so verschwindet der Term $\langle\varphi_0|\underline{A}\underline{B}+\underline{B}\underline{A}|\varphi_0\rangle$, also erhält man

$$\Delta L\cdot\Delta M\geq\frac{1}{2}|\langle\underline{C}\rangle|. \quad (\text{A.7})$$

A.2 Ableitung einer Vertauschungsrelation

Wie man leicht nachweist, gelten folgende Beziehungen

$$\begin{aligned} [\underline{L}_1\underline{L}_2,\underline{M}]&=\underline{L}_1[\underline{L}_2,\underline{M}]+[\underline{L}_1,\underline{M}]\underline{L}_2 \\ [\underline{M},\underline{L}_1\underline{L}_2]&=\underline{L}_1[\underline{M},\underline{L}_2]+[\underline{M},\underline{L}_1]\underline{L}_2 \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Für einen gegebenen Kommutator

$$[\underline{x}, \underline{p}] = j\hbar I \quad (\text{A.9})$$

weist man unter wiederholter Anwendung von Gl. A.8 nach:

$$\begin{aligned} [\underline{x}, \underline{p}^2] &= [\underline{x}, \underline{p}\underline{p}] = 2j\hbar\underline{p} = j\hbar \frac{\partial}{\partial \underline{p}} \underline{p}^2, \\ [\underline{x}, \underline{p}^n] &= nj\hbar\underline{p}^{n-1} = j\hbar \frac{\partial}{\partial \underline{p}} \underline{p}^n. \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Analog beweist man die Relationen

$$\begin{aligned} [\underline{x}^2, \underline{p}] &= [\underline{x}\underline{x}, \underline{p}] = 2j\hbar\underline{x} = j\hbar \frac{\partial}{\partial \underline{x}} \underline{x}^2, \\ [\underline{x}^n, \underline{p}] &= nj\hbar\underline{x}^{n-1} = j\hbar \frac{\partial}{\partial \underline{x}} \underline{x}^n. \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

Eine beliebige Funktion von \underline{x} , \underline{p} , die eine Observable darstellt, kann in eine Potenzreihe mit Termen der Form $\underline{x}^n \underline{p}^m$ und $\underline{p}^m \underline{x}^n$ entwickelt werden. Unter Anwendung von Gl. A.8, Gl. A.10 folgt

$$[\underline{x}, \underline{x}^n \underline{p}^m] = \underline{x}^n [\underline{x}, \underline{p}^m] + [\underline{x}, \underline{x}^n] \underline{p}^m = \underline{x}^n \cdot j\hbar \frac{\partial}{\partial \underline{p}} \underline{p}^m = j\hbar \frac{\partial}{\partial \underline{p}} (\underline{x}^n \underline{p}^m). \quad (\text{A.12})$$

Ein analoger Beweis gilt für den Kommutator $[\underline{p}^m \underline{x}^n, \underline{p}]$. Damit sind die Beziehungen Gl. 3.29 bewiesen.

A.3 Zeitunabhängige Eigenwerte

Aus der Eigenwertgleichung einer nicht explizit zeitabhängigen Observablen $\underline{\Lambda}$

$$\underline{\Lambda}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle \quad (\text{A.13})$$

folgt nach Differentiation nach der Zeit unter Beachtung von Gl. 3.72

$$\begin{aligned} \frac{d\underline{\Lambda}}{dt}|\lambda\rangle + \underline{\Lambda} \frac{d|\lambda\rangle}{dt} &= \frac{1}{j\hbar} (\underline{\Lambda}\underline{H} - \underline{H}\underline{\Lambda})|\lambda\rangle + \underline{\Lambda} \frac{d|\lambda\rangle}{dt} \\ &= \frac{d\lambda}{dt}|\lambda\rangle + \lambda \frac{d|\lambda\rangle}{dt}. \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

Bildet man die Bracket mit dem Bra $\langle\lambda|$ und verwendet Gl. A.13, so erhält man

$$\begin{aligned} \frac{1}{j\hbar} \langle\lambda|\underline{\Lambda}\underline{H}|\lambda\rangle - \frac{1}{j\hbar} \langle\lambda|\underline{H}\underline{\Lambda}|\lambda\rangle + \langle\lambda|\underline{\Lambda} \frac{d|\lambda\rangle}{dt} &= \frac{d\lambda}{dt} \langle\lambda|\lambda\rangle + \lambda \langle\lambda| \frac{d|\lambda\rangle}{dt}, \\ \frac{1}{j\hbar} \lambda \langle\lambda|\underline{H}|\lambda\rangle - \frac{1}{j\hbar} \lambda \langle\lambda|\underline{H}|\lambda\rangle + \lambda \langle\lambda| \frac{d|\lambda\rangle}{dt} &= \frac{d\lambda}{dt} + \lambda \langle\lambda| \frac{d|\lambda\rangle}{dt} \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

und somit

$$\frac{d\lambda}{dt} = 0. \quad (\text{A.16})$$

Damit ist die Zeitunabhängigkeit der Eigenwerte bewiesen. Aus Gl. A.14 erhält man wegen $d\lambda/dt = 0$ nach Rearrangieren der Terme

$$\begin{aligned} \underline{\Lambda} \left(\frac{1}{j\hbar} \underline{H}|\lambda\rangle + \frac{d|\lambda\rangle}{dt} \right) - \lambda \left(\frac{1}{j\hbar} \underline{H}|\lambda\rangle + \frac{d|\lambda\rangle}{dt} \right) &= 0, \\ (\underline{\Lambda} - \lambda I) \left(\frac{1}{j\hbar} \underline{H}|\lambda\rangle + \frac{d|\lambda\rangle}{dt} \right) &= 0. \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

Daraus folgt die Bewegungsgleichung Gl. 3.73.

A.4 Lagrangefunktion und Hamiltonfunktion

In der Mechanik werden generalisierte Koordinaten x_i ($i = 1, 2, \dots, n$) und generalisierte Geschwindigkeiten $\dot{x}_i = dx_i/dt$ definiert. Die Bewegungsgleichungen lassen sich in der Form

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} - \frac{\partial L}{\partial x_i} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (\text{A.18})$$

schreiben, wobei $L = L(x_i, \dot{x}_i, t)$ die Lagrangefunktion bedeutet, die in einfachen Fällen als die Differenz von kinetischer Energie und potentieller Energie gedeutet werden kann.

Definiert man die zu den Koordinaten x_i kanonisch konjugierten Impulse p_i durch

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i}, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (\text{A.19})$$

so erhält man anstelle von Gl. A.18 die Bewegungsgleichungen

$$\dot{p}_i = \frac{dp_i}{dt} = \frac{\partial L}{\partial x_i}, \quad p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i}, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (\text{A.20})$$

Man definiert eine Hamiltonfunktion $H(x_i, p_i, t)$ durch

$$H(x_i, p_i, t) = \sum_{i=1}^n \dot{x}_i p_i - L(x_i, \dot{x}_i, t). \quad (\text{A.21})$$

Durch Bilden der Differentiale folgt unter Beachtung von Gl. A.20

$$\begin{aligned} dH &= \sum_i \frac{\partial H}{\partial x_i} dx_i + \sum_i \frac{\partial H}{\partial p_i} dp_i + \frac{\partial H}{\partial t} dt \\ &= \sum_i \dot{x}_i dp_i + \sum_i p_i d\dot{x}_i - \sum_i \frac{\partial L}{\partial x_i} dx_i - \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} d\dot{x}_i - \frac{\partial L}{\partial t} dt \\ &= \sum_i \dot{x}_i dp_i - \sum_i \frac{\partial L}{\partial x_i} dx_i - \frac{\partial L}{\partial t} dt + \left(\sum_i p_i d\dot{x}_i - \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} d\dot{x}_i \right) \\ &= - \sum_i \frac{\partial L}{\partial x_i} dx_i + \sum_i \dot{x}_i dp_i - \frac{\partial L}{\partial t} dt \\ &= - \sum_i \dot{p}_i dx_i + \sum_i \dot{x}_i dp_i - \frac{\partial L}{\partial t} dt. \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

Durch Vergleich der ersten und letzten Zeile liest man aus Gl. A.22 ab:

$$\dot{x}_i = \frac{dx_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = \frac{dp_i}{dt} = - \frac{\partial H}{\partial x_i}, \quad \frac{\partial H}{\partial t} = - \frac{\partial L}{\partial t}, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (\text{A.23})$$

In einfachen Fällen hat die Hamiltonfunktion die Bedeutung der Gesamtenergie.

Ein Beispiel aus der Elektrotechnik bietet die Kraft auf eine Punktladung q im Vakuum. Die Bewegungsgleichung für einen Massenpunkt der Masse m und der Ladung q lautet

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \mu_0 \vec{H}), \quad (\text{A.24})$$

wobei \vec{E} und \vec{H} durch das Skalarpotential φ und das Vektorpotential \vec{A} wie folgt ausgedrückt werden:

$$\vec{E} = -\text{grad } \varphi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \quad \mu_0 \vec{H} = \text{rot } \vec{A}. \quad (\text{A.25})$$

Die Lagrangefunktion, aus der man in Anwendung von Gl. A.18 die Bewegungsgleichung Gl. A.24 erhält, lautet

$$L = \frac{1}{2}m\vec{v}^2 - q\varphi + q\vec{A} \cdot \vec{v}, \quad (\text{A.26})$$

wobei die generalisierten Geschwindigkeiten die Komponenten von \vec{v} sind, $\dot{x}_i = v_i$ ($i = 1, 2, 3$). Damit erhält man in Anwendung von Gl. A.19 den kanonischen Impuls

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial v_i} = mv_i + qA_i \quad \longrightarrow \quad \vec{p} = m\vec{v} + q\vec{A}. \quad (\text{A.27})$$

Die Hamiltonfunktion Gl. A.21 ist somit

$$H = \vec{p} \cdot \vec{v} - L = \frac{1}{2}m\vec{v}^2 + q\varphi = \frac{1}{2m}(\vec{p} - q\vec{A})^2 + q\varphi. \quad (\text{A.28})$$

Diese Hamiltonfunktion ist die Grundlage zur Erfassung der quantisierten Wechselwirkung zwischen Ladungen und dem elektromagnetischen Feld (siehe z. B. [19, S.405]).

Anhang B

Übungen und Anwendungen

B.1 Bracketschreibweise und Integralgleichungen

Die Integralgleichung

$$\varphi(x) + u(x) \int_a^b v^*(x') \varphi(x') dx' = w(x) \quad (\text{B.1})$$

ist zu lösen (die Funktionen $u(x)$, $v(x)$ und $w(x)$ sind gegeben).

Man interpretiert die Funktionen als Komponenten von abstrakten Vektoren in einem Basissystem

$$\langle x | x' \rangle = \delta(x - x'), \quad \int_a^b |x \rangle dx \langle x | = \underline{1}, \quad (\text{B.2})$$

und erhält somit anstelle von Gl. B.1

$$\langle x | \varphi \rangle + \langle x | u \rangle \int_a^b \langle v | x' \rangle dx' \langle x' | \varphi \rangle = \langle x | w \rangle \quad (\text{B.3})$$

oder (weil $\langle x |$ sicher nicht der Null-Bra ist, und weil nicht alle Bras $\langle x |$ auf den Ket in der folgenden Zeile orthogonal sein können; ist $v(x)$ reell, gilt $\langle x | v \rangle = \langle v | x \rangle$)

$$|\varphi \rangle + |u \rangle \langle v | \varphi \rangle = |w \rangle. \quad (\text{B.4})$$

Man bildet die Bracket mit $\langle v |$, berechnet $\langle v | \varphi \rangle$, und setzt diesen Ausdruck in Gl. B.4 ein:

$$\langle v | \varphi \rangle = \frac{\langle v | w \rangle}{1 + \langle v | u \rangle}. \quad (\text{B.5})$$

Man beachte: Falls $1 + \langle v | u \rangle = 0$, existiert eine Lösung für $\langle v | \varphi \rangle$ nur dann, falls auch $\langle v | w \rangle = 0$ (in diesem Fall ist $\langle v | \varphi \rangle$ eine beliebige Konstante c). Das Ergebnis lautet

$$\begin{aligned} |\varphi \rangle &= |w \rangle - |u \rangle \frac{\langle v | w \rangle}{1 + \langle v | u \rangle} && \text{für } 1 + \langle v | u \rangle \neq 0, \\ |\varphi \rangle &= |w \rangle - c |u \rangle && c \text{ beliebig, wenn } 1 + \langle v | u \rangle = 0, \quad \langle v | w \rangle = 0. \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Man bildet die Bracket mit $\langle x |$, verwendet die Vollständigkeitsrelation Gl. B.2, und erhält die Lösung der Integralgleichung

$$\begin{aligned} \varphi(x) = w(x) - u(x) \frac{\int_a^b v^*(x)w(x)dx}{1 + \int_a^b v^*(x)u(x)dx} & \quad \text{für } 1 + \int_a^b v^*(x)u(x)dx \neq 0, \\ \varphi(x) = w(x) - cu(x) & \quad \text{für } 1 + \int_a^b v^*(x)u(x)dx = 0, \\ & \quad \text{und } \int_a^b v^*(x)w(x)dx = 0. \end{aligned} \tag{B.7}$$

Nach diesem Rezept lassen sich auch Integralgleichungen folgender Form lösen:

$$\varphi(x) + \sum_i u_i(x) \int_a^b v_i^*(x')\varphi(x')dx' = w(x). \tag{B.8}$$

B.2 Der zweidimensionale unitäre Raum

B.2.1 Eine spezielle Basistransformation. Lineare und zirkulare Polarisation von Photonen

Es sei eine orthonormierte Basis (die a-Darstellung) gegeben:

$$\sum_{i=1}^2 |a_i\rangle \langle a_i| = \underline{I}, \quad \langle a_i | a_j \rangle = \delta_{ij}. \tag{B.9}$$

Verdreht man die Basiskets $|a_i\rangle$ durch einen unitären Operator \underline{U} in eine Basis $|b_i\rangle$

$$|b_i\rangle = \underline{U}|a_i\rangle, \quad \underline{U}\underline{U}^\dagger = \underline{U}^\dagger\underline{U} = \underline{I}, \tag{B.10}$$

so ist die Basis der $|b_i\rangle$ ebenfalls orthonormiert, es gilt

$$\sum_{i=1}^2 |b_i\rangle \langle b_i| = \underline{I}, \quad \langle b_i | b_j \rangle = \delta_{ij}. \tag{B.11}$$

Der Drehoperator \underline{U} ist in der a-Darstellung durch Matrixelemente $U_{ij}^{(a)}$ gegeben (man beachte die Vollständigkeitsrelationen von Gl. B.9 und Gl. B.11):

$$\underline{U} = \underline{I}\underline{U}\underline{I} = \sum_{i,j=1}^2 |a_i\rangle \langle a_i| \underline{U} |a_j\rangle \langle a_j| = \sum_{i,j=1}^2 |a_i\rangle U_{ij}^{(a)} \langle a_j| = \sum_{j=1}^2 |b_j\rangle \langle a_j|, \tag{B.12}$$

der Umkehropoperator \underline{U}^\dagger durch die Matrixelemente $U_{ij}^{\dagger(a)}$:

$$\underline{U}^\dagger = \underline{I}\underline{U}^\dagger\underline{I} = \sum_{i,j=1}^2 |a_i\rangle \langle a_i| \underline{U}^\dagger |a_j\rangle \langle a_j| = \sum_{i,j=1}^2 |a_i\rangle U_{ij}^{\dagger(a)} \langle a_j| = \sum_{j=1}^2 |a_j\rangle \langle b_j|. \tag{B.13}$$

Es gilt somit

$$\begin{aligned} U_{ij}^{(a)} &= \langle a_i | b_j \rangle, \\ U_{ij}^{\dagger(a)} &= \langle b_i | a_j \rangle = \langle a_j | b_i \rangle^* = U_{ji}^{(a)*}. \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

Die Komponenten eines allgemeinen Kets $|\varphi\rangle$ transformieren sich wegen

$$|\varphi\rangle = \sum_{j=1}^2 |a_j\rangle \langle a_j | \varphi \rangle = \sum_{j=1}^2 \varphi_j^{(a)} |a_j\rangle = \sum_{j=1}^2 |b_j\rangle \langle b_j | \varphi \rangle = \sum_{j=1}^2 \varphi_j^{(b)} |b_j\rangle \quad (\text{B.15})$$

wie

$$\begin{aligned} \varphi_i^{(a)} &= \langle a_i | \varphi \rangle = \sum_{j=1}^2 \langle a_i | b_j \rangle \varphi_j^{(b)} = \sum_{j=1}^2 U_{ij}^{(a)} \varphi_j^{(b)}, \\ \varphi_i^{(b)} &= \langle b_i | \varphi \rangle = \sum_{j=1}^2 \langle b_i | a_j \rangle \varphi_j^{(a)} = \sum_{j=1}^2 U_{ij}^{\dagger(a)} \varphi_j^{(a)}. \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

Eine spezielle Transformation sei durch folgende Beziehungen definiert:

$$U_{ij}^{(a)} = \langle a_i | b_j \rangle \hat{=} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ j & -j \end{pmatrix}, \quad U_{ij}^{\dagger(a)} = \langle b_i | a_j \rangle \hat{=} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -j \\ 1 & j \end{pmatrix}. \quad (\text{B.17})$$

Damit lauten die Transformationsgleichungen für die Komponenten der Kets in den beiden Darstellungen

$$\begin{pmatrix} \varphi_1^{(a)} \\ \varphi_2^{(a)} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ j & -j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_1^{(b)} \\ \varphi_2^{(b)} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \varphi_1^{(b)} \\ \varphi_2^{(b)} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -j \\ 1 & j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_1^{(a)} \\ \varphi_2^{(a)} \end{pmatrix}. \quad (\text{B.18})$$

Die Basiskets $|b_i\rangle$ entwickelt nach Basiskets $|a_i\rangle$ sind (der Drehoperator \underline{U} wird aus Gl. B.12 eingesetzt):

$$\begin{aligned} |b_1\rangle &= \underline{U} |a_1\rangle = \sum_{i,j=1}^2 |a_i\rangle \langle a_i | b_j \rangle \langle a_j | a_1 \rangle \\ &= \sum_{i=1}^2 |a_i\rangle \langle a_i | b_1 \rangle = \sum_{i=1}^2 U_{i1}^{(a)} |a_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|a_1\rangle + j|a_2\rangle), \\ |b_2\rangle &= \underline{U} |a_2\rangle = \sum_{i,j=1}^2 |a_i\rangle \langle a_i | b_j \rangle \langle a_j | a_2 \rangle \\ &= \sum_{i=1}^2 |a_i\rangle \langle a_i | b_2 \rangle = \sum_{i=1}^2 U_{i2}^{(a)} |a_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|a_1\rangle - j|a_2\rangle). \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

Versteht man unter den Kets $|a_1\rangle, |a_2\rangle$ den Polarisationszustand von Photonen, die unter $0^\circ, 90^\circ$ linear polarisiert sind, so bezeichnen die Kets $|b_1\rangle, |b_2\rangle$ rechtszirkular bzw. linkszirkular polarisierte Photonen.

Unter 45° linear polarisierte Photonen wären somit durch den folgenden Ket $|\xi\rangle$ bzw. in der a-Darstellung durch dessen Komponenten $\xi_1^{(a)}, \xi_2^{(a)}$ gegeben:

$$|\xi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|a_1\rangle + |a_2\rangle), \quad \begin{pmatrix} \xi_1^{(a)} \\ \xi_2^{(a)} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.20})$$

In Anwendung von Gl. B.18 lauten die Komponenten des Kets $|\xi\rangle$ in der b-Darstellung

$$\begin{pmatrix} \xi_1^{(b)} \\ \xi_2^{(b)} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1-j \\ 1+j \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1-j \\ 1+j \end{pmatrix}. \quad (\text{B.21})$$

Der Ket $|\xi\rangle$ (entwickelt nach Basiskets der b-Darstellung) ist somit

$$|\xi\rangle = \frac{1}{2} [(1-j)|b_1\rangle + (1+j)|b_2\rangle]. \quad (\text{B.22})$$

Die Matrixelemente eines allgemeinen Operators \underline{L} transformieren sich zwischen den beiden Darstellungen wie folgt:

$$L_{ij}^{(b)} = \langle b_i | \underline{L} | b_j \rangle = \langle a_i | \underline{U}^\dagger \underline{L} \underline{U} | a_j \rangle = \sum_{k,\ell=1}^2 \langle a_i | \underline{U}^\dagger | a_k \rangle \langle a_k | \underline{L} | a_\ell \rangle \langle a_\ell | \underline{U} | a_j \rangle = \sum_{k,\ell=1}^2 U_{ik}^{\dagger(a)} L_{k\ell}^{(a)} U_{\ell j}^{(a)}. \quad (\text{B.23})$$

Beispiel: Der Operator mit den Matrixelementen

$$L_{k\ell}^{(a)} \hat{=} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{B.24})$$

lautet in der b-Darstellung

$$L_{ij}^{(b)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1-j \\ 1+j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ j & -j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.25})$$

Der allgemeinste normierte Polarisationszustand kann in der a-Darstellung wie folgt geschrieben werden:

$$|p\rangle = e^{j\delta} (e^{-j\varphi} \cos \alpha |a_1\rangle + e^{j\varphi} \sin \alpha |a_2\rangle), \quad 0 \leq \alpha \leq \pi/2, \quad 0 \leq \varphi < \pi. \quad (\text{B.26})$$

Für $\varphi = 0, \pi/2$, $0 \leq \alpha \leq \pi/2$ handelt es sich um lineare Polarisation, die Werte $\alpha = \pi/4$, $\varphi = \pi/4$ liefern rechtszirkulare, die Werte $\alpha = \pi/4$, $\varphi = 3\pi/4$ linkszirkulare Polarisation.

Zu jedem (allgemein: elliptischen) Polarisationszustand $|p_1\rangle$ gibt es einen orthogonalen Polarisationszustand $|p_2\rangle$, es gilt also $\langle p_1 | p_2 \rangle = 0$. Für den Ansatz von Gl. B.26 erfüllen orthogonale Polarisationszustände die Bedingungen $\alpha_1 + \alpha_2 = \pi/2$, $|\varphi_2 - \varphi_1| = \pi/2$.

Polarisationszustände können auch durch den Elevationswinkel ψ der großen Achse der Polarisationsellipse ($0 \leq \psi < \pi$) und den Quotienten der Länge der kleinen Achse und der Länge der großen Achse ausgedrückt werden (dieser Quotient wird als $\tan \chi$, $-\pi/4 \leq \chi \leq \pi/4$ festgelegt; somit ist $|\tan \chi| \leq 1$, $\chi > 0$ bezeichnet nach der Konvention rechtshändige Polarisation, $\chi < 0$ linkshändige Polarisation; dabei ist der Blick gegen die Ausbreitungsrichtung des Lichts gerichtet).

Deutet man die Winkel $0 \leq 2\psi < 2\pi$ als geographische Länge auf einer Einheitskugel (der Poincaré-Kugel), die Winkel $-\pi/2 \leq 2\chi \leq \pi/2$ als geographische Breite (Südpol $2\chi = -\pi/2$, Nordpol $2\chi = \pi/2$), so liegen alle linearen Polarisationen am Äquator, alle rechtshändigen elliptischen Polarisationen auf der Nordhalbkugel, alle linkshändigen elliptischen Polarisationen auf der Südhalbkugel. Die zirkularen Polarisationen liegen im Nordpol und Südpol. Orthogonale Polarisationszustände liegen auf der Kugeloberfläche einander diametral gegenüber.

Die Beziehungen zwischen den Winkeln α , φ einerseits und ψ , χ andererseits (sowie die korrekte Wahl der Vorzeichen) sind im folgenden ohne Beweis angeführt. Man beachte, daß die vollständig polarisierten Zustände auf der Kugeloberfläche liegen. Teilweise polarisiertem Licht kann man Punkte innerhalb der Kugel zuordnen, unpolarisiertes Licht entspräche in dieser Darstellung dem Kugelmittelpunkt.

$$\begin{aligned} \tan 2\psi &= \tan 2\alpha \cos 2\varphi & 0 \leq 2\psi < 2\pi \\ \sin 2\chi &= \sin 2\alpha \sin 2\varphi & -\pi/2 \leq 2\chi \leq \pi/2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{für } \cos 2\varphi < 0 : & \quad \text{wähle } \pi < 2\psi < 2\pi \\ \text{für } \cos 2\varphi = 0 : & \quad \text{wähle } 2\psi = 0 \text{ für } \tan \alpha \leq 1 \\ & \quad \quad \quad 2\psi = \pi \text{ für } \tan \alpha > 1 \end{aligned}$$

$$2\psi = \begin{cases} 2\alpha & \text{für } \varphi = 0 \\ 2\pi - 2\alpha & \text{für } \varphi = \pi/2 \end{cases} \quad \text{für } \sin 2\alpha = 1 : \quad 2\chi = \begin{cases} 2\varphi & 0 \leq 2\varphi \leq \pi/2 \\ \pi - 2\varphi & \pi/2 \leq 2\varphi \leq 3\pi/2 \\ 2\varphi - 2\pi & 3\pi/2 \leq 2\varphi < 2\pi \end{cases}$$

Orthogonale Polarisationen

$$\begin{aligned} |2\psi_2 - 2\psi_1| &= \pi & 2\chi_2 &= -2\chi_1 \\ \alpha_1 + \alpha_2 &= \pi/2 & |\varphi_2 - \varphi_1| &= \pi/2 \end{aligned}$$

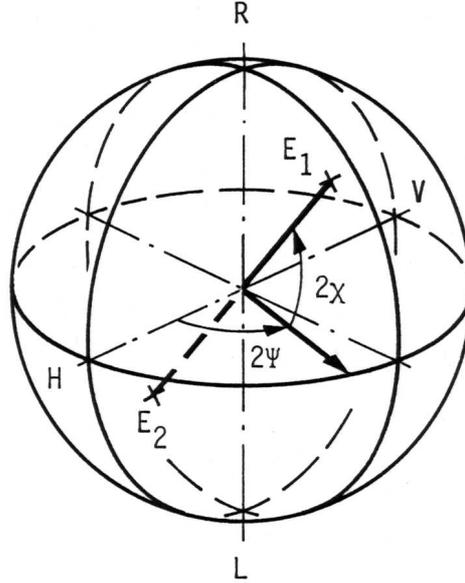


Abbildung B.1: Darstellung von Polarisationszuständen auf der Poincaré-Kugel.

B.2.2 Der statistische Operator. Der Polarisationsgrad

Im folgenden wird die a-Darstellung von Gl. B.9 verwendet. Der allgemeinste statistische Operator zur Beschreibung von Polarisationszuständen

$$\underline{\varrho} = \sum_{i,j=1}^2 |a_i\rangle \langle a_i | \underline{\varrho} | a_j\rangle \langle a_j | = \sum_{i,j=1}^2 |a_i\rangle \varrho_{ij} \langle a_j | \quad (\text{B.27})$$

ist hermitesch, seine Matrix ϱ_{ij} ist daher eine hermitesche Matrix, die durch vier reelle Parameter bestimmt ist. Die Matrix kann somit als Linearkombination von vier linear unabhängigen hermiteschen Matrizen

$$\sigma_{0,ij} \hat{=} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \sigma_{1,ij} \hat{=} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \sigma_{2,ij} \hat{=} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_{3,ij} \hat{=} \begin{pmatrix} 0 & -j \\ j & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.28})$$

mit reellen Koeffizienten s_0, s_1, s_2, s_3 geschrieben werden:

$$\varrho_{ij} = \frac{1}{2} \left(s_0 \sigma_{0,ij} + \sum_{k=1}^3 s_k \sigma_{k,ij} \right) \hat{=} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} s_0 + s_1 & s_2 - j s_3 \\ s_2 + j s_3 & s_0 - s_1 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.29})$$

Den hermiteschen Matrizen $\sigma_{k,ij}$ entsprechen in sinngemäßer Anwendung von Gl. B.27 hermitesche Operatoren

$$\begin{aligned} \underline{\sigma}_0 &= |a_1\rangle \langle a_1| + |a_2\rangle \langle a_2| = \underline{I}, \\ \underline{\sigma}_1 &= |a_1\rangle \langle a_1| - |a_2\rangle \langle a_2|, \\ \underline{\sigma}_2 &= |a_1\rangle \langle a_2| + |a_2\rangle \langle a_1|, \\ \underline{\sigma}_3 &= -j |a_1\rangle \langle a_2| + j |a_2\rangle \langle a_1|. \end{aligned} \quad (\text{B.30})$$

Sie haben folgende Eigenvektoren (EV) und Eigenwerte (EW) — die Überprüfung erfolgt durch Einsetzen in die entsprechende Eigenwertgleichung:

$$\begin{aligned}
\underline{\sigma}_1 : \quad & \text{EV } |a_1\rangle = |0\rangle, \text{ EW } +1, \\
& \text{EV } |a_2\rangle = |\pi/2\rangle, \text{ EW } -1, \\
\underline{\sigma}_2 : \quad & \text{EV } \frac{1}{\sqrt{2}}(|a_1\rangle + |a_2\rangle) = |\pi/4\rangle, \text{ EW } +1, \\
& \text{EV } \frac{1}{\sqrt{2}}(|a_1\rangle - |a_2\rangle) = |3\pi/4\rangle, \text{ EW } -1, \\
\underline{\sigma}_3 : \quad & \text{EV } \frac{1}{\sqrt{2}}(|a_1\rangle + j|a_2\rangle) = |rz\rangle, \text{ EW } +1, \\
& \text{EV } \frac{1}{\sqrt{2}}(|a_1\rangle - j|a_2\rangle) = |lz\rangle, \text{ EW } -1.
\end{aligned} \tag{B.31}$$

Die Eigenzustände von $\underline{\sigma}_1$ sind unter den Winkeln $0, \pi/2$ linear polarisiert, die von $\underline{\sigma}_2$ sind unter den Winkeln $\pi/4, 3\pi/4$ linear polarisiert; die Eigenzustände von $\underline{\sigma}_3$ sind rechtszirkular bzw. linkszirkular polarisierte Photonen.

Für die σ -Operatoren gelten folgende Beziehungen:

$$\text{Sp}(\underline{\sigma}_i \underline{\sigma}_j) = 0 \text{ für } i \neq j, \quad i, j = 0, \dots, 3; \quad [\underline{\sigma}_i, \underline{\sigma}_j] = 2j \underline{\sigma}_k, \quad i, j, k = 1, 2, 3 \text{ (und zyklisch)} \tag{B.32}$$

Für den statistischen Operator Gl. B.27 kann man unter Verwendung der σ -Operatoren schreiben

$$\underline{\varrho} = \frac{1}{2} \sum_{\ell=0}^3 s_\ell \underline{\sigma}_\ell. \tag{B.33}$$

Unter Verwendung von Gl. B.32 und Beachtung von Gl. B.28 berechnet man

$$\text{Sp}(\underline{\varrho}) = \frac{s_0}{2} \text{Sp}(\underline{\sigma}_0) = s_0, \quad \text{Sp}(\underline{\varrho}^2) = \frac{1}{4} \text{Sp} \left(\sum_{\ell=0}^3 s_\ell^2 \underline{\sigma}_\ell^2 \right) = \frac{1}{2} \sum_{\ell=0}^3 s_\ell^2. \tag{B.34}$$

Da der statistische Operator die Bedingungen Gl. 2.120 zu erfüllen hat, folgt daraus allgemein für die Parameter s_ℓ

$$s_0 = 1, \quad s_1^2 + s_2^2 + s_3^2 \leq 1. \tag{B.35}$$

Das Gleichheitszeichen gilt für reine Zustände, also für vollständig polarisiertes Licht. Für $0 < s_1^2 + s_2^2 + s_3^2 < 1$ handelt es sich um teilweise polarisiertes Licht (ein Gemisch), für $s_1^2 + s_2^2 + s_3^2 = 0$ ist das Licht unpolarisiert: in der a-Darstellung drückt sich das dadurch aus, daß die beiden orthogonalen Basiszustände mit gleicher Wahrscheinlichkeit vertreten sind,

$$\underline{\varrho}_{\text{unpol}} = \sum_{i=1}^2 |a_i\rangle \frac{1}{2} \langle a_i|. \tag{B.36}$$

Es kann ein Polarisationsgrad

$$P = \sqrt{s_1^2 + s_2^2 + s_3^2} \leq 1 \tag{B.37}$$

definiert werden; $P = 0$ bedeutet unpolarisiertes, $P = 1$ vollständig polarisiertes Licht. Am Ende des voranstehenden Abschnitts wurde auf die Möglichkeit verwiesen, die Zustände vollständig polarisierter Photonen auf die Oberfläche einer Einheitskugel (der Poincaré-Kugel) abzubilden. In Erweiterung dieser Darstellung läßt sich teilweise polarisiertes Licht auf das Innere der Einheitskugel abbilden, wobei der Abstand des Punktes vom Kugelmittelpunkt durch den Polarisationsgrad P der Photonen gegeben ist. Dem Kugelmittelpunkt entspricht somit unpolarisiertes Licht.

Die Wahrscheinlichkeit, in einem (durch den statistischen Operator $\underline{\rho}$ beschriebenen) System einen bestimmten Zustand anzutreffen kann mit Gl. 2.119 berechnet werden. Für einige ausgewählte Polarisationszustände erhält man als Ergebnis:

$$\begin{aligned}
\text{Sp}(\underline{\rho}|0\rangle\langle 0|) &= \frac{1}{2}(1 + s_1), \\
\text{Sp}(\underline{\rho}|\pi/2\rangle\langle \pi/2|) &= \frac{1}{2}(1 - s_1), \\
\text{Sp}(\underline{\rho}|\pi/4\rangle\langle \pi/4|) &= \frac{1}{2}(1 + s_2), \\
\text{Sp}(\underline{\rho}|3\pi/4\rangle\langle 3\pi/4|) &= \frac{1}{2}(1 - s_2), \\
\text{Sp}(\underline{\rho}|rz\rangle\langle rz|) &= \frac{1}{2}(1 + s_3), \\
\text{Sp}(\underline{\rho}|lz\rangle\langle lz|) &= \frac{1}{2}(1 - s_3).
\end{aligned} \tag{B.38}$$

s_1, s_2, s_3 sind ein Maß für die Anteile von Licht, welches unter den Winkeln $0, \pi/4$ linear polarisiert bzw. rechtszirkular polarisiert ist. Die in Gl. B.38 berechneten Ausdrücke sind somit die normierten Intensitäten (normiert auf die Gesamtintensität 1 des Lichtes), welche man unter Vorschaltung von Polarisationsfiltern für die linearen Polarisierungen mit den Orientierungen $0, \pi/2, \pi/4, 3\pi/4$ bzw. für die rechtszirkulare und die linkszirkulare Polarisation am Photodetektor messen würde. Bezeichnet man diese Intensitäten als $I(\cdot)$, so lassen sich die Stokes-Parameter aus Intensitätsmessungen ermitteln:

$$\begin{aligned}
I(0) + I(\pi/2) &= 1 \\
I(0) - I(\pi/2) &= s_1 \\
I(\pi/4) - I(3\pi/4) &= s_2 \\
I(rz) - I(lz) &= s_3
\end{aligned} \tag{B.39}$$

Wie man sieht, ist auch $I(\pi/4) + I(3\pi/4) = I(rz) + I(lz) = 1$, die Intensität ist immer die Summe der in orthogonalen Polarisationszuständen gemessenen Intensitäten.

Die Matrix Gl. B.29 des statistischen Operators (auch Dichtematrix genannt) läßt sich wie folgt umformen:

$$\begin{aligned}
\rho_{ij} \hat{=} \frac{1}{2} \left[\begin{pmatrix} s_0 - \sqrt{s_1^2 + s_2^2 + s_3^2} & 0 \\ 0 & s_0 + \sqrt{s_1^2 + s_2^2 + s_3^2} \end{pmatrix} \right. \\
\left. + \begin{pmatrix} s_1 + \sqrt{s_1^2 + s_2^2 + s_3^2} & s_2 - js_3 \\ s_2 + js_3 & -s_1 + \sqrt{s_1^2 + s_2^2 + s_3^2} \end{pmatrix} \right].
\end{aligned} \tag{B.40}$$

Die erste Matrix in der eckigen Klammer beschreibt den unpolarisierten Anteil des Lichtes, ihre Determinante $\text{Det}(\rho_{ij}) \geq 0$. Wenn das Licht vollständig polarisiert ist, ist die Matrix wegen $s_0 = 1, s_1^2 + s_2^2 + s_3^2 = 1$ die Nullmatrix, die Determinante hat den Wert Null. Die zweite Matrix in der eckigen Klammer erfaßt den vollständig polarisierten Anteil des Lichtes, ihre Determinante hat den Wert Null. Ist das Licht unpolarisiert, so gilt wegen Gl. B.38 $s_1 = s_2 = s_3 = 0$, die zweite Matrix ist die Nullmatrix, die erste Matrix ist wegen $s_0 = 1$ die Einheitsmatrix.

Die Parameter s_0, s_1, s_2, s_3 werden auch in der klassischen Optik definiert, sie heißen Stokessche Parameter zur Charakterisierung von Polarisationszuständen des Feldes. In der klassischen Optik ist der Parameter s_0 ein Maß für die (ohne Polarisationsfilter) gemessene Intensität des Lichtes (hier in der Quantentheorie ist wegen der Normierung der Zustände immer $s_0 = 1$, so, als würde man normierte Intensitäten $I \leq 1$ verwenden). Die Beziehungen Gl. B.35, Gl. B.37 sind daher für den Fall der klassischen Optik wie folgt zu modifizieren:

$$\left(\frac{s_1}{s_0}\right)^2 + \left(\frac{s_2}{s_0}\right)^2 + \left(\frac{s_3}{s_0}\right)^2 \leq 1, \quad P = \sqrt{\left(\frac{s_1}{s_0}\right)^2 + \left(\frac{s_2}{s_0}\right)^2 + \left(\frac{s_3}{s_0}\right)^2} \leq 1. \tag{B.41}$$

Ohne Beweis wird der Zusammenhang zwischen den Winkeln $2\psi, 2\chi$ auf der Poincaré-Kugel und den Stokes-Parametern zitiert:

$$\tan(2\psi) = \frac{s_2}{s_1}, \quad 0 \leq 2\psi < 2\pi, \quad \tan(2\chi) = \frac{s_3}{\sqrt{s_1^2 + s_2^2}}, \quad -\pi/2 \leq 2\chi \leq \pi/2. \tag{B.42}$$

B.3 Wellen und Photonen

B.3.1 Wellen in klassischer Beschreibung

Als Vorstufe zur Quantisierung denkt man sich das elektromagnetische Feld im Vakuum in einem Volumen V (z. B. in einem Würfel) nach ebenen Wellen mit der Orts- und Zeitabhängigkeit $\exp[-j(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})]$ entwickelt. Jede ebene Welle ist in zwei orthogonalen Polarisierungen vertreten. Als Beispiel wird eine einzige Welle der Frequenz ω und der Fortpflanzungskonstante k ($\omega = kc$) mit gegebener linearer Polarisation herausgegriffen, welche in z -Richtung propagiert. Man beschreibt sie durch eine komplexe Energieamplitude $F(z, t)$ oder eine reelle Energieamplitude $F_r(z, t)$

$$\begin{aligned} F(z, t) &= \sqrt{2\hbar\omega} a(t) e^{jkz}, \\ a(t) &= a_0 e^{-j\omega t} = |a_0| e^{-j(\omega t - \varphi_a)}, \\ F_r(z, t) &= \Re\{F(z, t)\} = \frac{1}{2}F(z, t) + \frac{1}{2}F^*(z, t) = \sqrt{2\hbar\omega} |a_0| \cos(\omega t - kz - \varphi_a). \end{aligned} \quad (\text{B.43})$$

$F(z, t)$ ist so normiert, daß die Gesamtenergie der betrachteten Welle innerhalb des Normierungsvolumens durch

$$H = \frac{1}{2} |F(z, t)|^2 = \hbar\omega |a(t)|^2 = \frac{1}{2} \hbar\omega (aa^* + a^*a) \quad (\text{B.44})$$

gegeben ist. Damit hat $|a(t)|^2$ eine physikalische Bedeutung: Es ist die Anzahl der Energiequanten (Photonen), welche sich in der betrachteten Welle (in dem betrachteten Modus des Feldes) innerhalb des Volumens V befinden. Man transformiert auf neue Variable Q, P wie folgt:

$$\begin{pmatrix} a \\ a^* \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}} \begin{pmatrix} 1 & j \\ 1 & -j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \omega Q \\ P \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \omega Q \\ P \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -j & j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ a^* \end{pmatrix}. \quad (\text{B.45})$$

Durch diese Substitution erhält man für die Gesamtenergie in der betrachteten Welle

$$H = \frac{1}{2} P^2 + \frac{1}{2} (\omega Q)^2, \quad (\text{B.46})$$

ein Ausdruck, der formal der Energie eines harmonischen Oszillators mit dem Impuls P und der Koordinate Q gleicht. Man beachte ferner

$$\omega Q \sim \Re(a) \text{ (Kophasalkomponente)}, \quad P \sim \Im(a) \text{ (Quadraturkomponente)}. \quad (\text{B.47})$$

Die Gesamtenergie ist somit die Summe der Energien in der Kophasalkomponente und in der Quadraturkomponente des komplexen Energiezeigers der Welle. Da bei der Quantisierung Impuls P und Koordinate Q zu nicht kommutierenden Operatoren werden, lassen sie sich nicht gleichzeitig scharf messen: Das führt zu einer quantenmechanisch bedingten Unsicherheit der Messung des Zeigers einer Welle, dem Quantenrauschen.

Nach Gl. 3.68 erhält man für die klassische Bewegungsgleichung der Energieamplitude a

$$\frac{da}{dt} = [a, H] = \frac{\partial a}{\partial Q} \frac{\partial H}{\partial P} - \frac{\partial a}{\partial P} \frac{\partial H}{\partial Q} = \frac{\omega P - j\omega^2 Q}{\sqrt{2\hbar\omega}} = -j\omega a \quad (\text{B.48})$$

mit der Lösung $a(t) = a_0 \exp(-j\omega t)$, womit der Ansatz von Gl. B.43 nachträglich bestätigt ist.

Jeder Modus des elektromagnetischen Feldes kann somit durch die Variablen Q, P (oder alternativ durch die Variablen a, a^*), einen Polarisationsvektor und eine Fortpflanzungskonstante $k = \omega/c$ beschrieben werden.

B.3.2 Quantisierung von Wellen

In der Quantentheorie werden aus den klassischen Größen Q, P hermitesche, nicht vertauschbare Operatoren:

$$\underline{Q} = \underline{Q}^\dagger, \quad \underline{P} = \underline{P}^\dagger, \quad [\underline{Q}, \underline{P}] = j\hbar I, \quad (\text{B.49})$$

aus den klassischen Beziehungen Gl. B.45 werden Operatorengleichungen:

$$\begin{pmatrix} \underline{a} \\ \underline{a}^\dagger \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}} \begin{pmatrix} 1 & j \\ 1 & -j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \omega \underline{Q} \\ \underline{P} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \omega \underline{Q} \\ \underline{P} \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -j & j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \underline{a} \\ \underline{a}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (\text{B.50})$$

Setzt man für $\underline{Q}, \underline{P}$ im Kommutator Gl. B.49 ein, so erhält man

$$[\underline{a}, \underline{a}^\dagger] = I. \quad (\text{B.51})$$

Für den Energieoperator (Hamiltonoperator) folgt unter Verwendung des Kommutators Gl. B.51

$$\underline{H} = \frac{1}{2}\underline{P}^2 + \frac{1}{2}\omega^2\underline{Q}^2 = \frac{1}{2}\hbar\omega(\underline{a}\underline{a}^\dagger + \underline{a}^\dagger\underline{a}) = \hbar\omega \left(\underline{a}^\dagger\underline{a} + \frac{1}{2}I \right). \quad (\text{B.52})$$

Der klassischen Bewegungsgleichung Gl. B.48 korrespondiert die Operatorengleichung (siehe auch Gl. 3.72)

$$\frac{d\underline{a}}{dt} = \frac{1}{j\hbar}[\underline{a}, \underline{H}] = -j\omega\underline{a}, \quad \text{Lösung: } \underline{a}(t) = \underline{a}_0 e^{-j\omega t}, \quad [\underline{a}_0, \underline{a}_0^\dagger] = I. \quad (\text{B.53})$$

Die klassische reelle Energieamplitude Gl. B.43 wird zu einem hermiteschen Operator:

$$\underline{E}_r(z, t) = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}} [\underline{a}(t)e^{jkz} + \underline{a}^\dagger(t)e^{-jkz}] = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}} [\underline{a}_0 e^{-j(\omega t - kz)} + \underline{a}_0^\dagger e^{j(\omega t - kz)}]. \quad (\text{B.54})$$

B.3.3 Bosonen. Erzeuger- und Vernichteroperatoren

Zunächst sollen die Eigenwerte des Hamiltonoperators Gl. B.52 und die Bedeutung der Operatoren $\underline{a}, \underline{a}^\dagger$ untersucht werden. Man führt einen hermiteschen Operator \underline{n} ein,

$$\underline{n} = \underline{a}^\dagger\underline{a}, \quad \text{somit } \underline{H} = \hbar\omega \left(\underline{n} + \frac{1}{2}I \right), \quad (\text{B.55})$$

und versucht, das Eigenwertproblem

$$\underline{n}|n\rangle = n|n\rangle \quad (\text{B.56})$$

zu lösen. Unter Verwendung der Vertauschungsrelation Gl. B.51 folgt:

$$\begin{aligned} \underline{a}^\dagger\underline{a}|n\rangle &= n|n\rangle \\ (\underline{a}\underline{a}^\dagger - I)|n\rangle &= n|n\rangle \\ \underline{a}\underline{a}^\dagger|n\rangle &= (n+1)|n\rangle \\ \underline{a}^\dagger\underline{a}\underline{a}^\dagger|n\rangle &= (n+1)\underline{a}^\dagger|n\rangle \\ \underline{n}\{\underline{a}^\dagger|n\rangle\} &= (n+1)\{\underline{a}^\dagger|n\rangle\}. \end{aligned} \quad (\text{B.57})$$

Der Operator \underline{a}^\dagger erzeugt somit aus einem Zustand $|n\rangle$ mit dem Eigenwert n einen Eigenzustand zum Eigenwert $(n+1)$, man bezeichnet \underline{a}^\dagger als einen Erzeuger-Operator. Es muß noch die Normierungskonstante c ermittelt werden:

$$\begin{aligned} \underline{a}^\dagger|n\rangle &= c|n+1\rangle \\ \langle n|\underline{a}\underline{a}^\dagger|n\rangle &= |c|^2 \langle n+1|n+1\rangle \\ \langle n|\underline{I} + \underline{a}^\dagger\underline{a}|n\rangle &= \langle n|n\rangle + \langle n|\underline{n}|n\rangle = |c|^2 \langle n+1|n+1\rangle \\ 1+n &= |c|^2 \end{aligned} \quad (\text{B.58})$$

Es gilt daher für die Wirkung des Erzeugers:

$$\underline{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \quad (\text{B.59})$$

Analog erschließt man die Wirkung des Operators \underline{a} :

$$\begin{aligned} \underline{a}^\dagger \underline{a} |n\rangle &= n |n\rangle \\ \underline{a} \underline{a}^\dagger \underline{a} |n\rangle &= n \underline{a} |n\rangle \\ (\underline{I} + \underline{a}^\dagger \underline{a}) \underline{a} |n\rangle &= n \underline{a} |n\rangle \\ \underline{n} \{ \underline{a} |n\rangle \} &= (n-1) \{ \underline{a} |n\rangle \}, \end{aligned} \quad (\text{B.60})$$

der Operator \underline{a} erzeugt somit aus einem Zustand $|n\rangle$ mit dem Eigenwert n einen Eigenzustand zum Eigenwert $(n-1)$, man bezeichnet \underline{a} als einen Vernichter-Operator. Analog zu Gl. B.58 wird die Normierungskonstante ermittelt; das Ergebnis lautet:

$$\underline{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle. \quad (\text{B.61})$$

Wenn ein Zustand niedrigster Energie existieren soll (entsprechend einem Minimalwert für n), dann müssen die Eigenwerte n ganzzahlig sein: Nur in diesem Fall gibt es einen Eigenwert $n=0$ und einen Zustand $|0\rangle$, für den gemäß Gl. B.61 gilt $\underline{a}|0\rangle = 0$. Andererseits gibt es keinen Maximalwert für n , weil sich nach Gl. B.59 immer Zustände zu höheren Werten von n erzeugen lassen. Das Ergebnis lautet somit (der Operator \underline{n} wird als Anzahloperator bezeichnet):

$$\underline{n} |n\rangle = n |n\rangle, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (\text{B.62})$$

die Zustände sind vollständig und orthogonal:

$$\sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n| = \underline{I}, \quad \langle n | n' \rangle = \delta_{nn'}. \quad (\text{B.63})$$

Die Lösung des Eigenwertproblems des Hamiltonoperators wird damit:

$$\underline{H} |E_n\rangle = E_n |E_n\rangle, \quad E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{B.64})$$

Die Energie wird in ganzzahligen Vielfachen von $\hbar\omega$ vergeben (diese Energieportionen nennt man Photonen). Innerhalb *eines* Modus (in *einer* Welle des elektromagnetischen Feldes) kommt es nur auf deren Anzahl n an, sie sind innerhalb eines Modus ununterscheidbar (sie lassen sich aber sehr wohl von den Photonen in einer anderen Welle unterscheiden). Teilchen, von denen beliebig viele in einen Zustand gehen können, und die innerhalb dieses Zustands ununterscheidbar sind, bezeichnet man als Bosonen.

Man beachte, daß jede Welle eine minimale Energie besitzt: Für $n=0$ (es ist kein einziges Photon vorhanden, welches etwa von einem Photodetektor registriert werden könnte!) ist die Energie

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega. \quad (\text{B.65})$$

Man nennt sie Nullpunktsenergie, der Zustand ist der Vakuumzustand $|0\rangle$. Diese endliche Energie erklärt sich dadurch, daß wegen der Unschärferelation zwischen Kophasalkomponente und Quadraturkomponente (oder zwischen elektrischer und magnetischer Feldstärke) nicht beide gleichzeitig identisch null sein können, sondern um den Erwartungswert Null Schwankungen ausführen, die sogenannten Nullpunktsfluktuationen. Diese Schwankungen können ein anderes System stören, etwa Anlaß einer Photonenemission eines angeregten Atoms sein. Vor der Quantisierung des elektromagnetischen Feldes wurde für so eine Photonenemission eines Atoms im Vakuum der Ausdruck „spontane Emission“ geprägt, weil kein Grund für die Emission ersichtlich war.

B.3.4 Temperaturstrahlung. Bose-Einstein-Verteilung

Für $q < 1$ gelten folgende Beziehungen (die zweite erhält man aus der ersten durch Differenzieren nach q):

$$\frac{1}{1-q} = \sum_{n=0}^{\infty} q^n, \quad \frac{1}{(1-q)^2} = \sum_{n=0}^{\infty} nq^{n-1} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} nq^n}{q}. \quad (\text{B.66})$$

Der statistische Operator für ein System im thermischen Gleichgewicht ist durch Gl. 2.130 gegeben. Setzt man den Hamiltonoperator Gl. B.55 ein, so folgt

$$\underline{\varrho} = \frac{\exp\left(-n \frac{\hbar\omega}{kT}\right)}{\text{Sp}\left[\exp\left(-n \frac{\hbar\omega}{kT}\right)\right]} = \frac{q^n}{\text{Sp}(q^n)}, \quad q = \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right). \quad (\text{B.67})$$

Damit berechnet man den Erwartungswert für die Anzahl von Photonen in einem Modus der Temperaturstrahlung:

$$\langle \underline{n} \rangle = \bar{n} = \text{Sp}(\underline{\varrho} \underline{n}) = \sum_{n=0}^{\infty} \langle n | \underline{\varrho} | n \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \langle n | q^n | n \rangle}{\sum_{n=0}^{\infty} \langle n | q^n | n \rangle} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} nq^n}{\sum_{n=0}^{\infty} q^n}. \quad (\text{B.68})$$

Setzt man für die Summen aus Gl. B.66 ein, erhält man für die mittlere Anzahl von Photonen in einem Oszillator (einer Welle, einem Modus des Feldes) im thermischen Gleichgewicht

$$\bar{n} = \frac{q}{1-q} = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1}. \quad (\text{B.69})$$

Im optischen Frequenzbereich ist diese Anzahl auch bei sehr hohen Temperaturen klein gegen Eins, das Licht verhält sich nichtklassisch. Im Radiofrequenzbereich gilt bei Zimmertemperatur $\bar{n} \gg 1$, wir haben thermisches Rauschen mit klassischen Eigenschaften (Gaußsches Rauschen).

Analog berechnet man

$$\overline{\delta n^2} = \overline{n^2} - \bar{n}^2 = \bar{n} + \bar{n}^2. \quad (\text{B.70})$$

Bei klassischem Rauschen ist $\bar{n} \gg 1$, die relativen Leistungsschwankungen $\overline{\delta n^2}/\bar{n}^2 \approx 1$. Der Grund für die hohen Fluktuationen in einem Modus ist die Interferenz der Elementarfelder der Bosonen, die sich zufällig in Phase addieren, aber auch durch destruktive Interferenz auslöschen können. Im Quantenbereich ist wegen $\bar{n} \ll 1$ auch die relative Intensitätsfluktuation groß, $\overline{\delta n^2}/\bar{n}^2 \approx 1/\bar{n} \gg 1$.

Die Wahrscheinlichkeit, genau n Photonen in einem Modus der Temperaturstrahlung anzutreffen, ist nach Gl. 2.119 und Gl. B.67

$$w(n) = \text{Sp}(\underline{\varrho} | n \rangle \langle n |) = \langle n | \underline{\varrho} | n \rangle = \frac{q^n}{\sum_{n=0}^{\infty} q^n} = q^n(1-q). \quad (\text{B.71})$$

Aus Gl. B.69 ist aber

$$q = \frac{\bar{n}}{1 + \bar{n}}. \quad (\text{B.72})$$

Aus Gl. B.71, Gl. B.72 folgt schließlich die Wahrscheinlichkeitsverteilung von Bosonen im thermischen Gleichgewicht (Bose-Einstein-Verteilung)

$$w(n) = \frac{1}{1 + \bar{n}} \cdot \frac{1}{\left(1 + \frac{1}{\bar{n}}\right)^n}. \quad (\text{B.73})$$

B.3.5 Kohärente Zustände. Poisson-Verteilung

Den klassischen Größen a , a^* von Gl. B.44 entsprechen in der Quantentheorie die nicht-hermiteschen Operatoren \underline{a} , \underline{a}^\dagger , die somit keine Observablen darstellen. Die Eigenkets von \underline{a} haben (wie im folgenden gezeigt wird) eine enge Beziehung zu klassischen Wellen. Das Eigenwertproblem

$$\underline{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle, \quad \alpha = |\alpha|e^{j\varphi_\alpha} \quad (\text{B.74})$$

hat komplexe Eigenwerte, die Eigenkets werden als α -Zustände oder kohärente Zustände bezeichnet. Man kann sie nach der Basis Gl. B.63 entwickeln:

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle. \quad (\text{B.75})$$

Setzt man in die Eigenwertgleichung Gl. B.74 ein und beachtet Gl. B.61, erhält man

$$\sum_{n=0}^{\infty} c_n \sqrt{n} |n-1\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha c_n |n\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_{n+1} \sqrt{n+1} |n\rangle. \quad (\text{B.76})$$

Durch Vergleich der Koeffizienten, Rekursion auf einen ersten Koeffizienten c_0 und Einsetzen in die Entwicklung Gl. B.75 folgt

$$c_{n+1} = \frac{\alpha c_n}{\sqrt{n+1}}, \quad c_n = \frac{\alpha^n c_0}{\sqrt{n!}}, \quad |\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n c_0}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \quad (\text{B.77})$$

c_0 wird aus der Forderung ermittelt, daß der Zustand normiert sein soll:

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = 1 = |c_0|^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = |c_0|^2 \exp(|\alpha|^2). \quad (\text{B.78})$$

Mit einer willkürlichen Phase φ_α von α lautet der kohärente Zustand

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{\frac{|\alpha|^{2n} e^{-|\alpha|^2}}{n!}} e^{jn\varphi_\alpha} |n\rangle. \quad (\text{B.79})$$

Mit Gl. B.74 erhält man den Erwartungswert der Photonenzahl in einem α -Zustand:

$$\langle \underline{n} \rangle = \bar{n} = \langle \alpha | \underline{n} | \alpha \rangle = \langle \alpha | \underline{a}^\dagger \underline{a} | \alpha \rangle = |\alpha|^2. \quad (\text{B.80})$$

Damit kann der kohärente Zustand folgendermaßen geschrieben werden:

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{\frac{\bar{n}^n e^{-\bar{n}}}{n!}} e^{jn\varphi_\alpha} |n\rangle. \quad (\text{B.81})$$

Die Wahrscheinlichkeit, n Photonen in einem kohärenten Zustand anzutreffen, ist das Quadrat des Absolutbetrags der Wahrscheinlichkeitsamplitude, mit welcher der Ket $|n\rangle$ in der Entwicklung vertreten ist,

$$w(n) = \frac{\bar{n}^n e^{-\bar{n}}}{n!} \quad (\text{Poisson-Verteilung}). \quad (\text{B.82})$$

Für die Poisson-Verteilung berechnet man ein mittleres Schwankungsquadrat von

$$\overline{\delta n^2} = \overline{n^2} - \bar{n}^2 = \bar{n}. \quad (\text{B.83})$$

Der Vergleich mit der Bose-Einstein-Verteilung Gl. B.70 zeigt: Für hohe mittlere Photonenzahl $\bar{n} \gg 1$ sind die relativen Intensitätsfluktuationen beim kohärenten Zustand sehr klein, $\overline{\delta n^2}/\bar{n}^2 = 1/\bar{n} \ll 1$, der kohärente Zustand ist im Vergleich zum thermischen Licht für $\bar{n} \gg 1$ ein sehr stabiles Signal. Für $\bar{n} \ll 1$ sind kohärenter Zustand und thermisches Licht praktisch nicht zu unterscheiden, für beide sind die relativen Intensitätsschwankungen groß ($\bar{n} \ll 1$ ist der Quantenbereich; man beachte, daß sich die Aussage auf eine einzige Welle bezieht!).

Für den Erwartungswert des Operators der Energieamplitude Gl. B.54 mit einem kohärenten Zustand erhält man unter Verwendung der auch für \underline{a}_0 gültigen Eigenwertgleichung Gl. B.74:

$$\begin{aligned} \langle \underline{E}_r(z, t) \rangle &= \langle \alpha | \underline{E}_r(z, t) | \alpha \rangle = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}} \left[\langle \alpha | \underline{a}_0 | \alpha \rangle e^{-j(\omega t - kz)} + \langle \alpha | \underline{a}_0^\dagger | \alpha \rangle e^{j(\omega t - kz)} \right] \\ &= \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}} \left[|\alpha| e^{-j(\omega t - kz - \varphi_\alpha)} + |\alpha| e^{j(\omega t - kz - \varphi_\alpha)} \right] \\ &= \sqrt{2\hbar\omega} |\alpha| \cos(\omega t - kz - \varphi_\alpha). \end{aligned} \quad (\text{B.84})$$

Der Vergleich mit Gl. B.43 zeigt, daß der Erwartungswert des Feldoperators mit einem kohärenten Zustand eine ideale Sinuswelle gegebener Amplitude und Phase ist. Amplitude und Phase (oder Kophasalkomponente und Quadraturkomponente) können aber nicht gleichzeitig scharf gemessen werden. Die quantentheoretische Beschreibung einer klassischen Sinuswelle ist der kohärente Zustand. Bei einer Messung des Zustandes sind Photonenzahl, Phase und Amplitude nicht scharf definiert (der Endpunkt des komplexen Zeigers ist nicht exakt definiert, sondern von einem Unschärfekreis umgeben). Beim Empfang mit einem Photodetektor setzt sich die Poisson-Verteilung der Photonen in eine Poisson-Verteilung der Photoelektronen um, der Photostrom zeigt Schrotrauschen (Quantenrauschen). Es läßt sich zeigen, daß sich das Licht von einem idealen, einmodigen Laser in einem α -Zustand befindet.

B.3.6 Quantenrauschen beim Empfang von Wellen

Beim Empfang von Licht mit einem phasenempfindlichen Empfänger (Heterodyn-Empfänger) oder bei der Verstärkung von Licht mit einem phasenempfindlichen Verstärker kommt es zu Quantenrauschen, weil Kophasalkomponente und Quadraturkomponente des Feldes einer Unschärfereation genügen. Aus Gl. B.50, Gl. B.51 berechnet man für den Kommutator:

$$\begin{aligned} [\omega Q, P] &= \frac{\hbar\omega}{2} [\underline{a} + \underline{a}^\dagger, -j\underline{a} + j\underline{a}^\dagger] = \frac{j\hbar\omega}{2} [\underline{a} + \underline{a}^\dagger, -\underline{a} + \underline{a}^\dagger] \\ &= \frac{j\hbar\omega}{2} [\underline{a}, \underline{a}^\dagger] - \frac{j\hbar\omega}{2} [\underline{a}^\dagger, \underline{a}] = j\hbar\omega \underline{I}. \end{aligned} \quad (\text{B.85})$$

Aus Gl. 2.103 folgt die Unschärfereation

$$\Delta(\omega Q) \cdot \Delta P \geq \frac{1}{2} |\langle j\hbar\omega \underline{I} \rangle| = \frac{1}{2} \hbar\omega. \quad (\text{B.86})$$

Für gleichzeitige Messungen nicht kommutierender Observabler gilt aber nach Gl. 1.32 das doppelte Unschärfeprodukt (bei Empfang oder Verstärkung mit einem phasenempfindlichen System werden notwendigerweise gleichzeitige Messungen von Kophasal- und Quadraturkomponente vorgenommen):

$$\Delta(\omega Q) \cdot \Delta P \geq \hbar\omega \quad \text{für gleichzeitige Messungen} \quad (\text{B.87})$$

Die minimale Unsicherheit beim Empfang oder der Verstärkung mit einem phasenempfindlichen System beträgt somit für jeden Modus des Feldes $\hbar\omega$, das ist eine äquivalente Rauschenergie,

die *einem* Photon pro Modus entspricht. Empfängt man ein Signal mit einer Bandbreite B , so muß nach dem Abtasttheorem der Zustand von B Moden pro Sekunde gemessen werden, was zu einer minimalen, quantentheoretisch bedingten Rauschleistung von $\hbar\omega B$ führt (jeder empfangene Modus liefert pro Sekunde die äquivalente Rauschenergie eines Photons). Im klassischen Bereich lassen sich pro Modus zwei nahezu unabhängige Messungen durchführen (Amplitude und Phase, oder Kophasal- und Quadraturkomponente), da im Radiofrequenzbereich die Quantenenergie $\hbar\omega$ so klein ist (außerdem andere Rauschursachen — wie das thermische Rauschen — dominieren), daß die Nichtkommutativität von Q, P nicht bemerkbar wird. Im optischen Bereich dagegen ist wegen der vernachlässigbaren Anzahl thermischer Photonen (siehe Gl. B.69) das Quantenrauschen dominierend:

$$P = \hbar\omega B \quad (\text{minimale Rauschleistung in der Bandbreite } B) \quad (\text{B.88})$$

Die Unterschiede des Empfangs von Temperaturstrahlung und Laserstrahlung sollen nochmals zusammenfassend deutlich gemacht werden:

Temperaturstrahlung ist in klassischer Beschreibung ein Gaußprozeß (gaußsches Rauschen), der in seinen statistischen Eigenschaften vollständig durch das Frequenzspektrum oder dessen Fouriertransformierte (die Autokorrelationsfunktion) gegeben ist. Die Bandbreite sei Δf , die Beobachtungszeit für einen Modus des Feldes im Sinn von Gl. B.69 ist die Kohärenzzeit $\tau_k = 1/\Delta f$. Die Temperaturstrahlung sei mit einem Signal der Nachrichtenbandbreite B moduliert. Um die Nachricht zu detektieren, muß man somit Beobachtungszeiten $T = 1/B$ wählen, und in dieser Zeit empfängt man somit $M = \Delta f/B$ unabhängige Moden der Temperaturstrahlung. Der Strom i am Photodetektor ist proportional zur empfangenen Photonenzahl n , das Signal-Rauschleistungsverhältnis ist daher $\text{SRV} = \bar{n}^2/\overline{\delta n^2}$.

Wir betrachten zunächst den Quantenbereich $hf/kT \gg 1$, wegen Gl. B.69 $\bar{n} \ll 1$, und somit wegen Gl. B.70 $\overline{\delta n^2} \approx \bar{n}$.

Wählt man nun die Nachrichtenbandbreite so hoch wie die Bandbreite der Temperaturstrahlung, so ist $M = 1$, die Beobachtungszeit zur Detektion der Modulation ist genau so groß wie die für den Empfang eines Modus der Temperaturstrahlung. Es gilt daher

$$\text{SRV} = \frac{\bar{n}^2}{\overline{\delta n^2}} \approx \bar{n} \ll 1 \quad (\text{B.89})$$

Es ist in diesem Fall nicht möglich, die Nachricht zu empfangen: Der Detektor kann nicht unterscheiden, ob die empfangenen schnellen Fluktuationen von der Temperaturstrahlung oder aber von der schnellen Modulation stammen.

Wählt man dagegen die Nachrichtenbandbreite B sehr klein im Vergleich zur Bandbreite Δf der Temperaturstrahlung, so empfängt man in einer Beobachtungszeit T für die Modulation sehr viele unabhängige Moden M der Temperaturstrahlung, deren Photonenzahlen sich zu $\bar{N} = M\bar{n}$ addieren; da die Moden unabhängig sind, addieren sich auch die mittleren Schwankungsquadrate zu $M\overline{\delta n^2}$. In diesem Fall gilt somit

$$\text{SRV} = \frac{(M\bar{n})^2}{M\overline{\delta n^2}} \approx M\bar{n} = \bar{N} \quad (\text{B.90})$$

Die Modulation läßt sich gut empfangen, sofern die in einer Beobachtungszeit T empfangene Photonenzahl N sehr groß ist (das ist der Fall für $B \ll \Delta f$). Merksatz: Auch mit einer Taschenlampe kann man gut morsen, weil man beim Empfang des langsam veränderlichen Signals die schnellen Fluktuationen der Temperaturstrahlung ausmittelt.

Wir betrachten nun den klassischen Bereich $hf/kT \ll 1$, wegen Gl. B.69 $\bar{n} \gg 1$, und somit wegen Gl. B.70 $\overline{\delta n^2} \approx \bar{n}^2$.

Wählt man wieder die Nachrichtenbandbreite so hoch wie die Bandbreite der Temperaturstrahlung, so ist $M = 1$, die Beobachtungszeit zur Detektion der Modulation ist genau so groß wie die für den Empfang eines Modus der Temperaturstrahlung. Es gilt daher

$$\text{SRV} = \frac{\bar{n}^2}{\overline{\delta n^2}} \approx 1 \quad (\text{B.91})$$

Es ist daher wieder nicht möglich, die Nachricht zu empfangen: Der Detektor kann nicht unterscheiden, ob die empfangenen schnellen Fluktuationen von der Temperaturstrahlung oder aber von der schnellen Modulation stammen.

Wählt man aber die Nachrichtenbandbreite B sehr klein im Vergleich zur Bandbreite Δf der Temperaturstrahlung, so empfängt man in einer Beobachtungszeit T für die Modulation wieder sehr viele unabhängige Moden M der Temperaturstrahlung, deren Photonenzahlen sich zu $\bar{N} = M\bar{n}$ addieren; da die Moden unabhängig sind, addieren sich auch die mittleren Schwankungsquadrate zu $M\overline{\delta n^2} = M\bar{n}^2$. In diesem Fall gilt daher

$$\text{SRV} = \frac{(M\bar{n})^2}{M\overline{\delta n^2}} \approx M \quad (\text{B.92})$$

Die Modulation läßt sich gut empfangen, sofern $M = \Delta f/B \gg 1$.

Für Laserstrahlung (einen Oszillator, der einen kohärenten Zustand emittiert) gelten obige Beziehungen nicht. Das Lasersignal besitzt eine stabile Amplitude, die Linienbreite Δf der Strahlung wird durch Phasenschwankungen dominiert, der Zufallsprozeß ist nicht (wie jener der Temperaturstrahlung) durch die Angabe des Leistungsspektrums (oder der Autokorrelationsfunktion) vollständig bestimmt, siehe [21], Abb.6.5, S. 307. Für den idealen Laser gilt für beliebige Beobachtungszeiten die Poisson-Verteilung Gl. B.82 mit dem mittleren Schwankungsquadrat $\overline{\delta n^2} = \bar{n}$ nach Gl. B.83. Es folgt somit für das Signal-Rauschleistungsverhältnis

$$\text{SRV} = \frac{\bar{n}^2}{\overline{\delta n^2}} = \bar{n} \quad (\text{B.93})$$

Wird für eine hohe Modulationsbandbreite B die Beobachtungszeit sehr klein (und dementsprechend möglicherweise $\bar{n} \ll 1$), so kann dennoch ein großes SRV dadurch erzielt werden, daß man die Signalleistung des Sendelasers vergrößert, um sicherzustellen, daß die in einer Beobachtungszeit am Detektor registrierte Photonenzahl \bar{n} groß ist.

B.4 Fermionen

Als Fermionen bezeichnet man Teilchen (es handelt sich um solche mit halbzahligem Spin), von denen maximal ein einziges Teilchen in ein- und demselben Zustand vorhanden sein kann (sie sind im Gegensatz zu den „geselligen“ Bosonen extrem „ungesellig“). Es wird gezeigt, daß sich dieses Verhalten durch folgende Vertauschungsrelationen für Vernichter und Erzeuger von Fermionen reproduzieren läßt (zur Definition des Antikommutators siehe Gl. 2.104):

$$[\underline{b}, \underline{b}^\dagger]_+ = \underline{I}, \quad [\underline{b}, \underline{b}]_+ = [\underline{b}^\dagger, \underline{b}^\dagger]_+ = 0. \quad (\text{B.94})$$

Der Operator $\underline{b}^\dagger \underline{b}$ ist hermitesch, es soll untersucht werden, ob er analog zu Gl. B.55 die Bedeutung eines Anzahloperators besitzt. Es ist das Eigenwertproblem

$$\underline{b}^\dagger \underline{b} |n\rangle = n |n\rangle \quad (\text{B.95})$$

zu lösen. Aus den Antikommutatoren von Gl. B.94 folgt:

$$\begin{aligned} \underline{b} \underline{b}^\dagger + \underline{b}^\dagger \underline{b} &= \underline{I} \\ \underline{b}^\dagger \underline{b} \underline{b}^\dagger \underline{b} + \underline{b}^\dagger \underline{b}^\dagger \underline{b} \underline{b} &= \underline{b}^\dagger \underline{b} \\ \underline{b}^\dagger \underline{b} \underline{b}^\dagger \underline{b} - \underline{b}^\dagger \underline{b} &= 0 \\ \underline{b}^\dagger \underline{b} (\underline{b}^\dagger \underline{b} - \underline{I}) &= 0 \\ n(n-1) &= 0 \end{aligned} \quad (\text{B.96})$$

Die letzte Zeile folgt aus Gl. 2.105, Gl. 2.106. Der Anzahloperator besitzt nur die Eigenwerte $n = 0, 1$ (entsprechend den Zuständen $|0\rangle, |1\rangle$), wie für Fermionen gefordert. Jetzt wird die Wirkung

von Erzeugern und Vernichtern überprüft:

$$\begin{aligned}
b^\dagger b|1\rangle &= |1\rangle \\
\underline{b} b^\dagger b|1\rangle &= \underline{b}|1\rangle \\
(\underline{I} - \underline{b}^\dagger \underline{b})b|1\rangle &= \underline{b}|1\rangle \\
b^\dagger b\{\underline{b}|1\rangle\} &= 0 \cdot \{\underline{b}|1\rangle\}
\end{aligned} \tag{B.97}$$

Daraus folgt ferner (die Normierungskonstante hat den Wert 1)

$$\underline{b}|1\rangle = |0\rangle, \quad \underline{b} \underline{b}|1\rangle = \underline{b}|0\rangle = 0. \tag{B.98}$$

Vernichtet man im Zustand $|1\rangle$ ein Fermion, erhält man den Zustand $|0\rangle$. Im Zustand $|0\rangle$ läßt sich kein weiteres Fermion vernichten. Analog erhält man aus

$$\begin{aligned}
b^\dagger b|0\rangle &= 0 \\
(\underline{I} - \underline{b} \underline{b}^\dagger)|0\rangle &= 0 \\
\underline{b} b^\dagger|0\rangle &= |0\rangle \\
b^\dagger b\{b^\dagger|0\rangle\} &= 1 \cdot \{b^\dagger|0\rangle\}
\end{aligned} \tag{B.99}$$

die Ergebnisse

$$b^\dagger|0\rangle = |1\rangle, \quad b^\dagger b^\dagger|0\rangle = \underline{b}^\dagger|1\rangle = 0. \tag{B.100}$$

Im Zustand $|0\rangle$ läßt sich *ein* Fermion erzeugen, aber kein weiteres.

Zur Berechnung der Statistik im thermischen Gleichgewicht darf jetzt nicht der statistische Operator von Gl. 2.130 verwendet werden. Der Operator von Gl. 2.130 gilt für ein kanonisches Ensemble, er maximiert den Erwartungswert des Entropie-Operators ($-k \ln \underline{\varrho}$) (der Ausdruck $\text{Sp}[\underline{\varrho}(-k \ln \underline{\varrho})]$ wird maximiert) unter der Nebenbedingung, daß der Erwartungswert der Energie $\langle \underline{H} \rangle$ gegeben ist.

Hier muß der statistische Operator eines großkanonischen Ensembles verwendet werden, welcher den Erwartungswert des Entropie-Operators unter den Nebenbedingungen maximiert, daß sowohl der Erwartungswert der Energie $\langle \underline{H} \rangle$, als auch der Erwartungswert der Teilchenanzahl $\langle \underline{b}^\dagger \underline{b} \rangle = \langle \underline{N} \rangle$ gegeben ist ($\underline{N} = \underline{b}^\dagger \underline{b}$ ist der Anzahloperator).

Der statistische Operator für das großkanonische Ensemble lautet:

$$\underline{\varrho} = \frac{\exp\left(\frac{\zeta \underline{N} - \underline{H}}{kT}\right)}{\text{Sp}\left[\exp\left(\frac{\zeta \underline{N} - \underline{H}}{kT}\right)\right]} \tag{B.101}$$

Die Konstante ζ hat die Bedeutung des chemischen Potentials pro Teilchen. Interessiert man sich für einen Fermionenzustand der Energie E , so ist der Energieoperator des Systems

$$\underline{H} = E \underline{N} = E \underline{b}^\dagger \underline{b}. \tag{B.102}$$

Die Wahrscheinlichkeit, ein Fermion im Zustand anzutreffen, ist

$$\begin{aligned}
w(1) &= \text{Sp}(\underline{\varrho}|1\rangle \langle 1|) = \langle 1|\underline{\varrho}|1\rangle \\
&= \frac{\left\langle 1 \left| \exp\left[\frac{(\zeta - E)\underline{N}}{kT}\right] \right| 1 \right\rangle}{\sum_{n=0}^1 \left\langle n \left| \exp\left[\frac{(\zeta - E)\underline{N}}{kT}\right] \right| n \right\rangle} = \frac{\exp\left[\frac{(\zeta - E)}{kT}\right]}{1 + \exp\left[\frac{(\zeta - E)}{kT}\right]} = \frac{1}{\exp\left[\frac{(E - \zeta)}{kT}\right] + 1}.
\end{aligned} \tag{B.103}$$

Gl. B.103 ist die Fermi-Dirac-Verteilung. Wie man sieht, hat die Konstante ζ die Bedeutung der Fermi-Energie E_F . Man erhält somit die Fermiverteilung

$$w(1) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) + 1}, \quad w(0) + w(1) = 1. \tag{B.104}$$

B.5 Der Oszillator bei großen Quantenzahlen

Ein klassischer harmonischer Oszillator (Massenpunkt der Masse m) schwingt um die Ruhelage $x = 0$:

$$x = A \cos \omega t, \quad p = m \frac{dx}{dt} = -m\omega A \sin \omega t. \quad (\text{B.105})$$

Die Energie des Oszillators ist

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 A^2 (\sin^2 \omega t + \cos^2 \omega t) = \frac{1}{2}m\omega^2 A^2. \quad (\text{B.106})$$

Diese Energie wird für große Quantenzahlen n mit der in Gl. B.64 berechneten Energie des quantenmechanischen Oszillators verglichen:

$$E_n \approx \hbar\omega n = \frac{1}{2}m\omega^2 A^2, \quad \rightarrow \quad n = \frac{1}{2}v^2 A^2 \text{ mit } v = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}. \quad (\text{B.107})$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte $w(x)$, mit welcher der klassische Oszillator in einem Intervall $x, x + dx$ auf der x -Achse lokalisiert werden kann, ist proportional zur Zeit dt , die er in diesem Intervall verbringt. Aus

$$t = \frac{1}{\omega} \arccos \frac{x}{A}, \quad dt = -\frac{dx}{\omega\sqrt{A^2 - x^2}} \quad (\text{B.108})$$

folgt für die Wahrscheinlichkeitsdichte (mit einer Normierungskonstanten c)

$$w(x) = \frac{c}{\sqrt{A^2 - x^2}}. \quad (\text{B.109})$$

Wegen

$$\int_{-A}^{+A} w(x) dx = 1 = c \arcsin \frac{x}{A} \Big|_{-A}^{+A} = c\pi \quad (\text{B.110})$$

erhält man das Ergebnis

$$w(x) = \frac{1}{\pi\sqrt{A^2 - x^2}}. \quad (\text{B.111})$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichteamplitude $\psi_n(x)$ für die Lokalisierung eines Oszillators mit der Energie E_n ist die normierte Lösung der Schrödingergleichung Gl. 3.56. Sie lautet (v ist der in Gl. B.107 definierte Parameter)

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{v}{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(vx) \exp\left(-\frac{v^2 x^2}{2}\right), \quad H_n \text{ Hermite-Polynom.} \quad (\text{B.112})$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte ist das Absolutbetragsquadrat der WDA

$$w_n(x) = |\psi_n(x)|^2 = \frac{v}{2^n n! \sqrt{\pi}} H_n^2(vx) \exp(-v^2 x^2). \quad (\text{B.113})$$

Diese Wahrscheinlichkeitsdichte sollte für große Quantenzahlen n gegen die Wahrscheinlichkeitsdichte von Gl. B.111 konvergieren.

Zur Überprüfung benötigt man die nachstehend angeführten, für $n \gg 1$ gültigen Beziehungen:

$$\begin{aligned} n! &\approx \sqrt{2n\pi} \left(\frac{n}{e}\right)^n, \\ H_n(vx) &= \sqrt{\frac{2^{n+1} \left(\frac{n}{e}\right)^n}{\cos \alpha}} \exp(n\alpha^2) \cos \left[\left(2n + \frac{1}{2}\right) \alpha - \frac{n\pi}{2} \right], \\ \alpha &= \arcsin \left(\frac{vx}{\sqrt{2n}} \right). \end{aligned} \quad (\text{B.114})$$

Diese Beziehungen werden in Gl. B.113 eingesetzt. Ferner wird $\cos \alpha$ durch $\sqrt{1 - \sin^2 \alpha}$ ersetzt. Wegen $\sin \arcsin \alpha = \alpha$ erhält man nach Kürzen von Ausdrücken in Zähler und Nenner und teilweises Ersetzen von n durch A (nach Gl. B.107 gilt $2n = v^2 A^2$) das Zwischenergebnis

$$w_n(x) = \frac{2}{\pi \sqrt{A^2 - x^2}} \exp(2n\alpha^2 - v^2 x^2) \cos^2 \left[\left(2n + \frac{1}{2}\right) \alpha - \frac{n\pi}{2} \right]. \quad (\text{B.115})$$

Für große Werte von n gilt

$$2n\alpha^2 = 2n \arcsin^2 \left(\frac{vx}{\sqrt{2n}} \right) \approx 2n \frac{v^2 x^2}{2n} = v^2 x^2, \quad (\text{B.116})$$

und somit $\exp(2n\alpha^2 - v^2 x^2) \approx 1$. Die \cos^2 -Funktion ist für große Werte von n eine extrem rasch oszillierende Funktion (jeder Massen-„Punkt“ mit einer noch so kleinen, aber endlichen Ausdehnung würde sehr viele der Oszillationen der Funktion überdecken), sie kann durch ihren Mittelwert $1/2$ ersetzt werden: Unter diesen Voraussetzungen liefern Gl. B.111 und Gl. B.115 identische Ergebnisse.

Abb. B.2 zeigt den Verlauf der klassisch und der quantenmechanisch berechneten Wahrscheinlichkeitsdichten. Man beachte, daß der klassische Massenpunkt sich nur innerhalb des Intervalls $-A \leq x \leq +A$ aufhalten kann, wogegen für den quantenmechanischen Oszillator auch außerhalb dieser Grenzen eine endliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit besteht (sie nimmt mit zunehmender Entfernung von den klassischen Grenzen rasch ab). Die quantenmechanische Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist innerhalb der klassischen Grenzen eine (für zunehmende Werte von n immer rascher) oszillierende Funktion.

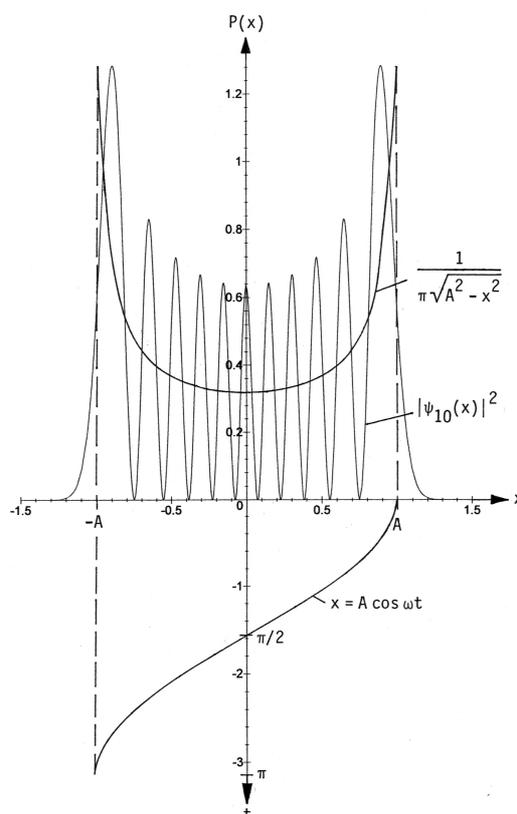


Abbildung B.2: Vergleich der Wahrscheinlichkeitsdichten (hier mit $P(x)$ bezeichnet) der Lokalisierung eines klassischen und eines quantenmechanischen Oszillators.

B.6 Teilchen am halbdurchlässigen Spiegel

An einem verlustlosen, halbdurchlässigen Spiegel gelten zwischen Eingangssignal und Ausgangssignal die Beziehungen ($\pi/2$ Phasenverschiebung bei Transmission)

$$\begin{pmatrix} |3\rangle \\ |4\rangle \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} j & 1 \\ 1 & j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |1\rangle \\ |2\rangle \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} |1\rangle \\ |2\rangle \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -j & 1 \\ 1 & -j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |3\rangle \\ |4\rangle \end{pmatrix}. \quad (\text{B.117})$$

Die Matrix ist unitär, deshalb gilt $\langle 1|1\rangle + \langle 2|2\rangle = \langle 3|3\rangle + \langle 4|4\rangle$.

Besteht zwischen den Eingangssignalen eine Phasenbeziehung

$$|2\rangle = e^{j\varphi}|1\rangle, \quad \langle 1|1\rangle = \langle 2|2\rangle, \quad (\text{B.118})$$

so erhält man durch Einsetzen in Gl. B.117 die Ausgangssignale

$$\begin{aligned} |3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(j + e^{j\varphi})|1\rangle & \langle 3|3\rangle &= (1 + \sin\varphi)\langle 1|1\rangle \\ |4\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + je^{j\varphi})|1\rangle & \langle 4|4\rangle &= (1 - \sin\varphi)\langle 1|1\rangle \end{aligned} \quad (\text{B.119})$$

Mit einer geeignet gewählten Phasenverschiebung φ läßt sich an den Ausgängen konstruktive oder destruktive Interferenz erzielen.

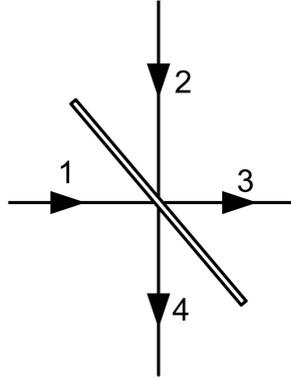


Abbildung B.3: Verlustloser, halbdurchlässiger Spiegel.

Es sollen nun unterscheidbare (klassische) Teilchen betrachtet werden. Teilchen 1 im Eingang 1 ist durch den Zustand $|1\rangle_1$ beschrieben, Teilchen 2 im Eingang 2 durch $|2\rangle_2$. Der vollständige Eingangszustand kann durch einen Produktket $|a\rangle = |1\rangle_1|2\rangle_2 = |1,2\rangle$ beschrieben werden (in Kets oder Bras beziehe sich immer das erste Argument auf Teilchen 1, das zweite auf Teilchen 2). Setzt man für $|1\rangle_1, |2\rangle_2$ aus Gl. B.117 ein, so erhält man für den resultierenden Endzustand

$$|e\rangle = \frac{1}{2}(-j|3,3\rangle - |3,4\rangle + |4,3\rangle - j|4,4\rangle) \quad (\text{B.120})$$

Es sind 4 Fälle mit je einer Wahrscheinlichkeit von 25% möglich: Beide Teilchen werden reflektiert (Zustand $|4,3\rangle$); beide werden transmittiert (Zustand $|3,4\rangle$); Teilchen 1 wird reflektiert, Teilchen 2 wird transmittiert ((Zustand $|4,4\rangle$); Teilchen 1 wird transmittiert, Teilchen 2 wird reflektiert ((Zustand $|3,3\rangle$)).

Bei nicht unterscheidbaren Teilchen ist nicht klar, ob Teilchen 1 in Eingang 1, Teilchen 2 in Eingang 2 landet, oder aber Teilchen 1 in Eingang 2, Teilchen 2 in Eingang 1. Es können daher zwei Zustände unterschieden werden, die sich symmetrisch oder antisymmetrisch im Bezug auf die Vertauschung der beiden Teilchen verhalten:

$$\begin{aligned} |a\rangle_+ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|1,2\rangle + |2,1\rangle) \\ |a\rangle_- &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|1,2\rangle - |2,1\rangle) \end{aligned} \quad (\text{B.121})$$

Man beachte, daß sich die Kets auf die Ortszustände beziehen; berechnet man durch Einsetzen aus Gl. B.117 die entsprechenden Endzustände, so folgt

$$\begin{aligned} |e\rangle_+ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-j|3,3\rangle - j|4,4\rangle) \\ |e\rangle_- &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-|3,4\rangle + |4,3\rangle) \end{aligned} \quad (\text{B.122})$$

Bosonen existieren immer in insgesamt symmetrischen Zuständen (z.B. Photonen im Ortszustand $|a\rangle_+$, deren Zustand auch im Bezug auf den Spin = die Polarisation symmetrisch ist), sie landen mit gleicher Wahrscheinlichkeit im selben Ausgang (3 oder 4). Ist der Anfangszustand antisymmetrisch, so landen die Teilchen immer in verschiedenen Ausgängen. Das trifft auch für Photonen zu, deren Spinanteil (= Polarisationszustand) antisymmetrisch ist (antisymmetrischer Ortsanteil und antisymmetrischer Spinanteil geben insgesamt einen bezüglich Teilchenvertauschung symmetrischen Gesamtzustand).

B.7 Unmöglichkeit des Klonens von Zuständen

Soll ein Zustand $|\varphi\rangle_1$ in einem Universum 1 in einem Universum 2 in einem Ket $|\varphi\rangle_2$ reproduziert werden, so müßte ein unitärer Operator \underline{U} existieren, der folgende Eigenschaft besitzt:

$$\underline{U}|\varphi\rangle_1|0\rangle_2 = \underline{U}|\varphi,0\rangle = |\varphi\rangle_1|\varphi\rangle_2 = |\varphi,\varphi\rangle \quad (\text{B.123})$$

Für einen aus Eigenzuständen $|1\rangle, |2\rangle$ eines Operators superponierten Ket $|\varphi\rangle = a|1\rangle + b|2\rangle$ müßten daher folgende Beziehungen erfüllt sein:

$$\begin{aligned} \underline{U}|\varphi,0\rangle &= |\varphi,\varphi\rangle \\ &= (a|1\rangle + b|2\rangle)(a|1\rangle + b|2\rangle) \\ &= a^2|1,1\rangle + ab|1,2\rangle + ba|2,1\rangle + b^2|2,2\rangle, \\ \underline{U}|\varphi,0\rangle &= \underline{U}(a|1\rangle + b|2\rangle)|0\rangle \\ &= a|1,1\rangle + b|2,2\rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.124})$$

Diese Beziehungen sind nur für $ab = 0$ verträglich. Der Zustand $|\varphi\rangle$ muß daher entweder der bekannte Zustand $|1\rangle$ oder der bekannte Zustand $|2\rangle$ sein. Ein vollständig bekannter Zustand $|1\rangle$ oder $|2\rangle$ kann aber immer durch Präparation erzeugt werden.

B.8 Bell-Zustände. Bell-Zustands-Messungen

Zwei Photonen mit orthogonalen Polarisationszuständen $|h\rangle, |v\rangle$ (horizontal, vertikal linear polarisiert) fallen aus Richtungen 1, 2 auf einen halbdurchlässigen Spiegel. Eine mögliche Basis bilden die Zustände

$$|h\rangle_1|h\rangle_2 = |h,h\rangle, \quad |v\rangle_1|v\rangle_2 = |v,v\rangle, \quad |h\rangle_1|v\rangle_2 = |h,v\rangle, \quad |v\rangle_1|h\rangle_2 = |v,h\rangle. \quad (\text{B.125})$$

Eine andere mögliche Basis bilden die verschränkten Zustände (Bell-Zustände)

$$\begin{aligned} |\Phi\rangle_{12}^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|h,h\rangle + |v,v\rangle) \quad \text{Spinanteil symmetrisch} \\ |\Phi\rangle_{12}^- &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|h,h\rangle - |v,v\rangle) \quad \text{Spinanteil symmetrisch} \\ |\Psi\rangle_{12}^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|h,v\rangle + |v,h\rangle) \quad \text{Spinanteil symmetrisch} \\ |\Psi\rangle_{12}^- &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|h,v\rangle - |v,h\rangle) \quad \text{Spinanteil antisymmetrisch} \end{aligned} \quad (\text{B.126})$$

Man beachte, daß sich jeder der Zustände Gl. B.126 in jeden der anderen Zustände durch Manipulation eines einzigen Photons umwandeln läßt (z. B. $|\Psi\rangle_{12}^+$ in $|\Psi\rangle_{12}^-$ dadurch, daß die Phase eines der Photonen um π verschoben wird). Zustände $|\Psi\rangle_{12}^-$ lassen sich etwa durch parametrische

Abwärtsmischung in optisch nichtlinearen Kristallen erzeugen (ein Photon der Energie hf zerfällt spontan in zwei Photonen der Energie $hf/2$, welche mit verschränkten orthogonalen Polarisationen in verschiedene, genau definierte Richtungen emittiert werden).

Welcher Bell-Zustand vorliegt, kann durch eine Bell-Zustands-Messung (BSM = Bell state measurement) ermittelt werden.

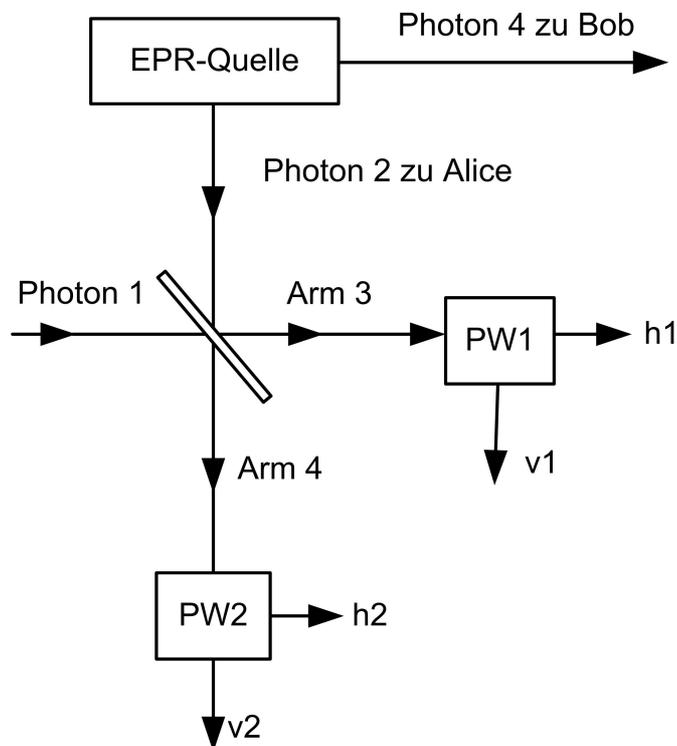


Abbildung B.4: Teleportation, Bell-Zustands-Messung. PW1, PW2 Polarisationsweichen, EPR-Quelle (Einstein-Podolsky-Rosen-Quelle) erzeugt verschränkte Photonen.

Für die BSM wird zunächst angenommen, daß die verschränkten Photonen aus den Richtungen 1, 2 auf den halbdurchlässigen Spiegel fallen, siehe Abb. B.4. Es ergeben sich folgende Verhältnisse:

- $|\Phi\rangle_{12}^+$, $|\Phi\rangle_{12}^-$: Da die Spinanteile der Zustände symmetrisch sind, müssen auch die Ortsanteile symmetrisch sein (Photonen existieren als Bosonen in symmetrischen Zuständen). Beide Photonen gehen entweder in Arm 3 oder in Arm 4, und da sie gleiche Polarisation aufweisen, an der Polarisationsweiche wieder in den selben Ausgang; es landen somit beide Photonen in einem Detektor bei h1 (oder v1, oder h2, oder v2).
- $|\Psi\rangle_{12}^+$: Da der Spinanteil des Zustands symmetrisch ist, muß auch der Ortsanteil symmetrisch sein (Photonen existieren als Bosonen in symmetrischen Zuständen). Beide Photonen gehen wieder entweder in Arm 3 oder in Arm 4, da sie aber orthogonal polarisiert sind, gehen sie nach der Polarisationsweiche in verschiedene Ausgänge. Es landet ein Photon bei h1, eines bei v1 (oder eines bei h2, eines bei v2).
- $|\Psi\rangle_{12}^-$: Da der Spinanteil des Zustands antisymmetrisch ist, muß auch der Ortsanteil antisymmetrisch sein (Photonen existieren als Bosonen in symmetrischen Zuständen). Ein Photon geht in den Arm 3, eines in den Arm 4, da sie aber orthogonal polarisiert sind, gehen sie nach den Polarisationsweichen in verschiedene Ausgänge. Es landet ein Photon bei h1, eines bei v2 (oder eines bei h2, eines bei v1).

B.9 Teleportation eines Quantenzustands

Abb. B.4 zeigt die Versuchsanordnung: Der unbekannte Zustand eines Photons 1 (im Labor bei Alice)

$$|\varphi\rangle_1 = \alpha|h\rangle_1 + \beta|v\rangle_1 \quad (\text{B.127})$$

soll an einem Photon 4 an einem anderen Ort (im Labor von Bob) reproduziert werden. Wie in Abschn. B.7 erläutert wurde, ist ein Klonen des Zustands unmöglich. Es ist aber (wie nachstehend gezeigt wird) möglich, das Photon 1 zu vernichten, und ein Photon 4 mit identischen Eigenschaften zu Bob zu senden.

Zunächst erzeugt eine EPR-Quelle zwei verschränkte Photonen 2, 4 im Zustand

$$|\Psi\rangle_{24}^- = \frac{1}{\sqrt{2}}(|h\rangle_2|v\rangle_4 - |v\rangle_2|h\rangle_4) \quad (\text{B.128})$$

Photon 2 läuft zu Alice, Photon 4 zu Bob. Der Gesamtzustand der Photonen 1, 2 und 4 ist das direkte Produkt der Kets $|\varphi\rangle_1$ und $|\Psi\rangle_{24}^-$:

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle_{124} &= |\varphi\rangle_1 |\Psi\rangle_{24}^- = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha|h\rangle_1 + \beta|v\rangle_1)(|h\rangle_2|v\rangle_4 - |v\rangle_2|h\rangle_4) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha|h\rangle_1|h\rangle_2|v\rangle_4 - \alpha|h\rangle_1|v\rangle_2|h\rangle_4 + \beta|v\rangle_1|h\rangle_2|v\rangle_4 - \beta|v\rangle_1|v\rangle_2|h\rangle_4). \end{aligned} \quad (\text{B.129})$$

Dieser Ket läßt sich mit den in Gl. B.126 definierten Bell-Zuständen folgendermaßen schreiben:

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle_{124} &= \frac{1}{2}|\Phi\rangle_{12}^+(\alpha|v\rangle_4 - \beta|h\rangle_4) + \\ &\quad + \frac{1}{2}|\Phi\rangle_{12}^-(\alpha|v\rangle_4 + \beta|h\rangle_4) + \\ &\quad + \frac{1}{2}|\Psi\rangle_{12}^+(-\alpha|h\rangle_4 + \beta|v\rangle_4) + \\ &\quad + \frac{1}{2}|\Psi\rangle_{12}^-(-\alpha|h\rangle_4 - \beta|v\rangle_4). \end{aligned} \quad (\text{B.130})$$

Alice macht in ihrem Labor an den beiden ihr zur Verfügung stehenden Photonen 1, 2 eine Bell-Zustands-Messung. Das Ergebnis kann einer der vier möglichen Bell-Zustände sein. Ist das Ergebnis der Zustand $|\Psi\rangle_{12}^+$, so kann sie Bob über eine klassischen Kanal mitteilen, daß sich das auf dem Weg zu ihm befindliche Photon 4 im Zustand $|\varphi\rangle_4 = -\alpha|h\rangle_4 - \beta|v\rangle_4$ befindet, also bis auf eine nicht observable Phase π teleportiert wurde. Sollte das Ergebnis der Zustand $|\Psi\rangle_{12}^-$ sein, so kann sie Bob mitteilen, daß sich Photon 4 im Zustand $-\alpha|h\rangle_4 + \beta|v\rangle_4$ befindet, also Bob die Phase zwischen $|h\rangle_4$ und $|v\rangle_4$ noch um π drehen muß. Für die restlichen beiden Möglichkeiten gelten analoge Überlegungen.

B.10 Die Bellsche Ungleichung

In Abschn. 3.1.2 wurde erwähnt, daß in [4] gezeigt wurde, daß es keine lokale Theorie mit verborgenen Variablen geben kann, welche die Vorhersagen der Quantentheorie aus den verschränkten Zuständen dupliziert. Man kann den Photonen beim Start keine klassische a-priori-Information darüber mitgeben, wie sie sich an zwei Orten A, B in einem Experiment zu verhalten haben, derart, daß die Vorhersagen der Quantentheorie mit verschränkten Zuständen dadurch dupliziert würden.

Die Versuchsanordnung sei wie in Abb. 3.1. Ein Analysator für lineare Polarisation bei A kann unter den Winkeln ϑ_{A1} , ϑ_{A2} orientiert werden, einer bei B unter ϑ_{B1} , ϑ_{B2} . Bei A werde eine Variable $a(\vartheta)$ definiert, welche die Werte (+1) oder (-1) annehmen kann, je nachdem, ob ein bei A ankommendes Photon den Analysator passiert oder nicht. Analog wird bei B eine Variable $b(\vartheta)$ definiert, welche ebenfalls die Werte (+1) oder (-1) annehmen kann, je nachdem, ob ein bei

B ankommendes Photon den Analysator passiert oder nicht. Man definiert eine Funktion dieser beiden Variablen

$$F(a, b) = [a(\vartheta_{A2}) + a(\vartheta_{A1})]b(\vartheta_{B1}) + [a(\vartheta_{A2}) - a(\vartheta_{A1})]b(\vartheta_{B2}). \quad (\text{B.131})$$

Wie man durch Einsetzen der möglichen Werte für die Variablen überprüft, kann diese Funktion nur die Werte ± 2 annehmen, es gilt

$$F(a, b) = \pm 2, \quad \text{d. h.} \quad |F(a, b)| = 2. \quad (\text{B.132})$$

Man nimmt nun an, es existiere eine 'verborgene' Variable λ , welche bei der 'Geburt' der Zwilling photons festgelegt wurde und das Zufallsverhalten der Photonen steuert (nämlich, wie sie sich an den Analysatoren zu verhalten haben). Die Variablen a, b sind nun von λ abhängig, $a = a(\vartheta_A, \lambda)$, $b = b(\vartheta_B, \lambda)$.

Mit einer beliebigen Wahrscheinlichkeitsdichte $w(\lambda)$ gilt nun

$$\begin{aligned} \int w(\lambda) d\lambda &= 1, \\ \int w(\lambda) |F(a, b)| d\lambda &= 2, \\ \left| \int w(\lambda) F(a, b) d\lambda \right| &\leq 2. \end{aligned} \quad (\text{B.133})$$

Aus der letzten Zeile in Gl. B.133 folgt durch Einsetzen von $F(a, b)$ aus Gl. B.131 die Beziehung

$$\begin{aligned} | \langle a(\vartheta_{A2}, \lambda) b(\vartheta_{B1}, \lambda) \rangle + \\ + \langle a(\vartheta_{A1}, \lambda) b(\vartheta_{B1}, \lambda) \rangle + \\ + \langle a(\vartheta_{A2}, \lambda) b(\vartheta_{B2}, \lambda) \rangle - \langle a(\vartheta_{A1}, \lambda) b(\vartheta_{B2}, \lambda) \rangle | \leq 2. \end{aligned} \quad (\text{B.134})$$

Die spitzen Klammern bezeichnen Erwartungswerte bezüglich der Zufallsvariablen λ . Kann diese Beziehung (die Bellsche Ungleichung) in Auswertung irgendeines Experiments verletzt werden, so kann für dieses System keine lokale Theorie mit verborgenen Variablen existieren. Im folgenden Abschnitt wird gezeigt, daß diese Gleichung durch Experimente mit verschränkten Zuständen verletzt werden kann.

B.11 Die Verletzung der Bellschen Ungleichung mit verschränkten Zuständen

Es werde der Zustand von Gl. 3.13 untersucht:

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0,0\rangle + |\pi/2, \pi/2\rangle). \quad (\text{B.135})$$

Aus Gl. 3.11, Gl. 3.14 werden folgende Beziehungen übernommen:

$$\begin{aligned} \langle \vartheta_A, \vartheta_B | \psi_0 \rangle &= \langle \vartheta_A - \pi/2, \vartheta_B - \pi/2 | \psi_0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \cos(\vartheta_A - \vartheta_B), \\ \langle \vartheta_A - \pi/2, \vartheta_B | \psi_0 \rangle &= -\langle \vartheta_A, \vartheta_B - \pi/2 | \psi_0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \sin(\vartheta_A - \vartheta_B). \end{aligned} \quad (\text{B.136})$$

Damit erhält man für die Wahrscheinlichkeiten W der einzelnen Ereignisse

$$\begin{aligned} W(\vartheta_A, \vartheta_B) &= W(\vartheta_A - \pi/2, \vartheta_B - \pi/2) = \frac{1}{2} \cos^2(\vartheta_A - \vartheta_B), \\ W(\vartheta_A - \pi/2, \vartheta_B) &= W(\vartheta_A, \vartheta_B - \pi/2) = \frac{1}{2} \sin^2(\vartheta_A - \vartheta_B). \end{aligned} \quad (\text{B.137})$$

Ein quantentheoretisch berechneter Erwartungswert des Produktes von Variablen $a(\vartheta_A)b(\vartheta_B)$ ist daher

$$\begin{aligned} \langle a(\vartheta_A)b(\vartheta_B) \rangle &= (+1)(+1)W(\vartheta_A, \vartheta_B) + (-1)(-1)W(\vartheta_A - \pi/2, \vartheta_B - \pi/2) + \\ &\quad + (+1)(-1)W(\vartheta_A, \vartheta_B - \pi/2) + (-1)(+1)W(\vartheta_A - \pi/2, \vartheta_B) = \\ &= \cos^2(\vartheta_A - \vartheta_B) - \sin^2(\vartheta_A - \vartheta_B) = \cos(2\vartheta_A - 2\vartheta_B). \end{aligned} \quad (\text{B.138})$$

Der nach Gl. B.134 zu berechnende Wert ist somit

$$|\cos(2\vartheta_{A2} - 2\vartheta_{B1}) + \cos(2\vartheta_{A1} - 2\vartheta_{B1}) + \cos(2\vartheta_{A2} - 2\vartheta_{B2}) - \cos(2\vartheta_{A1} - 2\vartheta_{B2})| \quad (\text{B.139})$$

Wählt man beispielsweise für die Winkel

$$\vartheta_{A1} = 0, \quad \vartheta_{A2} = \pi/4, \quad \vartheta_{B1} = \pi/8, \quad \vartheta_{B2} = 3\pi/8, \quad (\text{B.140})$$

so erhält man das Ergebnis

$$|4 \cos(\pi/4)| = \left| \frac{4}{\sqrt{2}} \right| = 2\sqrt{2} > 2. \quad (\text{B.141})$$

Damit ist die Bellsche Ungleichung verletzt. Meßergebnisse mit verschränkten Zuständen sind somit nicht durch eine lokale Theorie mit verborgenen Variablen zu erklären.

Eine ausführliche Behandlung von verschränkten Zuständen (mathematische Behandlung, Erzeugung, ferner Grundlagen der in dieser Vorlesung nicht behandelten sogenannten Quetschzustände = squeezed states) mit vielen weiterführenden Literaturangaben findet man in [6], [27], [7].

Literaturverzeichnis

- [1] Aharonov, Y.; Bohm, D.: Significance of electromagnetic potentials in quantum theory. *Phys. Rev.* 115 (1959) 485–491
- [2] Albert, D. Z.: Bohm’s alternative to quantum mechanics. *Sci. Am.* (1994), May, 32–39
- [3] Bate, R. T.: The quantum-effect device: Tomorrow’s transistor? *Sci. Am.* (1988), March, 78–82
- [4] Bell, J. S.: On the Einstein Podolsky Rosen Paradox. *Physics I* (1964) 195–200
- [5] Bell, J. S.: *Speakable and Unsayable in Quantum Mechanics. Collected papers on quantum philosophy.* Cambridge University Press 2004, ISBN 978-0-521-52338-7
- [6] DiGuglielmo, James: *Entangled States of Light.* Diplomarbeit, Matr. Nr. 2323400, Leibniz Universität Hannover, Max-Planck-Institut für Gravitationsphysik (Albert-Einstein-Institut). Hannover, September 2006.
- [7] Dong, Rui-Fang: *Generation and Distillation of Nonclassical Polarization States of Intense Light.* Dissertation, Naturwissenschaftliche Fakultät der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, Tag der mündlichen Prüfung 09. Juni 2009.
- [8] Einstein, A.; Podolsky, B.; Rosen, N.: Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete?: Wheeler, J. A.; Zurek, W. H. (Hrsg.): *Quantum theory and measurement.* Princeton, New Jersey: Princeton University Press 1983, S. 137–151
- [9] Englert, B. G.: *Spin coherence in Stern-Gerlach interferometers,* A. O. Barut (Hrsg.): *New frontiers in quantum electrodynamics and quantum optics.* New York: Plenum Press 1990, S. 521–530
- [10] Englert, B. G.; Schwinger, J.; Scully, M. O.: *Center-of-mass motion of masing atoms,* A. O. Barut (Hrsg.): *New frontiers in quantum electrodynamics and quantum optics.* New York: Plenum Press 1990, S. 513–519
- [11] Englert, B. G.; Scully, M. O.: *Good and bad welcher weg detectors,* A. O. Barut (Hrsg.): *New Frontiers in quantum electrodynamica and quantum optics.* New York: Plenum Press 1990, S. 507–512
- [12] Englert, B. G.; Scully, M. O.; Walther, H.: *The duality in matter and light.* *Sci. Am.* (1994), December, 56–61
- [13] Feynman, R. P.: *The Feynman Lectures on Physics: Mechanics, Radiation, and Heat.* Reading, Mass.; Addison-Wesley 1963
- [14] Feynman, R. P.: *The Feynman Lectures on Physics: Electromagnetism and Matter.* Reading, Mass.: Addison-Wesley 1964
- [15] Feynman, R.P.: *The Feynman Lectures on Physics: Quantum Mechanics.* Reading, Mass.: Addison-Wesley 1965

- [16] Feynman; Leighton; Sands: Vorlesungen über Physik, Band III: Quantenmechanik (deutsch-engl.) München-Wien: R. Oldenbourg 1971
- [17] Fick, E.: Einführung in die Grundlagen der Quantentheorie. Frankfurt/Main: Akad. Verlagsgesellschaft 1968
- [18] Grau, D.: Übungsaufgaben zur Quantentheorie - Quantentheoretische Grundlagen. Buchreihe der Atomenergie, Band 9 München: Karl Thiemeig 1975
- [19] Grau, G. K.: Quantenelektronik. Optik und Laser. Springer-Verlag 1978
- [20] Grau, G. K.: Optische Nachrichtentechnik. Eine Einführung. 1. Aufl., 2. Aufl. München: Springer-Verlag 1981, 1986
- [21] Grau, G. K.; Freude, W.: Optische Nachrichtentechnik. Eine Einführung. 3. Aufl. München: Springer-Verlag 1991
- [22] Greenberger, D. M.; Ya'sin, A.: The haunted measurement in quantum theory, D. M. Greenberger (Hrsg.): New techniques and ideas in quantum measurement theory. New York: Annals New York Academy of Sciences 1986, S. 449–457
- [23] Greene, B.: Der Stoff, aus dem der Kosmos ist. Raum, Zeit und die Beschaffenheit der Wirklichkeit. Goldmann Taschenbuch 15487, April 2008 (amerikanische Originalausgabe „The Fabric of the Cosmos“ 2004 bei Alfred A. Knopf, New York)
- [24] Heiblum, M.; Eastman, L. F.: Ballistic electrons in semiconductors. *Sci. Am.* (1987), February, 65–73
- [25] Imry, Y.; Webb, R. A.: Quantum interference and the Aharonov-Bohm effect. *Sci. Am.* (1989), April, 36–42
- [26] Jaynes, E. T.: Quantum Beats, A. O. Barut (Hrsg.): Foundation of radiation theory and quantum electrodynamics. New York: Plenum Press 1980, S. 37–43
- [27] Ling, Alexander Euk Jin: Entangled State Preparation for Optical Quantum Communication: Creating and characterizing photon pairs from Spontaneous Parametric Down Conversion inside bulk uniaxial crystals. A Thesis submitted for the degree of PhD, Department of Physics, National University of Singapore, Singapore 2008.
- [28] Mandel, L.: Coherence and indistinguishability. *Opt. Lett.* 16 (1991) 1882–1883
- [29] Maudlin, T.: Quantum Non-Locality and Relativity. Metaphysical Intimations of Modern Physics. Blackwell Publishing 2002, ISBN 978-0-6312-3221-6
- [30] Mermin, N. D.: Is the moon there when nobody looks? Reality and the quantum theory. *Phys. Today* 38 (1985) 38–47
- [31] Merzbacher, E.: Single valuedness of wave functions. *Am. J. Phys.* 30 (1962) 237–247
- [32] Messiah, A.: Quantum Mechanics, Vol. I North-Holland Publishing Co. 1965
- [33] Messiah, A.: Quantum Mechanics, Vol. II North-Holland Publishing Co. 1966
- [34] Nauenberg, M.; Stroud, C.; Yeazell, J.: The classical limit of an atom. *Sci. Am.* (1994), June, 24–29
- [35] Peres, A.: Can we undo quantum measurements? *Phys. Rev. D* 22 (1980) 879–883
- [36] Ruthen, R.: Waves are waves. *Sci. Am.* (1991), August, 11–12
- [37] Schleich, W. P.; Barnett, S. M. (Hrsg.): Quantum phase and phase dependent measurements. *Phys. Scr. T* 48, Royal Swedish Academy of Sciences 1993

- [38] Schrödinger, E.: Die gegenwärtige Situation in der Quantenmechanik: Wheeler, J. A.; Zurek, W. H. (Hrsg.): Quantum theory and measurement. Princeton, New Jersey: Princeton University Press 1983, S. 98–129
- [39] Scully, M. O.; Drühl, K.: Quantum eraser: A proposed photon correlation experiment concerning observation and „delayed choice“ in quantum mechanics. Phys. Rev. A 25 (1982) 2208–2213
- [40] Scully, M. O.; Englert, B. G.; Schwinger, J.: Spin coherence and humpty-dumpty. III. The effects of observation. Phys. Rev. A. 40 (1989) 1775–1784
- [41] Scully, M. O.; Englert, B. G.; Walther, H.: Quantum optical tests of complementarity. Nature 351 (1991) 111–116
- [42] Scully, M. O.; Walther, H.: Quantum optical test of observation and complementarity in quantum mechanics. Phys. Rev. A. 39 (1989) 5229–5236
- [43] Shimony, A.: The reality of the quantum world. Sci. Am. (1988), January, 36–43
- [44] Walther, H.: Atome im nichtklassischen Licht. Phys. Bl. 47 (1991) 38–42
- [45] Yacoby, A.; Heiblum, M.; Umansky, V.; Shtrikman, H.; Mahalu, D.: Unexpected periodicity in an electronic double slit experiment. Phys. Rev. Lett. 73 (1994) 3149–3152
- [46] Yam, P.: Rubbed out with the quantum eraser. Sci. Am. (1996), January, 17–18
- [47] Zeilinger, A.: Einsteins Spuk. Teleportation und andere Mysterien der Quantenphysik. Bertelsmann Verlag, München 2005

Druckfehler, Anmerkungen

Die in der Version 2010/2011 gefundenen Druckfehler wurden in dieser Ausgabe berichtigt, die Literaturliste wurde durch einige Zitate ergänzt.

Eine Sammlung von Übungsaufgaben zur Quantentheorie mit Lösungen, Anwendungen, Formelsammlung und Liste der physikalischen Konstanten findet man unter www.dietrich-grau.at im Internet (zusammengestellt von Dr. Dietrich Grau, Assistenzprofessor und Universitätslektor i. R., Institut für Theoretische Physik der Technischen Universität Wien).

Sollten Sie in der Ausgabe 2011/2012 weitere Druckfehler entdecken, so bitte ich um Mitteilung per E-mail unter

`gerhard.grau @ etit.uka.de`

Andere Ableitung von Gl. (B.12) - (B.14)

Grundgedanke: Eine Größe ist dann berechnet, wenn sie auf einer Seite einer Gleichung mit einer 1 oder einem Einheitsoperator multipliziert erscheint.

Aus

$$|b_i\rangle = \underline{U} |a_i\rangle$$

folgt $\sum_i |b_i\rangle\langle a_i| = \underline{U} \sum_i |a_i\rangle\langle a_i| = \underline{U} I = \underline{U}$

oder, adjungiert $\underline{U}^+ = \sum_i |a_i\rangle\langle b_i|$

Die Matrixelemente von \underline{U} und \underline{U}^+ in der a-Darstellung sind:

$$U_{ij}^{(a)} = \langle a_i | \underline{U} | a_j \rangle = \langle a_i | \sum_k | b_k \rangle \langle a_k | a_j \rangle = \sum_k \langle a_i | b_k \rangle \delta_{jk} = \langle a_i | b_j \rangle$$

$$U_{ij}^{+(a)} = \langle a_i | \underline{U}^+ | a_j \rangle = \langle a_i | \sum_k | a_k \rangle \langle b_k | a_j \rangle = \sum_k \delta_{ik} \langle b_k | a_j \rangle = \langle b_i | a_j \rangle = \langle a_j | b_i \rangle^*$$

Erläuterung zur Bemerkung nach Gl. (B.122)

Ein Zustand sei antisymmetrisch bezüglich einer Vertauschung der Teilchen ($|1\rangle, |2\rangle$ bezeichnen die Eingänge 1, 2 am Spiegel, die Subskripte 1, 2 bezeichnen die Teilchen):

$$|a\rangle = 1/\sqrt{2} (|1\rangle_1 |2\rangle_2 - |2\rangle_1 |1\rangle_2)$$

Ein Zustand sei antisymmetrisch in der Polarisation ($|h\rangle, |v\rangle$ bezeichnen horizontale und vertikale lineare Polarisation):

$$|p\rangle = 1/\sqrt{2} (|h\rangle_1 |v\rangle_2 - |v\rangle_1 |h\rangle_2)$$

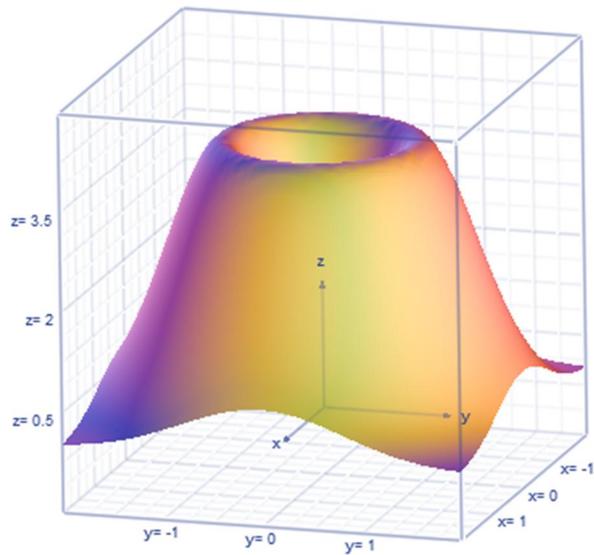
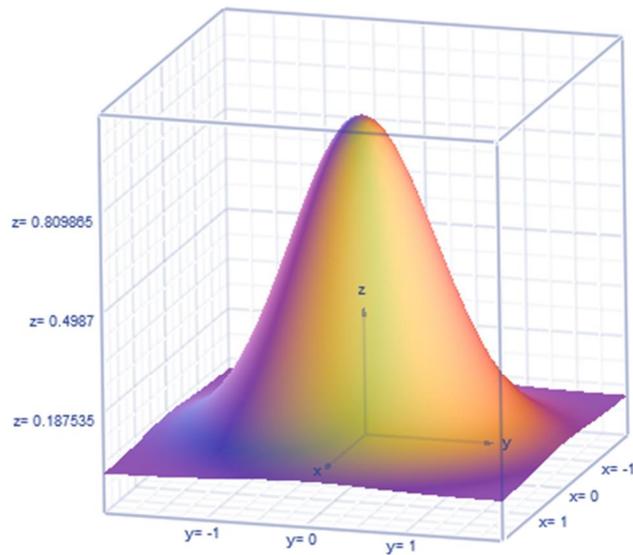
Der Zustand $|a\rangle |p\rangle$ enthält nach Multiplikation vier Terme

$$|a\rangle |p\rangle = 1/2 (|1, h\rangle_1 |2, v\rangle_2 - |1, v\rangle_1 |2, h\rangle_2 - |2, h\rangle_1 |1, v\rangle_2 + |2, v\rangle_1 |1, h\rangle_2)$$

Der resultierende Zustand ist somit symmetrisch bezüglich einer Vertauschung der beiden Teilchen.

Wahrscheinlichkeitsdichten (siehe Kap. B.3.6)

(aufgetragen in z -Richtung) von Kophasalkomponente (x -Richtung im Diagramm) und Quadraturkomponente (y -Richtung im Diagramm) von thermischem (= Gaußschem) Rauschen und von einem Oszillator, bei dem eine stabile Amplitude vorhanden ist (die Phase ist gleichverteilt, da für sie keine Rückstellkraft existiert; für einen idealen Oszillator wird die Fläche zu einem Dirac-Zylinder).



Erläuterung zu Formel B.131

$a(\vartheta_{A1})$	$a(\vartheta_{A2})$	$b(\vartheta_{B1})$	$b(\vartheta_{B2})$	$a(\vartheta_{A2}) + a(\vartheta_{A1})$	$a(\vartheta_{A2}) - a(\vartheta_{A1})$	Summe oder Differenz der letzten beiden Spalten
1	1	1	1	2	0	± 2
1	1	1	-1	2	0	± 2
1	1	-1	1	2	0	± 2
1	1	-1	-1	2	0	± 2
1	-1	1	1	0	-2	± 2
1	-1	1	-1	0	-2	± 2
1	-1	-1	1	0	-2	± 2
1	-1	-1	-1	0	-2	± 2
-1	1	1	1	0	2	± 2
-1	1	1	-1	0	2	± 2
-1	1	-1	1	0	2	± 2
-1	1	-1	-1	0	2	± 2
-1	-1	1	1	-2	0	± 2
-1	-1	1	-1	-2	0	± 2
-1	-1	-1	1	-2	0	± 2
-1	-1	-1	-1	-2	0	± 2

Bellsche Ungleichung (andere Ableitung)

(siehe auch Kapitel B.10 der Vorlesung „Einführung in die Quantentheorie“).

Identische Zwillinge

1. Größe (möglich: groß, klein)
2. Augen (möglich: blau, braun)
3. Haare (möglich: dunkel, hell)

Identische Photonenzwillinge

1. Polarisation unter ϑ_1 (möglich: H1, V1)
2. Polarisation unter ϑ_2 (möglich: H2, V2)
3. Polarisation unter ϑ_3 (möglich: H3, V3)

Es gibt 8 Möglichkeiten für die Messung der drei meßbaren Eigenschaften Größe, Augenfarbe, Haarfarbe der Zwillingpaare:

groß=H1	blau=H2	dunkel=H3
groß=H1	blau=H2	hell=V3
groß=H1	braun=V2	dunkel=H3
groß=H1	braun=V2	hell=V3
klein=V1	blau=H2	dunkel=H3
klein=V1	blau=H2	hell=V3
klein=V1	braun=V2	dunkel=H3
klein=V1	braun=V2	hell=V3

Für die Anzahl der Paare mit bestimmten Eigenschaften gilt folgende Ungleichung:

$$\begin{aligned}
 \text{Anzahl} \left(\begin{array}{l} \text{groß=H1} \\ \text{blau=H2} \\ \text{Haare beliebig} \end{array} \right) &\leq \text{Anzahl} \left(\begin{array}{l} \text{groß=H1} \\ \text{Augen beliebig} \\ \text{dunkel=H3} \end{array} \right) + \text{Anzahl} \left(\begin{array}{l} \text{Größe beliebig} \\ \text{blau=H2} \\ \text{hell=V3} \end{array} \right) = \\
 &= \text{Anzahl} \left(\begin{array}{l} \text{groß=H1} \\ \text{blau=H2} \\ \text{dunkel=H3} \end{array} \right) + \text{Anzahl} \left(\begin{array}{l} \text{groß=H1} \\ \text{braun=V2} \\ \text{dunkel=H3} \end{array} \right) + \\
 &\quad + \text{Anzahl} \left(\begin{array}{l} \text{groß=H1} \\ \text{blau=H2} \\ \text{hell=V3} \end{array} \right) + \text{Anzahl} \left(\begin{array}{l} \text{klein=V1} \\ \text{blau=H2} \\ \text{hell=V3} \end{array} \right)
 \end{aligned}$$

Das Gleichheitszeichen gilt nur dann, falls

$$\text{Anzahl} \left(\begin{array}{l} \text{groß=H1} \\ \text{braun=V2} \\ \text{dunkel=H3} \end{array} \right) = 0 \quad \text{und} \quad \text{Anzahl} \left(\begin{array}{l} \text{klein=V1} \\ \text{blau=H2} \\ \text{hell=V3} \end{array} \right) = 0$$

Kann diese Ungleichung verletzt werden, so bedeutet das, daß die Annahme des lokalen Realismus für die betrachteten Messungen nicht gilt (lokal = die Messung an einem Ort ist unabhängig von einer Messung an einem anderen Ort; Realismus = die gemessenen Objekte haben die ihnen zugeschriebenen Eigenschaften tatsächlich und unveränderlich).

Die Photonenzwillinge seien im Zustand $|\psi\rangle = (|0,0\rangle + |\pi/2, \pi/2\rangle) / \sqrt{2}$.

Die Wahrscheinlichkeitsamplitude, daß sie unter ϑ_A, ϑ_B orientierte Analytoren passieren:

$$\langle \vartheta_A, \vartheta_B | \psi \rangle = (1/\sqrt{2}) \cos(\vartheta_A - \vartheta_B), \quad \langle \vartheta_A, \vartheta_B - \pi/2 | \psi \rangle = -(1/\sqrt{2}) \sin(\vartheta_A - \vartheta_B)$$

Obige Ungleichung lautet daher für diese (verschränkten) Zwillinge:

$$|\langle \vartheta_1, \vartheta_2 | \psi \rangle|^2 \leq |\langle \vartheta_1, \vartheta_3 | \psi \rangle|^2 + |\langle \vartheta_2, \vartheta_3 - \pi/2 | \psi \rangle|^2$$

Speziell gilt für $\vartheta_1 = \pi/8, \vartheta_2 = 0, \vartheta_3 = -\pi/8$

$$\cos^2(\pi/8) \leq \cos^2(\pi/4) + \sin^2(\pi/8)$$

$$\cos^2(\pi/8) - \sin^2(\pi/8) \leq \cos^2(\pi/4)$$

$$\cos(\pi/4) \leq \cos^2(\pi/4)$$

$$1 \leq \cos(\pi/4)$$

Die Ungleichung ist verletzt. Lokaler Realismus gilt nicht für verschränkte Zustände.