

Theoretische Physik III

Quantenmechanik

Vorlesung von Prof. Dr. Andreas Buchleitner im Sommersemester 2019

Markus Österle Damian Lanzenstiel

6. Mai 2019

Inhaltsverzeichnis

0	Einleitung	2
0.1	Wichtige Infos	2
0.2	Programm	2
0.3	Litaratur	2
I	Quantenmechanik - Intro	4
I.1	Wave-particle duality at the double-slit	5
I.1.1	Consequences and terminology	6
I.2	Measure, filtering and spectral decomposition	7
II	Messungen, Zustände, Operatoren im Hilbertraum	9
II.1	Zustände und Projektoren im Hilbertraum	9
II.2	Lineare, normale hermitesche, selbstadjungierte Operatoren	11

Kapitel 0

Einleitung

0.1 Wichtige Infos

Professor Andreas Buchleitner Zi. 901

abu@uni-freiburg.de

buchleitner_office@physik.uni-freiburg.de

Sekretäre Gislinde Bühler & Susanne Trantke Zi. 804

Übungsleiter Eduardo Carnio, Zi. 910

eduardo.carnio@physik.uni-freiburg.de

ILLIAS Theorie III: Password: TPIIIss19

Klausur 15. Juli 13:00 - 16:00 Uhr im großen Hörsaal

0.2 Programm

- Proseminar (BSc) zus. mit MSc-Seminar
QM für Liebhaber & Interpretation of QM
- Kolloquium montags 17:15 Uhr 27. Mai Göttinger Erklärung, CF v. W.
- 23.-27. September DPG Fall Meeting, Quantum Sciences and IT

0.3 Litaratur

(auch auf ILLIAS gelistet)

- C. Cohen-Tannodji, B. Diu, F. Lafoë, Mécaunique quantique, F,D,E, Vol I + II
- O. Hittmeier Lehrbuch d. Quantenmechanik, Thienig 1972
- B. - G. Engert, Lectures on quantum mechanics, I - IV, World Scientific 2006
- M. Bartelmann et al, Theoretische Physik, Springer 2015
- J.J. Sakurai, Modern Quantummechanics, Addison-Wesley 1995
- A. Peres, Quantum Theory: Concepts and Methods, Kluwer 1995
- M.A. Nielson, I. L. Chang, Quantum Computation & Quantum Information, Cambridge University Press 2000

- Landau & Lifschitz, Lehrbuch der Theoretischen Physik Bd. III

Formelsammlung: Bronstein & Semendiciev. Taschenbuch d. Mathematik

Kapitel I

Quantenmechanik - Intro

Quantenmechanik (QM) beschreibt den Mikrokosmos (im Gegensatz zum Makrokosmos).

- im CD-Player
- im Handy
- Kernspin
- Zeitstandards

QM ist „merkwürdig“ insofern, als anthropomorpher Anschauung unangepasst. \Rightarrow Sie sorgt noch heute für hitzige und kontroverse Debatten.

→ siehe Podcasts PI - Kolloquium, z.B. Nicoles Gisin 15.04.2009, Reinhard Werner 24.12.2007

→ mathematischer Rahmen relativ einfach, doch Interpretation schwierig
 \Rightarrow Feynman: „Shut up and calculate!“

Historische Genese: Wie (fast?) alle physikalischen Theorien aus experimenteller Evidenz, die mit der „klassischen“ Theorie nicht vereinbar war.

Aus **theoretischer „Notlage“ angesichts bestehender Experimente:**

Balmer-Linien (1885), Franck-Hertz-Versuch (1913), Photoeffekt (Hallweds 1888 & Einstein 1905), Schwarzkörperspektrum (Planck 1900), Compton-Effekt (1921), Kernspaltung (Halm, Meitner und Strassmann 1939), Stern-Gerlach-Versuch (1921).

Große Namen: N. Bohr, W. Heisenberg, E. Schrödinger, M. Born, John v. Neumann, A. Sommerfeld, L. de Broglie, P. Dirac, W. Pauli, L. Szilárd, R. Oppenheimer, Gamow, Siegelt, Hellmann, Ettore Majorana.

Zu Majorana: Leonardo Sciascia: La Scomparsa di Majorana (Das Verschwinden des Majorana).

Buchempfehlung: Richard Rhodes: Die Atombombe oder die Geschichte des 8. Schöpfungstages

Weitere Quantenmechaniker: E. Teller, A. Sacharov, L. Landau, J. Belt, M. Gutzwiller.

Korrespondenzprinzip: Wie korrespondieren die QM-Theorien mit den klassischen Theorien? Wie sieht der Übergang vom diskreten zu einem kontinuierlichen Spektrum aus?

Beispiel: Atommodell mit quantisierten Elektronen-Orbitalen von Bohr und dem Klassischen Modell von Rutherford und kontinuierlichen Kepler-Orbitalen.

Die Energieniveaus eines Wasserstoff Atoms sind: $E = \frac{1}{2n^2}$. Daraus folgt, dass höhere Energieniveaus immer näher aneinander liegen. Die Energiedifferenzen $E_{n+1} - E_n \sim \hbar\omega_{\text{Kepler}}$ werden also immer geringer. Die Umlauffrequenz kann also mit zunehmender Hauptquantenzahl immer genauer bestimmbar.

I.1 Wave-particle duality at the double-slit

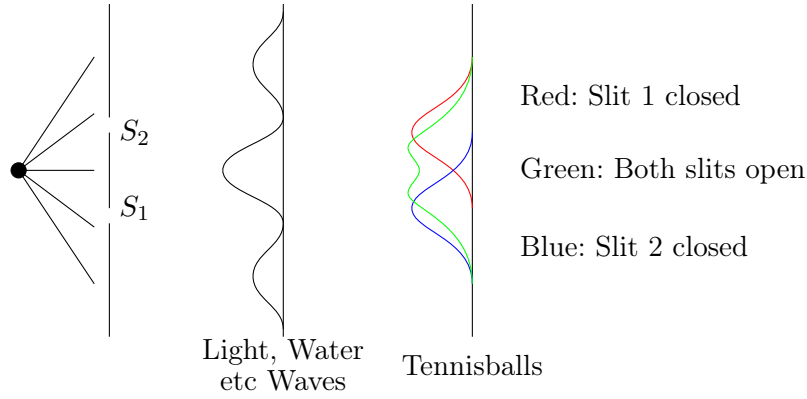


Abbildung I.1: Double-slit Experiment by Young (1803)

For Waves the complex amplitudes $E_1(x)$ and $E_2(x)$ coming from slits 1 and 2 and arriving at point x on the screen add up

$$E(x) = E_1(x) + E_2(x) \quad (\text{I.1})$$

The corresponding intensity reads:

$$I(x) \propto |E(x)|^2 = \underbrace{|E_1(x)|^2 + |E_2(x)|^2}_{\substack{\text{"classical" intensities} \\ \text{e.g. with Tennis balls} \\ \text{ladder contribution}}} + \underbrace{2\Re(E_1^*(x)E_2(x))}_{\substack{\text{interference term} \\ \sim \cos(\varphi_2(x) - \varphi_1(x)) \\ \text{contains phase information} \\ \text{cross term}}} \quad (\text{I.2})$$

$$|E_1 + E_2|^2 = (E_1 + E_2)(E_1^* + E_2^*) = |E_1|^2 + |E_2|^2 + 2\Re(E_1^*E_2)$$

ladder contribution	cross contribution
$\begin{array}{c} \overbrace{E_1 \text{ --- } E_1^*} \\ E_2 \text{ --- } E_2^* \\ \underbrace{\hspace{1.5cm}} \end{array}$	$\begin{array}{c} \overbrace{E_1 \text{ --- } E_2^*} \\ E_2 \text{ --- } E_1^* \\ \underbrace{\hspace{1.5cm}} \end{array}$
$ E_1 ^2 + E_2 ^2$	$+ \quad 2\Re(E_1^*E_2)$

→ **Light is a wave phenomenon**

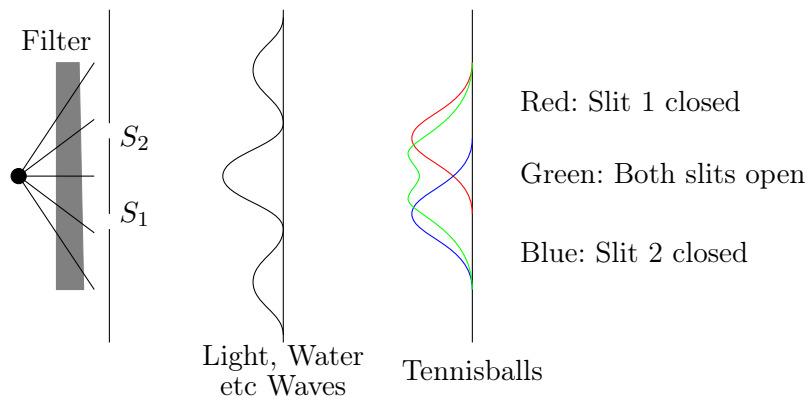


Abbildung I.2: T3 Doppelspalt mit Filter

If we make the source weaker and weaker and have a sufficiently sensitive screen/detector, we observe the arrival of **single point-like** photons on the screen (photo-electric effect Einstein (1905) (\rightarrow corpusculan hypothesis))

By making the source sufficiently weak, we can ensure that at most 1 photon is present in the interferometer at a given time. \rightarrow no possible interaction between photons!

If we **integrate** over many single detection events, we recover the interference pattern.

We can make statistical predictions about the position of individual detection events (the integrated signal forms a probabilistic distribution) but the individual photons clearly don't have a deterministic trajectory (otherwise no interference).

Summary

- Upon detection, light behaves like an assembly of particles.
- The density of detection events reproduces the predictions of the wave picture (classical electromagnetism).
- We cannot explain the appearance of an interference pattern if we treat the photons as classical particles. Each photon goes through both slits 1 and 2: two classically exclusive alternatives.

I.1.1 Consequences and terminology

The agreement of the probability distribution for individual detections events with the predictions of optics (classical field theory) justifies referring to $E(x, t)$ as a **probability amplitude** of the photons. $|E(x, t)|^2$ is the corresponding **probability density** (normalized, real, other attributes ...) for detection at point x and time t . Later on, we use $\psi(x, t)$ instead of $E(x, t)$ for the **wavefunction**.

The appearance of both wave and particle properties in the behavior of microscopic objects is known as **wave-particle duality**.

This raises the question of the “**critical scale**” below which these phenomenon take place and above which our classical representations hold.

Remarks:

- I) In optics, interference follows from the superposition principle, which is a consequence of the linearity of the field equations.

Correspondingly the equations of QM are also linear and the superpositions principle applies.

- II) The probabilistic predictions of the wave picture can only be accessed by accumulating many individual detection events, i.e. by repeating the same experiment.

Individual events are not predictable, QM only makes statistical predictions.

- III) There is a strong effect to push this critical scale function into the macroscopic world (e.g. experiments M. Arndt, Vienna interference of C_{60} molecules).

I.2 Measure, filtering and spectral decomposition

(Messung, Filterung und spektrale Zerlegung)

Classical field:

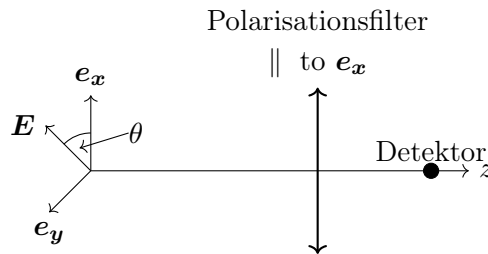


Abbildung I.3: Linearly polarized beam of monochromatic light

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = E_0 \hat{e}_p e^{i(kz - \omega t)} \quad (\text{I.3})$$

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = & E_0 \cos \theta \mathbf{e}_x e^{i(kz - \omega t)} \\ & + E_0 \sin \theta \mathbf{e}_y e^{i(kz - \omega t)} \end{aligned}$$

After the filter

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = E_0 \cos \theta \mathbf{e}_x e^{i(kz - \omega t)}$$

Intensity:

$$I' \propto |E'|^2 \quad I \propto |E|^2$$

Malus' law

$$I' = I \cos^2 \theta \quad (\text{I.4})$$

What happens if we weaken the source to obtain single photons?

→ 2 possible options:

- a single photon passes completely (click on detector): event "1"
- or it does not pass at all (no click): event "0"

For each photon, the outcome cannot be predicted with certainty.

Upon averaging over a large number of photons, the fraction which makes it through is:

$$\frac{N_1}{n_1 + n_0} \rightarrow \cos^2 \theta$$

in accordance with Malus' law (I.4).

E.g.: 10010001110101

Special cases:

- $\theta = 0^\circ \rightarrow$ all photons go through: 1111...1
- $\theta = 90^\circ \rightarrow$ no photon goes through: 0000...0

\Rightarrow in this case the output is certain but experiment must be repeated many times to prove that this is the case.

In these cases, we say that the photon finds itself in an **eigenstate**. One state: $|1\rangle$ for \hat{e}_x polarized and one state $|0\rangle$ for \hat{e}_y polarized which is associated with the particular outcomes for **eigenvalues** 1 and 0.

Sichere (Quanten-) Ereignisse gibt es allein für $\hat{e}_p = \hat{e}_x$ bzw. $\hat{e}_p = \hat{e}_y$. Diese Polarisationsrichtungen definieren die **Eigenzustände** $|1\rangle$ (\hat{e}_x) bzw. $|0\rangle$ (\hat{e}_y) zu den **Eigenwerten** 1 bzw. 0.

Für eine allgemeine Wahl von \hat{e}_p haben wir die Orthogonalzerlegung

$$\hat{e}_p = \hat{e}_x \cos \theta + \hat{e}_y \sin \theta \quad (\text{I.5})$$

Die Wahrscheinlichkeit für „0“ **oder** „1“ ergibt sich als:

$$\cos^2 \theta + \sin^2 \theta = 1 \quad (\text{I.6})$$

wie gewünscht.

(I.5) kann als „**spektrale Zerlegung**“ des Polarisationszustandes \hat{e}_p in die durch den Mesapparat/Filter definierten Eigenzustände \hat{e}_x und \hat{e}_y bzw. $|1\rangle$ und $|0\rangle$.

Lässt man Photonen, die durch F transmittiert werden, durch einen weiteren Filter F' der selben Orientierung wie F gehen, so folgt ein **sicheres** Ereignis, da das Photon durch F im Eigenzustand \hat{e}_x von F' **präpariert** wurde.

In diesem Sinne: Zustandspräparation \equiv Filterung (-smessung)

Bemerkung

- (1) Um sich davon zu überzeugen, dass das System in einem Eigenzustand präpariert wurde, muss Statistik über viele ($N \gg 1$) Photonen betrieben werden.
- (2) (I.5) und (I.6) legen bereits die essentielle Vektorraumstruktur des QM mit vorzugsweise orthonormierten Basisvektoren fest.
- (3) Systeme, die sich mit $|0\rangle$ und $|1\rangle$ vollständig beschreiben lassen heißen: **Zweiniveausysteme**

Kapitel II

Messungen, Zustände, Operatoren im Hilbertraum

Nun die etwas mathematischere Fassung, die letztlich (streng) durch die Theorie selbst-adjungierter Operatoren im Hilbertraum gegeben ist ¹. Ziel der mathematischen Darstellung, ist letztlich eine geometrische Anschauung des Hilbertraums.

II.1 Zustände und Projektoren im Hilbertraum

Zustandsvektor, abstrakt geschrieben: $|\psi\rangle^2$ (stellt \hat{e}_p), entsprechend $|1\rangle$ statt \hat{e}_x , $|0\rangle$ statt \hat{e}_y , c_1 statt $\cos\theta$, c_0 statt $\sin\theta$ in (I.5),

$$\Rightarrow |\psi\rangle \stackrel{(I.5)}{=} c_0|0\rangle + c_1|1\rangle \quad (II.1)$$

wobei wir außerdem c_0 und c_1 kompaktwertig wählen ³

Gemäß (II.1) ist $|\psi\rangle$ ein Vektor in einem komplexen, zweidimensionalen Vektorraum, der zusätzlich mit dem **kanonischen Skalarprodukt** (\cdot, \cdot) verziert sein soll.

$$\begin{aligned} c_0 &= (|0\rangle, |\psi\rangle) =: \langle 0|\psi\rangle & c_1 &= (|1\rangle, |\psi\rangle) =: \langle 1|\psi\rangle \\ |c_0|^2 + |c_1|^2 &= 1 \quad (\text{s.o. (I.5) und (I.6)}) & \langle 0|1\rangle &= \langle 1|0\rangle = 0 \end{aligned} \quad (II.2)$$

Verallgemeinerung dieser Struktur auf Vektorraum \mathcal{H} mit abzählbarer Dimension $\dim \mathcal{H} =: d_{\mathcal{H}}$, das zusätzlich vollständig⁴⁵ bzgl. des durch das iobige Skalarprodukt induzierter Norm:

$$\|\cdot\| = (\cdot, \cdot)^{1/2} \quad (II.3)$$

sein soll. Ein solcher Vektorraum heißt **Hilbertraum**.

Weitere Schreibweisen für $|\varphi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}$:

$$\begin{aligned} (|\varphi\rangle, |\psi\rangle) &= \left((\varphi_1, \dots, \varphi_{d_{\mathcal{H}}})^{\top}, (\psi_1, \dots, \psi_{d_{\mathcal{H}}})^{\top} \right) = (\varphi_1^*, \dots, \varphi_{d_{\mathcal{H}}}^*) \cdot \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_{d_{\mathcal{H}}} \end{pmatrix} \\ &= \sum_{j=1}^{d_{\mathcal{H}}} \varphi_j^* \psi_j = \langle \varphi | \psi \rangle \end{aligned} \quad (II.4)$$

¹s. linear Operations in Hilbertspace, Joachim Weidmann, Springer-Vlg

²Diese Schreibweise kommt aus der notation von „maps to“ \mapsto und wurde später zu $|\dots\rangle$.

³siehe Übungsaufgabe zu ellipisch polarisierten EM-Wellen

⁴d.h. alle Cauchy-Folgen konvergieren in \mathcal{H} .

⁵s. z. B. Barner, Flohr, Analysis I, S1199, Analysis II, S145

Damit festgelegt:

$$|\psi\rangle = (\psi_1 \ \dots \ \psi_{d_{\mathcal{H}}})^T = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_{d_{\mathcal{H}}} \end{pmatrix}$$

$$\langle\varphi| = (\varphi_1^* \ \dots \ \varphi_{d_{\mathcal{H}}}^*) = \left(|\varphi\rangle^T\right)^* =: |\varphi\rangle^\dagger \quad (\text{II.5})$$

$|\varphi\rangle^\dagger = \langle\varphi|$ heißt der zu $|\varphi\rangle$ **adjungierte** Vektor, „†“ wird „kreuz“, „cross“, „dagger“ gelesen. Analog zu (II.1) können wir jedem Zustand $|\psi\rangle$ in der zugehörigen Orthonormalbasis (ONB) die Darstellung:

$$|\psi\rangle = \sum_{j=1}^{d_{\mathcal{H}}} \langle j|\psi\rangle |j\rangle \quad (\text{II.6})$$

Wir fordern die Normierung der Wellenfunktion ψ :

$$\langle\psi|\psi\rangle = ||\psi||^2 = 1 \quad (\text{II.7})$$

$$(\text{II.6}) \quad \hat{=} \quad \sum |j\rangle\langle j|\psi\rangle \quad \forall |\psi\rangle$$

zuordnen.

$$|\psi\rangle = \sum |j\rangle\langle j|\psi\rangle \quad \forall |\psi\rangle$$

Zerlegung der Eins / Vollständigkeitsrelation

$$\Rightarrow \sum \underbrace{|j\rangle\langle j|}_{\text{Projektor}} = \mathbb{1} = (\text{id}) \quad (\text{II.8})$$

Die Zerlegung der Eins \equiv Identität in die „**Projektionsoperatoren**“

$$|j\rangle\langle j||j\rangle\langle j| = |j\rangle\langle j|j\rangle\langle j| = |j\rangle\langle j|$$

$|j\rangle\langle j|$ nennt man auch das **dyadische Produkt** von $|j\rangle$ mit sich selbst.

$$P_j = |j\rangle\langle j| \quad (\text{II.9})$$

Man sieht leicht, dass die „**Idempotenz**“ der P_j :

$$P_j^2 = P_j \quad \forall j \quad (\text{II.10})$$

Zu jedem P_j definieren wir die „**Orthogonalprojektion**“

$$Q_j := 1 - P_j \quad (\text{II.11})$$

Hier gilt häufig $1 := \mathbb{1} = \text{id}$

Eine andere Schreibweise für $\langle j|\psi\rangle$ ist $\psi = \sum_j (\hat{e}_j, \psi) \hat{e}_j$. Außerdem gilt: $\langle\phi|\psi\rangle = (|\phi\rangle, |\psi\rangle)$

$$P_j \cdot Q_j = Q_j \cdot P_j = P_j - \underbrace{P_j^2}_{\substack{(\text{II.10}) \\ P_j}} = 0 \quad (\text{II.12})$$

Vollständig konsistent mit der geometrischen Anschauung orthogonaler Projektionen.

Gleiches lässt sich für Summen von Projektoren sagen:

$$P = \sum_{j=1}^M P_j \quad Q = 1 - P = \sum_{j=M+1}^{s_{\mathcal{H}}} P_j \quad (\text{II.13})$$

$$P^2 = P \quad Q^2 = Q \quad PQ = QP = 0 \quad (\text{II.14})$$

Man erinnere sich an das Beispiel in (I.2)

★hier fehlt eine Grafik★

Bemerkungen

- (a) Die abstrakte Schreibweise $|\psi\rangle$ bzw. $\langle\psi|$ geht auf Dirac zurück, daher auch „**Dirac-Notation**“ genannt.
- (b) $|\psi\rangle$ nennt auch (Zustands-) „**Ket**“ (-Vektor), $\langle\psi|$ entsprechend „**Bra**“ (\rightarrow Bracket /Klammer). In etwas mathematischerer Weise wird $\langle\psi|$ auch als das zu $|\psi\rangle$ gehörende lineare Funktional im zu Hilbertraum \mathcal{H} dualen Raum aufgefasst, das vermöge (II.4) jedem Ket $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ die Zahl $(|\psi\rangle, |\phi\rangle \stackrel{(II.4)}{=} \langle\psi|\phi\rangle)$ zuordnet ^{6 7}.
- (c) In (II.1, 4-6, 8) haben wir ein bestimmtes, durch vorgegebene, orthogonale Filterstellungen definiertes Basissystem $\{|0\rangle, |1\rangle, \dots, |j\rangle, \dots\}$ gewählt. Dies entspricht den Eigenvektoren unseres Messoperators (siehe (I.2)) die auf ein eindeutiges Messresultat führen. Durch die (a priori beliebige) Wahl einer bestimmten ONB wählt man eine bestimmte „**Darstellung**“⁸, die man natürlich wechseln kann (z.B. durch Drehung des Basissystems).

II.2 Lineare, normale hermitesche, selbstadjungierte Operatoren

Die oben eingeführten Projektoren P_j sind offenbar **lineare** Operatoren, denn es gilt:

$$P_j(\lambda|\phi\rangle + \mu|\psi\rangle) = \lambda P_j|\phi\rangle + \mu P_j|\psi\rangle \quad \forall \lambda, \mu \in \mathbb{C}, |\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H} \quad (II.15)$$

Im Folgenden werden wir es ganz allgemein mit linearen Operatoren auf Hilberträumen zu tun haben, die auf Kets gemäß

$$A|u\rangle = |v\rangle \quad (II.16)$$

und auf Bras gemäß

$$\langle s|B = \langle t| \quad (II.17)$$

operieren. Man sagt A wirkt in (II.16) „nach rechts“ und B in (II.17) „nach links“. Interessiert man sich für die Wirkung von A aus (II.16) für einen Bra $\langle w|$, so verschafft man sich zunächst die Wirkung von A auf eine vollständige (Ket-) Basis:

$$A|j\rangle = |j'\rangle \quad \forall j = 1, \dots, d_{\mathcal{H}} \quad (II.18)$$

daraus, die „**Matrixelemente**“

$$\langle w|A|j\rangle = \langle w|j'\rangle \quad (II.19)$$

(wird auch als A_{wj} geschrieben) was die Darstellung:

$$\langle w|A = \sum_j \langle w|A|j\rangle \langle j| \quad (II.20)$$

Bei $*$ spricht man auch vom Einsetzen/Anwenden von rechts „der Eins“. Entsprechend gilt:

$$A|u\rangle = \sum_j |j\rangle \langle j|A|u\rangle \quad (II.21)$$

Daher gilt:

$$\langle w|A|u\rangle \stackrel{(II.20)}{=} \sum_j \langle w|A|j\rangle \langle j|u\rangle \stackrel{(II.21)}{=} \sum_j \langle w|j\rangle \langle j|A|u\rangle \quad (II.22)$$

⁶Cohen-Tannodji, TI Chap. II B2 b, p110

⁷Sakurai, p.13

⁸ \rightarrow Analogie „darstellende Matrix“ in Lin. Algebra, z.B. Fischer, Vieweg 1984 p.186 f.

Der zu A in (II.16) „**adjungierte**“ Operator A^\dagger ist dadurch definiert, dass er auf $\langle u|$ genauso operiert wie A auf $|u\rangle$, d.h. für beliebige $|u\rangle, |v\rangle$ in (II.16):

$$\langle u|A^\dagger = \langle v| \quad (\text{II.23})$$

Dies impliziert wegen (II.5)

$$\begin{aligned} \langle v| &\stackrel{\text{(II.5)}}{=} \left(|v\rangle^\top\right)^* \stackrel{\text{(II.16)}}{=} \left((A|u\rangle)^\top\right)^* \stackrel{\text{(II.21)}}{=} \left(\sum_j |j\rangle\langle j|A|u\rangle\right)^{\top*} \\ &= \left(\sum_j \langle j|A|u\rangle|j\rangle^\top\right)^* = \sum_j \langle j|A|u\rangle^* \langle j| \\ &\stackrel{\text{(II.8)}}{=} \sum_j \langle u|A^\dagger|j\rangle\langle j| \quad \text{und insbesondere für} \quad \langle u|A = \langle v| \end{aligned} \quad (\text{II.24})$$

$$\langle j|A|u\rangle^* = \langle u|A|j\rangle \quad (\text{II.25})$$

d.h. die Matrixdarstellung von A geht durch Transposition und komplexe Konjugation in sich selbst über, bzw. die Matrixdarstellung von A ist bis auf komplexe Konjugation symmetrisch (bzgl. Spiegelung an der Diagonalen).

Kürzer:

$$A^\dagger \stackrel{\text{(II.4)}}{=} \stackrel{\text{(II.5)}}{=} (A^\top)^* = (A^*)^\top = A \quad (\text{II.26})$$

A heißt dann „**hermitesch**“.