
Grundprinzipien der Quantenphysik

Vorlesung – WS03/04

Josef Oswald

Vorwort:

Dieses Skriptum soll kein Ersatz für die eigene Mitschrift sein. Den Kern bilden Gedankenskizzen, die jeweils nach den gehaltenen beiden Vorlesungsstunden vorangegangener Semester angefertigt wurden. Daher ist dieses Skriptum ausschließlich zur Benützung in Verbindung mit der Vorlesung gedacht.

1 Einleitung:

Im einleitenden Kapitel sollen wichtige Zusammenhänge, wie sie wahrscheinlich zum Teil schon von anderen einführenden Lehrveranstaltungen bekannt sind, auf phänomenologischer Basis zusammenfassend dargestellt werden. Dabei geht es vorwiegend um die Zusammenhänge zwischen Teilchen- und Wellenbild. Es wird dabei zunächst noch kein Schwergewicht auf theoretische Geschlossenheit gelegt, sondern die Überlegungen sind vorwiegend heuristisch. Im Gegensatz dazu sollen im Hauptteil der Vorlesung die genannten Aspekte systematisch noch einmal aufgerollt werden und dabei die wichtigsten Konzepte und die Symbolik, welche als eine Art „Sprache“ der Quantenphysik angesehen werden kann, erarbeitet werden.

1.1 Grundlegende Zusammenhänge:

Einer der grundlegendsten Effekte, der zur Entwicklung der Quantenphysik beigetragen hat, ist der „lichtelektrische Effekt“. Daher an dieser Stelle eine kurze Zusammenfassung der wichtigsten Rückschlüsse aus diesem Experiment:

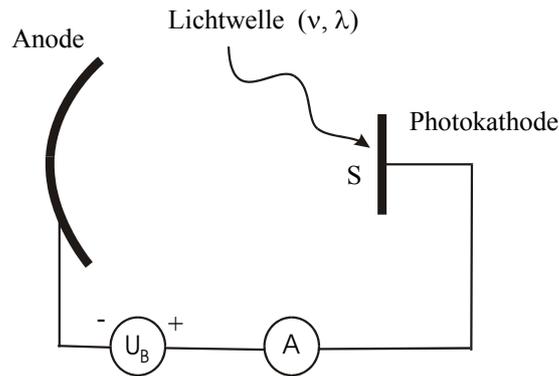


Abbildung 1.1-1 Prinzip für den Nachweis des lichtelektrischen Effektes. Zur Unterdrückung des Stromes kann eine negative Spannung U_B zwischen Anode und Kathode gelegt werden.

Trifft Licht der Wellenlänge λ , bzw. Frequenz der ν , mit der Strahlungsleistung S auf eine Photokathode, so werden bei geeigneter Wellenlänge Elektronen aus der Photokathode herausgelöst und treffen auf die Anode. Auf diese Weise kann bereits ohne Anlegen einer Fremdspannung ($U_B=0$) ein elektrischer Strom im Messkreis nachgewiesen werden. Es ist allerdings festzustellen, dass erst ab einer bestimmten Frequenz ν_g oder unter einer bestimmten Wellenlänge λ_g dieser Effekt auftritt. Ist die Frequenz unter dieser Grenzfrequenz, so kann auch ein drastisches Erhöhen der Strahlungsleistung S keinen Photostrom hervorrufen. Um nun die kinetische Energie jener Elektronen zu messen, welche sich in Richtung Anode bewegen, legt man eine Gegenspannung U_B anlegen. Damit die Elektronen die Anode erreichen können, müssen sie das durch die Spannung U_B erzeugte abstoßende Potential überwinden, welches nur durch eine ausreichende kinetische Energie möglich ist. „Würgt“ man den Strom durch Aufdrehen von U_B ab, so kann man daraus schließen, dass gerade bei „Nullwerden“ des Stromes das abstoßende Potential gleich der kinetischen Energie der schnellsten Elektronen geworden ist ($E_{kin} = e \cdot U_B$). Variiert man die verschiedenen Parameter im Experiment, so kann man einige Trends feststellen, die schematisch in nachstehender Abbildung dargestellt sind: (i) Erhöht man die Strahlungsleistung S bei verschiedenen konstanten Gegenpotentialen U_B , so erhält man grundsätzlich einen Anstieg des Stromes, der beim geringsten Gegenpotential am stärksten und beim größten Gegenpotential am geringsten ausfällt ($U_1 < U_2 < U_3$). (ii) Erhöht man das Gegenpotential so weit, bis der Strom verschwindet, so erhält man bei verschiedenen Frequenzen ($\nu_1 < \nu_2 < \nu_3 < \nu_4 < \nu_5$) den oben rechts dargestellten Trend. Der Spannungswert ($U_1 < U_2 < U_3 < U_4 < U_5$), bei dem der Strom verschwindet, verschiebt sich mit der Frequenz der Lichtwelle zu höheren Werten. Ein für die Interpretation entscheidender Umstand ist der, dass das Abwürgen des Stromes bei einer bestimmten Gegenspannung U_B durch ein Erhöhen der Strahlungsleistung S nicht aufgehoben werden kann!

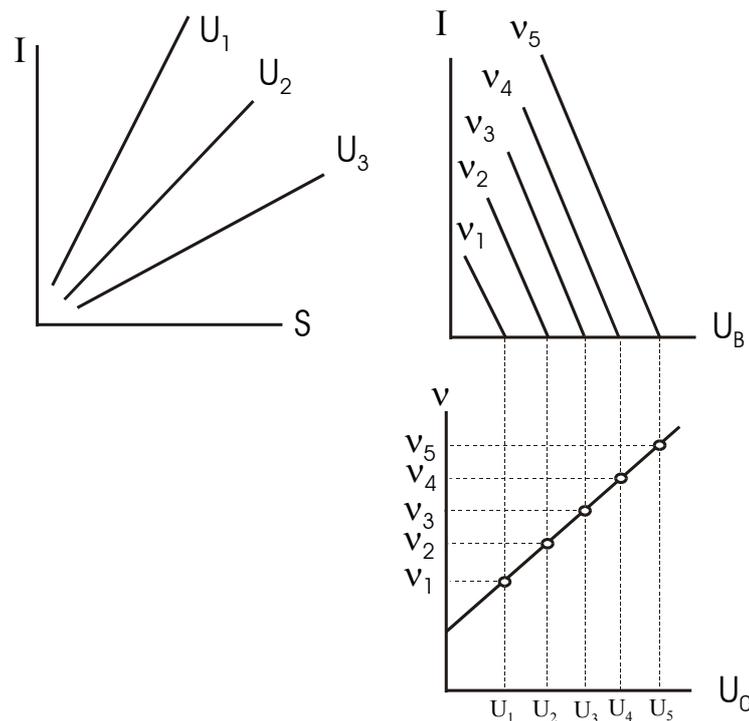


Abbildung 1.1-2: Verschiedene Trends beim lichtelektrischen Effekt, qualitativ dargestellt.

(iii) Trägt man die Spannungswerte $U_1 - U_5$, bei denen der Photostrom Null wird und die zugehörigen Frequenzen $\nu_1 - \nu_5$ in ein Diagramm (Abbildung 1.1-2 rechts unten), so ergibt sich ein linearer Zusammenhang $U_0 = a + b \cdot \nu$. Rechnet man auf die kinetische Energie der Elektronen $E_{kin} = e \cdot U_0$ um, so erhält man:

$$\text{Eqn. 1.1-1: } e \cdot U_0 = h \cdot \nu - E_A$$

Der lineare Faktor der Geradengleichung entpuppt sich dabei als Planck'sches Wirkungsquantum und die Konstante a transformiert sich in die Austrittsarbeit der Photokathode. Die Konstante h ist deshalb eine universelle Naturkonstante, weil keinerlei Materialparameter eingehen, sondern ein direkter Zusammenhang zwischen Energie und Frequenz hergestellt wird, der bislang keine Entsprechung in der klassischen Physik findet. Eine konsistente Deutung dieses Sachverhaltes ist nur möglich, wenn man annimmt, dass das Wellenfeld des Lichtes aus endlichen diskreten Energieportionen (Quanten) besteht, die man als Photonen („Lichtteilchen“) bezeichnet. Die Energie eines solchen Photons beträgt

$$\text{Eqn. 1.1-2: } E_{ph} = h \cdot \nu$$

h ist das Planck'sche Wirkungsquantum und ν die Frequenz.

Obwohl die Maxwellgleichungen eine vollständige Beschreibung elektromagnetischer Wellen, und damit auch von Lichtwellen, ermöglichen, kommen Lichtquanten in den Maxwellgleichungen nicht vor. Dieser zusätzliche Aspekt der Lichtquanten kommt nur durch die quantenphysikalische Beschreibung des Lichtes hinzu.

Eine weitere wichtige Grundlage stellt die De Broglie Beziehung dar. Sie verknüpft den Impuls, der eine typische Teilcheneigenschaft ist, mit der Wellenlänge, die im Gegensatz dazu eine typische Welleneigenschaft ist:

$$\text{Eqn. 1.1-3: } p = \hbar \cdot k = \frac{h}{2\pi} \cdot \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{h}{\lambda}$$

Während Eqn.1.1-2 speziell für Photonen gilt, ist Eqn. 1.1-3 für alle Teilchen, wie z.B. Elektronen, gültig. Für die Energie von klassischen Teilchen (mit Ruhemasse) mit $v \ll c$ gilt die klassische Formel für die kinetische Energie:

$$\text{Eqn. 1.1-4 } E = \frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Somit ist k und damit λ eines mit Ruhemasse behafteten Teilchens durch die kinetische Energie festgelegt.

Man kann auch hier die Probe machen, ob die De Broglie Beziehung für den Spezialfall der Photonen tatsächlich gilt. Die Schlüsselfrage dabei ist, ob die Teilcheneigenschaften der Photonen tatsächlich so weit gegeben sind, dass der durch die De Broglie Beziehung beschriebene Impuls auch tatsächlich als Kraftwirkung bei Auftreten von Photonen auf ein Ziel nachgewiesen werden kann. Als Ausgangspunkt für diese Betrachtung verwenden wir den Strahlungsdruck von klassischen elektromagnetischen Wellen:

$$\text{Eqn. 1.1-5 } p = \frac{S}{c} \quad \begin{array}{l} S \dots \text{Strahlungsleistungsdichte, } c \dots \text{Lichtgeschwindigkeit} \\ p \dots \text{Druck (Impuls/Zeit/Fläche)} \end{array}$$

Man kann den Impuls pro Lichtquant einfach ausrechnen durch $p_{ph} = p/n$, wobei n die Zahl der pro Zeit u. Fläche auftreffenden Photonen ist. Im Fall von monochromatischem Licht ist die Zahl der auftreffenden Photonen leicht zu berechnen: $n = S/E_{ph} = S/(h \cdot \nu)$ und man erhält damit:

$$\text{Eqn. 1.1-6} \quad p_{ph} = \frac{S}{c} \cdot \frac{1}{n} = \frac{S}{c} \cdot \frac{h \cdot \nu}{S} = \frac{h \cdot \nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$$

was genau der De Broglie Beziehung entspricht. D.h. in jenen Fällen, für die bereits die klassische Wellenbeschreibung die Kraftwirkung einer Lichtwelle beschreibt, stimmt sie exakt mit jener aus der Quantenbeschreibung überein. Eine der Konsequenzen daraus ist, dass eine Taschenlampe die Sie in der Hand halten einschalten, aufgrund des Impulses der ausströmenden Photonen einerseits und der Impulserhaltung andererseits, einen Rückstoß ausüben muss (wie das ausströmende Wasser bei einem Gartenschlauch). Ich überlasse es Ihnen, eine Abschätzung für die Größenordnung des Effektes zu machen. Prinzipiell beruht auch die Idee des Photonentriebwerkes, wie es uns hin- und wieder in der Sciencefiction Literatur begegnet, darauf.

1.2 Die Schrödingergleichung:

Durch den Welle-Teilchen Dualismus, der sich von Photonen auch auf klassische Teilchen (mit Ruhemasse) verallgemeinern lässt, drängt sich natürlich die Frage auf, ob es zur bekannten Wellengleichung für Lichtwellen (elektromagnetische Welle) auch eine verallgemeinerungsfähige Wellengleichung für alle Arten von Teilchen geben müsste. Wir betrachten daher zunächst die klassische Wellengleichung, wie sie für Lichtwellen zutrifft:

$$\text{Eqn. 1.2-1} \quad \frac{d^2 \xi(x, t)}{dx^2} = \frac{1}{c^2} \cdot \frac{d^2 \xi(x, t)}{dt^2}$$

Diese Gleichung entstammt der Elektrodynamik und kann aus den Maxwellgleichungen abgeleitet werden. x ist eine Ortskoordinate, t die Zeit und c die Lichtgeschwindigkeit. Wir betrachten die einfachst mögliche Lösung, nämlich eine eindimensionale (ebene) Welle:

$$\text{Eqn. 1.2-2} \quad \xi(x, t) = A \cdot e^{i(\omega t - kx)}$$

Durch Einsetzen lässt sich leicht verifizieren, dass $\omega = c \cdot k$ gilt. Aufgrund der Gültigkeit der De Broglie Beziehung kann man vermuten, dass Eqn. 1.2-2 auch für den Fall von freien, mit Ruhemasse behafteten, klassischen Teilchen bereits eine Wellenlösung darstellt, zu der man allerdings noch die passende Wellen-(differential)-gleichung finden muss. D.h., man geht umgekehrt vor und sucht zu einer bereits bekannten Lösung, welche für

einen durchschaubaren Spezialfall gilt, eine dazu passende Wellengleichung und hofft, dass die Verallgemeinerung dieser Wellengleichung dann auch alle anderen allgemeinen Fälle ebenfalls richtig beschreibt. Das ist an sich keine ungewöhnliche Vorgangsweise in der Grundlagenforschung - nur muss sich die so gefundene (errätene) Gleichung dann auch in der Praxis bewähren und theoretisch zumindest im Nachhinein begründen lassen.

Betrachten wir Eqn. 1.2-1, so haben wir einen ortsabhängigen Term, der mit k verknüpft ist und einen zeitabhängigen Term, der mit ω verknüpft ist. Für k haben wir schon eine Entsprechung im Teilchenbild, nämlich den Impuls, für ω haben wir noch nichts. Daher lassen wir vorerst den Teil mit der Zeitabhängigkeit außer Acht und betrachten nur den linken Term mit der x -Abhängigkeit. Um anzuzeigen, dass wir uns nun nicht mehr auf Lichtwellen beschränken wollen, ersetzen wir in der „Wellenfunktion“ das Symbol $\xi(x,t)$ durch $\psi(x,t)$. D.h. wir berechnen

$$\frac{d^2\psi(x,t)}{dx^2} \text{ für den Fall } \psi(x,t) = A \cdot e^{i(\omega t - kx)} \quad \text{und erhalten damit}$$

$$\text{Eqn. 1.2-3} \quad \frac{d^2\psi(x,t)}{dx^2} = -k^2\psi(x,t)$$

Spalten wir in obiger Gleichung die Zeitabhängigkeit ab,

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

so können wir diese aus Eqn. 1.2-3 herauskürzen. Benutzen wir weiters Eqn. 1.1-4 ($E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$), so können wir Eqn. 1.2-3 zu folgendem Ausdruck ergänzen:

$$\text{Eqn. 1.2-4} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E \cdot \psi(x)$$

D.h. wir haben hier eine Wellengleichung für freie Teilchen, deren Lösungen dem Ausgangspunkt gemäß ebene Wellen sind, wobei E die kinetische Energie darstellt. Diese Differentialgleichung ist mathematisch gesehen eine Eigenwertgleichung für die kinetische Energie. Soweit haben wir aber noch nichts gewonnen, da wir diese Lösungen ja schon kennen, ja sogar gefordert haben. Was aber Eqn. 1.2-4 auszeichnet ist ihre Verallgemeinerungsfähigkeit (die sich selbstverständlich, wie schon erwähnt, in der Praxis erst bewähren muss!).

Zur Verallgemeinerung ziehen wir die Analogie zur klassischen Physik heran. Demgemäß setzt sich die Energie eines Teilchens im Allgemeinen aus kinetischer Energie E_{kin} und potentieller Energie E_{pot} zusammen. Wenn man nun annimmt, dass es auch für die Gesamtenergie E eine solche Wellengleichung geben soll, so muss sie wie folgt aussehen:

$$E \cdot \psi(x) = (E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}}) \psi(x)$$

Im Allgemeinen ist E_{pot} ortsabhängig (Potentialtöpfe etc.), sodass man üblicherweise das Potential $V(x)$ zur Beschreibung verwendet (Detail am Rande: im Falle des elektrischen Potentials kann man die Ladung des Teilchens e als Konstante herausziehen). Für die kinetische Energie verwenden wir Eqn. 1.2-4, sodass wir schließlich folgenden Ausdruck erhalten:

$$\text{Eqn. 1.2-5} \quad \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2}{dx^2} + eV(x) \right) \psi(x) = E \cdot \psi(x)$$

Eqn. 1.2-5 stellt, wie man erkennen kann, die sog. zeitunabhängige Schrödingergleichung dar. Es wäre jetzt falsch zu behaupten, dass der oben beschriebene Weg als Ableitung der Schrödingergleichung bezeichnet werden könnte. Vielmehr ist es ein zielgerichtetes „Erraten“ derselben.

Die Gültigkeit dieser Gleichung vorausgesetzt (jedenfalls hat sie sich bisher offensichtlich bewährt!), kann man erwarten, die Gleichgewichtszustände (stationäre Zustände) aller Teilchensysteme, und das sind letztlich Atome, Moleküle bis hin zu den Festkörpern, beschreiben zu können.

Auf die Einbeziehung der Zeitabhängigkeit möchte ich in diesem einleitenden Kapitel verzichten - diese ist ohnehin Bestandteil des Hauptteiles der Vorlesung. Zur bildlichen Vorstellung kann man sich damit behelfen, dass $\psi(x)$ die räumliche Verteilung der Welle zu einem bestimmten, eingefrorenen Zeitpunkt beschreibt. Laufende Wellenpakete werden dementsprechend keine stationären Zustände sein können. Stationäre Zustände sind am ehesten mit stehenden Wellen zu vergleichen, deren Amplitudenverteilung im Raum sich zeitlich nicht ändert, die aber auf eine noch herauszufindende Art und Weise oszillieren.

1.3 Interpretation der Wellenfunktion:

Zur Interpretation von $\psi(x)$ können wir uns vorerst an die uns bekannten Fakten über Lichtwellen halten. Wenn wir uns erinnern, dass das Licht praktischer (realer)

Lichtquellen (abgesehen vom Laser) in mehr oder weniger ausgedehnten Wellenzügen (= Wellenpaketen) ausgestrahlt wird, so können wir uns vorstellen, dass der Aufenthaltsort des mit der Welle verknüpften Teilchens im Bereich der Ausdehnung des Wellenzuges zu finden sein muss. So lange man es also mit Wellenpaketen zu tun hat, ist die Interpretation im Teilchenbild im Allgemeinen kein besonderes Problem. Im Rahmen der Zeitabhängigkeit, welche hier vorerst nicht behandelt wurde, ist eine Bewegung, wie bei klassischen Teilchen, auch ohne weiters beschreibbar. Bei stationären Zuständen, wie z.B. bei gebundenen Elektronen in Potentialtöpfen, treten dann statt sich bewegendere Wellenpakete stehende Wellen auf. Der Ort des Teilchens kann in jedem Fall nur mehr als wahrscheinlicher Aufenthaltsort angegeben werden, wobei die Antreffwahrscheinlichkeit an einer bestimmten Stelle durch das Quadrat der Wellenfunktion gegeben ist. Ich verzichte an dieser Stelle auf eine formale Abhandlung dieses Sachverhaltes, da eine systematische Abhandlung Gegenstand des Hauptteils der Vorlesung ist.

1.4 Beugung und Unschärferelation:

Nachdem nun die „Versöhnung“ des Teilchen- und Wellenbildes über die De Broglie Beziehung und der Schrödingergleichung recht vielversprechend gelungen ist, ist es eine äußerst empfehlenswerte Übung, Effekte, die man im Wellenbild schon längst verstanden hat, auch mit den Begriffen des Teilchenbildes zu erklären (zumindest es zu versuchen). Aus den Schlussfolgerungen, die sich dann für das Teilchenbild ziehen lassen, sind mitunter erstaunliche Erkenntnisse verbunden. Ein gutes Beispiel dafür ist die Beugung am Einzelspalt:

Im Wellenbild lässt sich der Winkel α bis zum ersten Minimum sehr leicht beschreiben:

$$\text{Eqn. 1.4-1} \quad b \cdot \sin(\alpha) = \lambda \quad \text{wobei für } \alpha \ll 1 \text{ gilt: } b \cdot \alpha = \lambda$$

Möchte man mit den Begriffen des Teilchenbildes den gleichen Sachverhalt beschreiben, so muss man über die De Broglie Beziehung den Impuls ins Spiel bringen.

Die Ablenkung um den Winkel α wird dann einfach durch einen z-Anteil k_z des k-Vektors \vec{k} bzw. durch einen z-Anteil p_z des Impulses \vec{p} beschrieben werden. Aufgrund der Vektoreigenschaften von \vec{k} können wir schreiben:

$$\text{Eqn. 1.4-2} \quad k_z = k \cdot \sin(\alpha)$$

wobei k die Wellenzahl in Ausbreitungsrichtung ist und damit durch die Wellenlänge festgelegt ist. Für kleine Winkel können wir wieder vereinfachen und erhalten $k_z = k \cdot \alpha$.

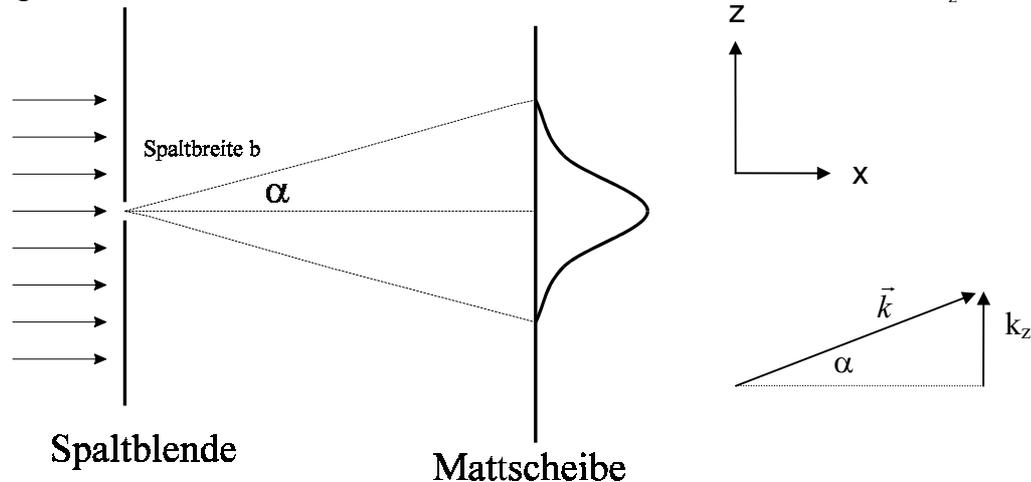


Abbildung 1.4-1: Prinzip der Beugung am Spalt. Dargestellt ist das zentrale Maximum bis zur ersten Nullstelle.

Nachdem $p_z = \hbar \cdot k_z$ gilt, können wir unter Einsetzen von α lt. Eqn. 1.4-1 folgendes schreiben:

$$\text{Eqn. 1.4-3} \quad p_z = \hbar \cdot \frac{2\pi}{\lambda} \cdot \frac{\lambda}{b} = \frac{h}{2\pi} \cdot \frac{2\pi}{b} = \frac{h}{b}$$

b kann man als eine Positionsfestlegung der durchgehenden Photonen auf der z -Achse auf den Bereich $\Delta z = b$ interpretieren. p_z andererseits kann man als eine Unbestimmtheit des Impulses Δp_z in Bezug auf die z -Richtung interpretieren, da es ja eine vertikale Ablenkung von der geradlinigen Fortbewegung beschreibt. Der Grund dafür liegt darin, dass jeder Punkt auf dem „Beugungsfleck“ als möglicher Auftreffpunkt eines Photons in Frage kommt. D.h. der Beugungsfleck engt im Wesentlichen den Bereich ein, in dem das Photon statistisch betrachtet, auftreffen kann. In diesem Sinne kann man obige Gleichung aus so schreiben:

$$\text{Eqn. 1.4-4} \quad \Delta p_z \cdot \Delta z \approx h$$

D.h. je genauer die Z -Position des Photons beim Durchgang festgelegt wird, desto unbestimmter sind die Z -Komponente des Impulses und damit die Auftreffposition auf der z -Achse. Dies entspricht genau der Heisenberg'schen Unschärferelation für die z -Komponente des Impulses. Die Heisenberg'sche Unschärferelation gilt somit offenbar für jede Raumkoordinate separat! Wenn man geneigt sein sollte zu sagen, dass ursprünglich

gar kein Impuls in z -Richtung vorhanden war, dann stimmt das natürlich, aber bedeutet konsequenterweise $p_z = 0$ und damit $\Delta p_z = 0$. Laut Unschärferelation wäre dies aber nur mit $\Delta z = b = \infty$ möglich! Kurz gesagt, auch $p=0$ ist ein bestimmter Impuls und unterliegt somit der Unschärferelation.

Zusammenfassend zu diesem Punkt kann man also sagen, dass dem Phänomen der Beugung im Wellenbild die Heisenberg'sche Unschärferelation im Teilchenbild entspricht.

1.5 Einige Kuriositäten und Widersprüche in der Interpretation:

An sich führt die bislang gefundene Konsistenz der verschiedenen Aspekte und Fakten (Wellennatur und Teilchennatur) zu einem großen Vertrauen in die Richtigkeit der bisherigen Beschreibung. Im Folgenden werden allerdings einige Situationen diskutiert, welche zu ernsthaften Problemen bei der Interpretation führen.

1.5.1 Reflexion am halbdurchlässigen Spiegel

Ein wichtiges Element in der Interferenzoptik sind sog. Strahlteiler. Sie sorgen dafür, dass man aus einer an sich „inkohärenten“ Ansammlung von Wellenzügen zumindest paarweise kohärente und somit interferenzfähige Teilwellenzüge erhält. Wenn Sie sich z.B. an das Michelsoninterferometer erinnern, so enthält dieses einen Strahlteiler, der in etwa das macht, was in nachstehender Abbildung schematisch dargestellt ist:

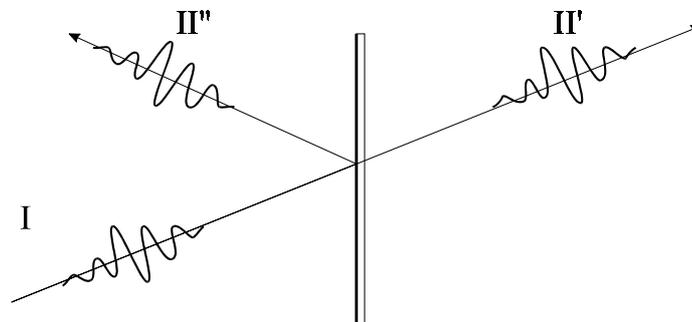


Abbildung 1.5-1: Prinzip eines halbdurchlässigen Spiegels als „Strahlteiler“. Die Lichtwellen sind als Wellenzüge dargestellt, die am Strahlteiler dupliziert werden. I ist der einlaufende Wellenzug, II' und II'' sind die auslaufenden Wellenzüge.

Vom Standpunkt des Wellenbildes stellt Abbildung 1.5-1 nichts Außergewöhnliches dar. Wir wollen allerdings wieder eine Interpretation im Teilchenbild versuchen. Für eine normal gebräuchliche Lichtintensität hat man es mit einem Photonenstrom zu tun und bei Aufteilung auf die Hälfte gehen 50% der Photonen auf die eine Seite und 50% auf die andere Seite. Aber es kann uns im Prinzip niemand daran hindern, dieselbe Zahl an Photonen langsam, also einzeln auf die „Reise“ zu schicken. Wie in Kapitel 1.3 erklärt, ist der Aufenthaltsbereich des Teilchens (Photon) mit der Ausdehnung des Wellenpaketes gegeben. Nun haben wir aber eine Aufteilung in 2 Wellenpakete ! Wo ist also das Teilchen? Würde es sich aufteilen, so müsste sich auch die Energie pro Teilchen halbieren: Da aber $E = h \cdot \nu$ gilt, müsste sich dann auch die Frequenz halbieren. Eine Farbveränderung ist aber durch einen Strahlteiler nicht festzustellen. D.h., dass das ursprüngliche Photon als Einheit bestehen bleiben muss. Betrachtet man also einzelne Photonen, so kann das betreffende Photon nur entweder reflektiert werden oder durchgehen. Was das Photon nun macht, ist zwar nicht vorhersehbar, aber man kann mit Detektoren nachprüfen, was es tatsächlich macht. Man hat also zwei Detektoren, einen für das reflektierte Licht und einen für das durchgehende. Bei der Messung mit einzelnen Photonen stellt man tatsächlich immer nur mit einem der beiden Detektoren einen „Klick“ fest, nie in beiden gleichzeitig.

Aber gerade dieses „Nachprüfen, was das Photon macht“ führt nun zu einem Kuriosum: Stellt man beispielsweise fest, dass das Photon reflektiert wird, so ist es sicher, dass es nicht durch den Strahlteiler durchgeht. D.h. im Moment dieser Feststellung muss die Wellenfunktion auf der „Durchgangsseite“ auf irgendeine geheimnisvolle Art und Weise verschwinden, da die Wahrscheinlichkeit Null wird. Nach unseren Erfahrungen mit der klassischen Physik sind wir es gewohnt, uns zumindest in Gedankenexperimenten als unbemerkter Beobachter fühlen zu dürfen. D.h. wir sind der Meinung, dass es prinzipiell möglich sein sollte, Vorgänge so zu beschreiben, dass sie immer gleich ablaufen, unabhängig davon, ob man beobachtet oder nicht. - Nach dem obigen Paradoxon ist das nicht möglich - nicht einmal als idealisiertes Gedankenexperiment. D.h., gelangt man zum Wissen über den Weg des Photons, egal wie, ändert sich die Gesamtwellenfunktion!

Diese Erkenntnis ist von derart fundamentaler Bedeutung, dass sie sogar Einfluss auf die philosophische Betrachtung des gesamten Weltbildes hat. Dieser Aspekt wird noch öfters im weiteren Verlauf der Vorlesung anklingen, sodass ich an dieser Stelle nicht weiter darauf eingehen möchte. Ich möchte stattdessen vorerst noch weitere Beispiele dafür bringen, wie unsere gewohnte Interpretation von physikalischen Vorgängen im Zusammenhang mit der Quantenphysik „ins Schleudern“ kommt.

1.5.2 Interferenz am Doppelspalt:

Die Doppelspaltinterferenz lässt sich im Wellenbild sehr leicht erklären: Die von der Quelle ausgehenden (primären) Wellenzüge regen in den 2 Spalten jeweils 2 phasenkohärente (sekundäre) Wellenzüge an („Wellenzugvervielfältigung“), die in der Folge am Schirm interferieren können. Blockiert man jeweils einen Spalt, so fällt diese Interferenz aus und man erhält die (breite) Intensitätsverteilung der Einzelspaltbeugung.

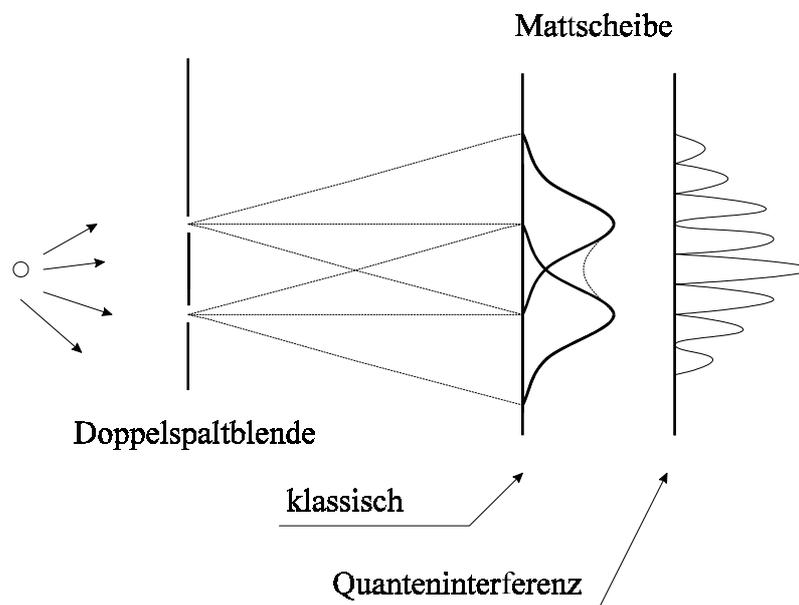


Abbildung 1.5-2: Schematische Darstellung der Doppelspaltinterferenz. Die Intensitätsverteilung am Schirm ist nicht die Summe der Intensitäten der einzelnen Spalte.

Im Teilchenbild ist die Interpretation nicht so einleuchtend: Bei der Betrachtung eines Photonenstromes gehen 50% aller durchgehenden Photonen durch den oberen und 50% durch den unteren Spalt. Wie schon bei der Diskussion des Strahlteilers, kann die Wellenzugvervielfältigung aber keine Aufteilung der einzelnen Photonen bedeuten - die Photonen bleiben unteilbar. D.h. bei einem Experiment mit einzelnen Photonen, welche mit dem primären Wellenzug verknüpft sind, folgen diese entweder dem sekundären Wellenzug des oberen oder des unteren Spaltes. Nun könnte man folgendermaßen argumentieren: Geht das Photon tatsächlich durch den oberen Spalt, so sollte es ihm völlig egal sein ob der untere Spalt offen oder geschlossen ist. Umgekehrt könnte man natürlich sagen, wenn das Photon durch den unteren Spalt geht, sollte es egal sein, ob der obere offen ist oder nicht. Die folgende Abbildung zeigt die Beugung am Einzelspalt als

„Snapshot“ einer Simulation, wobei sich das Beugungsbild erst nach einer Vielzahl von Treffern heraus bildet.

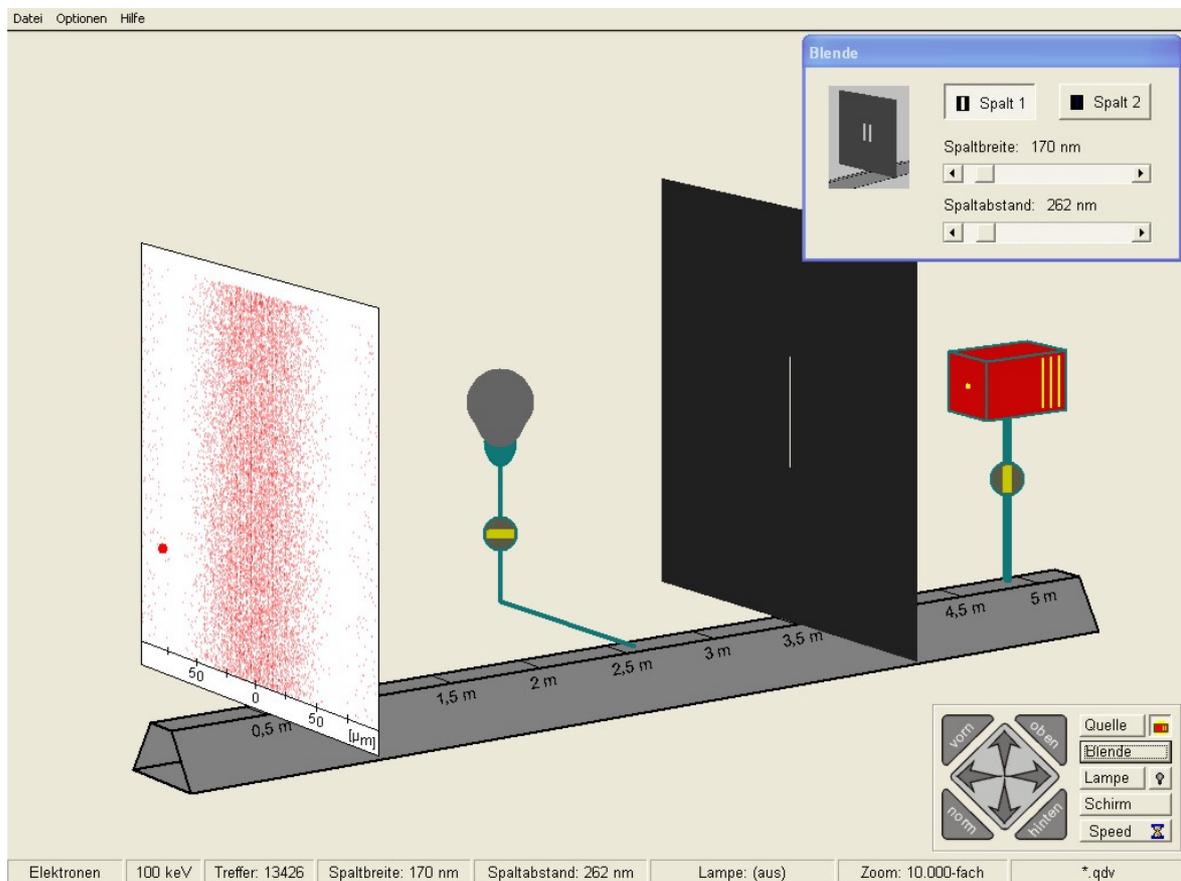


Abbildung 1.5-3: Simulation der Beugung am Einzelspalt. Das Beugungsbild ergibt sich aus der Gesamtheit aller Treffer einzelner Photonen. Das Bild zeigt einen „Snapshot“ der in der Vorlesung gezeigten Simulation (entwickelt von Klaus Muthsam, Ludwig-Maximilians-Universität München, 1998).

Demzufolge sollte die Gesamtintensität bei 2 offenen Spalten einfach die Summe der Einzelintensitäten sein. Dies ist allerdings nicht der Fall. Es gibt sogar Stellen am Schirm, an denen bei Öffnen beider Spalte die Intensität verschwindet, obwohl dort bei Einzelspaltbeugung eine nicht verschwindende Intensität auftritt. Man könnte also sagen, dass der Weg eines Photons, das angenommen durch den oberen Spalt geht, dennoch davon abhängt, ob der untere Spalt offen ist oder nicht, obwohl das Photon dort gar nicht vorbeigekommen sein kann. Dies wird in einem weiteren Bild gezeigt, welches ein entsprechender „Snapshot“ der Simulation des Doppelspalts ist. Das Beugungsbild ergibt sich wieder erst durch die Gesamtheit einer großen Anzahl von Treffern. Deutlich zu sehen ist die trefferfreie Zone (heller Streifen) eng neben dem mittleren Streifen, welche beim Einzelspalt an dieser Position nicht auftritt.

Dies zeigt einmal mehr, dass hier ein ernsthafter Widerspruch in der Interpretation vorliegen muss. Wie schon bei der Teilreflexion angedeutet, kommt unser Problem auch hier wieder von unserer stillschweigenden Annahme, wir hätten die prinzipielle Möglichkeit, das Photon „heimlich“ beobachten zu können.

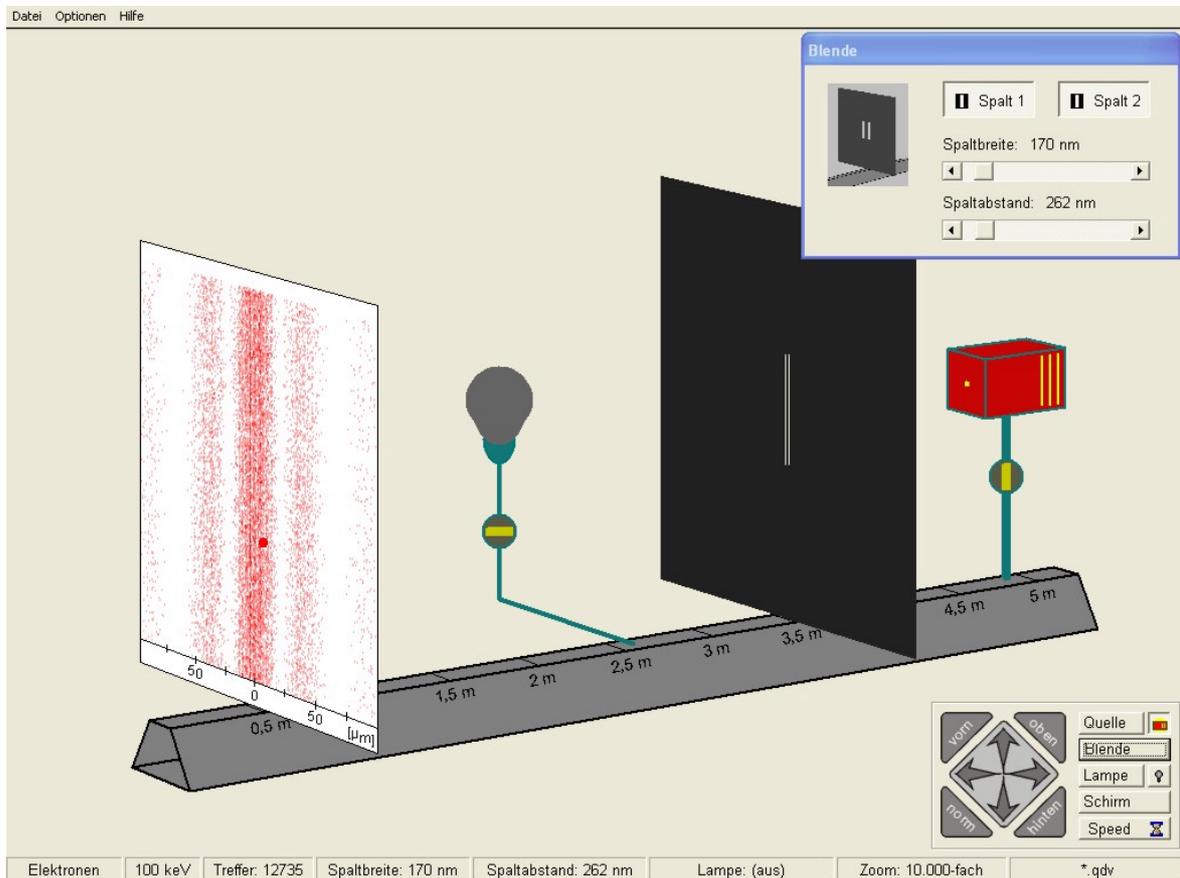


Abbildung 1.5-4: Simulation der Beugung am Doppelspalt. Das Beugungsbild ergibt sich aus der Gesamtheit aller Treffer einzelner Photonen. Das Bild zeigt einen „Snapshot“ der in der Vorlesung gezeigten Simulation (entwickelt von Klaus Muthsam, Ludwig-Maximilians-Universität München 1998).

1.5.3 Das Stern-Gerlach Experiment:

In den vorigen beiden Beispielen war die diskutierte physikalische Größe, nämlich der Teilchenort, wenigstens noch unter Einschränkungen mit einer räumlichen Wellenfunktion verknüpft. Im folgenden Beispiel lässt sich die diskutierte physikalische Größe, nämlich

das magnetische Moment von Silberatomen, nicht einmal mehr mit so einer Wellenfunktion in Verbindung bringen.

Der historische Hintergrund des Stern-Gerlach Experimentes war die Bestimmung des magnetischen Momentes von Silberatomen. Dazu wurde der Effekt ausgenutzt, dass neben einem Drehmoment, welches ein äußeres Magnetfeld auf magnetische Dipole ausübt, auch eine ablenkende Gesamtkraft auftritt, falls es sich um ein inhomogenes äußeres Magnetfeld handelt. Die Ablenkrichtung hängt dabei von der Einstellung des magnetischen Dipolmomentes relativ zur Richtung des äußeren Magnetfeldes ab. In der Praxis ging man daher so vor, dass aus den in einem Ofen verdampften Silberatomen ein möglichst schmaler, monoenergetischer Strahl durch eine geeignete Blendenanordnung ausgeblendet wurde und quer zur Feldrichtung durch ein inhomogenes Magnetfeld geschickt wurde. Da man erwarten konnte, dass die aus dem Ofen kommenden Atome eine beliebige, statistisch verteilte Orientierung der magnetischen Momente haben würden, rechnete man lediglich mit einer Aufweitung des Atomstrahls gegenüber dem feldlosen Fall. D.h. die Aufweitung des „Flecks“, der durch den Niederschlag der Silberatome entsteht, sollte ein Maß für deren magnetisches Moment sein.

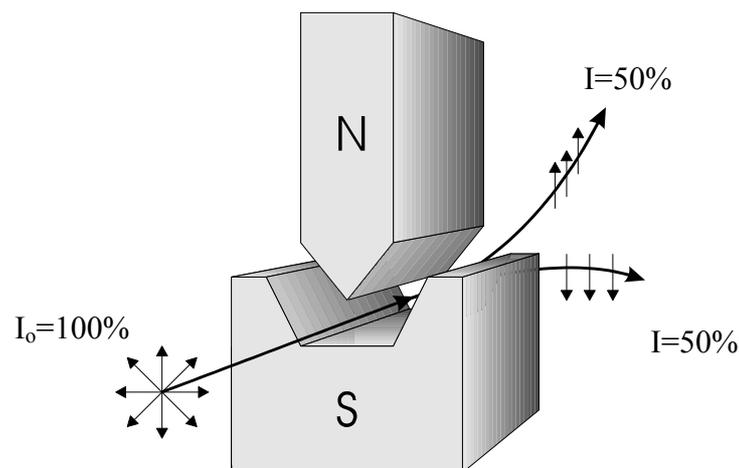


Abbildung 1.5-5: Prinzip des Stern-Gerlach Experimentes

Erstaunlich war allerdings, dass statt einer simplen Aufweitung eine Aufspaltung in zwei diskrete Strahlen erfolgte. Dieses Aufspalten kann nur so interpretiert werden, dass es zwei Atomsorten gibt, eine mit zur Feldrichtung parallelem magnetischem Moment und eine mit antiparallelem magnetischem Moment. Hier stellen sich sofort einige fundamentale Fragen:

- a) Kommen die Atome schon mit zwei so definiert ausgerichteten magnetischen Momenten aus dem Ofen heraus? Wohl kaum, da der Ofen nichts von der Orientierung oder überhaupt von der Existenz des Magnetfeldes „wissen“ kann.
- b) Werden die Momente demnach erst im Feld ausgerichtet? Ist fraglich, denn würden sie das, so müssten wohl alle in die gleiche Richtung schauen - aber es tritt praktisch genau die Hälfte mit parallelem und die Hälfte mit antiparallelem Moment auf.

Um diesem rätselhaften Umstand noch eins draufzusetzen, kann man sich vorstellen, dass man einen Teilstrahl, der nur Atome mit zueinander parallelem Moment besitzt, von den anderen isoliert und separat durch eine zweite, gleich gebaute Anordnung schickt. Ist dabei die Feldrichtung der zweiten gleich jener der ersten Anlage, so ändert sich nichts, außer dass dieser Strahl als Ganzes weiter abgelenkt wird (Abbildung 1.5-6-links, keine Aufspaltung). Nimmt man nun aber die Feldrichtung der zweiten Anlage mit 90 Grad gegen die erste verdreht, so tritt eine Aufspaltung ein, und zwar wieder in Atomsorten mit entgegengesetzter Richtung des magnetischen Momentes (Abbildung 1.5-6-rechts).

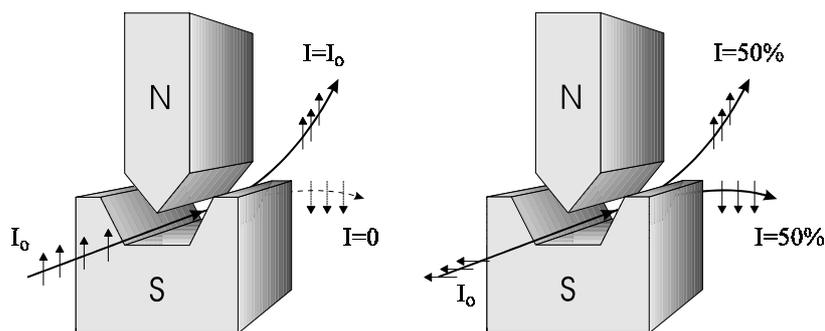


Abbildung 1.5-6: Zwei Fälle mit wohl definierter Richtung des magnetischen Momentes der einfliegenden Silberatome.

Da in diesem Fall eine „Zerlegung“ einer Atomsorte mit einheitlich ausgerichtetem magnetischen Moment in zwei zu gleichen Teilen mit entgegengesetzter Richtung des Momentes erfolgt, kann auch keine wie auch immer geartete Vektorzerlegung des magnetischen Momentes dahinterstecken. Auch hier kann man den Versuch wieder mit einzelnen Atomen durchführen und es zeigt sich, dass bei völlig gleichen Ausgangsbedingungen, völlig statistisch einmal die eine Orientierung und einmal die entgegengesetzte auftritt. D.h. dass hinsichtlich dieses Aspektes eine ganz analoge Problematik zu den beiden vorangegangenen Beispielen vorliegen muss, obwohl diesmal keine Wellenfunktion, die das Ganze mit einer Aufenthaltswahrscheinlichkeit verknüpft, dahintersteckt.

Aus letzterem Beispiel sieht man, dass das dahinter stehende Prinzip offenbar nicht allein auf das Verhalten unserer eingangs diskutierten Wellenfunktionen beschränkt ist.

Daraus kann man zumindest erahnen, dass da vielleicht ein noch grundlegenderes Prinzip dahintersteckt, beim dem selbst die Wellenfunktionen nur mehr einen Teilaspekt darstellen.

2 Systematische Entwicklung einer „quantenphysiktauglichen“ Beschreibung

Die in der Einleitung aufgezeigten Probleme bei der Interpretation von Effekten in der Quantenphysik waren hauptsächlich durch das uns von der klassischen Physik her gewohnte Konzept des „unbemerkten“ Beobachters entstanden. Diese klassische Anschauung geht von der idealisierten Vorstellung aus, dass sich alles in der Welt immer gleich abspielt, unabhängig davon, ob man dabei „zuseht“ oder nicht. Im Grunde ist zwar bekannt, dass jede Beobachtung (=Messung) aufgrund des für die Messung notwendigen Eingriffs eine gewisse Störung darstellt. Diese „Störung“ wurde aber lediglich als eine „Schwäche“ des Messapparates und nicht des zu beobachtenden Systems angesehen. Mit diesem klassischen „Denkansatz“ , dass es sich ja nur um eine gewisse Störung handeln kann, war es daher möglich, zumindest in Gedankenexperimenten diese Störung zu Null werden zu lassen und die Modellbeschreibungen unabhängig von einer eventuell vorhandenen Beobachtungseinrichtung zu machen. In der Quantenphysik scheint es nun so zu sein, dass nicht einmal mehr solche Gedankenexperimente möglich bzw. nicht mehr erlaubt sind, ohne in Widerspruch zu geraten. Das bedeutet, dass der Umstand der Beobachtung oder Messung kein quantitativer Aspekt einer Störung ist, sondern zu einer Qualität wird, die untrennbar vom zu beschreibenden System betrachtet werden muss. D.h. eine Theorie der Quantenphysik muss auch gleichzeitig eine Theorie der Messung von Zustandsgrößen eines Systems sein. Somit müssen etwaige durch eine Beobachtung des Systems verursachte Änderungen im System automatisch in der Beschreibung enthalten sein.

Bei der Entwicklung eines passenden Formalismus ist es zweckmäßig, sich eine möglichst überschaubare Situation zu suchen, bei der man der Natur „auf die Finger“ schauen kann. Davon ist dann der Formalismus zu abstrahieren und auf seine Allgemeingültigkeit hin zu untersuchen.

2.1 Die Photonen zeigen uns, wie es geht

(... wenn wir ihre Zeichen zu deuten verstehen).

Da die Wellennatur des Lichtes unabhängig von der Quantennatur verstanden und beschrieben werden kann, ist es möglich, aus einer Quanteninterpretation von bereits aus der klassischen Wellenbeschreibung bekannten optischen Effekten zu lernen.

2.1.1 „Spielereien“ mit Polarisationsfiltern:

Eine typische, relativ leicht verstehbare Welleneigenschaft ist die Polarisation. Sie stellt die Schwingungsebene des elektrischen Feldes dar. Aufgrund der Vektoreigenschaften des elektrischen Feldes sind Polarisierungseffekte über relativ einfache Vektorbeziehungen beschreibbar. So funktioniert ein Polarisationsfilter derart, dass die Projektion des elektrischen Feldes auf die Polarisationssebene des Filters „durchgelassen“ wird. Lässt beispielsweise ein Polarisationsfilter nur vertikal polarisiertes Licht durch und ist das einfallende Licht um den Winkel α gegen die Vertikale polarisiert, so entsteht hinter dem Polarisator vertikal polarisiertes Licht mit einer Amplitude, welche mit der Amplitude der einfallenden Welle über den $\cos(\alpha)$ zusammenhängt (Vektorprojektion).

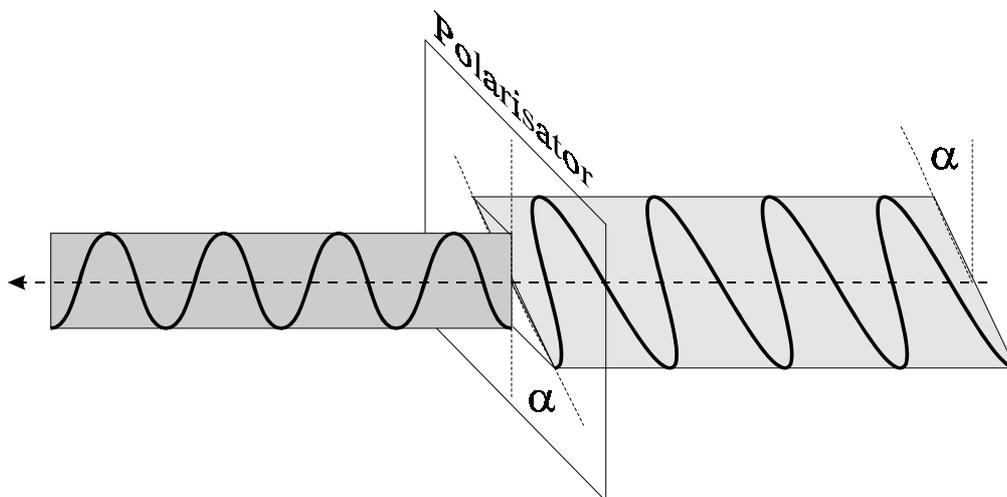


Abbildung 2.1-1: Funktionsprinzip eines Polarisators mit vertikaler Polarisationssebene

Bei der in Abbildung 2.1-1 beschriebenen Art von Polarisatoren geht somit ein Anteil der Energie verloren. Ein anderer Typ von Polarisationsfilter lässt sich auf dem bekannten Effekt der Doppelbrechung (z.B. Kalkspat) aufbauen. Hier ist der Effekt der, dass durch eine optische Anisotropie Lichtwellen mit unterschiedlicher Polarisation in unterschiedliche Richtungen abgelenkt werden. D.h. die Polarisationsanteile einer Lichtwelle werden zwar voneinander getrennt, aber keine davon wird absorbiert.

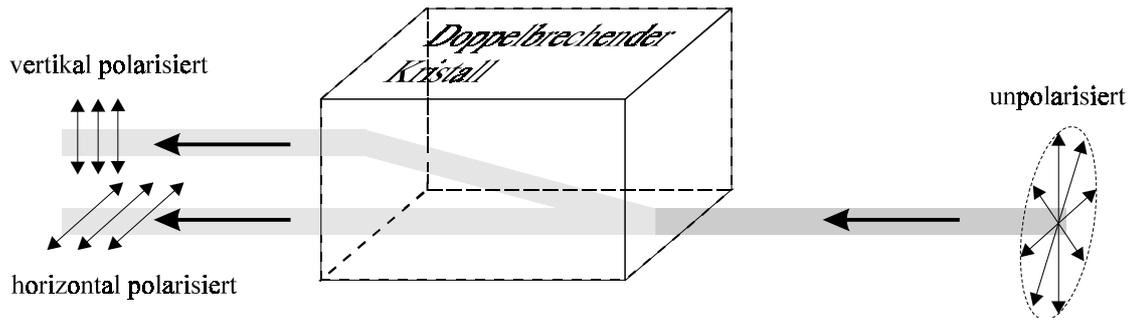


Abbildung 2.1-2: Funktionsprinzip eines doppelbrechenden Kristalls.

Wir können den Effekt der Doppelbrechung (Abbildung 2.1-2) so deuten, dass man zwei ineinander gestellte Polarisationsfilter mit aufeinander senkrecht stehender Polarisationsrichtung hat, wobei sich dann jedes Filter den ihm entsprechenden Anteil der Polarisation „herausholt“. Ist einfallendes Licht parallel zu einer der beiden Polarisationsrichtungen polarisiert, so geht es vollständig durch den dieser Polarisation zugewiesenen Weg, während auf dem anderen Weg, der zur dazu senkrechten Polarisationsrichtung gehört, kein Licht durchgeht. Ist die Polarisationsrichtung des einfallenden Lichtes beliebig, so gehen auf beiden Wegen die \cos -Anteile auf die entsprechenden Polarisationsrichtungen durch. Da man es zunächst mit Amplituden zu tun hat, muss man die $\cos^2(\alpha)$ Anteile verwenden, um die Intensitätsverhältnisse zu bekommen.

Wenn wir nun wieder auf die Quanteninterpretation wechseln, so können wir sofort wieder unser Paradoxon konstruieren:

Nehmen wir an, die einfallende Lichtwelle ist um genau 45° gegen die beiden Polarisationsrichtungen unseres doppelbrechenden Kristalls polarisiert. Dann sind die Projektionen des elektr. Feldes der einfallenden Welle auf beide Polarisationsrichtungen gleich groß. D.h., dass auf beiden Wegen die gleiche Lichtintensität durchgeht. Interpretieren wir nun dies im Teilchenbild, so heißt es, dass auf jedem Weg 50% der Photonen durchgehen. Machen wir das Experiment mit einzelnen Photonen, so haben wir wieder das Problem, dass das Photon nur entweder den einen oder den anderen Weg nehmen kann, weil es ja nicht teilbar ist (keine Farbänderung durch eine etwaige Halbierung der Energie beobachtet). D.h. während sich die Welle aufteilen kann, muss sich das Photon entscheiden. Wir haben also genau wieder jene heikle Situation der Interpretation mit unserem Beispiel herauspräpariert, von der auch schon in der Einleitung die Rede war. Wenn es uns also gelingt, dieses elementare Problem mit den Photonen in Zusammenhang mit der Polarisation so zu beschreiben, dass ein Widerspruch in der Interpretation von vorn herein theoretisch ausgeschlossen ist, so können wir hoffen, diesen Formalismus auch für andere Quantensysteme verallgemeinern zu können.

Um zu diesem Zweck alle notwendigen Zusammenhänge herausfinden zu können, müssen wir eine Reihe von „Experimenten“ mit Polarisationsfiltern durchführen. Um diese leichter zu überblicken, führen wir eine symbolische Darstellung der Polarisatorfunktion ein, die das Zeichnen und das Auffinden von Zusammenhängen erleichtern soll (siehe Abbildung 2.1-3):

Symbol a) steht für die grundsätzliche Funktion des doppelbrechenden Kristalls, nämlich der Trennung der beiden aufeinander normal stehenden Polarisationsanteile. Die Polarisationsrichtung 1 könnte dabei für vertikale Polarisation stehen und die 2 für horizontale Polarisationsrichtung. Das 1 bezeichnet, dass es sich um Polarisatoren für lineare Polarisation handelt - wir könnten das Ganze auch noch für zirkulare Polarisation und den dafür geeigneten Polarisatoren durchspielen (siehe etwas später). Möchte man nun ein Polarisationsfilter bauen, welches nur eine Polarisation durchlässt, so muss man einen der beiden Wege blockieren, wie in Symbol b) und c) angedeutet. Zuletzt könnte man, ohne etwas mit den beiden Polarisationsanteilen anzustellen, diese wieder im Strahlengang vereinigen. Durch Überlagerung der Wellen würde dann die ursprüngliche Welle wiederhergestellt und nichts ist passiert (Symbol d). Wenn auch eine Anordnung wie d) eigentlich nichts bewirkt, so wird ein solches Element bei der Systematisierung doch recht nützlich sein. Symbol d) wird in der Folge als Analytorkreis bezeichnet werden.

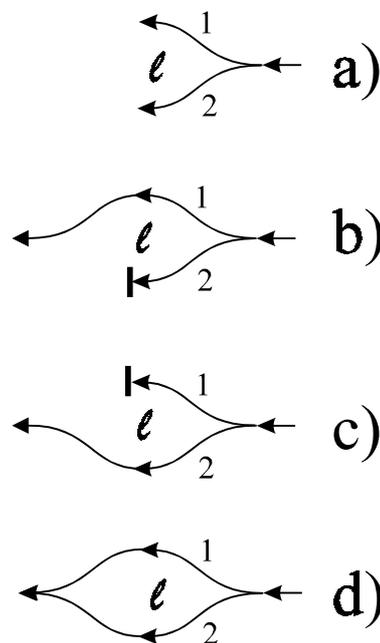


Abbildung 2.1-3: Symbolische Darstellung verschiedener Möglichkeiten für die Ausnutzung der Doppelbrechung.

Wir wollen nun in der Folge einige Kombinationen durchspielen:

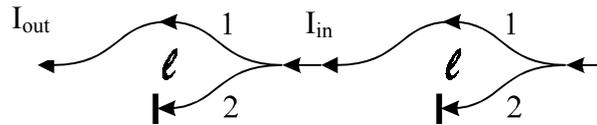


Abbildung 2.1-4: Kombination von 2 identischen Polarisationsfiltern

In obiger Kombination stellen wir zunächst mit einem Polarisator 1-polarisiertes Licht her und leiten es einem zweiten 1-Polarisator zu. Es ist leicht einzusehen, dass vom zweiten Polarisator die gesamte Intensität I_{in} auf I_{out} übertragen wird.

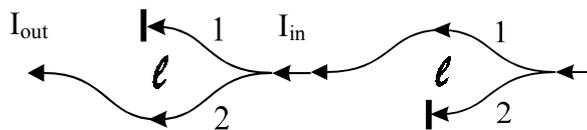


Abbildung 2.1-5: Kombination von 2 Polarisationsfiltern mit aufeinander senkrecht stehender Polarisation.

In der zweiten Kombination (Abbildung 2.1-5) ist einem 1-Polarisator ein 2-Polarisator nachgeschaltet. Da dies der Kombination von gekreuzten Polarisatoren entspricht, ergibt sich $I_{out} = 0$.

Nun wollen wir dazu übergehen, Kombinationen von Polarisatoren zu betrachten, bei denen die Polarisationsrichtungen um einen Winkel α gegeneinander verdreht sind. Wir können so vorgehen, dass wir nach wie vor 1-Polarisation mit vertikal und 2-Polarisation mit horizontal polarisiert definieren können. In nachstehender Abbildung 2.1-6 ist symbolisch ein um den Winkel α verdrehter Polarisator gezeichnet. Entsprechend diesem Symbol würde man mit 1'-Polarisation eine um den Winkel α gegen die Vertikale verdrehte Polarisation bezeichnen und mit 2'-Polarisation eine um den Winkel α gegen die Horizontale verdrehte Polarisation bezeichnen.

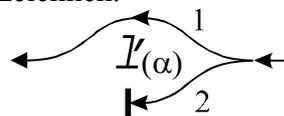


Abbildung 2.1-6: Symbol eines Polarisators mit einer um den Winkel α gegen die Vertikale geneigten Polarisationsebene.

Nun betrachten wir eine Kombination von einem 1-Polarisator und einem 1'-Polarisator.

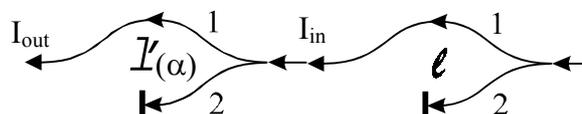


Abbildung 2.1-7: Kombination von einem 1-Polarisator und einem 1'-Polarisator

Da 1' eine um α verdrehte 1-Polarisation bezeichnet, erhält man $I_{out} = I_{in} \cos^2(\alpha)$

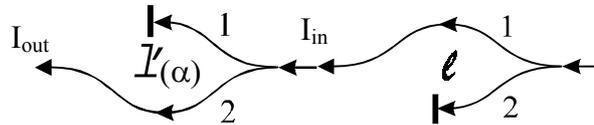


Abbildung 2.1-8: Kombination von einem 1-Polarisator und einem 2'-Polarisator

In Abbildung 2.1-8 entspricht der 2'-Polarisation eine 1'-Polarisation mit einem zusätzlichen Winkel von $\pm 90^\circ$. Das bedeutet dass in Abbildung 2.1-8 gilt: $I_{out} = I_{in} \sin^2(\alpha)$

Aus solchen Kombinationen lassen sich noch weitere, interessante Fälle konstruieren, die später beim „Abstrahieren“ eines „quantengerechten Formalismus“ noch sehr nützlich sein werden.

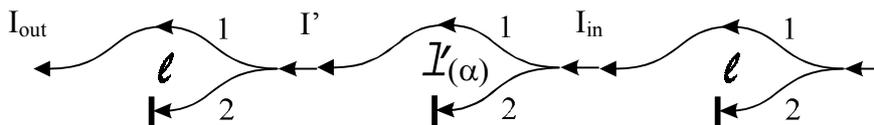


Abbildung 2.1-9: Kombination von zwei 1-Polarisatoren mit dazwischengeschaltetem 1'-Polarisator.

Es ist sicher leicht nachzuvollziehen, dass $I_{out} = I' \cos^2(\alpha)$ wobei $I' = I_{in} \cos^2(\alpha)$

Eine sehr interessante Kombination ist die folgende:

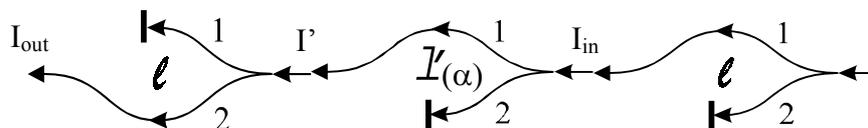


Abbildung 2.1-10: Kombination von einem 1-Polarisator und einem 2-Polarisator mit dazwischen geschaltetem 1'-Polarisator.

Es ist auch hier sehr leicht der Zusammenhang herzustellen: $I_{out} = I' \cos^2(\alpha - 90^\circ)$ wobei $I' = I_{in} \cos^2(\alpha)$, sodass $I_{out} = I_{in} \cos^2(\alpha) \cdot \sin^2(\alpha)$

Interessant in dieser Kombination ist, dass ohne dazwischen geschaltetem 1'-Polarisator die beiden 1- und 2- Polarisatoren allein ein $I_{out}=0$ ergeben würden, während durch das Dazwischenschalten des 1'-Polarisators $I_{out} \neq 0$ wird. Allein daraus wird schon klar, dass

die Polarisationsfilter eigentlich keine Filter im herkömmlichen Sinn sind, sondern die Polarisation des Lichtes während des „Filterns“ eigentlich auch verändern.

Um Sie noch etwas im Umgang mit solchen „Filtern“ zu trainieren, wollen wir unsere Betrachtungen auf die zirkulare Polarisation ausdehnen. Wie sie vielleicht noch wissen, kann man aus der Überlagerung von zwei senkrecht zueinander linear polarisierten Lichtwellen mit Hilfe einer Phasenverschiebung von 90° eine zirkular polarisierte Welle erzeugen (Lissajousfigur für den Fall eines Kreises). Je nach Vorzeichen der Phasenverschiebung erhält man einmal eine links umlaufende (linkszirkular) und einmal eine rechts umlaufende (rechtszirkular) Polarisation. Überlagert man nun eine links- und eine rechtszirkulare Welle gleicher Amplitude, so erhält man wieder eine linear polarisierte Welle, wobei die Lage der Polarisationsebene von der Phasenverschiebung zwischen der links- und rechtszirkularen Welle abhängt. Kurz gesagt kann man jede beliebige linear polarisierte Welle nicht nur aus einer Kombination von beliebigen, senkrecht zueinander linear polarisierten Lichtwellen darstellen, man kann sie auch durch Überlagerung von zirkular polarisierten Wellen darstellen. Das gleiche gilt auch umgekehrt: jede beliebige zirkular polarisierte Welle kann man nicht nur aus einer Kombination von beliebigen zirkular polarisierten Lichtwellen darstellen, man kann sie auch durch Überlagerung von linear polarisierten Wellen darstellen. Insofern sind auch Kombinationen von Polarisationsfiltern für lineare und zirkulare Polarisation denkbar. Rein formal können wir für die zirkulare Polarisation analog wie bei der linearen Polarisation vorgehen und definieren geeignete Symbole.



Abbildung 2.1-11: Symbole für zirkulare Polarisatoren, 1 könnte z.B. rechtszirkular und 2 linkszirkular bedeuten.

Sie wissen, dass es solche Polarisatoren in Form von sog. $\lambda/4$ -Plättchen gibt, welche aus linear polarisiertem Licht zirkular polarisiertes Licht erzeugen. Wir wollen uns aber an dieser Stelle mit der technischen Machbarkeit solcher Filter nicht weiter belasten und konzentrieren uns lieber auf die prinzipiell möglichen Verknüpfungen solcher Polarisatoren. Da wir nun linear und zirkular polarisiertes Licht gemischt betrachten wollen, müssen wir zur eindeutigen Kennzeichnung des Polarisationszustandes die Art des Filters dazuschreiben, z.B: 11, 12, z1, z2. Somit wäre beispielsweise 11 linear vertikal polarisiertes Licht, 12 linear horizontal polarisiertes Licht, z1 rechtszirkulares Licht und z2 linkszirkulares Licht. Wir betrachten nun folgende Kombination:

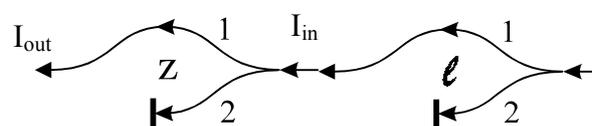


Abbildung 2.1-12: Kombination aus linearem und zirkularem Polarisationsfilter

Das erste Filter erzeugt vertikal linear polarisiertes Licht. Dieses kann zu gleichen Teilen aus entgegengesetzt umlaufendem zirkular polarisiertem Licht hergestellt werden. Deshalb muss sich die Intensität zur Hälfte auf linkszirkulares und zur Hälfte auf rechtszirkulares Licht aufteilen. Da aber nur rechtszirkulares Licht vom z-Polarisator durchgelassen wird, muss $I_{\text{out}} = 0.5 I_{\text{in}}$ sein. Man kann das Ganze auch umgekehrt betrachten:

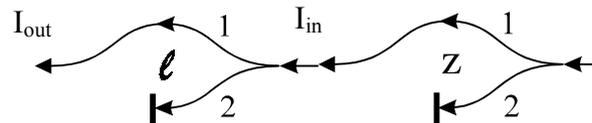


Abbildung 2.1-13: Kombination aus linearem und zirkularem Polarisationsfilter

Das erste Filter erzeugt rechtszirkular polarisiertes Licht. Dieses kann zu gleichen Teilen aus linear polarisiertem Licht mit aufeinander senkrecht stehender Polarisation hergestellt werden. Deshalb muss sich die Intensität zur Hälfte auf vertikal und zur Hälfte auf horizontal polarisiertes Licht aufteilen. Da aber in obigem Fall nur vertikal polarisiertes Licht vom 11-Polarisator durchgelassen wird, muss $I_{\text{out}} = 0.5 I_{\text{in}}$ sein.

Auch hier sind wieder 3-fach-Kombinationen besonders interessant:

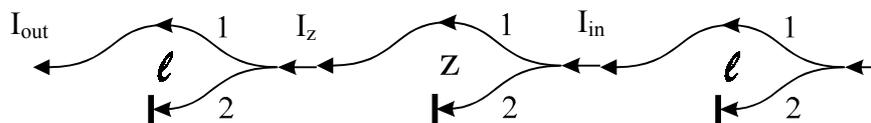


Abbildung 2.1-14: Kombination von zwei 11-Polarisatoren mit dazwischen geschaltetem z1-Polarisator

Das Aufstellen der Intensitätsverhältnisse ist relativ einfach: $I_z = 0.5 I_{\text{in}}$ und $I_{\text{out}} = 0.5 I_z$, sodass man $I_{\text{out}} = 0.25 I_{\text{in}}$ erhält.

Übungsaufgaben: (auf freiwilliger Basis, aber empfehlenswert)

1. Ermitteln Sie analog die Intensitätsänderungen für die Kombinationen 12-z1-11; 12-11-z1; 12-z1-12; 11-z2-11; 11-11-z2 sowie z1-11-z1; z1-z1-11; z2-11-z1; z2-z1-11; z1-12-z1 an.
2. Um welchen Faktor ändert sich die Amplitude $A_{\text{out}}/A_{\text{in}}$ in Abbildung 2.1-12, Abbildung 2.1-13 und Abbildung 2.1-14

2.1.2 Algebraisierung der Polarisationsexperimente:

Wenn auch die im vorigen Abschnitt vereinfachte symbolische Darstellung ein relativ rasches Arbeiten erlaubt, so ist der Aufwand mit zunehmender Komplexität der Kombinationen doch relativ hoch. Es lohnt sich daher, nach einer symbolischen Schreibweise Ausschau zu halten, mit der man auch ohne zu zeichnen die Übersicht behält, aber gleichzeitig auch eine sinnvolle Darstellung der sich durch die Verknüpfungen ergebenden Werte erlaubt. Wir führen dazu die in Abbildung 2.1-15 dargestellten algebraische Ausdrücke ein. Man kann sich die in Abbildung 2.1-15 rechts stehenden Ausdrücke bildlich so vorstellen, dass von rechts ein beliebiger (Polarisations-) Zustand angeboten wird (z.B. unpolarisiertes Licht von einer Lampe), von dem der entsprechende $l1$ - oder $l2$ -Anteil akzeptiert (herausgefiltert) und nach links ausgegeben wird.

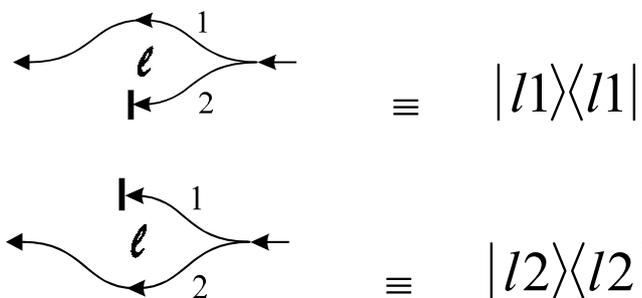


Abbildung 2.1-15: Algebraische Darstellung für lineare Polarisatoren

Eine praktische Anordnung samt Lampe könnte somit wie folgt aussehen:

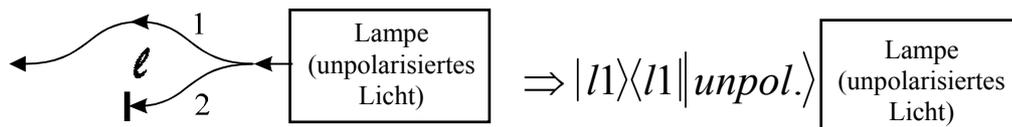


Abbildung 2.1-16: Beispiel für eine praktische Anordnung mit nicht polarisierender Lichtquelle.

Die Lampe gibt unpolarisiertes Licht aus (eckige Klammer nach links offen = „Ausgang“ nach links), von der der $l1$ -Polarisator den $l1$ -Anteil herausholt (eckige Klammer nach rechts offen = „Eingang“ von rechts) und nach links weitergibt (eckige Klammer nach links offen = „Ausgang“ nach links). Üblicherweise lässt man die Lampe samt unpolarisiertem Ausgang weg (wie z.B. in Abbildung 2.1-15) - man kann sie sich aber jederzeit im soeben erklärten Sinn dazudenken.

Ein Analysatorkreis (Abbildung 2.1-3d) wäre demnach, wie unten gezeigt, eine Parallelschaltung von den beiden Zweigen in Abbildung 2.1-15:

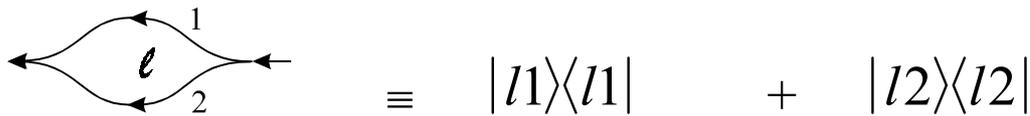


Abbildung 2.1-17: Algebraische Darstellung eines Analysatorkreises, der keinerlei Veränderung bewirkt.

Um herauszufinden, was man in solche algebraische Ausdrücke alles hineinstecken kann, wollen wir wieder einige spezielle Fälle betrachten:

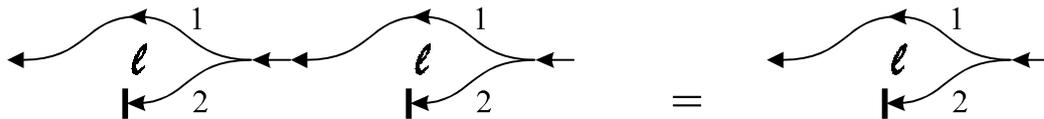


Abbildung 2.1-18: „Idempotenz“ von zwei identischen, hintereinander angewandten //Polarisationsfiltern

In der algebraischen Schreibweise würde man den in Abbildung 2.1-18 dargestellten Sachverhalt folgendermaßen darstellen:

Eqn. 2.1-1: $|l1\rangle\langle l1||l1\rangle\langle l1| = |l1\rangle\langle l1|$

Das vom ersten „Filter“ kommende // polarisierte Licht wird gleich an das nachfolgende //Filter ungeschwächt weitergegeben. Der obigen Identität können wir so Rechnung tragen, indem wir dem dazwischen stehenden Klammerausdruck die „1“ zuweisen:

Eqn. 2.1-2: $\langle l1||l1\rangle = 1$ daraus folgt:

$$|l1\rangle\langle l1||l1\rangle\langle l1| = 1 \cdot |l1\rangle\langle l1|$$

Es deutet sich somit die Möglichkeit an, durch Zuweisen von Werten an die geschlossenen Klammerausdrücke eine Reduktion des algebraischen Ausdruckes durchzuführen. Um diese Möglichkeit weiter zu hinterfragen, betrachten wir noch weitere Kombinationen, wie z.B. die folgende:

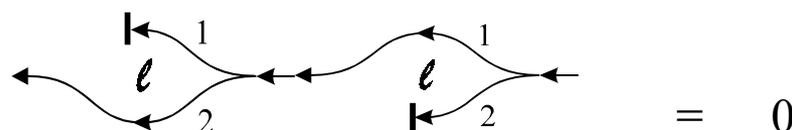


Abbildung 2.1-19: „Orthogonalität“ von zwei hintereinander angewandten, senkrecht zueinander polarisierenden Polarisationsfiltern.

Wir kennen das Ergebnis aus dem vorigen Kapitel und übertragen es auf unseren algebraischen Ausdruck:

$$\text{Eqn. 2.1-3: } |I2\rangle\langle I2||I1\rangle\langle I1| = 0$$

Der obigen Gleichung können wir so Rechnung tragen, dass wir dem dazwischen stehenden Klammerausdruck den Wert 0 zuweisen:

$$\text{Eqn. 2.1-4: } \langle I2||I1\rangle = 0 \quad \text{daraus folgt:}$$

$$|I2\rangle\langle I2||I1\rangle\langle I1| = \langle I2||I1\rangle \cdot |I2\rangle\langle I1| = 0 \cdot |I2\rangle\langle I1|$$

Der Ausdruck $|I2\rangle\langle I1|$ beschreibt eine Kombination, die prinzipiell aus $I1$ -polarisiertem Licht $I2$ -polarisiertes Licht macht - nur ist in der konkreten Filterkombination die übertragene Amplitude laut Eqn. 2.1-4 null. Das muss aber nicht immer so sein, wie wir noch später sehen werden.

Nun, in den bisherigen Spezialfällen war der Durchgang entweder 100% ($\langle I1||I1\rangle = 1$) oder 0% ($\langle I2||I1\rangle = 0$). Dies könnte ganz gleich sowohl für die Amplitudenverhältnisse als auch für die Intensitätsverhältnisse gelten. Wir nehmen zunächst an, dass die geschlossenen eckigen Klammern die Amplitudenverhältnisse beschreiben und betrachten folgende, etwas allgemeinere Situation (bereits in Abbildung 2.1-7 besprochen):

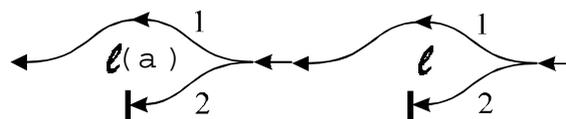


Abbildung 2.1-20: Kombination von einem $I1$ -Polarisator und einem $I1'$ -Polarisator

Der passende algebraische Ausdruck, diesmal inklusive unpolarisiertem Lampenausgang, sieht so aus:

$$\text{Eqn. 2.1-5: } |I1'\rangle\langle I1'||I1\rangle\langle I1||unpol\rangle$$

Unter Einbeziehung des Lampenausganges haben wir nun 2 geschlossene Klammern ($\langle I1||unpol\rangle$ und $\langle I1'||I1\rangle$). Da wir versuchen wollen, den geschlossenen Klammern Amplitudenverhältnisse zuzuschreiben, wird wohl der dem Ausdruck $\langle I1||unpol\rangle$ zuzuordnende Wert der Amplitudenänderung beim Übergang von der Lampe zum $I1$ -Polarisator entsprechen. Da wir uns jetzt nur dafür interessieren, was sich zwischen $I1$ - und $I1'$ -Polarisator abspielt, können wir die Amplitude des $I1$ -Anteiles beim 1. Filter „1“ setzen. D.h., man tut letztlich so, als ob dem 1. Filter bereits $I1$ -polarisiertes Licht mit der

Amplitude 1 zugeführt werden würde. Dies drückt sich so aus, dass man den Ausdruck in Eqn. 2.1-5 ohne Lampenausgang schreibt:

$$\text{Eqn. 2.1-6} \quad |I'\rangle\langle I' || I\rangle\langle I|$$

Damit drückt man aus, dass man davon ausgeht, dass das I -Filter bereits mit I -polarisiertem Licht der Amplitude 1 versorgt wird. Da wir uns an dieser Stelle ohnehin nur dafür interessieren, welche Veränderungen nach dem I -Filter, oder besser gesagt, durch das Zusammenspiel des I -Filters mit dem I' Filter auftreten, ist diese Annahme äußerst zweckmäßig. Somit sollte bei künftigen Betrachtungen ein nach rechts offener Eingang (fehlende Lampe) nicht weiter stören.

Daher brauchen wir uns nur mehr mit dem Ausdruck $|I'\rangle\langle I' || I\rangle\langle I|$ und der einzigen darin enthaltenen geschlossenen Klammer $\langle I' || I\rangle$ zu beschäftigen. Somit sollte nach unseren Überlegungen dieser Klammer die Amplitudenänderung beim Durchgang von I -polarisiertem Licht durch einen I' -Polarisator entsprechen. Wir kennen die Lösung dafür schon und können daher schreiben:

$$\text{Eqn. 2.1-7} \quad \langle I' || I\rangle = \cos(\alpha)$$

Um nun wieder auf den gesamten Ausdruck $|I'\rangle\langle I' || I\rangle\langle I|$ zurückzukommen, so schreiben wir ihn folgendermaßen um:

$$\text{Eqn. 2.1-8:} \quad |I'\rangle\langle I' || I\rangle\langle I| = \cos(\alpha) \cdot |I'\rangle\langle I|$$

Man kann sagen, dass Eqn. 2.1-8 einen „Apparat“ beschreibt, welcher, wenn man ihn mit I -polarisiertem Licht der Amplitude 1 „füttert“, er I' -polarisiertes Licht der Amplitude $\cos(\alpha)$ ausgibt. Die beiden verbleibenden offenen Klammern ($|I'\rangle$ und $\langle I|$) kann man nicht zum Verschwinden bringen - man braucht sie ja letztlich um anzuzeigen, welchen Polarisationszustand der „Apparat“ bereit ist zu 100% zu akzeptieren ($\langle I|$) und welchen er dann nachher ausgibt ($|I'\rangle$)

Ich möchte an dieser Stelle noch einmal betonen, dass die Zuweisung des Amplitudenverhältnisses an die geschlossenen Klammern zunächst ein Versuch ist, einen konsistenten und widerspruchsfreien Formalismus zu erhalten. Wir könnten schließlich ja auch versuchen, diesen Klammern statt der Amplitudenverhältnisse die Intensitätsverhältnisse zuzuweisen. D.h. die Sinnhaftigkeit unserer Wahl muss sich noch herausstellen. Um dies festzustellen, müssen wir weitere Spezialfälle untersuchen, deren

Ergebnisse wir schon kennen. Dadurch können wir dann überprüfen, ob unser bisheriger Formalismus sich darauf widerspruchsfrei anwenden lässt.

Bevor es weitergeht, vielleicht einige Beispiele zum (freiwilligen) „Aufwärmen“ und Vertiefen:

1) Wie ändert sich die Intensität bei folgenden „Apparaten“:

- a) $|z1\rangle\langle z1||1\rangle\langle 1|$ b) $|I2\rangle\langle I2||z1\rangle\langle z1||1\rangle\langle 1|$ c) $|I1\rangle\langle I1||z1\rangle\langle z1||1\rangle\langle 1|$
- b) $|z2\rangle\langle z2||1\rangle\langle 1||z1\rangle\langle z1|$ e) $|I2\rangle\langle I2||I'(\alpha)\rangle\langle I'(\alpha)||1\rangle\langle 1|$ für $\alpha = 0^\circ, 30^\circ, 45^\circ, 60^\circ, 90^\circ$

2) Stellen Sie die Zustände $|I1'\rangle$ und $|I2'\rangle$ für $\alpha = 30^\circ$ als eine Linearkombination der Zustände $|I1\rangle$ und $|I2\rangle$ dar. D.h. ermitteln Sie die Koeffizienten a und b nach dem Ansatz:
 $1 \cdot |I1'\rangle = a \cdot |I1\rangle + b \cdot |I2\rangle$

Wie schon in der letzten Vorlesung angekündigt, ist es nun erforderlich zu überprüfen, ob die Zuweisung der Übergangsamplituden an die geschlossenen (spitzen) Klammerausdrücke wie z.B. $\langle I2'|I1\rangle$ auch tatsächlich sinnvoll und vor allen widerspruchsfrei möglich ist. Zu diesem Zweck wählen wir uns die unten dargestellte Kombination:

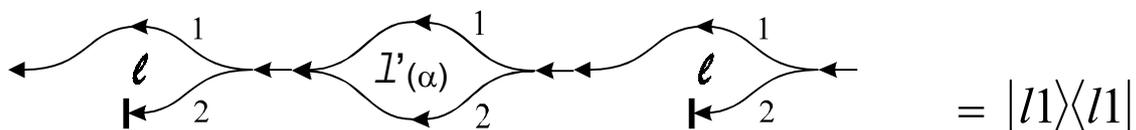


Abbildung 2.1-21: Kombination von zwei $I1$ -Polarisatoren mit dazwischen gestelltem I' -Analysatorkreis. Wie mit dem rechts stehenden algebraischen Ausdruck angedeutet, kann das Ganze eigentlich nur wie ein einfacher $I1$ -Polarisator wirken.

Nach unseren bisherigen Überlegungen bewirkt der mittlere Analysatorkreis nichts und wir erhalten somit 2 hintereinander geschaltete identische Filter, welche ihrerseits wieder wie ein einzelnes Filter des gleichen Typs wirken. Wir wollen uns aber dennoch den algebraischen Ausdruck für die gesamte Anordnung näher anschauen:

$$\begin{aligned}
 |I1\rangle\langle I1| [|I1'\rangle\langle I1'| + |I2'\rangle\langle I2'|] |I1\rangle\langle I1| &= |I1\rangle\langle I1| I1'\rangle\langle I1'| |I1\rangle\langle I1| + |I1\rangle\langle I1| I2'\rangle\langle I2'| |I1\rangle\langle I1| \\
 &= |I1\rangle\langle I1| [\langle I1|I1'\rangle\langle I1'|I1\rangle + \langle I1|I2'\rangle\langle I2'|I1\rangle] = |I1\rangle\langle I1|
 \end{aligned}$$

Daraus folgt dass der Ausdruck in den eckigen Klammern [...] = 1 sein muss:

$$\text{Eqn. 2-9: } [\langle I1 || I1' \rangle \langle I1' || I1 \rangle + \langle I1 || I2' \rangle \langle I2' || I1 \rangle] = 1$$

Diese Gleichung muss für beliebige Winkel α gelten (z.B. geht ja $I1'$ aus $I1$ durch eine Drehung um den Winkel α hervor). Die Ausdrücke in geschlossenen spitzen Klammern müssen somit Zahlen sein, die vom Winkel α abhängen. Wir kennen diese Abhängigkeiten eigentlich schon, bzw. wir haben sie schon mit der Amplitudenänderung beim Übergang von einem Filter zum nächsten identifiziert. Um allerdings zu überprüfen, ob nicht auch eine andere Wahl möglich wären, wollen wir das Ganze vorerst etwas allgemeiner untersuchen und diese Funktionen noch offen lassen. D.h. wir drücken diese Abhängigkeit formal durch folgende 4 Funktionen aus:

$$\begin{aligned} \langle I1 || I1' \rangle &\equiv f_1(\alpha) \\ \langle I1' || I1 \rangle &\equiv f_1^*(\alpha) \\ \langle I1 || I2' \rangle &\equiv f_2(\alpha) \\ \langle I2' || I1 \rangle &\equiv f_2^*(\alpha) \end{aligned}$$

Wir können sofort einige wichtige Zusammenhänge zwischen diesen 4 Funktionen feststellen:

$$\text{a) } f_1(\alpha) \cdot f_1^*(\alpha) + f_2(\alpha) \cdot f_2^*(\alpha) = 1$$

b) Wenn man α ersetzt durch $\alpha + 90^\circ$, so bedeutet das, dass $I1'$ in $I2'$ übergeht und umgekehrt, d.h. dass beide Polarisationsrichtungen ihre Bedeutung vertauschen. Wir müssen also folgende Eigenschaft von den Funktionen fordern:

$$\begin{aligned} |f_1(\alpha + 90^\circ)| &= |f_2(\alpha)| \\ |f_2(\alpha + 90^\circ)| &= |f_1(\alpha)| \end{aligned}$$

Wir wollen uns vorerst um die Vorzeichenfrage nicht kümmern und betrachten daher nur die Beträge, für die obigen Gleichungen auf jeden Fall gelten müssen. Fasst man a) und b) zusammen, so ist leicht einzusehen, dass diese Bedingungen entsprechend den unten stehenden Funktionen nur mit $\sin(\alpha)$ und $\cos(\alpha)$ erfüllt werden können:

$$\text{Eqn. 2-10 } \begin{aligned} |f_1(\alpha)| &= |f_1^*(\alpha)| = \cos(\alpha) \\ |f_2(\alpha)| &= |f_2^*(\alpha)| = \sin(\alpha) \end{aligned}$$

Da wegen Eqn. 2-9 die Faktoren $\langle I1 || I1' \rangle \langle I1' || I1 \rangle$ und $\langle I1 || I2' \rangle \langle I2' || I1 \rangle$ auf jeden Fall positive reelle Zahlen sein müssen, können $\langle I1 || I1' \rangle$ und $\langle I1' || I1 \rangle$ sowie $\langle I1 || I2' \rangle$ und $\langle I2' || I1 \rangle$

zueinander „schlimmstenfalls“ komplex konjugierte Zahlen sein (Erinnere: $a^*a \geq 0$). D.h. wir können festlegen dass:

Eqn. 2-11: $\langle I1 \| I1' \rangle = \langle I1' \| I1 \rangle^*$
 $\langle I1 \| I2' \rangle = \langle I2' \| I1 \rangle^*$ a^* bedeutet dabei das komplex konjugierte zu a

Für den Fall, dass es sich bei $\langle I1 \| I1' \rangle$ und $\langle I1 \| I2' \rangle$ bereits um reelle Zahlen handelt, ist Eqn. 2-11 trivialerweise erfüllt. D.h. ist $\langle I1 \| I1' \rangle$ eine reelle Zahl, so ist es auch $\langle I1' \| I1 \rangle$ und wir können für beide die schon weiter vorne gefundenen cos- bzw. sin- Funktion einsetzen.

An dieser Stelle wird aber auch klar, dass die cos- und sin-Funktionen die einzig mögliche sinnvolle Zuweisung an die Ausdrücke $\langle I1 \| I1' \rangle$ und $\langle I1 \| I2' \rangle$ darstellen und etwa die Identifikation von $\langle I1 \| I1' \rangle$ und $\langle I1 \| I2' \rangle$ mit dem Verhältnis der Intensitäten (Zuweisung der \cos^2 - und \sin^2 - Funktionen) wegen Eqn. 2-9 zu keinem sinnvollen Ergebnis führen würde. Würde man nämlich $\langle I1 \| I1' \rangle = \cos^2(\alpha)$ und $\langle I1 \| I2' \rangle = \sin^2(\alpha)$ zuweisen, so müsste man verlangen dass $[\langle I1 \| I1' \rangle \langle I1' \| I1 \rangle + \langle I1 \| I2' \rangle \langle I2' \| I1 \rangle] = \cos^4(\alpha) + \sin^4(\alpha) = 1$ gilt, was wohl kaum der Fall ist !

Betrachten wir nun eine andere, bereits bekannte Kombination:

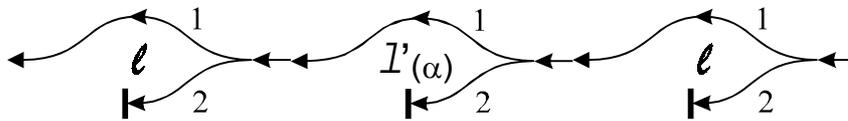


Abbildung 2.1-22: Kombination von zwei I1-Polarisatoren mit dazwischen gestellten I1'-Polarisator.

Der algebraische Ausdruck für die obige Kombination lautet $|I1\rangle \langle I1 \| I1' \rangle \langle I1' \| I1 \rangle \langle I1|$. Aufgrund von Eqn. 2-10 und Eqn. 2-11 wissen wir, dass folgendes gilt.

Eqn. 2-12 $\langle I1 \| I1' \rangle \langle I1' \| I1 \rangle = \cos^2(\alpha)$

Dies ist aber genau der Anteil an Intensität, der bei Durchgang von I1-polarisiertem Licht durch einen I1'-Polarisator durchgeht. Somit wird abermals klar, dass Ausdrücke wie z.B. $\langle I1' \| I1 \rangle$ lediglich die Amplitudenänderung bei Durchgang von z.B. I1-polarisiertem Licht durch einen I1'-Polarisator beschreiben können. Dies ist eine äußerst angenehme Eigenschaft dieser geschlossenen *«eckigen»* Klammersausdrücke, denn solange man noch die Amplituden zur Verfügung hat, hat man sich prinzipiell die Möglichkeit bewahrt, auch Interferenzeffekte zu berücksichtigen. Lässt man nämlich für diese Ausdrücke auch

komplexe Zahlen zu, so hat man neben der Amplitudenveränderung auch die Möglichkeit, eine etwaige Phasenverschiebung zu erfassen. (siehe Übungsbeispiele weiter hinten). Auf jeden Fall ist aber $\langle I1 | I1' \rangle \langle I1' | I1 \rangle \geq 0$ eine positiv definite Zahl (für jede komplexe Zahl gilt $a \cdot a^* \geq 0$), welche die Intensitätsänderung beim Durchgang beschreibt. Auf Experimente mit einzelnen Photonen uminterpretiert heißt das, dass die Zahl $\langle I1 | I1' \rangle \langle I1' | I1 \rangle$ die Wahrscheinlichkeit dafür beschreibt, dass ein Photon, welches sich im Polarisationszustand $|I1\rangle$ befindet, auch den Polarisator $|I1'\rangle$ passiert. Passiert es allerdings das Filter für $|I1'\rangle$, so ist es auch im Polarisationszustand $|I1'\rangle$ und nicht mehr im Polarisationszustand $|I1\rangle$! (mit diesem Sachverhalt werden wir uns aber später noch genauer zu befassen haben).

Kommen wir noch einmal auf den Ausdruck in Eqn. 2-9 zurück, so bedeutet er die Summe der Wahrscheinlichkeiten der beiden Wege durch den Analysatorkreis. Mit anderen Worten bedeutet Eqn. 2-9 dass die Wahrscheinlichkeit dafür, dass das Photon entweder oben oder unten durchgeht, 1 ist - was wohl nicht weiter verwunderlich ist. Andererseits ist es aber auch beruhigend, dass so etwas Selbstverständliches aus unserem Formalismus auch automatisch herauskommt. Dieses „Dazwischenschalten“ eines an sich unwirksamen Analysatorkreises, wie soeben in Zusammenhang mit Abbildung 2.1-21 oder Eqn. 2-9 erklärt, ist ein äußerst nützlicher algebraischer „Trick“, die uns im weiteren Verlauf noch sehr gute Dienste leisten wird !

2.1.3 Überlagerung von Polarisationszuständen:

Das Konzept der Überlagerung von Zuständen ist wohl eines der fundamentalsten Konzepte, ohne die eine quantenphysikalische Beschreibung völlig unmöglich wäre. Glücklicherweise ist es möglich, anhand unserer Betrachtung von Polarisationszuständen bereits alle Aspekte dieses Konzeptes auf relativ durchschaubare Art zu erlernen.

Wie schon weiter vorne erwähnt, ist es prinzipiell möglich, eine linear polarisierte Welle durch Überlagerung von zwei gegenläufig zirkular polarisierten Wellen darzustellen und umgekehrt. Nach unseren bisherigen Überlegungen können wir uns einen Apparat vorstellen, der durch irgend eine Filterkombination aus dem Polarisationszustand am Eingang $|P_E\rangle$ einen veränderten Polarisationszustand am Ausgang $|P_A\rangle$ macht. Wir können den Polarisationszustand am Eingang $|P_E\rangle$ durch eine Überlagerung (Linearkombination) von beispielsweise $|I1\rangle$ und $|I2\rangle$ dargestellt denken. In so einem Fall wäre es sinnvoll, wenn auch der Ausgangszustand $|P_A\rangle$ durch eine Linearkombination von

ebenfalls $|I1\rangle$ und $|I2\rangle$ dargestellt sein würde. Die ganze Problematik stellt sich also wie folgt dar:

$$|P_E\rangle = a \cdot |I1\rangle + b \cdot |I2\rangle \equiv \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

$$|P_A\rangle = c \cdot |I1\rangle + d \cdot |I2\rangle \equiv \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix}$$

Wenn man sich darauf festlegt, alle möglichen Polarisationszustände immer mit den gleichen zwei „Basiszuständen“ $|I1\rangle$ und $|I2\rangle$ darzustellen, so reicht es aus, nur mehr die Überlagerungskoeffizienten a, b bzw. c, d anzugeben. Man kann sich dann der Vektorschreibweise bedienen, in der die Position in der Spalte angibt, zu welchem der Basiszustände der jeweilige Koeffizient gehört. Es soll aber betont werden, dass in diesem Fall die Wahl der Basiszustände klar sein muss und konsequent durchgehalten wird. Solange wir es mit linearen Polarisationszuständen zu tun haben und mit ihnen wieder andere lineare Polarisationszustände darstellen, haben wir es letztlich tatsächlich mit Vektoren zu tun, sodass obige Anlehnung an die Vektorschreibweise eigentlich nicht verwunderlich ist. Es muss sich allerdings nicht immer um vektorielle physikalische Größen handeln, welche den jeweiligen Basiszuständen zugrunde liegen. Wir brauchen beispielsweise nur an zirkulare Polarisationszustände denken, so ist es mit der Betrachtung als tatsächlicher Vektor nicht mehr weit her. Wir werden also unser Konzept eher als eine verallgemeinerte Vektorschreibweise betrachten müssen, in der sich die Verknüpfungen zwischen den verallgemeinerten Vektoren nicht unbedingt länger wie normale Vektoren benehmen müssen. Bevor wir uns auf die Suche nach der formalen Behandlung dieser verallgemeinerten Vektoren machen, wollen wir uns überlegen, wie den eigentlich die mathematische Verknüpfung zwischen Eingangs- und Ausgangszustand in unserer verallgemeinerten Vektorschreibweise prinzipiell aussehen kann. Es sollte an sich folgendes gelten:

$$\begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} = A \otimes \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

Wir stellen uns vor, dass die Wirkung unseres Apparates A auf den Eingangszustand in verallgemeinerter Vektorschreibweise wirkt und daraus den Ausgangszustand erzeugt. Die mathematische „Wirkung“ sei dabei vorerst mit dem \otimes symbolisiert. Es ist relativ leicht einzusehen, dass die einfachste mathematische Operation, die einen Vektor in einen (anderen) Vektor überführen kann, eine Matrixmultiplikation ist. Um also unser „Überlagerungskonzept“ anwenden zu können, müssen wir nach einer Möglichkeit suchen,

unseren Apparat A durch eine, im konkreten Fall 2x2 Matrix zu repräsentieren (darzustellen). Dabei wird uns die folgende Kombination wertvolle Hilfe leisten:

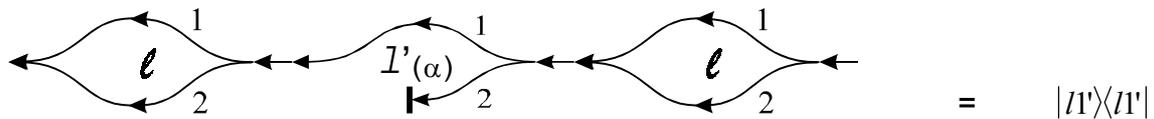


Abbildung 2.1-23: Kombination von zwei l-Analysatorkreisen mit dazwischen gestellten l'-Polarisator. Die Gesamtwirkung kann nur die eines l'-Polarisators sein.

In obiger Anordnung hat eigentlich nur der zentrale l'-Polarisator eine Wirkung, da die beiden Analysatorkreise am Eingang und Ausgang eigentlich nichts bewirken. Dennoch hat diese Anordnung in algebraischer Hinsicht eine Interessante Bedeutung. Wir betrachten $|l'\rangle\langle l'|$ als einen Apparat A, der im konkreten Fall ein l'-Polarisationsfilter ist. Der algebraische Ausdruck für A lt. Abbildung 2.1-23 lautet:

$$A = [|l1\rangle\langle l1| + |l2\rangle\langle l2|] \cdot |l'\rangle\langle l'| \cdot [|l1\rangle\langle l1| + |l2\rangle\langle l2|] = |l'\rangle\langle l'|$$

Da es sich am Eingang und am Ausgang jeweils um Analysatorkreise handelt, sind die beiden Zweige $|l1\rangle\langle l1|$ und $|l2\rangle\langle l2|$ jeweils am Eingang und am Ausgang parallel zu schalten (zu addieren). Löst man die Klammern auf, so erhält man folgendes:

Eqn. 2-13

$$A = |l1\rangle\langle l1| |l'\rangle\langle l'| |l1\rangle\langle l1| + |l1\rangle\langle l1| |l'\rangle\langle l'| |l2\rangle\langle l2| + |l2\rangle\langle l2| |l'\rangle\langle l'| |l1\rangle\langle l1| + |l2\rangle\langle l2| |l'\rangle\langle l'| |l2\rangle\langle l2|$$

Diesen etwas länglichen Ausdruck kann man auch etwas kompakter schreiben:

Eqn. 2-14:

$$A = \sum_{i=1}^2 \sum_{k=1}^2 |l_i\rangle\langle l_i| |l'\rangle\langle l'| |l_k\rangle\langle l_k|$$

Formal stimmt diese Gleichung aber auch mit einer Tensoroperation (=Matrixmultiplikation) nach folgendem Schema überein:

Eqn. 2-15

$$A = (|l1\rangle \quad |l2\rangle) \cdot \begin{pmatrix} \langle l1|l'\rangle\langle l'|l1\rangle & \langle l1|l'\rangle\langle l'|l2\rangle \\ \langle l2|l'\rangle\langle l'|l1\rangle & \langle l2|l'\rangle\langle l'|l2\rangle \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \langle l1| \\ \langle l2| \end{pmatrix}$$

(probieren Sie es aus - es funktioniert !)

Formal stellt somit A die Wirkung des l' - Polarisators $|l'\rangle\langle l'|$ auf einen beliebigen Polarisationszustand dar, der durch eine Linearkombination von l1- und l2-

Polarisationszuständen dargestellt wird. Das Resultat dieser Wirkung wird in dieser Schreibweise wieder als Linearkombination von I_1 - und I_2 - Polarisationszuständen dargestellt. Daher können wir die Matrix in Eqn. 2-15 als Tensoroperator \vec{A} für einen I_1 '-Polarisator in der I_1 - I_2 -Darstellung (kurz I -Darstellung) bezeichnen:

$$\text{Eqn. 2-16:} \quad \vec{A} = \begin{pmatrix} \langle I_1 | I_1 \rangle \langle I_1 | I_1 \rangle & \langle I_1 | I_1 \rangle \langle I_1 | I_2 \rangle \\ \langle I_2 | I_1 \rangle \langle I_1 | I_1 \rangle & \langle I_2 | I_1 \rangle \langle I_1 | I_2 \rangle \end{pmatrix}$$

Somit haben wir durch die algebraische Auflösung von Abbildung 2.1-23 tatsächlich eine Matrixdarstellung unseres Apparates, im konkreten Fall des I_1 '-Polarisationsfilters, gefunden. Die Matrixelemente von A sind Zahlen, deren Bildungsgesetz direkt von Eqn. 2-16 abzulesen ist. Wenngleich das alles nun relativ kompliziert aussieht, so ist letztlich nicht mehr dahinter als Abbildung 2.1-23 bzw. Eqn. 2-13. Das grundlegende Prinzip des zuletzt durchexerzierten Formalismus ist es, die Wirkung eines I_1 '-Polarisators zu beschreiben. D.h., es gibt einen beliebigen Polarisationszustand, welcher als Linearkombination von I_1 und I_2 dargestellt wird, und diesem I_1 '-Polarisaor zugeführt wird. Dieser I_1 '-Polarisator ändert den Zustand, wobei dieser geänderte Zustand mitsamt seiner Übergangsamplitude wieder als Linearkombination von I_1 und I_2 dargestellt wird. Es ist eine grundsätzliche Vorgangsweise, dass ein beliebiger Ausgangszustand durch ihn „darstellende“ Basiszustände durch Superposition (Überlagerung) repräsentiert wird. Das Resultat einer Operation durch einen „Apparat“ (in diesem Fall der I_1 '-Polarisator) soll dabei wieder mit den gleichen Basiszuständen (=Darstellung) durch Superposition repräsentiert (dargestellt) werden.

Man kann nun das soeben gesagte für einen beliebigen „Operator“ A , der einen beliebigen „Apparat“ repräsentiert, verallgemeinern. Dieser wirkt auf einen Polarisationszustand ein und kann diesen somit verändern. Die Matrixdarstellung für die Verwendung von den I_1 - und I_2 - Basiszuständen schaut dann im allgemeinen aus wie folgt:

$$\text{Eqn. 2-17:} \quad \vec{A} = \begin{pmatrix} \langle I_1 | A | I_1 \rangle & \langle I_1 | A | I_2 \rangle \\ \langle I_2 | A | I_1 \rangle & \langle I_2 | A | I_2 \rangle \end{pmatrix}$$

Dies bedeutet, dass die Matrixelemente so gebildet werden, dass man auf alle Basiszustände den Operator A wirken lässt, und die so erhaltenen Zustände wieder als Projektionen auf alle Basiszustände beschreibt (siehe Beispiele). Gibt es n Basiszustände (im Fall der Polarisation gilt $n=2$), so gibt es $(n \times n)$ Zahlenfaktoren (=Matrixelemente) die die bewusste Matrixdarstellung bilden. Man müsste aber nicht I_1 und I_2 als Basiszustände

verwenden. Ist es jemanden beispielsweise lieber, einen beliebigen Polarisationszustand als Überlagerung aus zirkular polarisierten Wellen statt aus linear polarisierten Wellen darzustellen, so müsste man

$$\begin{aligned} |P_E\rangle &= a \cdot |z1\rangle + b \cdot |z2\rangle \equiv \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \\ |P_A\rangle &= c \cdot |z1\rangle + d \cdot |z2\rangle \equiv \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} \end{aligned}$$

verwenden, wobei man aber die Matrixelemente von A in diesem Fall durch

$$\vec{A} = \begin{pmatrix} \langle z1|A|z1\rangle & \langle z1|A|z2\rangle \\ \langle z2|A|z1\rangle & \langle z2|A|z2\rangle \end{pmatrix}$$

bilden muss. D.h. die Matrixelemente in der z-Darstellung würden sich natürlich von denen der l-Darstellung unterscheiden, genauso wie die a,b bzw. c,d - Werte für die Darstellung der Ausgangs- und Eingangszustände. Dennoch müssen beide Darstellungen letztlich das gleiche Ergebnis liefern. Bei der Beschreibung der Wirkung von Apparaten kann man daher die Wahlmöglichkeit von verschiedenen Basiszuständen für die Darstellung als Analogie zur prinzipiellen Wahlmöglichkeit des Koordinatensystems bei „normalen“ Vektoren auffassen. Es sein aber an dieser Stelle bereits darauf hingewiesen, dass dieses Konzept im Gegensatz zu klassischen Vektoren in ihrer Dimension prinzipiell nicht eingeschränkt ist. In unserem Fall der Polarisation des Lichtes ist die Dimension 2, d.h. wir kommen mit zwei Basiszuständen aus, um daraus alle möglichen anderen Polarisationszustände durch Linearkombination (Überlagerung) aufbauen zu können. Wenn zwar es also prinzipiell egal ist, welche Basiszustände man zur Beschreibung seines Problems verwendet, so kann sich der tatsächliche Aufwand bei der Berechnung doch erheblich durch eine geschickte Wahl der Basiszustände verringern lassen.

Am besten lässt sich das soeben erklärte Konzept anhand von einigen Beispielen verstehen. Diese Beispiele sollen aber auch gleichzeitig dazu dienen, den Umgang mit der an sich doch sehr bequemen und übersichtlichen Klammerschreibweise etwas zu üben. Daher ist es dringend empfohlen, diese Beispiele auch als selbständige Übung nachzuempfinden.

Beispiel: Wirkung eines I1' Polarisators mit um 45° gekippter Polarisationssebene, darzustellen durch Superposition aus I1 und I2 Polarisationszuständen:

Um das soeben vorgestellte Konzept mit Polarisationszuständen noch etwas zu üben, stellen wir uns folgende Aufgabe: Wir sollen einen $I1'$ Polarisator für $\alpha=45^\circ$ aufbauen und dafür die $I1$ - $I2$ -Darstellung verwenden. Mit anderen Worten ausgedrückt heißt das, dass der Ausgangszustand durch Superposition von $I1$ -und $I2$ Zuständen vorliegt, darauf die entsprechende Matrixoperation angewandt wird und damit der Endzustand automatisch wieder als Superposition aus $I1$ -und $I2$ Zuständen ausgegeben wird. Nach Eqn. 2-17 haben wir folgende Matrix zu bilden:

$$|I1'\rangle\langle I1'| = \begin{pmatrix} \langle I1||I1'\rangle\langle I1'||I1\rangle & \langle I1||I1'\rangle\langle I1'||I2\rangle \\ \langle I2||I1'\rangle\langle I1'||I1\rangle & \langle I2||I1'\rangle\langle I1'||I2\rangle \end{pmatrix}$$

Zum Aufsuchen der Matrixelemente verwenden wir am besten entsprechende Polarisatoranordnungen, die wir dann auf herkömmliche Art und Weise analysieren können. Sehen wir uns als erstes das A_{11} -Element an: Wir können es erzeugen, indem wir die Kombination $|I1\rangle\langle I1||I1'\rangle\langle I1'||I1\rangle$ betrachten, welche auch in **Abbildung 2.1-9** dargestellt ist. In diesem Fall ist leicht feststellbar dass $\langle I1||I1'\rangle\langle I1'||I1\rangle = \cos^2(45) = 1/2$. Das A_{12} -Element kann mit der Kombination $|I1\rangle\langle I1||I1'\rangle\langle I1'||I2\rangle$ ermittelt werden. Hier stellt $\langle I1||I1'\rangle$ die bereits bekannte Übergangsamplitude $\cos(\alpha)$ dar, während $\langle I1'||I2\rangle$ die Übergangsamplitude von horizontaler Polarisation auf die um α verdrehte vertikale Polarisation darstellt. Wir können aber aus $I1$ ein $I2$ machen, indem man die $I1$ Achse um z.B. -90° kippt. Daher können wir für $\langle I1'||I2\rangle = \cos(\alpha-90^\circ)$ schreiben, womit sich für $\langle I1||I1'\rangle\langle I1'||I2\rangle = \cos(45^\circ) \cdot \cos(45^\circ-90^\circ) = 1/2$ ergibt. Wir betrachten nun gleich das Matrixelement A_{21} , welches ausgeschrieben $\langle I2||I1'\rangle\langle I1'||I1\rangle$ lautet. Bauen wir uns die zugehörige Polarisatoranordnung auf, so lautet diese $|I2\rangle\langle I2||I1'\rangle\langle I1'||I1\rangle$. Dies bedeutet die gleiche Anordnung wie für das Element A_{12} , nur mit umgekehrter Reihenfolge. Da daher alle Ausdrücke in den Klammern lediglich in umgekehrter Reihenfolge auftreten, kann der Zahlenwert von A_{21} höchstens das komplex konjugierte von A_{12} sein. Da wir aber für A_{12} eine rein reelle Zahl mit $A_{12}=1/2$ gefunden haben, muss auch $A_{21}=1/2$ sein. Bleibt nun nur noch das A_{22} -Element, welches durch die Anordnung $|I2\rangle\langle I2||I1'\rangle\langle I1'||I2\rangle$ zum Tragen kommt. Wir machen aus $I2$ wieder $I1$, indem wir dann statt für α den Winkel $\alpha-90^\circ$ einsetzen. Demzufolge erhalten wir für $\langle I2||I1'\rangle\langle I1'||I2\rangle = \cos^2(45^\circ-90^\circ) = 1/2$. Die vollständige Matrix für $A = |I1'\rangle\langle I1'|$ in der $I1$ - $I2$ -Darstellung lautet somit:

$$\vec{A} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

Wir können nun die Richtigkeit von \vec{A} durch einige Spezialfälle testen:

- a) Wir nehmen den Zustand $|I'\rangle$ und lassen darauf unseren Polarisator $|I'\rangle\langle I'|$ wirken. Es ist trivial, dass $|I'\rangle\langle I' || I'\rangle = 1 \cdot |I'\rangle$ sein muss, weil wir ja genau jenen Polarisationszustand anbieten, auf den der Polarisator eingestellt ist. Wir wollen diesen klaren Sachverhalt aber absichtlich etwas umständlicher analysieren, indem wir vorerst unseren $|I'\rangle$ - Zustand durch eine Überlagerung (Linearkombination) von $|I1\rangle$ und $|I2\rangle$ darstellen. Dazu kann man schreiben:

$$|I'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|I1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|I2\rangle$$

Wir können die Richtigkeit unserer Darstellung von $|I'\rangle$ überprüfen, indem wir testen ob $\langle I' || I'\rangle = 1$ gilt:

$$\begin{aligned} \langle I' || I'\rangle &= \left[\langle I1 | \frac{1}{\sqrt{2}} + \langle I2 | \frac{1}{\sqrt{2}} \right] \left[\frac{1}{\sqrt{2}} |I1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |I2\rangle \right] = \\ &= \frac{1}{2} \langle I1 || I1\rangle + \frac{1}{2} \langle I1 || I2\rangle + \frac{1}{2} \langle I2 || I1\rangle + \frac{1}{2} \langle I2 || I2\rangle = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1 \end{aligned}$$

Wichtig ist dabei, dass die gemischten Terme wegen der Orthogonalität der beiden Basiszustände $\langle I1 || I2\rangle = \langle I2 || I1\rangle = 0$ werden und wegfallen.

Alternative Rechnung: Wem die obige Rechnung etwas zu schnell war, kann sich auch des „Dazwischenschiebens“ eines I -Analytorkreises bedienen:

$$\langle I' || I'\rangle = \langle I' | [|I1\rangle\langle I1| + |I2\rangle\langle I2|] |I'\rangle = \langle I' || I1\rangle\langle I1 || I'\rangle + \langle I' || I2\rangle\langle I2 || I'\rangle$$

Die Teilausdrücke dabei lauten:

$$\begin{aligned} \langle I1 || I'\rangle &= \langle I1 | \left[\frac{1}{\sqrt{2}} |I1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |I2\rangle \right] = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle I1 || I1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \langle I1 || I2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \langle I' || I1\rangle &= \langle I1 || I'\rangle^* = \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \Rightarrow \langle I' || I1\rangle\langle I1 || I'\rangle &= \frac{1}{2} \end{aligned}$$

$$\langle I2 \| I1' \rangle = \langle I2 \| \left[\frac{1}{\sqrt{2}} |I1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |I2\rangle \right] \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle I2 \| I1 \rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \langle I2 \| I2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\langle I1' \| I2 \rangle = \langle I2 \| I1' \rangle^* = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\Rightarrow \langle I1' \| I2 \rangle \langle I2 \| I1' \rangle = \frac{1}{2}$$

$$\Rightarrow \langle I1' \| I1' \rangle = \langle I1' \| I1 \rangle \langle I1 \| I1' \rangle + \langle I1' \| I2 \rangle \langle I2 \| I1' \rangle = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1 \quad \text{was zu beweisen war.}$$

Man kann die Darstellung von $|I1'\rangle$ nun auch als Spaltenvektor schreiben:

$$|I1'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |I1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |I2\rangle \equiv \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

Auf diese Weise kann die Anwendung von $|I1'\rangle\langle I1'|$ auf $|I1'\rangle$ formal als Matrixmultiplikation geschrieben werden:

$$|I1'\rangle\langle I1'| |I1'\rangle = \vec{A} \cdot \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

D.h. $\vec{A} \cdot |I1'\rangle = |I1'\rangle$, was zu zeigen war. Somit ist Fall a) verifiziert.

b) Wir nehmen nun einen $|I2'\rangle$ Zustand und lassen darauf unser $|I1'\rangle\langle I1'|$ wirken. Wir wissen natürlich, dass $|I1'\rangle\langle I1'| |I2'\rangle = 0$ gelten muss und wollen das in der Folge in unserer absichtlich etwas umständlicheren Darstellung überprüfen. Dazu repräsentieren wir wieder $|I2'\rangle$ mit Überlagerung von $|I1\rangle$ und $|I2\rangle$:

$$|I2'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |I1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |I2\rangle$$

Wir können die Richtigkeit unserer Darstellung für $|I2'\rangle$ wieder testen, indem wir $\langle I2' \| I2' \rangle = 1$ überprüfen, was ich Ihrem Geschick überlassen möchte. Weiters muss überprüft werden, ob $\langle I1' \| I2' \rangle = 0$ gilt: Wir nehmen daher die Darstellung für $|I1'\rangle$ von vorhin und bilden:

$$\begin{aligned}\langle I1' | I2' \rangle &= \left[\langle I1 | \frac{1}{\sqrt{2}} + \langle I2 | \frac{1}{\sqrt{2}} \right] \left[\frac{1}{\sqrt{2}} | I1 \rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} | I2 \rangle \right] = \\ &= \frac{1}{2} \langle I1 | I1 \rangle - \frac{1}{2} \langle I1 | I2 \rangle + \frac{1}{2} \langle I2 | I1 \rangle - \frac{1}{2} \langle I2 | I2 \rangle = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0\end{aligned}$$

Somit ist die Orthogonalität in unserer Darstellung überprüft. Hinweis: Machen Sie als Übung die Rechnung für $\langle I1' | I2' \rangle = 0$ alternativ auch mit dem „Dazwischenschieben“ des I-Analysatorkreises $[|I1\rangle\langle I1| + |I2\rangle\langle I2|]$.

Zur Kontrolle von $|I1'\rangle\langle I1'| |I2'\rangle = 0$ bilden nun wieder:

$$|I1'\rangle\langle I1'| |I2'\rangle = \vec{A} \cdot \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

D.h. $\vec{A} \cdot |I2'\rangle = 0$, was zu zeigen war. Somit ist auch Fall b) verifiziert.

Beispiel: Stellen Sie die z1- und z2- Polarisatoren aus I1- und I2 - Polarisationszuständen dar.

In diesem Beispiel soll das verallgemeinerte, über reine Vektorrechnung hinausgehende, Superpositionsprinzip zur Darstellung von Zuständen geübt werden. Die Frage nach der Herstellung von z1-polarisiertem Licht (nach unserer eingangs getroffenen Vereinbarung vertikal polarisiert) durch Überlagerung von zwei senkrecht zueinander linear polarisierten Lichtwellen kann mit Hilfe unseres Grundlagenwissens beantwortet werden. Wir erinnern uns, dass zwei zueinander senkrechte Schwingungen bei einer Phasenverschiebung von $\varphi=90^\circ$ eine Kreisbewegung ergeben. Die Frage ist jetzt nur, wie drücken wir diese Phasenverschiebung in den Koeffizienten für $|I1\rangle$ und $|I2\rangle$ aus. Wir sollen ja die Darstellung durch geeignete Koeffizienten a und b für $|z1\rangle = a \cdot |I1\rangle + b \cdot |I2\rangle$ realisieren. Wären a und b normale reelle Zahlen, so hätten wir nur insgesamt schräg linear polarisiertes Licht. Wir müssen also auch die Phasenverschiebung von 90° in die Koeffizienten mit hineinpacken. Wir müssen uns also zunächst noch nach einer solchen Möglichkeit Ausschau halten. Dazu erinnern wir uns, dass eine Schwingung im allgemeinen in komplexer Schreibweise darstellbar ist:

$$\xi(t) = \xi_0 \cdot \exp(i \cdot \omega \cdot t) = \xi_0 [\cos(\omega \cdot t) + i \cdot \sin(\omega \cdot t)]$$

dies entspricht einem links herum (gegen den Uhrzeiger) umlaufenden Zeiger der Länge ξ_0 auf der komplexen Ebene (erinnern Sie sich an das Zeigerdiagramm in der Wechselstromtechnik). Betrachten man nur den Realteil oder nur den Imaginärteil, so erhält man eine Schwingung. Möchten wir eine Schwingung der Amplitude ξ_0 beispielsweise durch den Realteil ausdrücken, so müssen wir schreiben:

$$\xi_0 \cdot \cos(\omega \cdot t) = \xi_0 \cdot \frac{1}{2} [\exp(i \cdot \omega \cdot t) + \exp(-i \cdot \omega \cdot t)]$$

Möchten wir statt $\cos(\omega \cdot t)$ lieber $\sin(\omega \cdot t)$ haben, so müssen wir im Argument eine Phasenverschiebung von $\varphi = \pi / 2 = 90^\circ$ abziehen. D.h wir müssen unsere Ausgangsgleichung wie folgt umschreiben:

$$\xi(t) = \xi_0 \cdot \exp(i \cdot (\omega \cdot t - \pi / 2)) = \xi_0 [\cos(\omega \cdot t - \pi / 2) + i \cdot \sin(\omega \cdot t - \pi / 2)]$$

was aber offensichtlich auch durch folgendes erreicht werden kann:

$$\begin{aligned} \xi(t) &= \xi_0 \cdot \exp(-i \cdot \pi / 2) \cdot \exp(i \cdot \omega \cdot t) = \xi_0 \cdot \exp(-i \cdot \pi / 2) \cdot [\cos(\omega \cdot t) + i \cdot \sin(\omega \cdot t)] = \\ &= -i \cdot \xi_0 \cdot [\cos(\omega \cdot t) + i \cdot \sin(\omega \cdot t)] \end{aligned} \quad \text{Erinne}$$

re: $\exp(-i \cdot \pi / 2) = -i$

Daraus folgt, dass die Phasenverschiebung, die aus einem Cosinus einen Sinus macht, formal auch durch einen Cosinus mit imaginärer Amplitude ausgedrückt werden kann.

Stellen wir eine rechts herum laufende Kreisbewegung als Überlagerung unserer beiden Schwingungen in den beiden senkrecht stehenden Polarisationsrichtungen dar, so bekommen wir:

$$\begin{aligned} |z1\rangle &= \xi_0 \cdot [\cos(\omega \cdot t)|1\rangle + \sin(\omega \cdot t)|2\rangle] = \xi_0 \cdot [\cos(\omega \cdot t)|1\rangle - i \cdot \cos(\omega \cdot t)|2\rangle] = \\ &= \xi_0 \cdot [|1\rangle - i|2\rangle] \cdot \cos(\omega \cdot t) \end{aligned}$$

Da wir uns nur für die Amplituden interessieren, lassen wir den gemeinsamen oszillierenden cos-Faktor weg und erhalten:

$$|z1\rangle = \xi_0[|I1\rangle - i|I2\rangle] = \xi_0 \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$$

weitere fordern wir für unsere Darstellung:

$$\langle z1||z1\rangle = 1$$

Daraus muss sich dann ξ_0 bestimmen lassen. Um dies zu erreichen, können wir folgende Identität ausnützen:

$$\langle z1||z1\rangle = \langle z1|[|I1\rangle\langle I1| + |I2\rangle\langle I2|]|z1\rangle = 1$$

D.h., wir schieben wieder, bildlich gesehen, einen Analysator aus $I1$ und $I2$ - Zuständen ein. Lösen wir die Klammer zunächst nur nach rechts auf, bekommen wir:

$$\langle z1[|I1\rangle\langle I1||z1\rangle + |I2\rangle\langle I2||z1\rangle] = 1$$

Daraus können wir schließen, dass $|I1\rangle\langle I1||z1\rangle + |I2\rangle\langle I2||z1\rangle = |z1\rangle$ gilt. Daher sind die Faktoren $\langle I1||z1\rangle$ und $\langle I2||z1\rangle$ die Koeffizienten a und b für die Überlagerung von $|I1\rangle$ und $|I2\rangle$ zu $|z1\rangle$:

$$\text{Eqn. 2-18: } |z1\rangle = |I1\rangle\langle I1||z1\rangle + |I2\rangle\langle I2||z1\rangle = \begin{pmatrix} \langle I1||z1\rangle \\ \langle I2||z1\rangle \end{pmatrix}$$

Wir können also die Faktoren von vorn nehmen und schreiben:

$$\begin{aligned} \langle I1||z1\rangle &= 1 \cdot \xi_0 \\ \langle I2||z1\rangle &= -i \cdot \xi_0 \end{aligned}$$

Lösen wir obige Klammer [...] nun komplett auf, so bekommen wir die Bedingung:

$$\langle z1||I1\rangle\langle I1||z1\rangle + \langle z1||I2\rangle\langle I2||z1\rangle = 1$$

Da wir aber wissen dass $\langle I1||z1\rangle = \langle z1||I1\rangle^*$ gilt, erhalten wir letztlich:

$$(\xi_0) \cdot (\xi_0) + (-i \cdot \xi_0) \cdot (i \cdot \xi_0) = \xi_0^2 + \xi_0^2 = 1$$

D.h. wir erhalten: $\xi_0^2 = \frac{1}{2} \Rightarrow \xi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}$

Somit ist unsere $I1$ - $I2$ Darstellung komplett und lautet: $|z1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$

Für die $I1$ - $I2$ Darstellung des $z2$ -Polarisators brauchen wir nur die Phasenverschiebung des $I2$ -Polarisators in die entgegengesetzte Richtung verschieben, um eine im Vergleich zu $|z1\rangle$ entgegengesetzt herumlaufende zirkulare Polarisation zu erhalten. Dafür brauchen wir nur das Vorzeichen des Imaginärteils umkehren und können somit direkt schreiben:

$$|z2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$$

Wir wollen nun die Orthogonalität von $|z1\rangle$ und $|z2\rangle$ testen und überprüfen, ob tatsächlich $\langle z2 || z1 \rangle = 0$ herauskommt. Dazu schieben wir wieder einen Analysatorkreis ein:

$$\begin{aligned} \langle z2 || z1 \rangle &= \langle z2 || [I1 \langle I1 | + I2 \langle I2 |] z1 \rangle = \langle z2 || I1 \langle I1 | z1 \rangle + \langle z2 || I2 \langle I2 | z1 \rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (1) \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} (1) + \frac{1}{\sqrt{2}} (-i) \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} (-i) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0 \end{aligned}$$

Somit ist die Orthogonalität von $|z1\rangle$ und $|z2\rangle$ in der $I1$ - $I2$ -Darstellung überprüft. Es sei hier noch einmal darauf hingewiesen, dass speziell der Faktor $\langle z2 || I2 \rangle$ durch $\langle I2 || z2 \rangle^* = (i / \sqrt{2})^* = (-i / \sqrt{2})$ einzusetzen ist. Bei rein reellen Faktoren, wie z.B. $\langle z2 || I1 \rangle$ kommt durch das „komplex Konjugieren“ kein Unterschied zustande.

Beispiel: Stellen Sie einen $z1$ -Polarisator ($\equiv |z1\rangle\langle z1|$) als Matrix in der I -Darstellung dar. Weiters lassen Sie dann in der I -Darstellung $\equiv |z1\rangle\langle z1|$ einmal auf $|z1\rangle$ und einmal auf $|z2\rangle$ wirken und überprüfen Sie durch Matrixmultiplikation, ob auch tatsächlich $|z1\rangle\langle z1| |z1\rangle = |z1\rangle$ und $|z1\rangle\langle z1| |z2\rangle = 0$ herauskommt.

Anleitung: Verwenden Sie für die I -Darstellung von $|z1\rangle$ und $|z2\rangle$ die im vorigen Beispiel gefundenen Darstellungen. Bedenken Sie, dass ganz allgemein folgendes gilt:

$$|z1\rangle = \begin{pmatrix} \langle I1 || z1 \rangle \\ \langle I2 || z1 \rangle \end{pmatrix}, |z2\rangle = \begin{pmatrix} \langle I1 || z2 \rangle \\ \langle I2 || z2 \rangle \end{pmatrix} \quad (\dots I - \text{Darstellung})$$

$$|z1\rangle\langle z1| = \begin{pmatrix} \langle I1||z1\rangle\langle z1||I1\rangle & \langle I1||z1\rangle\langle z1||I2\rangle \\ \langle I2||z1\rangle\langle z1||I1\rangle & \langle I2||z1\rangle\langle z1||I2\rangle \end{pmatrix} \quad (\dots 1 - \text{Darstellung})$$

D.h., Sie können aus den gefundenen Darstellungen (siehe oben vorgeführte Beispiele) die Zahlenwerte, die für $\langle I1||z1\rangle$ $\langle z1||I1\rangle$ u.s.w. gebraucht werden, direkt ablesen. Vergessen Sie aber nicht, dass $\langle I1||z1\rangle = \langle z1||I1\rangle^*$!

2.2 Verallgemeinerung auf beliebige Quantenzustände:

Wir haben uns bisher auf die Betrachtung von Polarisationszuständen beschränkt und einen zur Beschreibung dieser Zustände (samt der Wirkung von Polarisationsfilteranordnungen) geeigneten algebraischen Formalismus entwickelt. Nun geht es in der Folge darum, die mit diesem Formalismus gefundenen Zusammenhänge auch auf andere, zunächst nicht näher spezifizierte Quantenzustände zu verallgemeinern. Was in den folgenden Abschnitten beispielhaft für Systeme mit 2 Basiszuständen ausgeschrieben ist, muss man sich letztlich auf Systeme mit beliebig vielen Basiszuständen verallgemeinert denken. Wohl aber werden auch echte sog. Zwei-Zustandssysteme bei der Behandlung praktischer Fälle (z.B. chem. Bindung) eine wichtige Rolle spielen. Vorher sollen aber die wichtigsten Zusammenhänge noch einmal zusammengefasst werden.

2.2.1 Was wir bisher von den „Polarisationsexperimenten“ mit Photonen und deren Beschreibung gelernt haben:

- 1) **Polarisationszustand:** Einen von einem System (z.B. Lampe + Polarisationsfilter) oder einer Filterkombination ausgegebenen Polarisationszustand P haben wir mit einer nach links offen spitzen Klammer gekennzeichnet:

$$|P\rangle \quad \text{beliebiger Polarisationszustand} \quad (\text{z.B. } |I1\rangle, |z1\rangle, |I1'\rangle, |z2\rangle, \text{ usw.})$$

Einen von einer Filteranordnung (Apparat) akzeptierten Polarisationszustand P haben wir mit einer nach rechts offen spitzten Klammer gekennzeichnet:

$$\langle P | \quad \text{beliebiger Polarisationszustand} \quad (\text{z.B. } \langle l1 |, \langle z1 |, \langle l1' |, \langle z2 |, \text{ usw.})$$

Physikalisch betrachtet bezeichnen beide Arten von Klammern exakt den gleichen Zustand

- 2) **Apparat und Übergangsamplitude:** Eine Filteranordnung oder ganz allgemein ein Apparat ist gekennzeichnet durch einen Eingangszustand und einen Ausgangszustand und einer Zahl a_{12} , welche im allgemeinen auch komplex sein kann und die Amplitudenänderung beim Übergang vom Eingang (P_1) zum Ausgang (P_2) beschreibt:

$$a_{12} \cdot |P_2\rangle \langle P_1| \quad \text{beliebiger Apparat, der auf Polarisationszustände wirkt}$$

Für den Fall, dass die Übergangsamplitude a_{12} eine komplexe Zahl ist, ist mit der Amplitudenänderung auch eine Phasenänderung der dahinter steckenden Schwingung verbunden.

- 3) **Übergangswahrscheinlichkeit:** Das Quadrat des Betrages von a_{12} gibt das Intensitätsverhältnis I_{12} beim Übergang von P_1 polarisiertem Licht am Eingang zu P_2 polarisiertem Licht am Ausgang an.

$$\text{Eqn. 2-19} \quad I_{12} = a_{12} \cdot a_{12}^*$$

Für den Fall, dass man einzelne Photonen betrachtet, die man nacheinander „auf die Reise schickt“, gibt I_{12} gleichzeitig die Wahrscheinlichkeit w_{12} dafür an, dass ein einzelnes Photon, welches im (Anfangs-) Zustand P_1 in den Apparat eintritt, den Apparat im (End-) Zustand P_2 wieder verlässt. Dementsprechend kann man auch schreiben:

$$\text{Eqn. 2-20} \quad w_{12} = I_{12} = a_{12} \cdot a_{12}^*$$

w_{12} bezeichnet man somit auch als Übergangswahrscheinlichkeit vom Zustand P_1 auf P_2 , die durch die Einwirkung des betreffenden Apparates zustande kommt.

Es versteht sich von selbst, dass physikalisch sinnvolle Apparate nur solche sein können, für die gilt:

$$\text{Eqn. 2-21} \quad 0 \leq a_{12} \cdot a_{12}^* \leq 1$$

- 4) **Projektor:** Die einfachst mögliche Form eines Apparates im Sinne von Pkt.2 ist ein Projektor. Im konkreten Fall der Polarisation ist ein Projektor ein Polarisationsfilter:

$$|P\rangle\langle P|$$

Wenn dem Projektor der ihm entsprechende Zustand (hier $|P\rangle$) am Eingang zugeführt wird, gibt er ihn unverändert an den Ausgang weiter. D.h. es gilt grundsätzlich:

$$\text{Eqn. 2-22} \quad |P\rangle\langle P||P\rangle = |P\rangle \Rightarrow \langle P|P\rangle = 1$$

Somit ist die Projektionsamplitude auf den „eigenen“ Zustand des Projektors immer 1.

- 5) **Basiszustände und Orthogonalität:** Als eine Basis bezeichnet man Polarisationszustände ($|P_I\rangle, |P_{II}\rangle$), aus denen durch Überlagerung (Superposition, Linearkombination) alle möglichen anderen Polarisationszustände hergestellt werden können:

$$|P\rangle = a_I \cdot |P_I\rangle + a_{II} \cdot |P_{II}\rangle$$

Im Falle der Photonpolarisation gibt es zwei Basiszustände, aus denen alle anderen aufgebaut werden können (z.B. ist $|I1\rangle$ und $|I2\rangle$ eine Basis sowie auch $|z1\rangle$ und $|z2\rangle$). In der Praxis beschränkt man sich auf sog. orthogonale Basiszustände, d.h. dass folgendes gilt:

$$\begin{aligned} |P_I\rangle\langle P_I||P_I\rangle &= 1 \cdot |P_I\rangle \\ |P_I\rangle\langle P_I||P_{II}\rangle &= 0 \cdot |P_I\rangle = 0 \\ |P_{II}\rangle\langle P_{II}||P_I\rangle &= 0 \cdot |P_{II}\rangle = 0 \\ |P_{II}\rangle\langle P_{II}||P_{II}\rangle &= 1 \cdot |P_{II}\rangle \end{aligned}$$

Man kann zu jedem Basiszustand sich einen Projektor auf diesen Basiszustand vorstellen. Wendet man nun einen solchen Projektor auf den eigenen Basiszustand an, so kommt dieser Basiszustand mit der Projektionsamplitude 1 heraus. Wendet man einen solchen Projektor auf einen anderen Basiszustand an, so kommt immer Null heraus. Mathematisch schreibt sich das wie folgt:

$$\text{Eqn. 2-23} \quad |P_k\rangle\langle P_k|P_n\rangle = \delta_{kn} \cdot |P_k\rangle \quad \text{mit} \quad \delta_{kn} = \begin{cases} = 1 & \text{für } k = n \\ = 0 & \text{für } k \neq n \end{cases} \quad (\text{„Delta-Funktion“})$$

6) **Einheitsoperator:** Ein Analysatorkreis besteht aus einer „Parallelschaltung“ von allen Projektoren, die zu den verschiedenen Basiszuständen gehören. Für unser Polarisationsproblem sind dies zwei, wie z.B:

$$|I1\rangle\langle I1| + |I2\rangle\langle I2| \quad \text{Analysatorkreis als Summe von den } I1 \text{ - und } I2 \text{ - Projektoren.}$$

Auch $|z1\rangle\langle z1| + |z2\rangle\langle z2|$ ist ein möglicher Analysatorkreis für Polarisationszustände.

Ein Analysatorkreis verändert den Zustand nicht!

Dementsprechend gilt unabhängig vom „analysierten“ Polarisationszustand beispielsweise:

$$\text{Eqn. 2-24} \quad [|I1\rangle\langle I1| + |I2\rangle\langle I2|] |P\rangle = \mathbf{1} \cdot |P\rangle$$

Man kann einen Analysatorkreis deshalb als „Einheitsoperator“ bezeichnen, der in Analogie zur Arithmetik mit echten Zahlen die „1“ darstellt.

7) **Darstellung von Zuständen:** Man erhält die Darstellung eines Zustandes in einer bestimmten Basis durch die Anwendung des entsprechenden Analysatorkreises (Summe aller zu dieser Basis gehörigen Projektoren) auf den betreffenden Zustand. Die I -Darstellung von einem allgemeinen Polarisationszustand $|P\rangle$ lautet somit wie folgt:

$$\begin{aligned} \text{Eqn. 2-25} \quad |P\rangle &= \mathbf{1} |P\rangle = [|I1\rangle\langle I1| + |I2\rangle\langle I2|] |P\rangle = |I1\rangle\langle I1| |P\rangle + |I2\rangle\langle I2| |P\rangle = \\ &= \langle I1|P\rangle |I1\rangle + \langle I2|P\rangle |I2\rangle \end{aligned}$$

Dementsprechend repräsentieren die geschlossenen Klammerausdrücke (= Projektions-Amplituden) die Darstellungskoeffizienten (a_I und a_{II}) für die Überlagerung der Basiszustände $|I\rangle$ und $|II\rangle$ zum betreffenden Zustand $|P\rangle$.

$$\text{Eqn. 2-26} \quad \begin{aligned} \langle I|P\rangle &= a_I \\ \langle II|P\rangle &= a_{II} \end{aligned}$$

In Anlehnung an die klassische Vektorschreibweise kann man die Koeffizienten auch als Spaltenvektor schreiben

$$\text{Eqn. 2-27} \quad |P\rangle = |I\rangle\langle I|P\rangle + |II\rangle\langle II|P\rangle \equiv \begin{pmatrix} \langle I|P\rangle \\ \langle II|P\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_I \\ a_{II} \end{pmatrix}$$

die Position innerhalb der Spalte markiert dabei zu welchem Basiszustand die entsprechende Zahl (=Darstellungskoeffizient) gehört.

8) **Vollständigkeit der Basis:** Neben der Orthogonalität, welche schon unter Pkt. 5 angesprochen wurde, gibt es ein weiteres Kriterium, welchem die Basiszustände gehorchen müssen, nämlich der sog. Vollständigkeit. Machen wir vorerst folgende Rechnung, wobei $|P_I\rangle$ und $|P_{II}\rangle$ ganz allgemein die Basiszustände sein sollen und a_I und a_{II} sind die zugehörigen Darstellungskoeffizienten:

$$\begin{aligned} \langle P|P\rangle &= \langle P| \left[|P_I\rangle\langle P_I| + |P_{II}\rangle\langle P_{II}| \right] |P\rangle = 1 \\ \Rightarrow \quad \langle P|P_I\rangle\langle P_I|P\rangle + \langle P|P_{II}\rangle\langle P_{II}|P\rangle &= 1 \\ \Rightarrow \quad a_I^* a_I + a_{II}^* a_{II} &= |a_I|^2 + |a_{II}|^2 = 1 \end{aligned}$$

Da wir zwischen $\langle P|P\rangle$ nur den Einheitsoperator (Analysatorkreis) einschieben, muss der ganze Ausdruck „1“ bleiben, was dazu führt, dass die Summe aller Betragsquadrate aller Darstellungskoeffizienten eines Zustandes in einer beliebigen Basis „1“ sein muss. Mathematisch etwas allgemeiner ausgedrückt heißt das:

$$\text{Eqn. 2-28} \quad \sum_k a_k^* a_k = 1$$

k erstreckt sich über alle Basiszustände, a_k ist der zum Basiszustand $|P_k\rangle$ gehörige Darstellungskoeffizient (= Projektionsamplitude) des darzustellenden (beliebigen) Zustandes $|P\rangle$.

9) **Darstellung von Apparaten (Operatoren):** Ein Apparat, der auf einen gegebenen Zustand wirkt und ihn in einen anderen überführt (siehe Pkt. 2) wird mathematisch auch als Operator bezeichnet. Wird nun ein beliebiger Eingangszustand $|P_E\rangle$ für diesen Apparat entsprechend einer Wahl von Basiszuständen (z.B.: $|P_I\rangle$ und $|P_{II}\rangle$) als Spaltenvektor dargestellt, so soll auch der durch die Wirkung des Apparates erzeugte Ausgangszustand $|P_A\rangle$ ebenfalls wieder durch dieselben Basiszustände als Spaltenvektor dargestellt werden. Aus dieser Anforderung ergibt sich, dass die Apparate durch Matrizen dargestellt werden müssen.

$$\text{Eqn. 2-29} \quad |P_A\rangle = \vec{A} \cdot |P_E\rangle \quad \text{wobei}$$

$$|P_A\rangle = \begin{pmatrix} b_I \\ b_{II} \end{pmatrix}; \quad |P_E\rangle = \begin{pmatrix} a_I \\ a_{II} \end{pmatrix}; \quad \vec{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}$$

Die Matrixelemente werden nach folgendem Schema gebildet (siehe Kapitel 2.1.3):

$$\text{Eqn. 2-30} \quad A_{jk} = \langle P_j | A | P_k \rangle$$

D.h., man lässt den Apparat (Operator) auf den mit k markierten Basiszustand wirken, und wendet auf den daraus resultierenden Zustand den Projektor auf den durch j gekennzeichneten Zustand an - das betreffende Matrixelement ist dann die entsprechende Projektionsamplitude. Die Kunst in der Praxis ist es, die Matrixelemente von \vec{A} zu finden. Hat man sie einmal für irgend ein Set von Basiszuständen (= Darstellung) gefunden, so kann man sie grundsätzlich auch in alle alternativen Darstellungen mit anderen Sets von Basiszuständen umrechnen (transformieren). Dies ist vergleichbar mit einem Wechsel des Koordinatensystems in der klassischen Vektorrechnung. Man kann durch eine geschickte Wahl der Basiszustände (Darstellung) sich bei der eigentlichen Rechnung eine Menge an Arbeit ersparen. Nicht selten ist es überhaupt so, dass allein schon durch den Basiswechsel das Problem bereits gelöst wird (für alle, die schon einmal davon gehört haben, passt dazu das Stichwort „Diagonalisierung“) - dazu später mehr.

2.2.2 Allgemeine Zustände und Operatoren:

Nach unserer bisher entwickelten algebraischen Schreibweise haben wir folgendes Schema:

a) Geschlossenen Klammern $\langle \mid \rangle$, nach dem Englischen „bracket“, stellen eine (komplexe) Zahl dar.

b) Halb offene Klammern wie $\langle \psi \mid$ (auch abstrakt „bra-Vektor“ genannt - 1. Teil des Wortes „bracket“) oder $\mid \psi \rangle$ (auch abstrakt „ket-Vektor“ genannt - letzter Teil des Wortes „bracket“) stellen abstrakte Zustände dar. Beide Varianten beschreiben exakt denselben Zustand. Sie erinnern sich: Als ausgegebener Zustand wird er als ket-Vektor (nach links offen) geschrieben. Als ein von einem Apparat akzeptierter Zustand wird er als bra-Vektor geschrieben (nach rechts offen).

Wir wissen dass

$$\langle \psi \mid \psi \rangle = 1 \quad \text{gilt, sodass nach „Einschieben“ des } I\text{-Operators (Analysatorkreis)}$$

folgendes gelten muss:

$$\langle \psi \mid [\mid a_I \rangle \langle a_I \mid + \mid a_{II} \rangle \langle a_{II} \mid] \mid \psi \rangle$$

(teilweises) Auflösen dieser Klammer ergibt:

$$\begin{aligned} \langle \psi \mid [\mid a_I \rangle \langle a_I \mid \psi \rangle + \mid a_{II} \rangle \langle a_{II} \mid \psi \rangle] &= [\langle \psi \mid a_I \rangle \langle a_I \mid + \langle \psi \mid a_{II} \rangle \langle a_{II} \mid] \mid \psi \rangle = \\ &= \langle \psi \mid a_I \rangle \langle a_I \mid \psi \rangle + \langle \psi \mid a_{II} \rangle \langle a_{II} \mid \psi \rangle = 1 \end{aligned}$$

Da wir wissen dass $\langle \psi \mid a_I \rangle^* = \langle a_I \mid \psi \rangle$ gilt, muss konsequenterweise auch folgendes gelten:

$$\{ \langle \psi \mid a_I \rangle \langle a_I \mid \psi \rangle \}^* = \mid a_I \rangle \langle a_I \mid \psi \rangle \quad \text{was letztlich ganz allgemein heißt dass}$$

$$\text{Eqn. 2-31} \quad \{ \langle \cdot \mid \cdot \rangle \}^* \equiv \langle \cdot \mid \cdot \rangle^*$$

Man nennt den bra-Vektor $\langle \mid$ den zum ket-Vektor $\mid \rangle$ „dualen Zustand“. Wie gesagt, beschreiben beide den identischen Zustand. Man braucht die zwei Varianten nur, um damit einen „mathematisch geschlossenen“ Formalismus aufbauen zu können. Wichtig ist, dass etwaige davor stehende Zahlen q bei der Umschreibung zum „dualen Zustand“ komplex konjugiert werden müssen ($q \rightarrow q^*$).

Verwendet man eine bestimmte Darstellung mit Basiszuständen, so wird ein ket-Vektor als Spaltenvektor dargestellt:

$$\text{Eqn. 2-32} \quad \mid \psi \rangle = \begin{pmatrix} a_I \\ a_{II} \end{pmatrix}, \text{ wobei nun } a_I \text{ und } a_{II} \text{ wieder die Darstellungskoeffizienten sind.}$$

Mathematisch „sauber“ wird das ganze, wenn man den dualen bra-Vektor als Zeilenvektor schreibt:

$$\text{Eqn. 2-33} \quad \langle \psi \mid = (a_I^* \quad a_{II}^*)$$

Auf diese Weise lässt sich bei der Berechnung von $\langle \psi \mid \psi \rangle$ das Schema einer Matrixmultiplikation anwenden (1-zeilige Matrix multipliziert mit einer 1-spaltigen Matrix), was richtigerweise zu einer Zahl (Skalar) führt. (Sie erinnern sich: Bei der Matrixmultiplikation werden die Matricelemente der sich ergebenden Matrix immer dadurch gebildet, dass man die Summe von Produkten zwischen Elementen bildet, die sich aus „Zeile der ersten Matrix“ mal „Spalte der zweiten Matrix“ ergibt. Demnach hat unsere resultierende Matrix nur 1 Element und ist somit ein Skalar.) Im konkreten Fall sieht dies in Übereinstimmung mit Eqn. 2-28 so aus:

$$\langle \psi \mid \psi \rangle = (a_I^* \quad a_{II}^*) \cdot \begin{pmatrix} a_I \\ a_{II} \end{pmatrix} = a_I^* a_I + a_{II}^* a_{II} = 1$$

Das entspricht formal natürlich auch dem bekannten Skalarprodukt von klassischen Vektoren.

c) Beiderseits offene Klammern $\mid \rangle \langle \mid$ beschreiben Apparate oder, mathematisch ausgedrückt, Operatoren. In einer konkreten Darstellung mit bestimmten Basiszuständen werden diese Operatoren mathematisch zu Matrizen (Tensoren). Lässt man beliebige Operatoren zu, so erhält man im Allgemeinen:

$$A|\psi_1\rangle = q \cdot |\psi_2\rangle$$

D.h., dass im Allgemeinen nicht nur der Zustand verändert wird, sondern dazu auch noch ein Zahlenfaktor q vor dem neuen Zustand auftreten kann. Schreibt man nun dies alles für die dualen Zustandsvektoren (bra-Vektoren) um, so sieht dies wie folgt aus.

$$\text{Eqn. 2-34} \quad \{A|\psi_1\rangle\}^* = \langle\psi_1|A^+ = \langle\psi_2| \cdot q^*$$

In der Matrixdarstellung ist A^+ die zu A komplex konjugierte und zugleich transponierte Matrix.

$$\text{Eqn. 2-35} \quad A^+ = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}^+ = \begin{pmatrix} A_{11}^* & A_{21}^* \\ A_{12}^* & A_{22}^* \end{pmatrix}$$

Dies nützen wir aus und bilden den folgenden Ausdruck:

$$\text{Eqn. 2-36} \quad \langle\psi_1|A^+A|\psi_1\rangle = \langle\psi_2|q^*q|\psi_2\rangle = q^*q\langle\psi_2|\psi_2\rangle = q^*q = |q|^2$$

Die grundsätzlich reelle Zahl $|q|^2$, welche hier zunächst nur als reine „mathematische Konsequenz“ auftaucht, wird im weiteren Verlauf noch eine wichtige physikalische Bedeutung erhalten.

2.2.3 Eigenzustände und Eigenwerte von Operatoren:

Wir haben festgestellt, dass im Allgemeinen eine beliebiger Zustand $|\psi_1\rangle$ durch Einwirkung eines Operators A in einen anderen Zustand $|\psi_2\rangle$ übergeführt wird. Es ist aber häufig so, dass es zu einem bestimmten Zustand $|\psi\rangle$ einen „passenden“ Operator A oder umgekehrt gesagt, dass es zu einem bestimmten Operator A einen „passenden“ Zustand $|\psi\rangle$ gibt, bei dem die einzige Wirkung des Operators auf den Zustand die Multiplikation mit einer Zahl e ist.

$$A|\psi\rangle = e \cdot |\psi\rangle$$

D.h., dass der Zustand selbst durch den Operator eigentlich gar nicht verändert wird.

In einem solchen Fall bezeichnet man definitionsgemäß wie folgt:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle & \dots\dots \text{„Eigenzustand“ zum Operator } A \\ e & \dots\dots \text{„Eigenwert“ des Operators } A \end{aligned}$$

Hinweis: Nach dieser Definition ist der im vorangegangenen Abschnitt eingeführte Vorfaktor q kein Eigenwert, da sich im vorigen Fall ja auch der Zustand ändert !

Beispiel: Wir haben eine solche „Eigenwertsituation“ eigentlich bereits kennen gelernt, nämlich in Zusammenhang mit dem Projektionsoperator (Polarisationsfilter), oder kurz Projektor genannt. Wir haben weiter vorne bereits festgestellt, dass für einen beliebigen Zustand immer gilt:

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

Das bedeutet demnach auch, dass $|\psi\rangle$ der Eigenzustand des Projektionsoperators $|\psi\rangle\langle\psi|$ ist, wobei der Eigenwert $e = 1$ ist.

Wir werden aber gleich einen etwas „aufregenderen“ Operator kennen lernen, dessen Eigenzustände und Eigenwerte besonders wichtige physikalische Größen darstellen.

2.3 Die zeitliche Entwicklung eines Zustandes:

Wenn wir unserem bisherigen Konzept treu bleiben, so müssen wir alle Veränderungen, die die Zustände betreffen, durch Operatoren ausdrücken - somit auch die zeitliche Veränderung. Es muss also einen Operator geben, der die zeitliche Entwicklung beschreibt, der sozusagen das „kosmische Uhrwerk“ repräsentiert. Es ist klar, dass wir diesen nicht so einfach hinschreiben können! Aber dank der prinzipiellen Zusammenhänge, die unser Formalismus aufzeigt, kann man schon sehr viel über die Eigenschaften dieses Operators aussagen, noch bevor man ihn überhaupt kennt. Und das macht es uns leichter, diesen Operator in der Folge auch zu finden.

Wir gehen also davon aus, dass ein Zustand zum Zeitpunkt $|\psi(t_1)\rangle$ durch einen Zeitentwicklungsoperator $U(t_2, t_1)$ in den Zustand $|\psi(t_2)\rangle$ übergeführt wird:

$$\text{Eqn. 2-37} \quad |\psi(t_2)\rangle = U(t_2, t_1)|\psi(t_1)\rangle$$

Wenn wir die bisher in Zusammenhang mit unseren „Polarisationsexperimenten“ gefunden Eigenschaften von Operatoren verallgemeinern und auch für diesen speziellen Operator fordern, so muss folgendes gelten:

$$\text{Eqn. 2-38} \quad \langle\psi(t_2)| = \langle\psi(t_1)|U^+(t_2, t_1)$$

Wir wissen, dass für „vernünftige“ Zustände grundsätzlich $\langle\psi(t_1)|\psi(t_1)\rangle = \langle\psi(t_2)|\psi(t_2)\rangle = 1$ gelten muss. Physikalisch heißt das, dass die Gesamtwahrscheinlichkeit dafür, dass das beschriebene „Teilchen“ zu beliebiger Zeit in irgendeinem Zustand ist „Eins“ sein muss. Was wohl der Fall ist, wenn wir davon ausgehen, dass es nicht ins „Nichts“ entschwinden kann. Wir können also schreiben:

$$\text{Eqn. 2-39} \quad \langle\psi(t_2)|\psi(t_2)\rangle = \langle\psi(t_1)|U^+(t_2, t_1) \cdot U(t_2, t_1)|\psi(t_1)\rangle = 1$$

Womit wir herausfinden dass, wie immer U aussehen mag, er folgende Eigenschaft haben muss:

$$\text{Eqn. 2-40} \quad U^+(t_2, t_1) \cdot U(t_2, t_1) = 1 \quad \dots \text{ Einheitsoperator}$$

D.h., für den Fall, dass wir (später) eine Matrixdarstellung für U finden, dass U^+ (komplex konjugiert und gleichzeitig transponiert) gleichzeitig die inverse Matrix zu U sein muss.

$$\text{Eqn. 2-41} \quad U^{-1} = U^+$$

Andererseits muss eine vernünftige Eigenschaft auch folgende sein:

$$\text{Eqn. 2-42} \quad U(t_3, t_1) = U(t_3, t_2) \cdot U(t_2, t_1)$$

Da die Anwendung dieses Operators offensichtlich darin besteht, dass man einfach die Zeit verstreichen lässt („warten“ - und Tee trinken), muss es egal sein, ob man zuerst von t_1 bis t_2 wartet und dann, ohne etwas dazwischen zu tun, von t_2 bis t_3 wartet oder ob man gleich

von t_1 bis t_3 wartet. Andererseits, wenn wir gar nicht warten, darf sich das System nicht ändern:

$$U(t_1, t_1) = 1 \quad \dots \quad \text{Einheitsoperator}$$

Aufgrund von Eqn. 2-42 muss das dasselbe sein wie:

$$U(t_1, t_1) = U(t_1, t_2)U(t_2, t_1) = 1$$

somit haben wir:

$$\text{Eqn. 2-43} \quad U^{-1}(t_2, t_1) = U(t_1, t_2) = U^+(t_2, t_1)$$

Nun interessieren wir uns für infinitesimale (verschwindend kleine) Änderungen in der Zeit $t \rightarrow t + \delta t$, d.h. $t_2 = t_1 + \delta t$:

Für $\delta t \rightarrow 0$ muss demnach gelten dass $U(t + \delta t, t) \rightarrow 1$ (Einheitsoperator).

D.h für genügend kleine Zeitänderungen muss es möglich sein, nach der linearen Abhängigkeit zu entwickeln („Taylorentwicklung 1. Ordnung“):

$$\text{Eqn. 2-44} \quad U(t + \delta t, t) = 1 + K(t) \cdot \delta t + \dots$$

Wir wissen von Eqn. 2-40 dass:

$$\begin{aligned} \text{Eqn. 2-45} \quad 1 &= U^+(t + \delta t, t)U(t + \delta t, t) = (1 + K^+(t) \cdot \delta t + \dots)(1 + K(t) \cdot \delta t + \dots) = \\ &= 1 + (K^+ + K) \cdot \delta t + \dots \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \quad K + K^+ = 0 \quad K^+ = -K \quad \dots \text{ „anti - hermitisch“}$$

K ist natürlich ebenfalls ein Operator, da wir ihn ja von U extrahiert haben. In „weiser Voraussicht“ spalten wir von K den Zahlenfaktor $-\frac{i}{\hbar}$ ab und führen damit einen neuen Operator H ein, der durch diese Maßnahme „hermitisch“ ($H^+ = H$) wird (lediglich „mathematisches Fachchinesisch“):

$$\text{Eqn. 2-46} \quad K = -\frac{i}{\hbar} H \quad \text{bzw.} \quad H = -\frac{\hbar}{i} K$$

Letzteres ist vorerst nur ein Spiel mit Vorfaktoren und ändert formal eigentlich noch nichts.

Nach diesen Maßnahmen können wir die infinitesimale Zeitentwicklung wie folgt schreiben:

$$|\psi(t + \delta t)\rangle = U(t + \delta t, t)|\psi(t)\rangle = \left(1 - \frac{i}{\hbar} H \cdot \delta t\right)|\psi(t)\rangle$$

Wenn wir nun obige Gleichung so interpretieren, dass

$$|\psi(t + \delta t)\rangle = |\psi(t)\rangle + \delta|\psi(t)\rangle, \quad \text{was wohl wegen der dahinter steckenden Reihenentwicklung der Fall ist, folgt:}$$

$$\text{Eqn. 2-47} \quad \delta|\psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar} \cdot H \cdot \delta t \cdot |\psi(t)\rangle$$

Mathematisch kann dies aber nur bedeuten dass

$$\text{Eqn. 2-48} \quad \delta|\psi(t)\rangle = \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle \cdot \delta t$$

Fasst man Eqn. 2-47 und Eqn. 2-48 zusammen, erhält man

$$\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar} \cdot H \cdot |\psi(t)\rangle \quad \text{so dass wir durch eine weitere Umformung}$$

$\text{Eqn. 2-49} \quad i \cdot \hbar \cdot \frac{d}{dt} \psi(t)\rangle = H \cdot \psi(t)\rangle \quad \text{die zeitabhängige Schrödingergleichung}$
--

erhalten. Obige Gleichung ist als zeitabhängige Schrödingergleichung bekannt. Sie ist offensichtlich eine Differentialgleichung, welche es erlaubt, die zeitliche Entwicklung des Zustandes $|\psi(t)\rangle$ zu berechnen - sofern man H kennt!

H wird als Hamiltonoperator bezeichnet und wir kennen ihn derzeit noch nicht!

Resümee zu diesem Kapitel:

Um nochmals dieses Kapitel zu rekapitulieren, so haben wir aus allgemeinen Prinzipien, welche wir letztlich aus unseren Polarisationsexperimenten extrahiert haben, geschlossen, dass, falls es einen Operator für die Zeitentwicklung gibt, er die soeben hergeleiteten Eigenschaften haben muss. Dies konnten wir allein aufgrund allgemeiner Zusammenhänge (Grundprinzipien) schließen, ohne den bewussten Operator selbst schon kennen zu müssen - wir wissen nun von seiner Existenz und müssen ihn somit „nur noch“ suchen !

2.4 Stationäre Zustände:

Nachdem wir im vorigen Kapitel die prinzipielle Form einer Zeitabhängigkeit behandelt haben, soll in diesem Kapitel der Spezialfall der Zeitabhängigkeit eines sog. stationären Zustandes behandelt werden, dessen Beschreibung sich konsequenterweise in die allgemeine Zeitabhängigkeit einfügen muss. Vorerst müssen wir aber noch konkretisieren, was „stationär“ im Rahmen unseres Formalismus bedeutet. Vom qualitativen Verständnis (Hausverstand) her muss es bedeuten, dass der Zustand zu einer späteren Zeit $|\psi(t_2)\rangle$ sich physikalisch nicht vom Zustand zu einer früheren Zeit $|\psi(t_1)\rangle$ unterscheidet. Nach unseren bisherigen Vorschriften können wir das feststellen, indem wir auf den Zustand $|\psi(t_2)\rangle$ den Projektor („Filter“) bezüglich des Ausgangszustandes $|\psi(t_1)\rangle$ anwenden und schauen, ob der Projektor $|\psi(t_1)\rangle\langle\psi(t_1)|$ diesen Zustand wie seinen eigenen „erkennt“ und akzeptiert, d.h. ob er ihn zur Gänze durchlässt. Um das zu veranschaulichen, greife ich noch einmal auf unsere am Beginn definierten graphischen Symbole zurück:

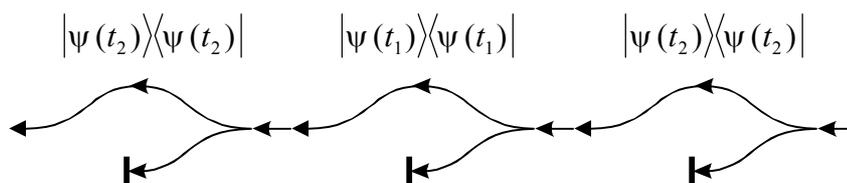


Abbildung 2.4-1: Schematische „Filteranordnung“ zur Veranschaulichung, wie man zwei Zustände „quantenmechanisch“ darauf hin untersuchen kann, ob sie physikalisch unterscheidbar sind oder nicht.

Wir nehmen also an, dass wir die Zustände zur Zeit t_1 und t_2 schon kennen und wollen nun die Bedingungen herausfinden, die diese Zustände erfüllen müssen, wenn sie physikalisch nicht unterscheidbar sein sollen. Dazu nehmen wir (symbolisch) die Projektoren zu diesen Zuständen und bauen damit die obige Filteranordnung auf. Wenn sich nun $|\psi(t_1)\rangle$ physikalisch nicht von $|\psi(t_2)\rangle$ unterscheidet, so darf sich das mittlere Filter überhaupt nicht auswirken, d.h. es muss gelten:

$$\begin{aligned} & |\psi(t_2)\rangle\langle\psi(t_2)|\psi(t_1)\rangle\langle\psi(t_1)|\psi(t_2)\rangle\langle\psi(t_2)| = |\psi(t_2)\rangle\langle\psi(t_2)| \\ \text{Eqn. 2-50} \quad & \Rightarrow \quad \langle\psi(t_2)|\psi(t_1)\rangle\langle\psi(t_1)|\psi(t_2)\rangle = 1 \end{aligned}$$

Mathematisch bedeutet das, dass die Projektionsamplitude $\langle\psi(t_1)|\psi(t_2)\rangle$ zwar noch komplex sein darf, sie aber auf jeden Fall den Betrag „1“ haben muss:

$$\text{Eqn. 2-51} \quad \left| \langle\psi(t_1)|\psi(t_2)\rangle \right| = 1$$

Daraus können wir schließen, dass die Zeitabhängigkeit in diesem Fall maximal die Phase der Projektionsamplitude verändern darf (sie fällt ja bei der Betragsbildung heraus). Somit können wir allgemein für die Zeitabhängigkeit eines stationären Zustandes folgendes ansetzen:

$$\text{Eqn. 2-52} \quad |\psi(t_2)\rangle = e^{-i \cdot f(t_2, t_1)} \cdot |\psi(t_1)\rangle$$

wobei $f(t_2, t_1)$ eine noch zu bestimmende Funktion der Zeit sein muss. Die Wahl des negativen Vorzeichens im Exponenten hat nur „ästhetische“ Gründe und schränkt die Allgemeinheit in keiner Weise ein. Wenn wir auch hier unser schon einmal praktiziertes „Wartenspiel“ abziehen, so warten wir einmal von t_1 bis t_2 und dann von t_2 nach t_3 und in der Folge betrachten wir den Fall dass wir gleich von t_1 bis t_3 warten. Diese 3 „Warteintervalle“ schreiben sich dann wie folgt:

$$|\psi(t_2)\rangle = e^{-i \cdot f(t_2, t_1)} \cdot |\psi(t_1)\rangle$$

$$\begin{aligned} |\psi(t_3)\rangle &= e^{-i \cdot f(t_3, t_2)} \cdot |\psi(t_2)\rangle \\ |\psi(t_3)\rangle &= e^{-i \cdot f(t_3, t_1)} \cdot |\psi(t_1)\rangle \end{aligned}$$

Physikalisch sinnvoll kann das Ganze nur sein wenn:

$$\begin{aligned} |\psi(t_3)\rangle = e^{-i \cdot f(t_3, t_1)} \cdot |\psi(t_1)\rangle &= |\psi(t_3)\rangle = e^{-i \cdot f(t_3, t_2)} \cdot |\psi(t_2)\rangle = \\ &= |\psi(t_3)\rangle = e^{-i \cdot f(t_3, t_2)} \cdot e^{-i \cdot f(t_2, t_1)} |\psi(t_1)\rangle \end{aligned}$$

woraus sich zwangsläufig ergibt dass:

$$e^{-i \cdot f(t_3, t_1)} = e^{-i \cdot f(t_3, t_2)} \cdot e^{-i \cdot f(t_2, t_1)}$$

$$\Rightarrow f(t_3, t_1) = f(t_3, t_2) + f(t_2, t_1)$$

Somit kann f nur eine lineare Funktion der Zeit sein. Legen wir als Anfangsbedingung für die Phase fest, dass zum Zeitpunkt $t=0$ die Amplitude des Zustandes rein reell sein soll, (das dürfen wir ohne Beschränkung der Allgemeinheit tun!), so bekommen wir als „allgemeinst“ mögliche Zeitabhängigkeit:

$$f(t) = \omega \cdot t$$

Eqn. 2-53

$$\Rightarrow |\psi(t)\rangle = e^{-i \cdot \omega \cdot t} |\psi(t=0)\rangle$$

wobei ω ein konstanter reeller Vorfaktor sein muss. Die Bezeichnung mit ω habe ich natürlich nicht zufällig gewählt, denn nach der obigen allgemein gültigen Form kann dieser zeitabhängige Phasenfaktor eigentlich nur eine periodische Funktion mit einer Kreisfrequenz ω sein. Diese Funktion muss sich natürlich auch in die Zeitabhängigkeit, wie sie durch die zeitabhängigen Schrödingergleichung beschrieben wird, einfügen. Wir stecken also unsere gefundene Funktion in die zeitabhängige Schrödingergleichung (Eqn. 2-49) hinein:

$$i \cdot \hbar \cdot \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = i \cdot \hbar \cdot \frac{d}{dt} e^{-i \cdot \omega \cdot t} |\psi(t=0)\rangle = \omega \cdot \hbar \cdot e^{-i \cdot \omega \cdot t} |\psi(t=0)\rangle = H \cdot |\psi(t)\rangle$$

Was zwangsläufig bedeutet, dass:

$\text{Eqn. 2-54} \quad H \cdot \psi(t)\rangle = \hbar \cdot \omega \cdot \psi(t)\rangle \quad (\text{zeitunabhängige Schrödingergleichung})$

Die Bezeichnung „zeitunabhängig“ scheint nun etwas irreführend, da die Zeit formal ja noch drinnen steht und bei der Herleitung sogar eine wichtige Rolle gespielt hat. Dennoch ist es so dass diese Gleichung, wie wir später noch sehen werden, eine Bestimmungsgleichung für den (stationären) Zustand $|\psi(t=0)\rangle$ ist, da die Zeitabhängigkeit ohnehin nur über die schon bekannte e-Funktion als multiplikativer Faktor auftaucht. Nach unserem bisherigen Formalismus ist H ein Operator, zu dem nach unserer Definition (siehe 2.2.3) obiger stationärer Zustand offensichtlich ein Eigenzustand mit dem Eigenwert $\hbar\omega$ ist. Der Faktor \hbar ist eigentlich ein bisher völlig nutzloser Faktor, den wir nur aus „Laune“ in Eqn. 2-46 eingeführt haben. Wir hätten die ganze Herleitung ohne weiters auch ohne diesen Faktor durchführen können. Da wir die Herleitung ganz allgemein für einen beliebigen stationären Zustand gemacht haben, muss dieses Ergebnis von Eqn. 2-54 von einigermaßen fundamentaler Bedeutung sein. Wir wollen deshalb einmal nachschauen, was die physikalische Realität (Natur) dazu zu sagen hat. Wir nehmen uns also wieder einmal unsere Lichtwellen her (von denen wir eigentlich auch schon alles Bisherige gelernt haben): Die zum Teil schon historischen Experimente mit Licht (z.B. Lichtelektrischer Effekt, siehe Einleitung) haben auf phänomenologischer Basis eine Verknüpfung zwischen Energie eines „Lichtteilchens“ und der Frequenz der Lichtwellen aufgezeigt.

$$E = h \cdot \nu$$

Somit muss wohl obiges ω in Eqn. 2-54, zumindest für den Fall, dass wir mit unserem Formalismus Photonen beschreiben, der Frequenz dieser Lichtwelle entsprechen (wobei wir in der Folge ω durch ν zu ersetzen haben). Daher entspricht unser Eigenwert $\hbar\omega$ in Eqn. 2-54 der Energie des sich im betreffenden stationären Zustand befindlichen Teilchens.

$$\text{Eqn. 2-55} \quad \hbar \cdot \omega = E$$

Wenn wir nun das ganze nicht nur als „glücklichen Zufall“ abtun wollen, der speziell nur für Licht gilt, sondern ein grundlegendes und allgemein gültiges Prinzip dahinter vermuten, so lässt sich dieser Sachverhalt wie folgt verallgemeinernd zusammenfassen:

1) Stationäre Zustände sind Eigenzustände des Hamiltonoperators H .

- 2) Die zugehörigen Eigenwerte sind die Energie des sich in diesem Zustand befindlichen Systems.
- 3) Die Zeitabhängigkeit existiert nur als multiplikativer Phasenfaktor der mit $\omega = E / \hbar$ oszilliert.

Eqn. 2-56 $|\psi(t)\rangle = |\psi(t=0)\rangle \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ (Zeitabhängigkeit eines stationären Zustandes)

Für die Lösung praktischer Probleme bedeutet das, dass man aus der Kenntnis des Hamiltonoperators H man durch Aufsuchen seiner Eigenzustände die stationären Zustände sowie die zugehörigen Energieeigenwerte eines Systems ermitteln kann.

Resümee zu diesem Kapitel: Wir wissen also inzwischen auch, was wir mit H alles ausrechnen können und zwar die wohl wichtigsten Eigenschaften eines physikalischen Systems, nämlich die stationären Zustände (Gleichgewichtszustände) und die zugehörigen Energiewerte. Wir haben sogar noch mehr getan, wir sind überhaupt erst draufgekommen, dass es so etwas wie Energieeigenwerte prinzipiell geben kann. - Es ist soweit nur ein Problem festzustellen, wir kennen H eigentlich noch nicht, oder? (Einfach zum Nachdenken: Definiert sich ein Objekt nicht durch seine Eigenschaften, die wir im Fall von H nun doch schon relativ gut kennen? Muss man wirklich glauben, dass ein bestimmtes H zu finden sein muss? Vielleicht kann man H immer erst in Zusammenhang mit der Bearbeitung eines konkreten Problems greifbar machen?)

Auf jeden Fall möchte darauf hinweisen, dass die zeitabhängige Schrödingergleichung (Eqn. 2-49) keine Bestimmungsgleichung für H ist, sondern eine Bestimmungsgleichung für die zeitliche Entwicklung von $|\psi(t)\rangle$, für die H ebenfalls bekannt sein muss. Andernfalls wäre die Kenntnis der Lösung vorausgesetzt - aber dann wären wir ohnehin schon fertig.

Um zu demonstrieren, dass man sehr wohl auch jetzt schon mit H rechnen kann, kommt jetzt das erste physikalisch relevante Anwendungsbeispiel.

2.5 Die Kopplung von 2 identischen physikalischen Systemen.

Um das soeben gesagte möglichst schnell in die Tat umzusetzen, bevor es möglicherweise aus dem Bewusstsein entschwindet, ein erstes Anwendungsbeispiel mit auch für die Praxis ganz besonderer physikalischer Relevanz. Es mag etwas kühn erscheinen, sich die Behandlung einer Kopplung zwischen Systemen vorzunehmen, wenn man eigentlich noch gar nicht weiß, wie man überhaupt die einzelnen Systeme berechnet. (Bescheiden, wie man üblicherweise sein sollte, müsste man sich eigentlich vorerst mit den einzelnen Systemen beschäftigen, bevor man sich an das Problem von deren Kopplung heranwagt.) Der Grund für unseren Übermut ist aber gar nicht so weit hergeholt: In der Praxis stehen wir nämlich tatsächlich sehr oft vor dem Problem, dass wir einzelne Systeme aufgrund ihrer Komplexität nicht mehr berechnen können (zumindest nicht ohne Näherungsverfahren bzw. numerische Näherungsmethoden). Man braucht nur an Atome denken, so ist man mit der exakten Berechenbarkeit beim Heliumatom schon am Ende - und die meisten Atome sind viel komplizierter, wie wir wissen. Aber dennoch möchten wir quantenmechanische Aussagen über Moleküle und Kristalle machen, die aus solchen komplexen Atomen aufgebaut sind. Wie sollte man da aus diesem Dilemma herauskommen, wenn man immer erst die Teilsysteme vollständig beschreiben müsste, bevor man sie zu größeren Gebilden zusammensetzt. - Nun, das Zauberwort in diesem Zusammenhang ist größtmögliche Abstraktion, und zwar nicht, um die Dinge zu verschleiern, sondern im Gegenteil, um die wesentlichen Zusammenhänge nicht zu

übersehen. Mit diesem Prinzip sind wir auch bis jetzt schon ganz gut gefahren und wollen daher versuchen, es auch auf die Kopplung von 2 identischen, aber sonst beliebigen physikalischen Systemen anzuwenden. Der Einfachheit halber denken wir an ein System, das aus zwei identischen Potentialtöpfen besteht, in die man ein Elektron hineingeben kann. (Dies könnte genauso das elektrische Potential der positiven Atomrümpfe von Atomen sein, denen man ein Elektron weggenommen hat).

Sind diese beiden Potentialtöpfe völlig unabhängig voneinander (nicht gekoppelt), so kann man davon ausgehen, dass die Energie im (Grund-)Zustand, den ein Elektron im Topf einnehmen kann, sicher unabhängig davon sein wird, ob es im ersten oder im zweiten Topf sitzt. Dennoch wollen wir beide Fälle unterscheiden und treffen folgende Vereinbarung:

- a) Das Elektron befindet im Zustand $|\psi_1\rangle$, wenn es im 1. Topf sitzt
- b) Das Elektron befindet im Zustand $|\psi_2\rangle$, wenn es im 2. Topf sitzt

wobei allein schon aus Symmetriegründen die Grundzustandsenergie E_0 für beide gleich sein muss (wir können diese Energie hier zwar nicht ausrechnen, aber es reicht uns zu wissen, dass es eine solche geben muss).

Nehmen wir wieder unseren (noch immer unbekannt) Hamiltonoperator H her, so kann man ebenfalls aus Symmetriegründen annehmen, dass er für beide Töpfe identisch ausschauen muss. Dem allgemeinen Formalismus vertrauend, können wir annehmen, dass für beide Zustände die Eigenwertgleichung mit H gelten wird:

$$H \cdot |\psi_1\rangle = E_0 \cdot |\psi_1\rangle$$

$$H \cdot |\psi_2\rangle = E_0 \cdot |\psi_2\rangle$$

Ich sage noch einmal, wir wissen an dieser Stelle nur, dass es solche Energieeigenwerte und den zugehörigen Hamiltonoperator gibt - können diese aber vorerst nicht näher bestimmen ! (In der Praxis müsste man daher in so einer Situation E_0 dem Experiment entnehmen). Dennoch wollen wir versuchen, aus übergeordneten Zusammenhängen, welche im allgemeinen Formalismus stecken, weitere Aussagen zum System zu machen:

Dem allgemeinen Formalismus folgend, stellen die zwei genannten Zustände die einzigen Möglichkeiten für das Elektron dar. Dementsprechend können wir diese beiden Zustände formal als eine Basis für ein sog. Zwei-Zustandssystem auffassen. Wir checken daher in der Folge einige bekannte Kriterien:

- a) Orthogonalität: Wenn das Elektron z.B. im Zustand $|\psi_1\rangle$ (linker Topf) sitzt, wir es aber im rechten Topf suchen (Projektor $|\psi_2\rangle\langle\psi_2|$ auf $|\psi_1\rangle$ anwenden), so werden wir es nicht finden:

$$|\psi_2\rangle\langle\psi_2||\psi_1\rangle = 0 \quad (\text{Orthogonalität erfüllt})$$

Das Gleiche gilt natürlich auch umgekehrt.

- b) Andererseits, wenn es im linken Topf sitzt und wir es im linken Topf suchen, so werden wir es sicher finden:

$$|\psi_1\rangle\langle\psi_1||\psi_1\rangle = 1$$

- c) Vollständigkeit: Wir werden es sicher entweder im rechten $|\psi_2\rangle$ oder linken Topf $|\psi_1\rangle$ finden

Nachdem wir jetzt eine Basis für unser Zwei-Zustandsproblem gefunden haben, wollen wir auch versuchen, eine entsprechende Matrixdarstellung des Hamiltonoperators H zu finden. Die allgemeine Vorschrift lautet:

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} \langle\psi_1|H|\psi_1\rangle & \langle\psi_1|H|\psi_2\rangle \\ \langle\psi_2|H|\psi_1\rangle & \langle\psi_2|H|\psi_2\rangle \end{pmatrix}$$

Nachdem wir wissen, dass der Hamiltonoperator auch für die zeitliche Entwicklung eines Zustandes zuständig ist, muss man sich bei der Bildung der Matrixelemente nicht nur um den „Istzustand“ kümmern, sondern man muss sich auch fragen, ob mit der Zeit prinzipiell auch eine Änderung dieses Zustandes stattfinden kann. D.h., während auf jeden Fall klar ist dass

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0 \quad \text{gilt,}$$

so gilt $\langle\psi_1|H|\psi_2\rangle = 0$ nur in dem Fall, dass jede Änderung in der Zeit mit Sicherheit ausgeschlossen ist. Die einzig mögliche Änderung, welche überhaupt vorstellbar ist, wäre, dass das Elektron auf irgend eine Art von einem Topf in den anderen gelangt (Tunneln) - d.h., dass eine gewisse Kopplung zwischen den Töpfen existiert. Wir wollen aber als vorbereitende Stufe noch den Fall vollkommen entkoppelter Töpfe betrachten.

2.5.1 Vollkommen entkoppelte Töpfe:

Ist diese Kopplung tatsächlich Null, so erhalten wir folgende Matrixelemente für H:

$$\langle \psi_1 | H | \psi_1 \rangle = E_0 \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle = E_0$$

$$\langle \psi_2 | H | \psi_2 \rangle = E_0 \langle \psi_2 | \psi_2 \rangle = E_0$$

$$\langle \psi_1 | H | \psi_2 \rangle = E_0 \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = 0$$

$$\langle \psi_2 | H | \psi_1 \rangle = E_0 \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle = 0$$

Stellen wir uns nun abstrakt einen etwas allgemeineren Zustand vor, der aus Überlagerung aus diesen beiden Basiszuständen hervorgeht und lassen wir H darauf wirken:

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$$

$$\text{so bewirkt} \quad H \cdot |\psi\rangle = \begin{pmatrix} E_0 & 0 \\ 0 & E_0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = E_0 \cdot \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = E_0 \cdot |\psi\rangle$$

Offensichtlich ist auch dieser, etwas allgemeinere Zustand ein Eigenzustand mit dem selben Eigenwert E_0 . Nach unserem Formalismus heißt das, dass er auch ein stationärer Zustand ist. Bildlich gesprochen bedeutet das, dass es gar nicht notwendig ist, dass das Elektron entweder im einen oder im anderen Topf sitzt, sondern es kann offensichtlich auch in einem stabilen (stationären) Zustand existieren, bei dem es in beiden Töpfen angetroffen werden kann - und das obwohl die Potentialtöpfe als entkoppelt angenommen wurden.

Einschub: Ortsbestimmung des Elektrons:

Das obige Problem sieht nun auf dem ersten Blick wieder wie unser in der Einleitung mehrfach angesprochene Kuriosum aus: Schaut man nämlich nach, wo das Elektron ist, so kann es immer nur in einem der beiden Töpfe angetroffen werden, nie in beiden gleichzeitig - der Zustand $|\psi\rangle$ schreibt es aber im allgemeinen beiden Töpfen zu. Wir können daher dieses Problem gleich zum Anlass nehmen um zu testen, ob unser neuer Formalismus diesen Widerspruch tatsächlich zu verhindern vermag, wie am Beginn angekündigt:

Nehmen wir also einen allgemeinen Zustand

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$$

und fragen wir nach dem Ort der Elektrons. In unserem Formalismus muss die (Orts-) Messung durch eine mathematische Operation beschrieben werden: D.h., wenn wir an einem Ort „nachschaun“, so bedeutet es, dass wir einen Projektionsoperator auf den betreffenden Ort anwenden müssen:

Nachschaun, ob sich das Elektron in Topf1 befindet, bedeutet somit formal:

$$|\psi_1\rangle\langle\psi_1|\psi\rangle$$

was offensichtlich das gleiche ist wie $a_1 \cdot |\psi_1\rangle$

Nachschaun, ob sich das Elektron in Topf2 befindet, bedeutet:

$$|\psi_2\rangle\langle\psi_2|\psi\rangle$$

was wieder das gleiche ist wie $a_2 \cdot |\psi_2\rangle$

Da $\langle\psi_1|\psi\rangle$ und $\langle\psi_2|\psi\rangle$ Amplitudenverhältnisse sind, kommt man durch das Betragsquadrat zur Antreffwahrscheinlichkeit für das Elektron im betreffenden Topf:

$$w_1 = \langle\psi|\psi_1\rangle\langle\psi_1|\psi\rangle \text{ Antreffwahrscheinlichkeit in Topf1}$$

$$w_2 = \langle\psi|\psi_2\rangle\langle\psi_2|\psi\rangle \text{ Antreffwahrscheinlichkeit in Topf2}$$

Ist unser Formalismus richtig, so darf es nicht möglich sein, dass man das Elektron in beiden Töpfen finden kann. Mit anderen Worten ausgedrückt heißt das, wenn man nachschaut, ob man das Elektron in beiden Töpfen findet, die Wahrscheinlichkeit dafür Null werden muss. Schauen wir also zuerst in Topf 1 nach und gleich danach in Topf 2 (von rechts nach links fortschreitend). Formal werden dafür die entsprechenden Projektoren nacheinander angewandt:

$$|\psi_2\rangle\langle\psi_2| \cdot |\psi_1\rangle\langle\psi_1|\psi\rangle$$

Es ist sofort erkennbar, dass die dazwischen entstandene geschlossene Klammer $\langle\psi_2|\psi_1\rangle$ wegen der Orthogonalität der Basiszustände den ganzen Ausdruck richtigerweise zu Null macht.

2.5.2 Nicht verschwindende Kopplung zwischen den Töpfen:

Im Folgenden nehmen wir nur eine sehr geringe, aber dennoch nicht verschwindende Kopplung an. In diesem Fall können wir die Matrixdarstellung des Hamiltonoperators vom vorigen Abschnitt übernehmen, müssen aber annehmen, dass die Nicht-Diagonalelemente nicht Null sein werden.

$$\langle\psi_1|H|\psi_1\rangle = E_0 \langle\psi_1|\psi_1\rangle = E_0$$

$$\langle\psi_2|H|\psi_2\rangle = E_0 \langle\psi_2|\psi_2\rangle = E_0$$

$$\langle\psi_1|H|\psi_2\rangle \neq 0$$

$$\langle\psi_2|H|\psi_1\rangle \neq 0$$

Da H für die zeitliche Entwicklung zuständig ist und wegen der Kopplung zwischen den Töpfen nicht mehr ausgeschlossen werden kann, dass eine Teilchen, welches sich z.B. in Topf 2 befindet, mit Ablauf der Zeit auch in Topf 1 überwechseln kann, werden die gemischten Ausdrücke nicht mehr Null sein können. Wegen der Hermitizität von H ($H^+ = H$) kann nur $H_{12} = H_{21} = k$ gelten kann:

$$\Rightarrow \quad \tilde{H} = \begin{pmatrix} E_0 & k \\ k & E_0 \end{pmatrix} \quad k \ll E_0$$

Wobei k rein reell sein muss und bei verschwindend kleiner, aber endlicher Kopplung als klein gegen E_0 angenommen werden kann. In Worten ausgedrückt bedeuten die gemischten Terme wie z.B. $\langle \psi_2 | H | \psi_1 \rangle$ dass ein Elektron, welches sich am Anfang im Zustand $|\psi_1\rangle$ befindet, und damit am Anfang mit Sicherheit im Zustand $|\psi_1\rangle$ angetroffen werden kann, unter der Wirkung der Zeit schließlich auch im Zustand $|\psi_2\rangle$ angetroffen werden kann.

Betrachtet man die Basiszustände unabhängig voneinander, so bleiben diese an sich Eigenzustände von H mit den Eigenwerten E_0 (zumindest für hinreichend geringe Kopplung zwischen den Töpfen - die Kopplung darf sicher nicht so groß werden, dass der eigenständige Charakter der Töpfe verloren geht, denn dann hat man es eigentlich schon mit einem neuen System zu tun, welches man separat behandeln muss). Wegen der Hermitizität von H ($H^\dagger = H$) müssen die beiden Nicht-Diagonalelemente gleich und reell sein und wir bezeichnen sie mit k (wie Kopplungsparameter).

Wenn wir diesmal wieder einen allgemeinen Zustand hernehmen

$$|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$$

so bewirkt die Anwendung des Hamiltonoperators

$$\tilde{H} \cdot |\Psi\rangle = \begin{pmatrix} E_0 & k \\ k & E_0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_0 \cdot a_1 + k \cdot a_2 \\ k \cdot a_1 + E_0 \cdot a_2 \end{pmatrix}$$

Offensichtlich lässt sich aus dem resultierenden Zustand kein gemeinsamer Faktor zum Ausgangszustand herausziehen, was bedeutet, dass sich der Zustand tatsächlich geändert haben muss. Dies bedeutet, dass ein allgemeiner, aus Überlagerung von $|\psi_1\rangle$ und $|\psi_2\rangle$ hergestellter Zustand nun prinzipiell kein Eigenzustand des Hamiltonoperators mehr ist und daher in weiterer Folge auch kein stationärer Zustand mehr sein kann. Wir müssen uns daher auch fragen, ob $|\psi_1\rangle$ und $|\psi_2\rangle$ selbst überhaupt noch stationäre Zustände sind. Wir lassen also H auf $|\psi_1\rangle$ und $|\psi_2\rangle$ wirken:

$$\tilde{H} \cdot |\psi_1\rangle = \begin{pmatrix} E_0 & k \\ k & E_0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_0 \\ k \end{pmatrix}$$

$$\tilde{H} \cdot |\psi_2\rangle = \begin{pmatrix} E_0 & k \\ k & E_0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} k \\ E_0 \end{pmatrix}$$

Was ganz offensichtlich auch eine echte Zustandsänderung bedeutet, die nicht durch ein einfaches Herausheben eines gemeinsamen Faktors repariert werden kann. Somit sind auch unsere gewählten Basiszustände $|\psi_1\rangle$ und $|\psi_2\rangle$ keine stationären Zustände mehr (deshalb sind sie aber immer noch als Basiszustände geeignet!).

Wenn man aber unser Zweitopfsystem als ein nach außen abgeschlossenes System betrachtet, so muss es für das Gesamtsystem einen Gleichgewichtszustand mit bestimmter Energie geben. Wir müssen also nach den entsprechenden stationären Zuständen Ausschau halten. Da wir mit $|\psi_1\rangle$ und $|\psi_2\rangle$ ein vollständiges Set von Basiszuständen haben, so können wir hoffen, dass sich die gesuchten stationären Zustände als Überlagerung mit diesen beiden Basiszuständen darstellen lassen. Wir setzen also an:

$$|\Psi_{stat}\rangle = \begin{pmatrix} a_{s1} \\ a_{s2} \end{pmatrix}$$

und suchen a_{s1} und a_{s2} . Beschreiben die gesuchten Koeffizienten einen Eigenzustand, so müsste formal unten stehende Gleichung erfüllt sein. Wir können somit diese sog. Eigenwertgleichung als Bestimmungsgleichung für die Koeffizienten benutzen:

$$\text{Eqn. 2-57} \quad \tilde{H} \cdot |\Psi_{stat}\rangle = \begin{pmatrix} E_0 & k \\ k & E_0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_{s1} \\ a_{s2} \end{pmatrix} = E \cdot \begin{pmatrix} a_{s1} \\ a_{s2} \end{pmatrix}$$

wobei E der Eigenwert zu H für $|\Psi_{stat}\rangle$ ist. Zum Finden der Koeffizienten müssen wir einfach das dahintersteckende Gleichungssystem auflösen:

$$\begin{pmatrix} E_0 & k \\ k & E_0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_{s1} \\ a_{s2} \end{pmatrix} = E \cdot \begin{pmatrix} a_{s1} \\ a_{s2} \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} E_0 - E & k \\ k & E_0 - E \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_{s1} \\ a_{s2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Das ist im Grunde ein homogenes Gleichungssystem für a_{s1} und a_{s2} . Wie allgemein bekannt, hat dieses Gleichungssystem nur nicht-triviale Lösungen, wenn die Determinante der Koeffizientenmatrix verschwindet. Dadurch erhält man eine zusätzliche Bedingung, durch welche E bestimmt werden kann.

$$\det \begin{pmatrix} E_0 - E & k \\ k & E_0 - E \end{pmatrix} = 0$$

$$\text{Eqn. 2-58} \quad \det \begin{pmatrix} E_0 - E & k \\ k & E_0 - E \end{pmatrix} = (E_0 - E)^2 - k^2 = 0$$

$$\begin{aligned} (E_0 - E)^2 - k^2 &= E_0^2 - 2 \cdot E \cdot E_0 + E^2 - k^2 = 0 \\ \Rightarrow E^2 - 2 \cdot E \cdot E_0 + E_0^2 - k^2 &= 0 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow E_{I/II} = E_0 \pm \sqrt{E_0^2 - E_0^2 + k^2} = E_0 \pm k$$

D.h. wir bekommen 2 mögliche Eigenwerte, was letztlich bedeutet, dass wir auch zwei stationäre Zustände erhalten werden.

Die Zustände findet man nun durch Einsetzen in das Gleichungssystem.:

a) Einsetzen mit $E=E_I=E_0+k$:

$$\begin{pmatrix} E_0 - E & k \\ k & E_0 - E \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_{s1} \\ a_{s2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -k & k \\ k & -k \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_{s1} \\ a_{s2} \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow -k \cdot a_{s1} + k \cdot a_{s2} &= 0 \\ k \cdot a_{s1} - k \cdot a_{s2} &= 0 \quad \Rightarrow \quad a_{s1} = a_{s2} \end{aligned}$$

b) Einsetzen mit $E=E_I=E_0-k$:

$$\begin{pmatrix} E_0 - E & k \\ k & E_0 - E \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_{s1} \\ a_{s2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} k & k \\ k & k \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_{s1} \\ a_{s2} \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow k \cdot a_{s1} + k \cdot a_{s2} &= 0 \\ k \cdot a_{s1} - k \cdot a_{s2} &= 0 \quad \Rightarrow \quad a_{s1} = -a_{s2} \end{aligned}$$

Wenn wir schreiben $a_{s1} = a_{s2} = a$, so ergibt sich:

$$|\psi_I\rangle = \begin{pmatrix} a \\ a \end{pmatrix}$$

$$|\psi_{II}\rangle = \begin{pmatrix} a \\ -a \end{pmatrix}$$

Da wir allg. verlangen dass $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ gilt, können wir auch noch a ermitteln: Es muss folgendes gelten:

$$\langle \psi_I | \psi_I \rangle = \langle \psi_{II} | \psi_{II} \rangle = a^2 + a^2 = 1 \quad \Rightarrow \quad a = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Somit haben wir für unser gekoppeltes System tatsächlich 2 stationäre Zustände mit zugehörigen Energieeigenwerten gefunden.

$$\begin{aligned} \text{Eqn. 2-59} \quad |\psi_I\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} && \text{mit} \quad E_I = E_0 + k \\ |\psi_{II}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} && \text{mit} \quad E_{II} = E_0 - k \end{aligned}$$

Der Grundsätzliche Effekt der Kopplung ist daher eine Aufspaltung des Energieniveaus der ungekoppelten Töpfe und stationäre Zustände sind nunmehr nur noch solche Zustände, bei denen das Elektron sich gleich wahrscheinlich in beiden Töpfen aufhält ($a_{s1} = a_{s2} = a$).

Entsprechend der Vorzeichen von den Koeffizienten bezeichnet man $|\psi_I\rangle$ als gerade, bzw. symmetrische Lösung und $|\psi_{II}\rangle$ als ungerade, bzw. antisymmetrische Lösung.

Praxisbezug: Stammen die 2 Töpfe von 2 identischen Atomen, so werden die Elektronen der äußersten Schale die stärkste Kopplung erfahren. Wie man aber sieht, kann die Aufspaltung dazu führen, dass ein stationärer Zustand entsteht, dessen Energie geringer ist als die Energie in den ungekoppelten Systemen (Energieabsenkung). Das bedeutet, dass durch Kopplung (=Bindung) die Gesamtenergie des Systems herabgesetzt wird. Will man diese Atome wieder voneinander trennen, so muss man diese Energie (=Bindungsenergie) wieder zuführen. Um mit den Begriffen der Chemie zu sprechen, so entspricht in unserem obigen Beispiel $|\psi_I\rangle$ dem Anti-Bondingzustand und $|\psi_{II}\rangle$ dem Bondingzustand.

2.5.3 Zeitliche Entwicklung von Zuständen in den gekoppelten Potentialtöpfen:

Wir haben das letzte mal festgestellt, dass die Kopplung zwischen den Töpfen dazu führt, dass nicht mehr beliebige Zustände, die durch Überlagerung der Basiszustände $|\psi_1\rangle$ und $|\psi_2\rangle$ erzeugt werden, stationär sind, bzw. dass nicht einmal mehr $|\psi_1\rangle$ und $|\psi_2\rangle$ selbst stationäre Zustände sind. Nach unserem Formalismus kann jeder Zustand $|\psi\rangle$ durch Überlagerung von $|\psi_1\rangle$ und $|\psi_2\rangle$ dargestellt werden. Für den Fall eines nichtstationären Zustandes $|\psi(t)\rangle$ muss das bedeuten dass folgendes gilt:

$$\text{Eqn. 2-60} \quad |\psi(t)\rangle = a_1(t) \cdot |\psi_1\rangle + a_2(t) \cdot |\psi_2\rangle$$

Mit anderen Worten ausgedrückt heißt das, dass sich die Anteile der Basiszustände $|\psi_1\rangle$ und $|\psi_2\rangle$ am allgemeinen Zustand $|\psi(t)\rangle$ zeitlich verändern müssen. Wollen wir nun die Antreffwahrscheinlichkeit w_I für das Elektron z.B. in Topf 1 wissen, so müssen wir folgendes berechnen:

$$\text{Eqn. 2-61} \quad \langle \psi_1 | \psi(t) \rangle = a_1(t); \quad \text{bzw.} \quad w_1 = \langle \psi(t) | \psi_1 \rangle \langle \psi_1 | \psi(t) \rangle = a_1^*(t) \cdot a_1(t)$$

Das bedeutet, dass sich die Antreffwahrscheinlichkeit in den jeweiligen Töpfen für einen nicht stationären Zustand zeitlich verändern muss.

In diesem Zusammenhang stellt sich somit die interessante Frage, was passiert im weiteren Verlauf der Zeit, wenn man zu einem bestimmten Zeitpunkt ($t=0$) das Elektron z.B. in Topf 1 vorfindet, d.h. dass zur Zeit $t=0$ das Elektron sich im Zustand $|\psi_1\rangle$ befindet. Wir wissen bereits, dass auch $|\psi_1\rangle$ kein stationärer Zustand mehr ist und wir kennen natürlich $a_1(t)$ bzw. $a_2(t)$ noch nicht. Das einzige, was wir relativ leicht hinschreiben können, ist die Zeitabhängigkeit für stationäre Zustände, welche lediglich aus einem zeitabhängigen Phasenfaktor besteht (siehe Eqn.2-56):

$$|\psi_{stat}(t)\rangle = |\psi_{stat}(t=0)\rangle \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

Daher ist es zweckmäßig, diesmal von den stationären Zuständen auszugehen und aus diesen alle anderen Zustände durch Superposition darzustellen. D.h. wir drehen den Spieß um und nehmen nicht $|\psi_1\rangle$ und $|\psi_2\rangle$ sondern die stationären Zustände $|\psi_I\rangle$ und $|\psi_{II}\rangle$ als

Basiszustände. Wie Sie sich sicher leicht davon überzeugen werden können, ist die Überlagerung formal ganz gleich durchzuführen wie vorher im umgekehrten Fall:

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_I\rangle + |\psi_{II}\rangle) \\ |\psi_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_I\rangle - |\psi_{II}\rangle) \end{aligned}$$

Eqn. 2-62

vorher hatten wir:

$$\begin{aligned} |\psi_I\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle) \\ |\psi_{II}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_1\rangle - |\psi_2\rangle) \end{aligned}$$

Auf den ersten Blick sieht es so aus als ob man damit im Kreis läuft, ohne viel damit zu erreichen. Nun, betrachtet man die Situation zu einer bestimmten Zeit (z.B. $t=0$), so hat man tatsächlich nicht viel von diesem Basiswechsel. Wollen wir aber die Zeitabhängigkeit betrachten, so hat man sehr viel davon, denn nur zu den stationären Zuständen kann man die Zeitabhängigkeit, wie oben erklärt, einfach dazuschreiben:

$$\begin{aligned} |\psi_I(t)\rangle &= |\psi_I(t=0)\rangle \cdot e^{-i\frac{E_I}{\hbar}t} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle) \cdot e^{-i\frac{E_I}{\hbar}t} \\ |\psi_{II}(t)\rangle &= |\psi_{II}(t=0)\rangle \cdot e^{-i\frac{E_{II}}{\hbar}t} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_1\rangle - |\psi_2\rangle) \cdot e^{-i\frac{E_{II}}{\hbar}t} \end{aligned}$$

Betrachten wir nun eine Anfangssituation, in der das Elektron im Zustand $|\psi_1\rangle$ ist, d.h. dass es sich nur im Topf 1 befindet. Diesen Zustand können wir aufbauen, indem wir die stationären Zustände $|\psi_I\rangle$ und $|\psi_{II}\rangle$ zunächst für den Zeitpunkt $t=0$ entsprechend überlagern:

$$|\psi(t=0)\rangle = |\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_I(t=0)\rangle + |\psi_{II}(t=0)\rangle)$$

Konsequenterweise muss die allgemeine Zeitabhängigkeit $|\psi(t)\rangle$ daraus folgen, wenn man zu den stationären Zuständen die bereits bekannte Zeitabhängigkeit dazuschreibt:

$$\begin{aligned}
|\psi(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\psi_I(t)\rangle + |\psi_{II}(t)\rangle \right) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\psi_I(t=0)\rangle \cdot e^{-i\frac{E_I}{\hbar}t} + |\psi_{II}(t=0)\rangle \cdot e^{-i\frac{E_{II}}{\hbar}t} \right) = \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle) \cdot e^{-i\frac{E_I}{\hbar}t} + \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_1\rangle - |\psi_2\rangle) \cdot e^{-i\frac{E_{II}}{\hbar}t} \right]
\end{aligned}$$

Wir können zur Kontrolle kurz den Fall völliger Entkopplung checken: In diesem Fall hätten wir $E_I = E_{II} = E_0$, sodass wir einen gemeinsamen oszillierenden Faktor herausheben können. Damit würde sich obige Gleichung reduzieren zu:

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle) + \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_1\rangle - |\psi_2\rangle) \right] \cdot e^{-i\frac{E_0}{\hbar}t} = e^{-i\frac{E_0}{\hbar}t} \cdot |\psi_1\rangle$$

Was nichts anderes bedeutet, als dass im entkoppelten Fall $|\psi_1\rangle$ richtigerweise ein stationärer Zustand wäre. In unserem Fall haben wir eine Kopplung und deshalb kann wegen der unterschiedlichen Energien kein gemeinsamer oszillierender Term herausgehoben werden. Fragt man nach dem Ort „Topf“, so muss man, wie wir wissen, den Projektionsoperator auf diesen Ort $|\psi_1\rangle\langle\psi_1|\psi(t)\rangle$ anwenden, d.h. dass wir die Amplitude $\langle\psi_1|\psi(t)\rangle$ berechnen müssen:

$$\begin{aligned}
\text{Eqn. 2-63} \quad \langle\psi_1|\psi(t)\rangle &= \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} (\langle\psi_1|\psi_1\rangle + \langle\psi_1|\psi_2\rangle) \cdot e^{-i\frac{E_I}{\hbar}t} + \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle\psi_1|\psi_1\rangle - \langle\psi_1|\psi_2\rangle) \cdot e^{-i\frac{E_{II}}{\hbar}t} \right] = \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} (\langle\psi_1|\psi_1\rangle + 0) \cdot e^{-i\frac{E_I}{\hbar}t} + \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle\psi_1|\psi_1\rangle - 0) \cdot e^{-i\frac{E_{II}}{\hbar}t} \right] = \\
&= \frac{1}{2} \langle\psi_1|\psi_1\rangle \cdot \left[e^{-i\frac{E_I}{\hbar}t} + e^{-i\frac{E_{II}}{\hbar}t} \right] = \\
&= \frac{1}{2} \left[e^{-i\frac{E_I}{\hbar}t} + e^{-i\frac{E_{II}}{\hbar}t} \right]
\end{aligned}$$

Obige Gleichung stellt offensichtlich eine Schwebung zwischen zwei Schwingungen mit etwas unterschiedlicher Frequenz dar. Ich überlasse es Ihrem Geschick, analog zu Eqn. 2-63 die zeitabhängige Projektionsamplitude $\langle\psi_2|\psi(t)\rangle$ zu berechnen. Ich gebe hier nur das Ergebnis bekannt:

$$\text{Eqn. 2-64} \quad \langle \psi_2 | \psi(t) \rangle = \frac{1}{2} \left[e^{-i \frac{E_I}{\hbar} t} - e^{-i \frac{E_{II}}{\hbar} t} \right]$$

Wie gefordert, ergibt sich für $t=0$: $\langle \psi_1 | \psi(t=0) \rangle = 1$ und $\langle \psi_2 | \psi(t=0) \rangle = 0$

Wir wollen nun in der Folge diesen Schwebungsterm etwas näher untersuchen. Schlüsseln wir dazu die e-Funktion in sin- und cos Terme auf:

$e^{-i \frac{E}{\hbar} t} = \cos\left(-\frac{E}{\hbar} t\right) + i \cdot \sin\left(-\frac{E}{\hbar} t\right)$, d.h. wir können Eqn. 2-63 wie folgt umschreiben:

$$\langle \psi_1 | \psi(t) \rangle = \frac{1}{2} \left\{ \left[\cos\left(-\frac{E_I}{\hbar} t\right) + \cos\left(-\frac{E_{II}}{\hbar} t\right) \right] + i \cdot \left[\sin\left(-\frac{E_I}{\hbar} t\right) + \sin\left(-\frac{E_{II}}{\hbar} t\right) \right] \right\}$$

unter Ausnützung der Additionstheoreme für sin und cos kann man weiter umformen:

$$\text{Eqn. 2-65} \quad \langle \psi_1 | \psi(t) \rangle =$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \left\{ 2 \cdot \cos\left(-\frac{E_I - E_{II}}{2\hbar} t\right) \cdot \cos\left(-\frac{E_I + E_{II}}{2\hbar} t\right) + i \cdot 2 \cdot \cos\left(-\frac{E_I - E_{II}}{2\hbar} t\right) \cdot \sin\left(-\frac{E_I + E_{II}}{2\hbar} t\right) \right\} = \\ & \cos\left(-\frac{E_I - E_{II}}{2\hbar} t\right) \cdot \left\{ \cos\left(-\frac{E_I + E_{II}}{2\hbar} t\right) + i \cdot \sin\left(-\frac{E_I + E_{II}}{2\hbar} t\right) \right\} = \\ & \cos\left(-\frac{E_I - E_{II}}{2\hbar} t\right) \cdot e^{-i \frac{E_I + E_{II}}{2\hbar} t} \end{aligned}$$

Interessieren wir uns nun für die zeitliche Entwicklung der Antreffwahrscheinlichkeit $w_I(t)$ in Topf 1, so müssen wir $\langle \psi_1 | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) | \psi_1 \rangle$ bilden:

$$\text{Eqn. 2-66} \quad w_I(t) = \langle \psi_1 | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) | \psi_1 \rangle =$$

$$\left\{ \cos\left(-\frac{E_I - E_{II}}{2\hbar} t\right) \right\}^2 \cdot e^{-i\frac{E_I + E_{II}}{2\hbar} t} \cdot e^{+i\frac{E_I + E_{II}}{2\hbar} t} =$$

$$\left\{ \cos\left(-\frac{E_I - E_{II}}{2\hbar} t\right) \right\}^2 = \frac{1}{2} \left[1 + \cos\left(-\frac{E_I - E_{II}}{\hbar} t\right) \right]$$

Auch hier möchte ich es wieder Ihrem Geschick überlassen, analog dazu die Antreffwahrscheinlichkeit w_2 in Topf 2 auszurechnen. Dazu nun nur das Resultat:

$$\text{Eqn. 2-67} \quad w_2(t) = \langle \psi_2 | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) | \psi_2 \rangle = \frac{1}{2} \left[1 - \cos\left(-\frac{E_I - E_{II}}{\hbar} t\right) \right]$$

Richtigerweise ergänzen sich beide Wahrscheinlichkeiten auf „1“, da ja das Elektron in jedem Fall in einem der Töpfe zu finden sein muss.

Wie in der Folge vorgeführt, lässt sich das ganze Verhalten relativ gut im Rahmen einer animierten Computersimulation zeigen

Ganz offensichtlich oszillieren beide Wahrscheinlichkeiten periodisch mit einer Frequenz ν :

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \frac{E_I - E_{II}}{\hbar}$$

Eqn. 2-68

$$\Rightarrow \Delta E = |E_I - E_{II}| = h \cdot \nu$$

wobei ν eindeutig mit der Energiedifferenz der beiden zur Überlagerung kommenden stationären Zustände zusammenhängt.

Praxisbezug: Haben wir z.B. einen Übergang eines Elektrons von einem stationären Zustand höherer Energie in einen stationären Zustand niedrigerer Energie, so werden die Zwischenzustände durch eine Überlagerung dieser beiden stationären Zustände beschrieben. Diese Überlagerung führt zu einer Oszillation des Elektronenortes. Ein derart schwingendes Elektron stellt klassisch gesehen so etwas wie eine oszillierende Dipolantenne dar, welche somit eine elektromagnetische Welle der entsprechenden Frequenz abstrahlt. Auf diese Art ist das Elektron in der Lage, seine überschüssige Energie loszuwerden und in den niedriger energetischen Zustand überzugehen.

2.6 Die Rolle der Symmetrie in der Quantenphysik:

Im nun folgenden Kapitel möchte ich das Thema „Symmetrie“ nur insoweit anschnitten, als es bereits unmittelbar bei der Behandlung des gekoppelten Topfes im vorigen Kapitel zum Tragen gekommen ist. Es soll daher an dieser Stelle auf eine allgemeinere Behandlung dieser Problematik verzichtet werden.

Unterzieht man die Ergebnisse des gekoppelten Doppelpotentialtopfes einer näheren Betrachtung, so fällt auf, dass die einzigen stationären Zustände jene sind, bei denen das Elektron mit je 50% Wahrscheinlichkeit in Topf 1 oder Topf 2 anzutreffen ist.

$w_1 = \langle \psi_1 | \psi_I \rangle \langle \psi_I | \psi_1 \rangle$, wobei

$$\begin{aligned} \langle \psi_1 | \psi_I \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle \psi_1 | \psi_1 \rangle + \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} (1 + 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \Rightarrow \langle \psi_1 | \psi_I \rangle \langle \psi_I | \psi_1 \rangle &= |\langle \psi_1 | \psi_I \rangle|^2 = \frac{1}{2} \end{aligned}$$

genau so gilt:

$$\langle \psi_2 | \psi_I \rangle \langle \psi_I | \psi_2 \rangle = |\langle \psi_2 | \psi_I \rangle|^2 = \frac{1}{2}$$

Kritisch betrachtet, sind das die einzigen stationären Lösungen, bei der die Natur keinen der beiden Töpfe gegenüber dem anderen auszeichnet. - Es wäre ja auch völlig unverständlich, warum die Natur bei 2 wirklich ununterscheidbaren Töpfen einen davon irgendwie „bevorzugen“ sollte.

Im Nachhinein können wir dieses „Nebenresultat“ des vorigen Kapitels zu einem Grundprinzip erheben und verlangen, dass Änderungen am System, welche sich nur im Rahmen der gegebenen Symmetrie abspielen, physikalisch keine Relevanz haben sollen. Im konkreten Fall heißt das, wenn man beide identischen Töpfe vertauschen würde, so sollte sich physikalisch an unserer Lösung nichts ändern. Dies ist nur der Fall, wenn sich das Elektron zu gleichen Teilen in beiden Töpfen aufhält. - Ich möchte betonen, dass dieses Prinzip nur für die Betrachtung von stationären Zuständen gilt.

Stellt man dieses Prinzip an den Anfang aller Betrachtungen, so kann es beim Finden von stationären Lösungen äußerst hilfreich sein (besonders bei etwas komplexeren Systemen). Wir hätten also unser gekoppeltes Doppeltopfsystem demnach auch wie folgt aufziehen können:

Beide Töpfe sind völlig identisch und daher darf ein Vertauschen der Indizes bei $|\psi_1\rangle$ und $|\psi_2\rangle$, was einer Vertauschung der Potentialtöpfe gleichkommt, keinen Einfluss auf die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons haben. Damit ergibt sich zwangsläufig, dass die Beiträge von $|\psi_1\rangle$ und $|\psi_2\rangle$ zu den stationären Zuständen betragsmäßig gleich sein müssen. D.h. vor diesem Hintergrund ist die Lösung des Problems mit der Frage verbunden, auf wie viele Arten man $|\psi_1\rangle$ und $|\psi_2\rangle$ kombinieren kann, damit einerseits orthogonale Zustände herauskommen und andererseits gleichzeitig die Beiträge von $|\psi_1\rangle$ und $|\psi_2\rangle$ zum stationären Zustand gleich sind. Mit etwas Phantasie kommt man sehr bald darauf, dass dies nur auf zwei Arten erreicht werden kann, einmal mit der symmetrischen und einmal mit der antisymmetrischen Kombination, d.h.

$$\begin{aligned} \text{Eqn. 2.6-1} \quad |\psi_I\rangle &= a \cdot |\psi_1\rangle + a \cdot |\psi_2\rangle \\ |\psi_{II}\rangle &= a \cdot |\psi_1\rangle - a \cdot |\psi_2\rangle \end{aligned}$$

wobei wegen $\langle \psi_I | \psi_I \rangle = \langle \psi_{II} | \psi_{II} \rangle = 1 \quad \Rightarrow \quad a = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad \text{folgt.}$

Die Ausnützung der Symmetrieeigenschaften von physikalischen Systemen stellt eine ganz wichtige Basis für die Quantenphysik dar. Deshalb werden wir sie gleich im nachfolgenden Kapitel nutzbringend einsetzen.

2.7 Ein System von beliebig vielen gekoppelten identischen Potentialtöpfen:

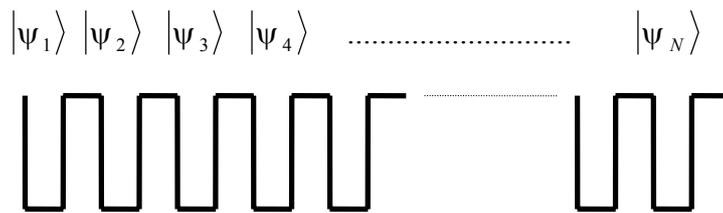


Abbildung 2.7-1: Schema eines Systems von N gekoppelten identischen Potentialtöpfen.

Wir gehen zunächst nach dem gleichen Schema vor wie beim Doppeltopf und definieren Basiszustände nach dem folgenden Prinzip: Befindet sich das Elektron in Topf 1 so sei es im Zustand $|\psi_1\rangle$, befindet es sich im Topf 2 so sei dies $|\psi_2\rangle$ usw.

Für den Fall völlig entkoppelter Töpfe können wir wieder annehmen, dass es einen stationären Zustand mit der Energie E_0 für das Elektron in einem solchen Topf gibt, unabhängig davon um welchen der Töpfe es sich handelt. Ein allgemeiner Zustand besteht nun wieder aus einer Überlagerung aus all diesen Zuständen:

$$\text{Eqn. 2.7-1} \quad |\Psi\rangle = \sum_{n=1}^N a_n |\psi_n\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ a_N \end{pmatrix}$$

wobei in der Vektorschreibweise der Spaltenvektor N Komponenten hat. Setzen wir wieder voraus, dass in den individuellen Töpfen die Eigenwertgleichung des Hamiltonoperators gilt, so sieht das wie folgt aus:

$$H \cdot |\psi_n\rangle = E_0 |\psi_n\rangle$$

Suchen wir die Matrixdarstellung des Hamiltonoperators in dieser Darstellung, so haben wir nach dem bekannten Schema die Matrixelemente zu bilden:

$$H_{ml} = \langle \psi_m | H | \psi_l \rangle$$

Völlige Entkopplung:

Betrachten wir abermals als ersten Schritt völlige Entkopplung, d.h. dass jede Änderung des Zustandes mit der Zeit ausgeschlossen ist, so erhalten wir folgendes:

$$\text{Eqn. 2.7-2} \quad H_{ml} = E_0 \langle \psi_m | \psi_l \rangle = E_0 \cdot \delta_{ml}$$

d.h. die Matrix schaut folgendermaßen aus:

$$\vec{H} = \begin{pmatrix} E_0 & 0 & \cdot & 0 \\ 0 & E_0 & 0 & \cdot \\ \cdot & 0 & E_0 & 0 \\ 0 & \cdot & 0 & E_0 \end{pmatrix}$$

wobei man sich die Matrix auf NxN ausgedehnt denken muss.

Geringe Kopplung:

Lässt man nun eine geringe Kopplung zwischen benachbarten Potentialtöpfen zu, so hat das Elektron eine nicht verschwindende Chance, unter der Wirkung der Zeit in den Nachbartopf zu gelangen. Formal heißt das, dass:

$$\text{Eqn. 2.7-3} \quad H_{ml} = \langle \psi_m | H | \psi_l \rangle = k > 0 \text{ für } m \neq l \text{ aber } |m - l| = 1, \text{ sonst soll Eqn. 2.7-2}$$

gelten

In Matrixform bedeutet das:

$$\text{Eqn. 2.7-4} \quad \vec{H} = \begin{pmatrix} E_0 & k & \cdot & 0 \\ k & E_0 & k & \cdot \\ \cdot & k & E_0 & k \\ 0 & \cdot & k & E_0 \end{pmatrix}$$

Da k nur benachbarte Töpfe koppeln soll, taucht es lediglich als Nebendiagonale zur Hauptdiagonalen auf. Es ist unschwer zu erkennen, dass auch für diesen Hamiltonoperator unsere Basiszustände $|\psi_n\rangle$ keine Eigenzustände mehr sind:

$$\vec{H} \cdot |\psi_n\rangle = \begin{pmatrix} E_0 & k & \cdot & 0 \\ k & E_0 & k & \cdot \\ \cdot & k & E_0 & k \\ 0 & \cdot & k & E_0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ k \\ E_0 \\ k \end{pmatrix}$$

wobei hier beispielsweise $n=3$ gewählt wurde - man muss sich alles auf N Komponenten erweitert denken !

Um die stationären Zustände zu finden, muss man daher die Eigenwertgleichung lösen:

$$\begin{aligned} \vec{H} \cdot |\psi_{stat}\rangle &= E \cdot |\psi_{stat}\rangle, & d.h.: \\ \text{Eqn. 2.7-5} \quad \Rightarrow & \begin{pmatrix} E_0 & k & \cdot & 0 \\ k & E_0 & k & \cdot \\ \cdot & k & E_0 & k \\ 0 & \cdot & k & E_0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_1^{stat} \\ a_2^{stat} \\ \cdot \\ a_N^{stat} \end{pmatrix} = E \cdot \begin{pmatrix} a_1^{stat} \\ a_2^{stat} \\ \cdot \\ a_N^{stat} \end{pmatrix} \\ \Rightarrow & \begin{pmatrix} (E_0 - E) & k & \cdot & 0 \\ k & (E_0 - E) & k & \cdot \\ \cdot & k & (E_0 - E) & k \\ 0 & \cdot & k & (E_0 - E) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_1^{stat} \\ a_2^{stat} \\ \cdot \\ a_N^{stat} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \cdot \\ 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Die Problematik führt somit wieder auf ein homogenes Gleichungssystem, welches gelöst werden muss. Um nicht-triviale Lösungen zu bekommen, muss man zuvor wieder die Determinante der Koeffizientenmatrix Null-setzen, womit wir in der Folge eine Anzahl von Lösungen für E erhalten. Genaugenommen bekommt man immer genau so viele Lösungen für E wie der Anzahl der Gleichungen entspricht, was wiederum der Anzahl der gekoppelten Töpfe entspricht. Zu jedem E erhält man nun als Lösung des

Gleichungssystems ein Set von Koeffizienten a_n^{stat} , die in Ihrer Gesamtheit als Spaltenvektor einen stationären Zustand darstellen. Somit erhält man insgesamt N stationäre Zustände mit zugehörigen Energieeigenwerten. Während die Lösung des Gleichungssystems für die 2x2 Matrix beim Doppelpotf noch relativ einfach war, ist dies für eine NxN Matrix „zu Fuß“ nicht mehr unbedingt so einfach zu schaffen - dafür bieten sich Standard PC-Programme an. Möchte man aber unbedingt „zu Fuß“ eine Lösung finden, so müssen wir uns die weiter oben erwähnten Symmetrieeigenschaften unseres Systems zu Nutze machen.

2.7.1 Aufsuchen der Stationären Zustände unter Ausnutzung der Symmetrieeigenschaften:

Der beim letzten mal skizzierte formale Lösungsweg über eine lineares, homogenes Gleichungssystem ist für eine analytische Lösung nicht sehr zweckmäßig. Deshalb wollen wir uns das bereits unter 2.6 angesprochene Prinzip der „Invarianz“ unter Symmetrieoperationen ausnützen.

Kurz zusammengefasst bedeutet es für unser System folgendes: Alle Potentialtöpfe samt deren Kopplung untereinander sind identisch. Das bedeutet, dass sich bei z.B. paarweisem Vertauschen beliebiger Töpfe die Antreffwahrscheinlichkeit für das Elektron in den betroffenen Töpfen nicht ändern darf. Da dies für beliebige Paare von Töpfen gilt, kann das nur bedeuten, dass die Antreffwahrscheinlichkeit für das Elektron in allen Töpfen gleich sein muss. Die Antreffwahrscheinlichkeit in einem bestimmten Topf n ist bekanntlich das Betragsquadrat des betreffenden Darstellungskoeffizienten a_n :

$$w_n = a_n^* \cdot a_n$$

Wegen der Vollständigkeit der Basis haben wir grundsätzlich

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^N w_n &= \sum_{n=1}^N a_n^* \cdot a_n = 1 \\ \Rightarrow N \cdot a_n^* \cdot a_n &= 1 \end{aligned}$$

So dass aus obiger Argumentation letztlich folgt:

$$\begin{aligned} \text{Eqn. 2.7-6} \quad a_n^* \cdot a_n &= \frac{1}{N} \quad \text{für alle} \quad n = 1 \dots N \\ \Rightarrow |a_n| &= \frac{1}{\sqrt{N}} \end{aligned}$$

Wir können also vorweg schon feststellen, dass unsere stationären Zustände $|\psi_m^s\rangle$ die folgende Form haben werden:

$$|\psi_m^s\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \cdot \begin{pmatrix} u_{1,m} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ u_{N,m} \end{pmatrix} \quad \text{wobei } |u_{n,m}| = 1 \quad \text{für } n, m = 1 \dots N$$

n bezeichnet den Basiszustand und m die Nummer des entsprechenden stationären Zustandes. Wie wir bereits etwas früher festgestellt haben, bilden N gekoppelte Potentialtöpfe wiederum N stationäre Zustände, deshalb muss man vorweg einen Index für die Bezeichnung des betrachteten stationären Zustandes m vorsehen, welcher dann ebenfalls von $m = 1 \dots N$ läuft.

Die Koeffizienten $u_{n,m}$ können sich im allgemeinen nur noch durch einen Phasenfaktor unterscheiden und müssen daher folgende Form haben:

$$\text{Eqn. 2.7-7} \quad u_{n,m} = e^{-i \cdot \varphi_{n,m}}$$

Um nun weitere Aussagen über die Eigenschaften dieses Phasenfaktors treffen zu können, wollen wir uns eine spezielle Symmetrioperation unseres Systems herausgreifen, nämlich die sogenannte Translationssymmetrie: Was das bedeutet, soll im Folgenden noch klar werden. Dazu betrachten wir zwei beliebige benachbarte Potentialtöpfe und bilden zunächst folgenden Quotienten:

$$\frac{u_{n+1,m}}{u_{n,m}} = e^{-i \cdot \Delta \varphi_{n,m}}$$

Ganz allgemein muss der Quotient wieder den Betrag „1“ haben und konsequenterweise im komplexen Exponenten eine Art Phasendifferenz beinhalten. D.h., wir können auch folgendes schreiben:

$$u_{n+1,m} = u_{n,m} \cdot e^{-i \cdot \Delta\varphi_{n,m}}$$

Da aber in unserem Fall die Nummerierung mit n völlig willkürlich ist und es bei identischen Potentialtöpfen ja völlig egal sein muss, wo ich mit der Nummerierung beginne, muss es letztlich egal sein, wie groß n tatsächlich ist. Mit anderen Worten: $\Delta\varphi_{n,m}$ darf eigentlich gar nicht von n abhängen ! Somit muss der Index n bei $\Delta\varphi$ weggelassen werden:

$$u_{n+1,m} = u_{n,m} \cdot e^{-i \cdot \Delta\varphi_m} \quad \text{wobei } \Delta\varphi \text{ eben nur mehr von } m \text{ abhängen darf.}$$

Dies bedeutet, dass für einen bestimmten stationären Zustand (bestimmtes m) $\Delta\varphi$ eine Konstante sein muss. Für die Verknüpfung beliebiger $u_{n,m}$ resultiert daher folgendes:

$$u_{n+j,m} = u_{n,m} \cdot \left[e^{-i \cdot \Delta\varphi_m} \right]^j = u_{n,m} \cdot e^{-i \cdot \Delta\varphi_m \cdot j}$$

Beginnen wir daher bei der Nummerierung der $u_{n,m}$ zweckmäßigerweise bei $n=0$, so können wir daraus alle anderen $u_{n,m}$ wie folgt berechnen:

$$\text{Eqn. 2.7-8} \quad u_{n,m} = u_{0,m} \cdot e^{-i \cdot \Delta\varphi_m \cdot n}$$

Ohne Beschränkung der Allgemeinheit können wir der Einfachheit halber $u_{0,m}$ als rein reell annehmen. Dieser Festlegung entspricht nämlich formal einem Herausheben eines gemeinsamen und daher physikalisch nicht relevanten Phasenfaktors aus allen Koeffizienten, wodurch die relative Phasenlage zwischen den Koeffizienten unbeeinflusst bleibt.

$$\text{Eqn. 2.7-9} \quad u_{0,m} = 1 \quad \text{so dass letztlich folgt: } u_{n,m} = e^{-i \cdot \Delta\varphi_m \cdot n}$$

Mit dieser Festlegung können wir somit formal einen kompletten Satz von Darstellungskoeffizienten $a_{n,m}$ ganz allgemein für den m -ten stationären Zustand wie folgt schreiben:

$$\text{Eqn. 2.7-10} \quad a_{n,m} = \frac{1}{\sqrt{N}} \cdot e^{-i \cdot \Delta\phi_m \cdot n}$$

Bevor wir nun fortfahren, möchte ich einen Begriff einführen, der in der Folge eine sehr anschauliche Interpretation der Resultate erlauben wird.

2.7.1.1 Die „Ortsdarstellung“:

Wie Sie sich erinnern können, bezieht sich die Wahl unserer Basiszustände auf die Möglichkeit, dass sich das Elektron in verschiedenen Töpfen aufhalten kann. Mit $|\psi_n\rangle$ haben wir den Zustand eines Elektrons bezeichnet, dass sich im Topf n befindet. Diese $|\psi_n\rangle$ sind, wie wir wissen, aber keine stationären Zustände ! Wir haben aber bereits herausgefunden, wie aus den $|\psi_n\rangle$ mit den Überlagerungskoeffizienten a_n man stationäre Zustände aufbauen kann. Das Resultat ist in Eqn. 2.7-10 gegeben. Da also der Index n einen bestimmten Topf und somit eigentlich einen bestimmten Aufenthaltsort des Elektrons bezeichnet, nennt man konsequenterweise diese spezielle Art der Darstellung in Eqn. 2.7-10 auch Ortsdarstellung.

Um dies zu verdeutlichen, können wir dazu übergehen, auch tatsächlich einen Ort x_n als Variable an Stelle des Index n in unsere Darstellungsfunktion einzufügen. Dazu müssen wir aber auch den Ausdruck $\Delta\phi_m \cdot n$ anders auffassen und ihn entsprechend umschreiben:

$$x_n = \Delta x \cdot n$$

$$\Delta\phi_m \cdot n = k_m \cdot \Delta x \cdot n$$

$$\text{Eqn. 2.7-11} \quad a_m(x_n) = \frac{1}{\sqrt{N}} \cdot e^{-i \cdot k_m \cdot x_n}$$

Δx ist demnach der Abstand zwischen zwei benachbarten Potentialtöpfen (z.B. Mitte-Mitte), k_m ist innerhalb eines Satzes von Darstellungskoeffizienten eine Konstante, die schlimmstenfalls nur für verschiedenen stationäre Zustände verschieden sein kann - dies deuten wir mit dem Index m an. Es sollte dabei keine prinzipielle Schwierigkeit bedeuten, wenn wir an dieser Stelle nur diskrete, d.h. nur bestimmte x -Werte zulassen ($x = x_n$). Durch dieses, zunächst rein formale Umschreiben von Eqn. 2.7-10 wird es möglich, die Gesamtheit aller Darstellungskoeffizienten als räumlichen „Wellenvorgang“ zu interpretieren. Wir wollen uns in der Folge noch um die Zeitabhängigkeit kümmern: Da wir voraussetzungsgemäß stationäre Zustände beschreiben, sollte die Zeitabhängigkeit

durch einfaches Dazuschreiben unserer bekannten oszillierenden exp-Funktion zu erledigen sein.

$$\text{Eqn. 2.7-12} \quad a_m(x_n, t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \cdot e^{-i \cdot k_m \cdot x_n} \cdot e^{-i \cdot \frac{E_m}{\hbar} \cdot t}$$

Man muss natürlich im allgemeinen damit rechnen, dass auch die Energie E für die N verschiedenen stationären Zustände $|\psi_m^s\rangle$ verschieden sein wird, was durch den Index m in E_m ausgedrückt werden soll.

Was wir bisher gemacht haben:

Wir haben durch allgemeine Symmetrieüberlegungen gefunden, dass für ein System von identischen, gekoppelten Potentialtöpfen die allgemeine Form von stationären Zuständen, inklusive Zeitabhängigkeit, entsprechend Eqn. 2.7-12 aussehen muss. Durch die Einführung des Ortes x_n an Stelle des Index n ist es uns möglich, Eqn. 2.7-12 als Wellenvorgang zu interpretieren. In diesem Zusammenhang bekommt der durch unsere formalen Betrachtungen auftauchende Faktor k_m im Exponenten die Bedeutung einer Wellenzahl (vergleiche mit der mathematischen Form einer klassischen Welle). In wie weit dieser vorerst nur rein formal herbeigeführten Übereinstimmung auch „physikalisches Leben eingehaucht“ werden kann, muss sich nun noch weisen !

Zu diesem Zweck erinnern wir uns, dass wir zum Auffinden der stationären Zustände eigentlich die Eigenwertgleichung hätten lösen müssen. Aus Symmetrieüberlegungen heraus ist es uns nun offenbar gelungen, uns um dieses Problem herum zu schwindeln. Was uns aber nicht erspart bleibt, ist es, uns wenigstens im Nachhinein durch Einsetzen davon zu überzeugen, dass Eqn. 2.7-11 auch tatsächlich eine Lösung der Eigenwertgleichung darstellt. Bei dieser Gelegenheit wird sich dann auch die Bedeutung von k_m herausstellen müssen. Nehmen wir uns also die Eigenwertgleichung her

$$\begin{pmatrix} E_0 & c & \cdot & 0 \\ c & E_0 & c & \cdot \\ \cdot & c & E_0 & c \\ 0 & \cdot & c & E_0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_{1,m} \\ a_{2,m} \\ \cdot \\ a_{N,m} \end{pmatrix} = E_m \cdot \begin{pmatrix} a_{1,m} \\ a_{2,m} \\ \cdot \\ a_{N,m} \end{pmatrix}$$

und setzen unsere gefundenen stationären Zustände $a_m(x_n) = \frac{1}{\sqrt{N}} \cdot e^{-i \cdot k_m \cdot x_n}$

ein. Der Index m bezeichnet eigentlich nur die Nummer des soeben betrachteten stationären Zustandes und hat mit der Matrixoperation selbst eigentlich nichts zu tun. Das hochgestellte „stat“ in der Version von Seite 76 habe ich hier aus Bequemlichkeit weggelassen - wir wissen ohnehin, dass wir uns hier mit stationären Zuständen befassen und brauchen es deshalb an dieser Stelle nicht unbedingt explizit herausstreichen.

Leider hat sich nun ein kleiner Konflikt in der Bezeichnungsweise ergeben: Ich hatte ursprünglich die Kopplungsmatrixelemente mit k bezeichnet. Da ich nun die Wellenzahl mit k bezeichnen möchte, bezeichne ich ab nun die Kopplungsmatrixelemente mit c (was zumindest mit dem englischen Ausdruck „coupling“ assoziiert werden kann).

Damit wir aber mit Matrixelementen arbeiten können, müssen wir uns der Indexschreibweise bedienen, was aber nach unserer Definition ohnehin nichts anderes bedeutet als:

$$a_{n,m} = a_m(x_n), \text{ wobei } x_n = \Delta x \cdot n$$

n bezeichnet den Ort und m jenen stationären Zustand, der gerade betrachtet wird, d.h. dass m mit der Matrixmultiplikation ohnehin nichts zu tun hat.

$$\text{Eqn. 2.7-13} \quad a_{n,m} = \frac{1}{\sqrt{N}} \cdot \exp(-i \cdot k_m \cdot \Delta x \cdot n)$$

Führt man nun laut obiger Eigenwertgleichung für ein beliebiges Element n des Spaltenvektors die Multiplikation aus (= n -te Zeile der Matrix mal Spaltenvektor), so erhält man folgendes:

$$a_{n-1,m} \cdot c + a_{n,m} \cdot E_0 + a_{n+1,m} \cdot c = E_m \cdot a_{n,m}$$

Alle anderen Summenglieder sind „0“, weil die Matrix nur in der Haupt- und in den beiden Nebendiagonalen von „0“ verschiedene Elemente enthält. Wir setzen nun Eqn. 2.7-13 ein und erhalten somit :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{N}} \left[c \cdot \exp(-i \cdot k_m \cdot \Delta x \cdot (n-1)) + E_0 \cdot \exp(-i \cdot k_m \cdot \Delta x \cdot n) + c \cdot \exp(-i \cdot k_m \cdot \Delta x \cdot (n+1)) \right] = \\ = E_m \cdot \frac{1}{\sqrt{N}} \cdot \exp(-i \cdot k_m \cdot \Delta x \cdot n) \end{aligned}$$

Wir können aus dem linken Ausdruck $\frac{1}{\sqrt{N}} \cdot \exp(-i \cdot k_m \cdot \Delta x \cdot n)$ herausheben und mit dem entsprechenden Teil auf der rechten Seite kürzen, so dass folgendes bleibt:

$$\text{Eqn. 2.7-14} \quad \left[c \cdot \exp(-i \cdot k_m \cdot \Delta x) + E_0 + c \cdot \exp(+i \cdot k_m \cdot \Delta x) \right] = E_m$$

Wir können die Terme umgruppieren und neu zusammenfassen:

$$E_m = E_0 + c \cdot \left[\exp(-i \cdot k_m \cdot \Delta x) + \exp(+i \cdot k_m \cdot \Delta x) \right]$$

Die exp-Funktionen können wir, wie schon früher einmal getan, in die sin- und cos-Anteile zerlegen und die entsprechenden Anteile neu zusammenfassen:

$$\begin{aligned} \text{Eqn. 2.7-15} \quad E_m = E_0 + c \cdot \left[\cos(k_m \cdot \Delta x) + \cos(-k_m \cdot \Delta x) \right] + \\ i \cdot \left[\sin(k_m \cdot \Delta x) + \sin(-k_m \cdot \Delta x) \right] = \\ E_0 + 2c \cdot \cos(k_m \cdot \Delta x) \end{aligned}$$

Der Imaginärteil hebt sich weg und wir erhalten somit eine Funktion, die jedem k-Wert einen Energiewert zuweist, wobei

$$E^{\max} = E_0 + 2c$$

$$E^{\min} = E_0 - 2c$$

D.h. wir erhalten bei N gekoppelten Töpfen N Energiewerte, welche sich als eine Art „Energieband“ im Intervall $E_0 + 2c$ und $E_0 - 2c$ anordnen. Erinnern Sie sich, dass wir für den Fall von 2 Töpfen ein ähnliches Ergebnis hatten, nur war die Aufspaltung der 2 Niveaus $\pm c$. Dass wir nun $\pm 2c$ erhalten ist nicht weiter verwunderlich, da der betrachtete Topf nun nach zwei Seiten koppelt und wegen der Ununterscheidbarkeit der beiden Nachbartöpfe der doppelte Effekt durch die Kopplung auftritt. Offensichtlich schieben sich alle weiteren Energieniveaus einfach in dieses Intervall. Bei geringer Kopplung können wir daher ein schmales Energieband erwarten, bei starker Kopplung ein breites. Das führt

für die weitere Praxis zur wichtigen Erkenntnis, dass es zur Abschätzung der Breite eines Energiebandes in einem Kristall ausreicht, nur den Effekt der Kopplung benachbarter Atome zu berechnen, was eine wichtige Reduktion des Aufwandes bedeutet.

2.7.1.2 Verhalten in der Nähe des Energiebandminimums:

In unserem Modell steckt aber noch viel mehr. Um das zu zeigen, betrachten wir in der Folge die Situation in der Nähe des „Bandminimums“. D.h. wir machen eine Variablentransformation derart, dass wir k_m ersetzen durch (k_0+k) , wobei k dann von der Position des Minimum aus gezählt werden soll. Wir lassen in der Folge auch gleich den Index m weg, da wir ja k selbst für die Bezeichnung des damit verbundenen stationären Zustandes verwenden können (es geht ja nur um die Zuordnung eines bestimmten E -Wertes zu einem bestimmten k - Wert !). Um die Existenz der Zuordnung zwischen k und E zu verdeutlichen, schreiben wir k allerdings nicht als Index für E sondern gleich als Funktionsargument $E(k)$. Die Funktion von Eqn. 2.7-15 kann man somit auch so schreiben, wobei nun das Minimum durch $k=0$ gegeben sein soll:

$$\text{Eqn. 2.7-16} \quad E(k) = E_0 + 2c \cdot \cos[(k_0 + k) \cdot \Delta x]$$

wobei $E(k = 0) = E_0 - 2c$ gelten soll.

Daraus kann man schließen dass man $k_0 \cdot \Delta x = \pi$, bzw. $k_0 = \frac{\pi}{\Delta x}$ setzen muss. Es ist leicht nachzuvollziehen, dass wir mit dieser Umformung aus Eqn. 2.7-16 das Folgende erhalten:

$$\text{Eqn. 2.7-17} \quad E(k) = E_0 - 2c \cdot \cos(k \cdot \Delta x)$$

Dabei ist nun k vom Minimum des Energiebandes aus zu zählen. Beschränken wir uns nun auf die Umgebung des Minimums, d.h. auf ausreichend kleine Werte für k , so dass $k \cdot \Delta x \ll 1$ gilt, so können wir die cos-Funktion nach $k \cdot \Delta x$ bis zur 2. Ordnung entwickeln:

$$\cos(k \cdot \Delta x) \cong 1 - \frac{(k \cdot \Delta x)^2}{2} = 1 - k^2 \cdot \frac{\Delta x^2}{2}$$

Setzen wir dies in Eqn. 2.7-17 ein, so ergibt sich folgender Zusammenhang für die Umgebung des Bandminimums:

$$\text{Eqn. 2.7-18} \quad E(k) \cong E_0 - 2c + c \cdot \Delta x^2 \cdot k^2$$

Mit Worten ausgedrückt heißt das, dass die Energie quadratisch von k abhängt. Nimmt man im allgemeinen Fall an, dass die Anzahl der gekoppelten Töpfe im Prinzip nicht beschränkt ist (kann auch unendliche „Kette“ von Töpfen sein), so kann auch k im Prinzip beliebige Werte annehmen, solange $k \cdot \Delta x \ll 1$ erfüllt ist. Betrachtet man in Analogie zu klassischen Wellen die mit k verbundene Wellenlänge $\lambda = 2\pi / k$, so bedeutet obige Bedingung, dass λ ausreichend groß gegen den Abstand der Töpfe sein muss ($\lambda \gg \Delta x$) (die Forderung $k \cdot \Delta x \ll 1$ repräsentiert genau diese Bedingung). Denkt man also tatsächlich an eine unendlich ausgedehnte Kette von gekoppelten Potentialtöpfen, so ist ein Elektron in so einem System auch tatsächlich als „frei“ zu betrachten, da es sich ja in jedem dieser Töpfe aufhalten kann. Bevor wir das Ergebnis noch weiter interpretieren, wollen wir noch weitere Umformungen durchführen.

Um auf unser ursprüngliches k_m aus z.B. Eqn. 2.7-13 zurückzukommen, so haben wir dieses durch (k_0+k) ersetzt. Berücksichtigen wir dies in Eqn. 2.7-13, so erhalten wir $a_n(k)$, wobei k die Rolle des Index m übernommen hat:

$$\begin{aligned} \text{Eqn. 2.7-19} \quad a_n(k) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \cdot \exp[-i \cdot (k_0 + k) \cdot \Delta x \cdot n] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \cdot \exp(-i \cdot k_0 \cdot \Delta x \cdot n) \cdot \exp(-i \cdot k \cdot \Delta x \cdot n) \end{aligned}$$

Da $k_0 \cdot \Delta x = \pi$ gilt, ergibt sich die erste exp-Funktion zu

$$\exp(-i \cdot k_0 \cdot \Delta x \cdot n) = \exp(-i \cdot \pi \cdot n)$$

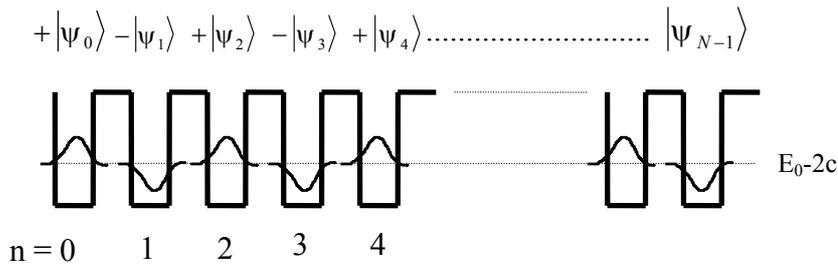
Legen wir den Koordinatenursprung an den Beginn der Topfkette zu $n=0$, so markiert $\Delta x \cdot n$ im Grunde die Position des n -ten Topfes auf der x-Achse. Daher können wir eigentlich etwas allgemeiner für $\Delta x \cdot n = x_n$ schreiben. Alles zusammen führt dann zu folgender Gleichung für $a_n(k)$:

$$\text{Eqn. 2.7-20} \quad a_n(k) = \frac{1}{\sqrt{N}} \cdot \exp(-i \cdot \pi \cdot n) \cdot \exp(-i \cdot k \cdot x_n) = \frac{(-1)^n}{\sqrt{N}} \cdot \exp(-i \cdot k \cdot x_n)$$

Der Faktor $\exp(-i \cdot \pi \cdot n)$ führt einfach zu $+1$, wenn n geradzahlig ist und zu -1 wenn n ungeradzahlig ist. Daher kann man dieses Sachverhalt auch durch $(-1)^n$ darstellen. Für den Spezialfall $k=0$ sieht der stationäre Zustand also wie folgt aus:

$$\text{Eqn. 2.7-21} \quad a_n(k=0) = \frac{(-1)^n}{\sqrt{N}}$$

Veranschaulichen wir uns dies in einer Skizze, so sieht dies wie folgt aus:



Die Situation für den Spezialfall $k=0$ erinnert stark an die anti-symmetrische Lösung des Doppelpotfes - auch beim Doppelpotf war die anti-symmetrische Lösung jene mit der niedrigsten Energie.

2.7.1.3 Verhalten des Energiebandes in der Nähe des Maximums:

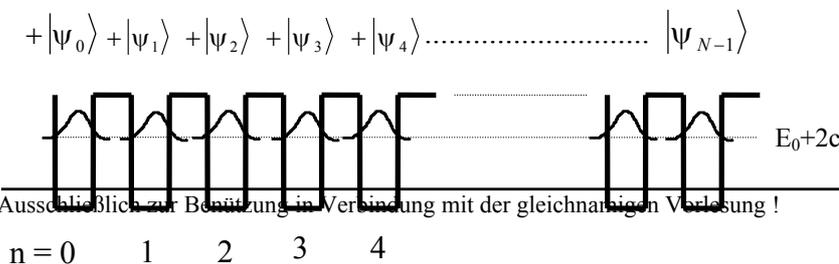
Sehen wir uns nun im Vergleich dazu das Energieband in der Nähe des Maximums E^{max} an. Laut Eqn. 2.7-16 tritt dies mit $k_0=0$ bei $k=0$ auf. Ich überlasse es hier wieder Ihrem Geschick, die Entwicklung in der Nähe des Maximums analog zum Minimum durchzuführen und gebe nur das Resultat wieder:

$$\text{Eqn. 2.7-22} \quad E(k) \cong E_0 + 2c - c \cdot \Delta x^2 \cdot k^2$$

Der k^2 - Beitrag ist somit negativ und startet bei E_0+2c . Schauen wir uns nun wieder $a_n(k)$ an, so erhalten wir:

$$\text{Eqn. 2.7-23} \quad a_n(k) = \frac{1}{\sqrt{N}} \cdot \exp(-i \cdot k \cdot x_n)$$

Für den Spezialfall $k=0$ veranschaulicht, sieht dies wie folgt aus:



2.7.1.4 Die „Wellenfunktion“:

Bevor es weitergeht, möchte ich noch einige Bemerkungen zur Schreibweise machen. Die abstrakte (darstellungsunabhängige) Schreibweise sieht symbolisch einen „ket-Vektor“ $|\psi^s(k)\rangle$ vor, wobei das s nur als Erinnerung für „stationär“ steht. Unsere allgemeine Darstellungsvorschrift lautet bekanntlich:

$$|\psi^s(k)\rangle = \sum_{n=0}^{N-1} a_n(k) \cdot |\psi_n\rangle = \begin{pmatrix} a_0(k) \\ \vdots \\ a_{N-1}(k) \end{pmatrix}$$

Die $|\psi_n\rangle$ sind Basiszustände, in denen sich das Elektron in einem bestimmten Topf n befindet. In obiger Formel übernimmt k gleichzeitig die Aufgabe den stationären Zustand zu bezeichnen (mit einem bestimmten Wert von k ist automatisch ein bestimmter stationärer Zustand verknüpft, so dass man sich zur Bezeichnung, bzw. Nummerierung der stationären Zustände einen eigenen Index sparen kann - sie erinnern sich: wir haben aus diesem Grund den Index m in Eqn. 2.7-16 „eingespart“). Wir haben uns auch schon des öfteren davon überzeugt, dass man die Darstellungskoeffizienten dadurch erhalten kann, indem man die entsprechenden Projektionsoperatoren $|\psi_n\rangle\langle\psi_n|$ der zugehörigen Basiszustände auf den abstrakten Zustand $|\psi\rangle$, den man darstellen will, anwendet. Für unsere stationären Zustände bedeutet das:

$$\begin{aligned} |\psi_n\rangle\langle\psi_n||\psi^s(k)\rangle &= |\psi_n\rangle\langle\psi_n|\sum_{j=0}^{N-1} a_j(k) \cdot |\psi_j\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} a_j(k) \cdot |\psi_n\rangle\langle\psi_n||\psi_j\rangle = \\ & \sum_{j=0}^{N-1} a_j(k) \cdot |\psi_n\rangle \cdot \delta_{jn} = a_n(k) \cdot |\psi_n\rangle \end{aligned}$$

Was letztlich bedeutet dass, wie bereits bekannt $\langle\psi_n||\psi^s(k)\rangle = a_n(k)$

D.h., um zu unserer verallgemeinerten „bra-ket“- Schreibweise zurückzukehren, können wir unsere stationären Zustände von Eqn. 2.7-20 auch wie folgt schreiben:

$$\text{Eqn. 2.7-24} \quad a_n(k) = \langle \psi_n | \psi^s(k) \rangle = \frac{(-1)^n}{\sqrt{N}} \cdot \exp(-i \cdot k \cdot x_n)$$

wobei wir noch den Vorfaktor $\frac{(-1)^n}{\sqrt{N}}$ der Einfachheit halber durch $a_n(k=0)$, oder kurz $a_n(0)$ repräsentieren können. Wir erhalten somit:

$$\text{Eqn. 2.7-25} \quad a_n(k) = a_n(0) \cdot \exp(-i \cdot k \cdot x_n)$$

Da entsprechend unserer Ortsdarstellung mit dem Index n ein bestimmter Aufenthaltsort des Elektrons verbunden ist (Sie erinnern sich: $x_n = n \cdot \Delta x$), kann man gleich dazu übergehen, die Basiszustände $|\psi_n\rangle$ direkt mit dem zugehörigen Ort x_n zu bezeichnen:

$$\text{Eqn. 2.7-26} \quad |x_n\rangle \equiv |\psi_n\rangle$$

Durch diese Schreibweise ist auch für Jedermann auf den ersten Blick erkennbar, dass man es mit der Ortsdarstellung zu tun hat, d.h. dass man Basiszustände verwendet, die dem Elektron einen bestimmten Ort (Topf) zuweisen. Dadurch wird aus Eqn. 2.7-24

$$\langle x_n | \psi^s(k) \rangle = \langle x_n | \psi^s(k=0) \rangle \cdot \exp(-i \cdot k \cdot x_n)$$

Was wir nun vor uns haben, ist offensichtlich eine skalare (weil geschlossene Klammer) Funktion des Ortes, so dass man mit der Vereinfachung sogar noch einen Schritt weitergehen kann und die geschlossenen Klammer gleich als Funktion schreibt:

$$\text{Eqn. 2.7-27} \quad \langle x_n | \psi^s(k) \rangle \equiv \psi(x_n, k)$$

Es ist zwar so, dass auf unser spezielles Problem angepasst, nur bestimmte, d.h. diskrete x -Werte gemeint sind. Die mathematische Funktion aber, die die Verknüpfung mit diesen x -Werten herstellt, ist vom mathematischen Standpunkt aus eigentlich schon eine stetige Funktion, in die man halt im konkreten Fall nur bestimmte Werte einsetzt. Charakterisiert man die Funktion selbst, so hat der Index n bei x eigentlich keinen Sinn - man schreibt also allgemein für einen beliebigen abstrakten Zustand $|\psi\rangle$ in der Ortsdarstellung

$$\psi(x) \equiv \langle x | \psi \rangle$$

Sind beispielsweise nur bestimmte Orte möglich, dann indiziert man die Orte (wie in unserem Beispiel) - was aber nichts daran ändert, dass $\psi(x)$ selbst eine stetige Funktion sein darf.

Die Funktion $\psi(x)$ bezeichnet man nun ganz allgemein als Wellenfunktion.

Als kleinen „Merksatz“ könnten wir also festhalten, dass die Wellenfunktion $\psi(x)$ für einen abstrakten quantenmechanischen Zustand $|\psi\rangle$ die Darstellungskoeffizienten für die Ortsdarstellung liefert, d.h., dass sie die Darstellungskoeffizienten für die Ortsbasiszustände $|x\rangle$ angibt. In einem konkreten Anwendungsbeispiel muss man daher gegebenenfalls geeignet „diskretisieren“.

2.7.1.5 Zeitliche Entwicklung:

Bisher haben wir uns beim Aufsuchen der stationären Zustände in erster Linie mit der Ortsabhängigkeit beschäftigt. Es war vorerst nicht notwendig, uns mit der Zeitabhängigkeit auseinander zu setzen - wir wissen, dass wir die Zeitabhängigkeit, wie gehabt, zu unseren stationären Zuständen einfach dazumultiplizieren können. Wir wissen allerdings auch schon von früher, dass Zustände, welche die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons nicht gleichmäßig auf alle Töpfe aufteilen, keine stationären Zustände mehr sein können. So sind auch unsere Basiszustände der Ortsdarstellung $|\psi_n\rangle$ aufgrund der Kopplung zwischen den Potentialtöpfen keine stationäre Zustände mehr. Wie schon beim Doppeltopf gehen wir daher dazu über, nun die stationären Zustände als Basiszustände zu benutzen, da wir für diese die Zeitabhängigkeit bereits kennen. D.h., wir stellen uns als Ausgangssituation eine durch Überlagerung von stationären Zuständen zum Zeitpunkt $t=0$ ungleichmäßige Elektronenverteilung her und sehen uns in der Folge an, wie sie sich zeitlich entwickelt. Im Falle unseres Vielfachtopfes gibt es im Vergleich zum Doppeltopf natürlich eine ungeheure Anzahl von Möglichkeiten, eine Ungleichverteilung als Startbedingung für die zeitlichen Entwicklung anzunehmen. Ich werde mich als Einstieg zunächst die am einfachsten beschreibbare Situation hernehmen und zwar jene, bei der nur zwei der N möglichen stationären Zustände zur Überlagerung kommen.

Wir überlagern also zwei verschiedene stationäre Zustände mit unterschiedlichem k , wobei sich die beiden k -Werte nicht zu sehr unterscheiden sollten, was allerdings erst weiter hinten in der Rechnung zum Tragen kommen wird. Die Wellenfunktion dieser beiden Zustände samt Zeitabhängigkeit sieht nun aus wie folgt:

$$\text{Eqn. 2.7-28} \quad \psi(x, k, t) = \langle x | \psi(k, t) \rangle = \psi(x=0, t=0) \cdot \exp(-i \cdot k \cdot x) \cdot \exp\left(-i \cdot \frac{E(k)}{\hbar} \cdot t\right)$$

Was die Schreibweise betrifft, so ist es üblich, alle Variablen und Parameter als Argumente für die Wellenfunktion hineinzuschreiben: dass neben x auch die Zeit t hinein muss, ist wohl klar. Was allerdings das k betrifft, so ist dieses für die Wellenfunktion auf jeden Fall ein konstanter Parameter und könnte somit auch als Index verwendet werden, der einfach den stationären Zustand benennt. Es gilt aber stillschweigend als vereinbart, dass wenn k dennoch dazugeschrieben wird, k auch einen wohl definierten Wert besitzt. D.h. dass es sich beim betreffenden, durch die Wellenfunktion ausgedrückten Zustand um eine harmonische Welle handeln muss. In Gegensatz dazu hat ein „ x -beliebiges“ Wellenpaket keinen bestimmten k -Wert und deshalb würde man in so einem Fall k überhaupt nicht in der Argumentenliste angeben. Man gibt also neben x und t grundsätzlich nur solche Parameter an, die im betreffenden Zustand auch einen wohl definierten („scharfen“) Wert besitzen.

Die Überlagerung unserer beiden stationären Zustände zur Zeit $t=0$ ergibt in der Ortsdarstellung:

$$\psi(x, t=0) = \langle x | \psi(t=0) \rangle = \psi(x, k_1, t=0) + \psi(x, k_2, t=0)$$

Lässt man nun die Zeit laufen, so darf man zu den stationären Zuständen die bekannte Zeitabhängigkeit einfach dazuschreiben:

$$\psi(x, t) = \psi(x, k_1, t=0) \cdot \exp\left(-i \cdot \frac{E(k_1)}{\hbar} \cdot t\right) + \psi(x, k_2, t=0) \cdot \exp\left(-i \cdot \frac{E(k_2)}{\hbar} \cdot t\right)$$

so dass man letztlich insgesamt erhält:

$$\begin{aligned} \psi(x, t) = & \psi(x=0, t=0) \cdot \exp(-i \cdot k_1 \cdot x) \cdot \exp\left(-i \cdot \frac{E(k_1)}{\hbar} \cdot t\right) + \\ & + \psi(x=0, t=0) \cdot \exp(-i \cdot k_2 \cdot x) \cdot \exp\left(-i \cdot \frac{E(k_2)}{\hbar} \cdot t\right) \end{aligned}$$

Wir können in der Folge die Orts- und Zeitabhängigkeit zu einem Exponenten zusammenziehen:

$$\begin{aligned}\psi(x,t) = & \psi(x=0,t=0) \cdot \exp\left[-i \cdot \left(k_1 \cdot x + \frac{E(k_1)}{\hbar} \cdot t\right)\right] + \\ & + \psi(x=0,t=0) \cdot \exp\left[-i \cdot \left(k_2 \cdot x + \frac{E(k_2)}{\hbar} \cdot t\right)\right]\end{aligned}$$

Weiters zerlegen wir die exp-Funktionen in ihre sin- und cos- Anteile nach folgendem Schema:

$$\begin{aligned}\cos(\alpha) + \cos(\beta) + i \cdot [\sin(\alpha) + \sin(\beta)] &= 2 \cos\left(\frac{\alpha - \beta}{2}\right) \cos\left(\frac{\alpha + \beta}{2}\right) + \\ i \cdot \left[2 \cos\left(\frac{\alpha - \beta}{2}\right) \sin\left(\frac{\alpha + \beta}{2}\right)\right] &= \\ 2 \cos\left(\frac{\alpha - \beta}{2}\right) \cdot \left[\cos\left(\frac{\alpha + \beta}{2}\right) + i \cdot \sin\left(\frac{\alpha + \beta}{2}\right)\right] &= \\ 2 \cos\left(\frac{\alpha - \beta}{2}\right) \cdot \exp\left(i \cdot \frac{\alpha + \beta}{2}\right)\end{aligned}$$

Wobei in unserem Fall

$$\begin{aligned}\alpha &= \left(-k_1 \cdot x - \frac{E(k_1)}{\hbar} \cdot t\right) \\ \beta &= \left(-k_2 \cdot x - \frac{E(k_2)}{\hbar} \cdot t\right)\end{aligned}$$

Somit lautet die komplette Wellenfunktion $\psi(x,t)$:

$$\begin{aligned}\psi(x,t) = & 2\psi(x=0,t=0) \cdot \cos\left(-\frac{k_1 - k_2}{2} \cdot x - \frac{E(k_1) - E(k_2)}{2 \cdot \hbar} \cdot t\right) \cdot \\ \text{Eqn. 2.7-29} & \cdot \exp\left[-i \cdot \left(\frac{k_1 + k_2}{2} \cdot x + \frac{E(k_1) + E(k_2)}{2 \cdot \hbar} \cdot t\right)\right]\end{aligned}$$

Die Exponentialfunktion stellt dabei eine ganz normale harmonische Welle dar, wobei als Wellenzahl k und als Energie E im konkreten Fall jeweils die Mittelwerte der überlagerten stationären Zustände genommen werden. Der cos-Faktor davor stellt nun eine zeitlich und räumlich veränderliche Amplitude dar, welche von der mathematischen Form her einen Schwebungsterm sowohl hinsichtlich der harmonischen Zeitabhängigkeit als auch hinsichtlich der harmonischen Ortsabhängigkeit darstellt. Dieser cos-Term stellt die Hüllkurve für die eigentliche Welle dar und das Argument dieses cos-Terms hat wieder die mathematische Form einer Wellenausbreitung. D.h., dass sich die Hüllkurve im Raum

weiterbewegen wird. Der gemeinsame Vorfaktor $\psi(x=0, t=0)$ (eigentlich ist es ja nur ein Wert weil $x=0$!) symbolisiert jenen Zustand, in dem sich ein Elektron befindet, wenn es sich im „Nullten“ Potentialtopf (am Beginn der Potentialtopfserie) befindet und ist entsprechend unserer ursprünglichen Schreibweise gleichbedeutend mit $|\psi_{n=0}\rangle$. Wie auch schon am Ausgangspunkt all unserer Überlegungen wissen wir über diesen Zustand nicht mehr als dass es ihn im Prinzip gibt und dass er für sich allein betrachtet die Energie E_0 besitzt. Im Grunde brauchen wir auch nicht mehr über diesen Zustand zu wissen, alles was wir an Details brauchen steckt repräsentativ in unseren Parametern E_0 , c und Δx . Kann man die Zustände in den einzelnen Töpfen ebenfalls berechnen (wir können es derzeit noch nicht), so kann man E_0 und c prinzipiell ebenfalls berechnen. Können wir es nicht oder ist der Einzeltopf selbst zu komplex (z.B. kompliziertes Atom), so muss man diese Parameter in der Praxis notfalls experimentell bestimmen. Wir nehmen jedenfalls an, dass E_0 , c und Δx prinzipiell bekannt sind und beschäftigen uns mit den „übergeordneten“ Konsequenzen daraus. Daher können wir in der weiteren Rechnung mit ruhigem Gewissen $\psi(x=0, t=0) = 1$ setzen. Zu den einzelnen Töpfen selbst kommen wir später noch einmal zurück.

Um das sich „Weiterschieben“ des Schwebungsbauches in Eqn. 2.7-29 zu beschreiben, betrachten wir den cos-Term am Maximum:

$$\cos\left(-\frac{k_1 - k_2}{2} \cdot x - \frac{E(k_1) - E(k_2)}{2 \cdot \hbar} \cdot t\right) = 1$$

Wenn wir nun auf diesem Maximum „mitreiten“ wollen, müssen wir x immer so „nachjustieren“, dass bei laufender Zeit $\cos(\cdot)=1$ bleibt. Dies können wir tun, in dem wir z.B. verlangen, dass das Argument des cos immer „0“ bleibt:

$$\begin{aligned} -\frac{k_1 - k_2}{2} \cdot x - \frac{E(k_1) - E(k_2)}{2 \cdot \hbar} \cdot t &= 0 \\ \Rightarrow x(t) &= -\frac{1}{\hbar} \cdot \frac{E(k_1) - E(k_2)}{k_1 - k_2} \cdot t \end{aligned}$$

Für nicht zu unterschiedliche k -Werte ($\Delta k \ll k_1, k_2$), die zusätzlich auch noch aus der Umgebung des Bandminimums kommen, d.h. $k_1, k_2 \ll \pi / \Delta x$, wobei Δx der Abstand benachbarter Potentialtöpfe (so zu sagen die Gitterkonstante des eindimensionalen Kristalls) ist, erhalten wir:

$$x(t) = -\frac{1}{\hbar} \cdot \frac{\Delta E}{\Delta k} \cdot t \cong -\frac{1}{\hbar} \cdot \frac{dE}{dk} \cdot t$$

D.h. statt des Differenzenquotienten verwenden wir die 1. Ableitung der Funktion $E(k)$. Das Vorzeichen wird lediglich davon abhängen, auf welcher Seite des Bandminimums die beiden k -Werte liegen - wir interessieren uns daher nur für den Betrag von $x(t)$ und lassen das Vorzeichen einfach weg. Wir kennen bereits $E(k)$ in der Nähe des Bandminimums (Eqn. 2.7-18) und erhalten daher

$$\text{Eqn. 2.7-30} \quad x(t) \cong \frac{2c\Delta x^2}{\hbar} \cdot k \cdot t \quad \Rightarrow \quad v = \frac{2c\Delta x^2}{\hbar} \cdot k$$

Dabei ist nun der Wert von k als Mittelwert zwischen k_1 und k_2 zu verstehen. Der Schwebungsbauch bewegt sich also mit einer konstanten Geschwindigkeit v weiter. Wir wollen nun einen Vergleich mit der klassischen Physik anstellen und die kinetische Energie eines Teilchens betrachten. Dazu ersetzen wir k in Eqn. 2.7-18 durch v lt. Eqn. 2.7-30 und erhalten:

$$\text{Eqn. 2.7-31} \quad E(v) \cong E_0 - 2c + \frac{\hbar^2}{4c\Delta x^2} \cdot v^2$$

Demzufolge muss man den geschwindigkeitsabhängigen Term mit der kinetischen Energie eines klassischen Teilchens vergleichen:

$$E_{kin} = \frac{m}{2} v^2 \Leftrightarrow \frac{\hbar^2}{4c\Delta x^2} \cdot v^2 \quad \Rightarrow \quad m_{eff} \equiv \frac{\hbar^2}{2c\Delta x^2}$$

Wenn wir also unseren Schwebungsbauch als eine Art Wellenpaket betrachten, mit dem ein Teilchen verknüpft ist, so lässt sich diesem Teilchen auch tatsächlich eine klassische Masse zuschreiben und die Bewegungsgesetze stimmen mit denen der klassischen Physik überein (zumindest haben wir uns bisher davon im Zusammenhang mit der kinetischen Energie überzeugt). Da diese Masse letztlich durch die Wirkung unseres periodischen Topfpotentials bestimmt wird, wird sie, wie bei allen Kristallelektronen von Festkörpern auch, als „Effektive Masse“ bezeichnet. Der Vergleich mit einem klassischen Teilchen hinkt allerdings insofern noch, als dass der Aufenthaltsort noch nicht eindeutig definiert ist. Eine Schwebung hat nämlich eine unendliche Folge von Wellenbäuchen, in der klassischen Physik kann man aber nur ein auf einen bestimmten Bereich lokalisiertes Wellenpaket brauchen. - Aber was die Bewegung betrifft, so haben wir bereits Übereinstimmung mit der klassischen Physik erzielt !

2.7.1.6 Lokalisierte Wellenpakete:

Um tatsächlich lokalisierte Wellenpakete darzustellen, muss man offensichtlich mehr als zwei verschiedene stationäre Zustände überlagern. Dennoch hat uns die obige Rechnung den Weg vorgezeichnet, wie es auch in einem etwas allgemeineren Fall funktionieren kann. Wir können auch im allgemeineren Fall erwarten, dass es einen sich bewegenden „Hüllkurventerm“ geben wird, der in der Folge die Bewegung eines auf den Bereich der Hüllkurve lokalisierten klassischen Teilchens beschreibt. Um diesen Fall zu betrachten, müssen wir uns zunächst mathematisch überlegen, auf welche Art eine Überlagerung zu einem lokalisierten Wellenpaket überhaupt erfolgen kann:

Zu diesem Zweck müssen wir uns erst eine vernünftige mathematische Formulierung einer lokalisierten Funktion zurechtlegen. Ohne jetzt langwierige mathematische Überlegungen anstellen zu wollen, kann man sagen, dass die einfachste analytische Funktion, die so etwas bewerkstelligt, eine Gaußfunktion ist:

$$\text{Eqn. 2.7-32} \quad \psi(x) = C \cdot \exp\left(-\frac{x^2}{b^2}\right)$$

wobei die Konstante b eine Art Maß für die Breite des Wellenpaketes darstellt und C eine weitere Konstante ist, die für Normierungszwecke gebraucht wird. Wir müssen also einen Weg finden, durch geeignete Wahl unserer Überlagerungs- bzw. Darstellungskoeffizienten $a(k)$ obige Funktion zu erzeugen. Formal ausgedrückt bedeutet das, wir müssen eine Funktion $a(k)$ derart bestimmen, dass folgende Gleichung gilt:

$$\text{Eqn. 2.7-33} \quad \psi(x) = \sum_k a(k) \cdot \exp(-i \cdot k \cdot x) = C \cdot \exp\left(-\frac{x^2}{b^2}\right)$$

Da wir sehr viele, relativ dicht liegende k -Werte haben (bei einer unendlichen Kette von Töpfen sind es sogar unendlich viele, die dann gezwungenermaßen ein Kontinuum an Werten liefern müssen), kann man die Summe zweckmäßigerweise als Integral über alle k ausführen:

$$\text{Eqn. 2.7-34} \quad \psi(x) = \int_k a(k) \cdot \exp(-i \cdot k \cdot x) dk = C \cdot \exp\left(-\frac{x^2}{b^2}\right)$$

Dieses Integral ist aber bereits aus der Mathematik als die Fouriertransformation bekannt. Wir können also unser Problem so formulieren, dass wir eine Funktion $a(k)$ suchen, deren Fouriertransformierte die rechts stehende Gaußfunktion ist. Nun nimmt gerade die Gaußfunktion in der Fouriertransformation eine besondere Stellung ein, nämlich insofern, als dass die Fouriertransformierte einer Gaußfunktion wieder eine Gaußfunktion ist (für weitere Details möchte ich auf die Mathematik verweisen). Dies bedeutet, dass wir für $a(k)$ ebenfalls eine Gaußfunktion ansetzen müssen. Um nun in der Folge $\psi(x)$ zu berechnen, müssen wir mit dem Gaußansatz für $a(k)$ das entsprechende Fourierintegral durchführen (d.h. wir schauen in einer Formelsammlung nach ...).

Wie bereits vorige Woche erklärt, hängen die k -Verteilung $a(k)$ und die aus der Überlagerung dieser k -Anteile entstehende Ortsverteilung (=Wellenfunktion) $\psi(x)$ durch eine Fouriertransformation zusammen. Diesbezüglich ist bekannt, dass speziell für die Gaußfunktion als k -Verteilung $a(k)$ als Fouriertransformierte wieder eine Gaußfunktion als Ortsverteilung (und natürlich umgekehrt) herauskommt. Starten wir also mit einer Gaußverteilung der k -Werte $a(k)$ wie folgt:

$$\text{Eqn. 2.7-35: } a(k) = A \cdot \exp\left(-\frac{k^2}{q^2}\right)$$

wobei nun q die Breite der k -Verteilung darstellt. Das zu lösende Fourierintegral hat damit folgende Form:

$$\text{Eqn. 2.7-36: } \psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} A \cdot \exp\left(-\frac{k^2}{q^2}\right) \cdot \exp(-i \cdot k \cdot x)$$

In diversen Formelsammlungen kann (in etwa) folgendes finden:

$$\text{Eqn. 2.7-37: } \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-a^2 \cdot k^2) \cdot \exp(-i \cdot k \cdot x) \propto \exp\left(-\frac{x^2}{4a^2}\right)$$

Womit man durch Koeffizientenvergleich sofort folgendes hinschreiben kann:

$$\text{Eqn. 2.7-38: } \int_{-\infty}^{\infty} A \cdot \exp\left(-\frac{k^2}{q^2}\right) \cdot \exp(-i \cdot k \cdot x) = C \cdot \exp\left(-\frac{q^2}{4} x^2\right)$$

Um die Vorfaktoren A und C kümmern wir uns nicht weiter. Es ist klar, dass man letzt endlich dafür sorgen muss, dass jeder Satz von Basiszuständen, egal ob jetzt im Ortsraum oder im k-Raum, die Vollständigkeitsbedingung erfüllen muss:

$$\sum_k a^*(k) \cdot a(k) = \int_k a^*(k) \cdot a(k) dk = 1 \quad \text{bzw.}$$

$$\sum_x \psi^*(x) \cdot \psi(x) = \int_x \psi^*(x) \cdot \psi(x) dx = 1$$

Dadurch können in der Folge die Normierungsfaktoren A bzw. C festgelegt werden. Wir wollen uns aber um diese Faktoren nicht weiter kümmern (ev. als freiwillige Übung geeignet) und uns auf die wesentlichen Zusammenhängen beschränken.

Interessieren wir uns nun für die physikalisch relevanten Wahrscheinlichkeitsverteilungen sowohl im Ortsraum als auch im k-Raum, so müssen wir die Verteilungsfunktionen noch quadrieren. Dies führt aber gerade für die Gaußfunktionen zu nichts dramatischem, sondern lediglich zu einem Faktor 2 im Exponenten:

$$|a(k)|^2 = A^2 \cdot \exp\left(-2 \frac{k^2}{q^2}\right)$$

$$|\psi(x)|^2 = C^2 \cdot \exp\left(-2 \frac{x^2}{b^2}\right) = C^2 \cdot \exp\left(-\frac{q^2}{2} \cdot x^2\right)$$

Definieren wir die Breite der k-Verteilung derart, dass wir Δk vom Zentrum des Gaußpeaks aus so wählen, dass die exp-Funktion auf den 1/e - Wert abgesunken ist bzw. die Breite des Wellenpaketes derart, dass bei Δx vom Zentrum des Gaußpeaks der Ortsverteilung aus auf den 1/e - Wert abgesunken ist, so erhalten wir:

Eqn. 2.7-39:

$$\Delta x = \frac{\sqrt{2}}{q}$$

$$\Delta k = \frac{q}{\sqrt{2}}$$

Es ist leicht zu sehen, dass die Gaußpeakbreiten wie folgt zusammenhängen:

Eqn. 2.7-40: $\Delta x \cdot \Delta k = 1$

Wenn wir uns erinnern, dass wir bereits $\hbar \cdot k$ mit dem Impuls p identifiziert haben, so muss die Impulsverteilung wohl $\Delta p = \hbar \cdot \Delta k$ sein. Damit erhalten wir einen fundamentalen Zusammenhang zwischen Impuls- und Ortsverteilung eines Teilchens, nämlich

Eqn. 2.7-41: $\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar$ die Heisenberg'sche Unschärferelation

In unserer bisherigen Rechnung kommt streng genommen $\Delta x \cdot \Delta p = \hbar$ heraus. Da, wie wir gleich im Anschluss sehen werden, dass Δx sich mit der Zeit vergrößert, ist diese Gleichung wohl als unterste Grenze der Unschärfe zu interpretieren, so dass im allgemeinen Fall wohl das " \geq " eher zutreffend ist. Dieser Aspekt ist bereits in obiger Gleichung berücksichtigt. Jedenfalls stellt sich in unserer Abhandlung die Heisenberg'sche Unschärferelation als eine Konsequenz der mathematischen Eigenschaften der Fouriertransformation heraus. Physikalisch ist die Konsequenz darin zu suchen, dass man, um ein örtlich lokalisiertes Teilchen zu erhalten, dieses Teilchen in einem Mischzustand aus verschiedenen stationären Zuständen mit verschiedenen k - Werten vorliegen muss. Da die k -Verteilung gleichzeitig einer Impulsverteilung entspricht, kann ein bestimmtes k nie gleichzeitig einen bestimmten Ort x des Teilchens beschreiben. Je genauer das Wellenpaket das Teilchen auf einen bestimmten Ort „festnagelt“, desto breiter ist die erforderliche k -Verteilung und damit die Impulsverteilung.

2.7.1.7 Zeitliche Entwicklung eines Wellenpaketes

Im vorigen Kapitel haben wir uns mit der prinzipiellen Darstellung eines Wellenpaketes befasst und daraus bereits eine wichtige Konsequenz feststellen können, nämlich die Heisenberg'sche Unschärferelation. Wir wollen nun die Betrachtung auf die zeitliche Entwicklung eines fortschreitenden Wellenpaketes erweitern. Dazu ist aber erst einmal zu berücksichtigen, dass der mittlere Impuls, bzw. das mittlere k der Gaußverteilung nicht bei $k_0=0$ liegt, wie im vorigen Kapitel angenommen. D.h. die etwas allgemeinere k -Verteilung muss etwa so aussehen:

$$a(k) = A \cdot \exp\left(-\frac{(k - k_0)^2}{q^2}\right)$$

Damit sieht das Fourierintegral nun wie folgt aus:

$$\psi(x) = A \int_{k=-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{(k-k_0)^2}{q^2}\right) \cdot \exp(-i \cdot k \cdot x) dk$$

Da die Integrationsgrenzen grundsätzlich von $-\infty \rightarrow +\infty$ gehen, kann man eine einfache Koordinatenverschiebung durchführen, ohne dass sich am Ergebnis des Integrals etwas ändern kann, d.h. wir können den Koordinatenursprung wieder in Mitte des Gaußpeaks verlegen und $(k-k_0)$ wieder durch k zu ersetzen. Wir dürfen aber nicht vergessen, dass man diese Nullpunktverschiebung auf der k -Achse auch in der zweiten \exp -Funktion durchführen muss, d.h. wir müssen im zweiten Exponenten k durch $(k+k_0)$ ersetzen. Damit können wir das Fourierintegral wie folgt umschreiben:

$$\psi(x) = A \int_{k=-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{k^2}{q^2}\right) \cdot \exp[-i \cdot (k+k_0) \cdot x] dk$$

Damit ist es nun möglich, einen Faktor $\exp(-i \cdot k_0 \cdot x)$ vor das Integral zu ziehen und es wird klar, dass sich am eigentlichen Fourierintegral im Vergleich zu gar nichts geändert hat:

$$\psi(x) = A \cdot \exp(-i \cdot k_0 \cdot x) \int_{k=-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{k^2}{q^2}\right) \cdot \exp(-i \cdot k \cdot x) dk \propto$$

Eqn. 2.7-42:

$$\propto \exp(-i \cdot k_0 \cdot x) \cdot \exp\left(-\frac{q^2}{4} \cdot x^2\right)$$

Als weiteren Schritt müssen wir die Zeitabhängigkeit einfügen. Dies ist möglich, in dem wir im Fourierintegral die bekannte Zeitentwicklung für stationäre Zustände zu den einzelnen $a(k)$ dazuschreiben.

$$\psi(x) = A \int_{k=-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{k^2}{q^2}\right) \cdot \exp\left[-i \cdot (k+k_0) \cdot x - i \cdot \frac{E(k+k_0)}{\hbar} \cdot t\right] dk$$

Für $E(k)$ verwenden wir das Verhalten in der Nähe des Bandminimums, d.h. wir setzen:

$$E(k) = \frac{\hbar^2 \cdot k^2}{2m_{\text{eff}}} \Rightarrow -i \cdot \frac{E(k+k_0)}{\hbar} t = -i \cdot \frac{\hbar \cdot k^2}{2m_{\text{eff}}} \cdot t - i \cdot \frac{\hbar \cdot k \cdot k_0}{m_{\text{eff}}} \cdot t - i \cdot \frac{\hbar \cdot k_0^2}{2m_{\text{eff}}} \cdot t$$

Die durch das Quadrieren entstandenen 3 Terme kann man nun geschickt auf die einzelnen Faktoren des Fourierintegrals verteilen:

$$\psi(x) = A \cdot \exp\left(-i \cdot k_0 \cdot x - i \cdot \frac{\hbar \cdot k_0^2}{2m_{\text{eff}}} \cdot t\right) \int_{k=-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{k^2}{q^2} + i \frac{\hbar \cdot k^2}{2m_{\text{eff}}} \cdot t\right) \cdot \exp(-i \cdot k \cdot x - i \cdot \frac{\hbar \cdot k \cdot k_0}{m_{\text{eff}}} \cdot t) dk$$

$$\psi(x) = A \cdot \exp\left(-i \cdot k_0 \cdot x - i \cdot \frac{\hbar \cdot k_0^2}{2m_{\text{eff}}} \cdot t\right) \int_{k=-\infty}^{\infty} \exp\left[-k^2 \left(\frac{1}{q^2} - i \frac{\hbar}{2m_{\text{eff}}} \cdot t\right)\right] \cdot \exp\left[-i \cdot k \cdot \left(x + \frac{\hbar \cdot k_0}{m_{\text{eff}}} \cdot t\right)\right] dk$$

D.h. wir haben die zeitabhängige Fouriertransformation auf eine Form zurückgeführt, die jener von Eqn. 2.7-42 entspricht - wir müssen nur folgende Ausdrücke im Integral im Vergleich zu vorher anders identifizieren (vorher \rightarrow jetzt):

$$\begin{aligned} \frac{1}{q^2} &\rightarrow \frac{1}{q^2} + i \frac{\hbar \cdot t}{2m_{\text{eff}}} \\ x &\rightarrow x + \frac{\hbar \cdot k_0}{m_{\text{eff}}} \cdot t \end{aligned}$$

Damit können wir auch in diesem Fall das Ergebnis von Eqn. 2.7-42 benutzen und die entsprechenden Ausdrücke einsetzen:

$$\psi\left(x + \frac{\hbar \cdot k_0}{m_{\text{eff}}} \cdot t\right) \propto \exp\left(-i \cdot k_0 \cdot x - i \cdot \frac{\hbar \cdot k_0^2}{2m_{\text{eff}}} \cdot t + \Delta\varphi(t)\right) \cdot \exp\left[\frac{\left(x + \frac{\hbar \cdot k_0}{m_{\text{eff}}} \cdot t\right)^2}{4 \cdot \left(\frac{1}{q^2} + i \frac{\hbar \cdot t}{2m_{\text{eff}}}\right)}\right]$$

An sich sollten wir auch beim rein imaginären exp-Vorfaktor eine passende Variablenersetzung durchführen, die allerdings lediglich eine Phasenverschiebung der Schwingung bewirken würde, die ohnehin später bei der Betragsbildung herausfällt und auf die es uns hier daher nicht ankommt. Der Vollständigkeit halber schreiben wir daher lediglich ein $\Delta\varphi(t)$ ins Argument dieser exp-Funktion. Wir machen nun den Nenner im

Exponenten reell, in dem wir oben und unten mit dem komplex konjugierten Nenner multiplizieren:

$$\frac{1}{4 \cdot \left(\frac{1}{q^2} + i \frac{\hbar \cdot t}{2m_{\text{eff}}} \right)} = \frac{\frac{1}{4} \cdot \left(\frac{1}{q^2} - i \frac{\hbar \cdot t}{2m_{\text{eff}}} \right)}{\frac{1}{q^4} + \left(\frac{\hbar \cdot t}{2m_{\text{eff}}} \right)^2} = \frac{\frac{q^2}{4}}{1 + \left(q^2 \cdot \frac{\hbar \cdot t}{2m_{\text{eff}}} \right)^2} - i \cdot \frac{\frac{1}{4} \cdot \frac{\hbar \cdot t}{2m_{\text{eff}}}}{\frac{1}{q^4} + \left(\frac{\hbar \cdot t}{2m_{\text{eff}}} \right)^2}$$

Wir interessieren uns in erster Linie für die Zeitabhängigkeit der Antreffwahrscheinlichkeit und müssen daher in der Folge $\psi^* \cdot \psi$ bilden. Dabei fallen alle exp-Funktionen mit rein imaginärem Exponenten weg, so dass ich mich bereits an dieser Stelle gar nicht mehr darum kümmern möchte, diese auszurechnen. Von den reellen Faktoren bleibt letztlich nur folgendes stehen, wobei ich wieder den konstanten Vorfaktor weglasse:

$$\text{Eqn. 2.7-43: } |\psi(x)|^2 \propto \exp \left[-\frac{1}{2} \cdot q^2 \cdot \left(x + \frac{\hbar \cdot k_0}{m_{\text{eff}}} \cdot t \right)^2 \cdot \frac{1}{1 + \left(q^2 \cdot \frac{\hbar \cdot t}{2m_{\text{eff}}} \right)^2} \right]$$

Der zeitabhängige Term neben dem x bedeutet, dass sich der Gaußpeak als ganzes mit konstanter Geschwindigkeit weiter schiebt.

$$\text{Eqn. 2.7-44} \quad v = \frac{\hbar \cdot k_0}{m_{\text{eff}}}$$

Dies kann man sich vergegenwärtigen, in dem man annimmt, dass man auf dem Maximum des Gaußpeaks "mitreitet". D.h. man muss x in der zeit immer so "nachjustieren", dass das Argument in der Gaußfunktion Null bleibt. Das geht nur, wenn $x = -v \cdot t$.

Analysieren wir diese Funktion noch etwas genauer, so bemerken wir auch, dass sich die Breite des Gaußpeaks mit der Zeit vergrößert. Die Geschwindigkeit v richtet sich offenbar nach dem mittleren Impuls p_0 , bzw. mittleren k-Wert k_0 , genau so, wie man es sich von einem freien klassischen Teilchen erwarten würde. Was offensichtlich neu ist, ist das zeitliche "Zerfließen" des Wellenpaketes. In diesem Zusammenhang stellt sich die berechnete Frage, ob dieses Zerfließen in unserer alltäglichen Erfahrung auch tatsächlich in Erscheinung treten kann. Dazu möchte ich Sie einladen, für einige typische Teilchen (z.B. Metallkugeln, etc.) unter der Annahme, dass es sich lediglich um Wellenpakete handeln würde (wir wissen natürlich, dass es nicht so einfach ist!), die typischen Zeiten für dieses Zerfließen abzuschätzen. Für diesen Zweck nehmen wir den entsprechenden zeitabhängigen Term des Exponenten

$$1 + \left(q^2 \cdot \frac{\hbar \cdot t}{2m_{\text{eff}}} \right)^2$$

und fragen uns, ab wann der zeitabhängige Faktor die "1" zu "überholen" beginnt und bezeichnen diese Zeit mit τ . Es ist leicht nachzuvollziehen, dass:

$$\text{Eqn. 2.7-45} \quad \tau = \frac{2m_{\text{eff}}}{\hbar \cdot q^2}$$

Da q über die Unschärferelation mit der Breite des Wellenpaketes Δx zusammenhängt (Eqn. 2.7-40), können wir $q = 1/\Delta x$ einsetzen. Für die Größenordnung von Δx nehmen wir den Durchmesser des betrachteten Objektes:

$$\text{Eqn. 2.7-46} \quad \tau = \frac{2m_{\text{eff}}}{\hbar} \cdot \Delta x^2$$

Was würde also für eine Metallkugel mit einem Durchmesser der Größenordnung 1 mm in etwa herauskommen ?

2.8 Der Effekt eines überlagerten ortsabhängigen Potentials

Bisher haben wir uns mit einem System von identischen Potentialtöpfen beschäftigt, bei denen sich sowohl die Topfböden als auch die Potentialtopfränder der verschiedenen gekoppelten Potentialtöpfe jeweils exakt auf dem gleichen, konstanten Potential befinden. Wir wollen diese Betrachtungen nun dahingehend erweitern, dass wir eine langsame Variation des Potentials entlang der Ortskoordinate zulassen. Der Einfachheit halber verlangen wir zunächst, dass die Potentialvariation so langsam vor sich geht, dass sich das Potential zwischen zwei benachbarten Potentialtöpfen nur unerheblich voneinander unterscheiden. Bildlich kann man sich das wie folgt vorstellen.

Potential

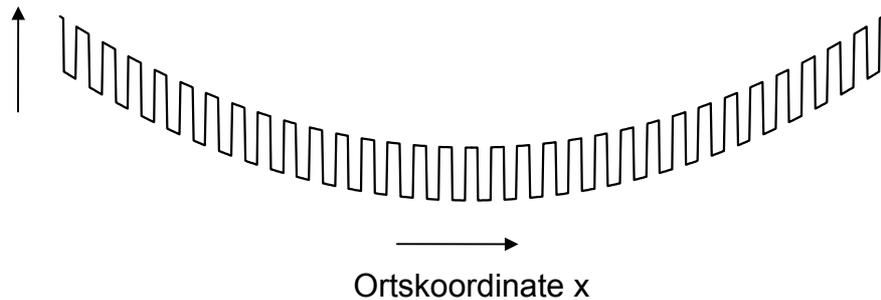


Abbildung 2.8-1: Schematische Darstellung einer Serie von identischen, gekoppelten Potentialtöpfen mit überlagertem, langsam variierendem Potential.

Der Vergleich mit der Praxis ist in diesem Fall leicht herzustellen: Die Serie von Töpfen selbst ist vergleichbar mit dem Gitterpotential der Atome in einem (Halbleiter-) Kristall. Das überlagerte Potential könnte dann von diversen Maßnahmen zur Herstellung einer Potentialmodulation wie z.B. durch Einbringen einer Dotierungsschichtstruktur stammen. Wir nehmen also an, dass die Kopplung zwischen den jeweils benachbarten Potentialtöpfen nach wie vor durch die gleiche Kopplungskonstante c , wie in Kapitel 2.7, beschrieben wird. Dementsprechend können wir auch den Hamiltonoperator von vorhin übernehmen und dem E_0 einfach das Potential $V(x)$ überlagern, d.h. wir ersetzen E_0 durch $E_0 + e \cdot V(x_n)$. (Bemerkung: Wir wissen natürlich, dass man für die potentielle Energie das elektrische Potential mit der Ladung des Teilchens multiplizieren muss - wir haben vorausschauend schon an ein Elektron gedacht und daher das Potential mit der Elementarladung multipliziert.)

$$\begin{pmatrix} E_0 & c & \cdot & 0 \\ c & E_0 & c & \cdot \\ \cdot & c & E_0 & c \\ 0 & \cdot & c & E_0 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} E_0 + e \cdot V(x_1) & c & \cdot & 0 \\ c & E_0 + e \cdot V(x_2) & c & \cdot \\ \cdot & c & \cdot & c \\ 0 & \cdot & c & E_0 + e \cdot V(x_N) \end{pmatrix}$$

D.h. wir wählen zunächst als Bezugspunkt für die Potentialmodulation die Grundzustandsenergie E_0 des isolierten Potentialtopfes (ohne Beschränkung der Allgemeinheit möglich). Die Eigenwertgleichung von Kapitel 2.7 wird dann einfach zu:

$$\text{Eqn. 2.8-1: } \begin{pmatrix} E_0 + e \cdot V(x_1) & c & \cdot & 0 \\ c & E_0 + e \cdot V(x_2) & c & \cdot \\ \cdot & c & \cdot & c \\ 0 & \cdot & c & E_0 + e \cdot V(x_N) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_{1,m} \\ a_{2,m} \\ \cdot \\ a_{N,m} \end{pmatrix} = E_m \cdot \begin{pmatrix} a_{1,m} \\ a_{2,m} \\ \cdot \\ a_{N,m} \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} E_0 + e \cdot V(x_1) - E_m & c & \cdot & 0 \\ c & E_0 + e \cdot V(x_2) - E_m & c & \cdot \\ \cdot & c & \cdot & c \\ 0 & \cdot & c & E_0 + e \cdot V(x_N) - E_m \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_{1,m} \\ a_{2,m} \\ \cdot \\ a_{N,m} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \cdot \\ 0 \end{pmatrix}$$

Sie erinnern sich: Die Komponenten a_{nm} stellen die Darstellungskoeffizienten für die Ortsdarstellung dar. D.h. für die Überlagerung zum stationären Zustand mit der Nummer m stellt a_{nm} den Beitrag jenes Zustandes dar, in welchem das Elektron (Teilchen) sich im Potentialtopf mit der Nummer n befinden würde.

Der Unterschied zu Kapitel 2.7 ist nun aber der, dass die verschiedenen Potentialtöpfe aufgrund des überlagerten, ortsabhängigen Potentials in diesem Fall prinzipiell nicht mehr ununterscheidbar sind. Deshalb können wir auch jene Symmetrieüberlegungen, die wir in Kapitel 2.7 durchgeführt haben und welche in der Folge zu den ebenen Wellen mit bestimmtem k -Wert als stationäre Zustände geführt haben, nicht mehr anwenden. Somit sieht es so aus, als ob wir diesmal um die direkte Lösung des obigen Gleichungssystems nicht mehr herumkommen. Wie aber schon seinerzeit erwähnt, ist so etwas für einen Computer kein prinzipielles Problem. Ich werde daher auch einige Demonstrationen diesbezüglich zeigen.

Aber auch für jene, die analytische Lösungen bevorzugen, kann ich sogar für diese etwas allgemeinere Situation im nächsten Kapitel etwas anbieten.

2.8.1 Die stationäre Schrödingergleichung in der Ortsdarstellung

Diese Kapitelüberschrift ist eigentlich nicht ganz zutreffend, da die Eigenwertgleichung von Eqn. 2.8-1 eigentlich schon die stationäre Schrödingergleichung in der Ortsdarstellung ist, nur wird sie in dieser Form üblicherweise nicht so bekannt sein. Daher möchte ich sie noch in eine vielleicht etwas leichter wiedererkennbare Form bringen:

Wir haben festgestellt, dass Eqn. 2.8-1 zu einem linearen Gleichungssystem wird, wenn wir die Matrixmultiplikation mit dem Spaltenvektor ausführen. Bevor wir das nun tun, möchte ich Sie an eine Bezeichnungsweise erinnern, die ich schon vor einiger Zeit eingeführt habe. Wie Sie sich vielleicht erinnern, haben wir speziell für die Ortsdarstellung die Koeffizienten a_{nm} durch den Begriff der Wellenfunktion ersetzt:

$$a_{nm} = a_m(x_n) \equiv \psi_m(x_n) \quad m \dots \text{Nummer des stationären Zustandes}$$

Dies konnten wir deshalb tun, da die Koeffizienten a_{nm} eine Funktion des Ortes sein müssen, die mathematisch durch die Funktion $\psi(x)$ beschrieben werden kann. Multiplizieren wir nun die Zeile n der Matrix mit dem Spaltenvektor, so erhalten wir eine der vielen Gleichungen des Gleichungssystems:

$$\text{Eqn. 2.8-2: } c \cdot \psi(x_{n-1}) + [E_0 + e \cdot V(x_n) - E_m] \cdot \psi(x_n) + c \cdot \psi(x_{n+1}) = 0$$

Da die Potentialtöpfe im Abstand Δx diskret angeordnet sind, kann man obige Gleichung auch wie folgt schreiben:

$$\text{Eqn. 2.8-3: } c \cdot \psi(x_n - \Delta x) + [E_0 + e \cdot V(x_n) - E_m] \cdot \psi(x_n) + c \cdot \psi(x_n + \Delta x) = 0$$

Nun kommen wir darauf zurück, dass wir eine Potentialmodulation verlangt haben, die sich zwischen benachbarten Töpfen, d.h. auf einer Strecke von Δx , nur sehr wenig ändert. Ähnliches dürfen wir deshalb zumindest für einen Teil der Wellenfunktionen der stationären Zustände erwarten. In diesem Fall können wir $\psi(x)$ in eine Reihe entwickeln und die Beiträge nach dem ersten nicht verschwindenden Term abbrechen. Wir entwickeln formal bis zur 2. Ordnung:

$$\begin{aligned} \text{Eqn. 2.8-4: } \quad \psi(x - \Delta x) &= \psi(x) - \frac{d\psi(x)}{dx} \Delta x + \frac{1}{2} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} (\Delta x)^2 + \dots \\ \psi(x + \Delta x) &= \psi(x) + \frac{d\psi(x)}{dx} \Delta x + \frac{1}{2} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} (\Delta x)^2 + \dots \end{aligned}$$

Setzen wir dies in Eqn. 2.8-3 ein, so fallen die 1. Ordnungen weg und wir erhalten:

$$\begin{aligned} \text{Eqn. 2.8-5: } \quad 2c \cdot \psi(x) + c \cdot \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} \cdot (\Delta x)^2 + [E_0 + e \cdot V(x) - E_m] \cdot \psi(x) &= 0 \text{ bzw.} \\ c \cdot \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} \cdot (\Delta x)^2 + [E_0 + e \cdot V(x) + 2c - E_m] \cdot \psi(x) &= 0 \end{aligned}$$

Wir haben bereits in Zusammenhang mit **Eqn. 2.7-31** die effektive Masse für den Fall ohne Potentialmodulation (freie Bewegung im periodischen Potential) eingeführt:

$$m_{\text{eff}} = \frac{\hbar^2}{2c \cdot \Delta x^2}$$

Mathematisch ist dies nur das Ersetzen einer Konstante oder eines Parameters durch einen anderen. Machen wir jedenfalls die überlagerte Potentialmodulation null, so verhält sich das Wellenpaket dieses Teilchens im wesentlichen wie ein klassisches Teilchen mit der Masse m_{eff} . Es ist daher sinnvoll, grundsätzlich m_{eff} an Stelle von c zu verwenden, auch wenn für diesen Fall zunächst keine Bewegung eines Teilchens mit den erhaltenden stationären Zuständen verbunden sein wird.

Wir hatten uns bisher um das Vorzeichen von c nicht gekümmert, wir haben nur gewusst, dass es eine reelle Zahl sein muss. Letztlich haben wir es stillschweigend wie positive Zahl betrachtet. Es ist uns aber schon in den vorigen Kapiteln aufgefallen, dass das Minimum aller Energien der möglichen stationären Zustände beim ungestörten periodischen Signal bei $E_{\text{min}} = E_0 - 2c$ liegt. Dieses Ergebnis muss sich nun natürlich auch mit obiger Gleichung für den Spezialfall ohne Potentialmodulation ergeben. Nun ist es für die Praxis sehr zweckmäßig, die Potentialmodulation auf diesen Minimumwert $E_0 - 2c$ ("untere Bandkante") zu beziehen. Um dies zu erreichen, verschieben wir den Bezugspunkt für das Potential zunächst derart, dass wir von auf

$$\left[E_0 + e \cdot V(x) + 2c - E_m \right] \quad \Rightarrow \quad \left[E_0 + e \cdot V(x) - 2c - E_m \right]$$

übergehen. Dies setzen wir in der Folge auch als Energienullpunkt fest, so dass wir letztlich überhaupt wie folgt umschreiben können:

$$\left[E_0 + e \cdot V(x) - 2c - E_m \right] \quad \Rightarrow \quad \left[e \cdot V(x) - E_m \right]$$

Diese Bezugspunktwahl bedeutet nun formal eine willkürliche Umkehr des Vorzeichens von c , wie man oben sehen kann. Dass die Wahl des Vorzeichens physikalisch eigentlich nicht viel bedeutet, dafür sorgt die Natur allein schon dadurch, dass die Aufspaltung durch die Kopplung immer symmetrisch mit $\pm c$ erfolgt. Hätten wir also von Haus aus c als negative Zahl definiert, so hätten wir in den vorigen Kapiteln genau die selben stationären Zustände als Lösungen erhalten, uns aber diese Vorzeichenumkehr hier erspart. Da wir das aber nicht getan haben und wir uns aber dennoch auf den Zustand mit der niedrigsten Energie beziehen möchten, müssen wir ab nun c als negativen Wert einsetzen.

$$\text{Eqn. 2.8-6:} \quad \Rightarrow \quad c = -\frac{\hbar^2}{2m_{\text{eff}} \cdot \Delta x^2}$$

c hat die Dimension einer Energie. Gibt man c in meV an, bezieht man die effektive Masse auf die Masse des wirklich freien Elektrons m_0 und misst man den Punktabstand Δx in nm, so ist c wie folgt gegeben:

$$c = -3.814 \cdot \left(\frac{m_{\text{eff}}}{m_0} \cdot \Delta x^2 \right)^{-1} \quad [\text{meV}]$$

Dieses c könnten wir nun in die Matrix einsetzen und die Eigenwerte und Eigenzustände durch ein numerisches Verfahren auch rechnen lassen (dazu später noch mehr !) Wir wollen vorerst aber den hier eingeschlagenen analytischen Lösungsweg noch etwas weiterverfolgen. Eqn. 2.8-6 erlaubt es uns nun, das c im Term mit der 2. Ableitung durch m_{eff} zu ersetzen:

$$c \cdot \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} \cdot (\Delta x)^2 \quad \Rightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2m_{\text{eff}}} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2}$$

Mit diesen Änderungen können wir Eqn. 2.8-5 neu schreiben und erhalten dadurch die stationäre Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{\text{eff}}} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + [e \cdot V(x) - E_m] \psi(x) = 0 \quad \text{bzw.}$$

Eqn. 2.8-7:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_{\text{eff}}} \frac{d^2}{dx^2} + e \cdot V(x) \right] \psi(x) = E_m \cdot \psi(x)$$

In dieser Form ist die stationäre Schrödingergleichung wohl den meisten Leuten bekannt und entspricht auch der ursprünglichen Form des Urhebers Erwin Schrödinger.

Im Rahmen unseres übergeordneten Konzeptes der Quantenphysik können wir die Rolle dieser Gleichung wie folgt zusammenfassen:

Die Schrödingergleichung als Differentialgleichung für die Wellenfunktionen ist eine spezielle Methode, die Eigenwertgleichung des Hamiltonoperators in der Ortsdarstellung zu lösen. Diese Eigenwertgleichung besteht im Allgemeinen aus einem linearen Gleichungssystem, dessen Dimension im Prinzip unbeschränkt ist.

Somit ist die Schrödingergleichung eine Bestimmungsgleichung für die Wellenfunktionen $\psi(x)$ und E_m , in der die Diskretheit der Orte in einem zu Grunde liegenden periodischen "Kristallpotential" verschwunden ist. Alle Eigenheiten des Kristallpotentials sind somit in der effektiven Masse verpackt. Betrachtet man nun nach wie vor auch die Diskretheit der einzelnen Ortszustände ("Gitteratome"), so stellt $\psi(x)$ eine Hüllkurve über diese Ortsbasiszustände dar. Dementsprechend wird für den Fall des zu Grunde liegenden periodischen Gitterpotentials $\psi(x)$ auch als "*Envelope Function*" bezeichnet.