

Frage aus dem Tut: Wann sind die Phasen von Zuständen relevant?

Antwort 1: Wo die Phase keine Rolle spielt

Die absolute Phase einer Wellenfunktion ist immer physikalisch irrelevant. Wenn wir uns also das Beispiel aus Aufgabe 14 anschauen, wo wir eine Wellenfunktion

$$\psi(x) = Ae^{-\gamma|x|}$$

normieren wollten (für $\gamma = ma/\hbar^2$), wobei A im Allgemeinen komplex ist, so haben wir als Normierungsbedingung

$$\langle \psi | \psi \rangle = \frac{|A|^2}{\gamma} \stackrel{!}{=} 1 \quad \Leftrightarrow \quad |A| = \sqrt{\gamma}$$

gefunden. Offensichtlich können wir im Allgemeinen $A = \sqrt{\gamma}e^{i\phi}$ für ein beliebiges (konstantes, reelles) ϕ wählen, um diese Bedingung zu erfüllen. Unser normierter Zustand ist dann also

$$\psi(x) = \sqrt{\gamma}e^{i\phi}e^{-\gamma|x|}$$

und dieser Zustand ist für alle beliebigen ϕ physikalisch äquivalent. Schließlich verschwindet $e^{i\phi}$ für alle Observablen, also für Erwartungswerte beliebiger Operatoren O :

$$\langle \psi | O | \psi \rangle = \int dx \psi^*(x) O \psi(x) = \int dx (\sqrt{\gamma}e^{-i\phi}e^{-\gamma|x|}) O (\sqrt{\gamma}e^{i\phi}e^{-\gamma|x|}) = \gamma \int dx e^{-\gamma|x|} O e^{-\gamma|x|}$$

(da ϕ konstant ist, können wir $e^{i\phi}$ an beliebigen Operatoren O vorbeikommütieren). Wenn wir ϕ also beliebig wählen können, wählen wir der Einfachheit halber stets $\phi = 0$.

Antwort 2: Wo die Phase eine Rolle spielt

Gleichwohl gibt es in der Quantenmechanik auch Phasen, die eine Rolle spielen. Diese treten bei superponierten Zuständen auf. Man betrachte etwa zwei Zustände $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$. Angenommen, diese erfüllen die Schrödinger-Gleichung, so erfüllen auch deren Linearkombinationen

$$|\psi\rangle := c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle, \quad c_1, c_2 \in \mathbb{C}$$

die Schrödinger-Gleichung.¹ Auf diese Art und Weise kann ich also neue Zustände konstruieren/ präparieren. Was $|\psi\rangle$ für ein Zustand ist, hängt natürlich von der Wahl der Koeffizienten c_1 und c_2 ab. Beispielsweise ist

¹ An dieser Stelle habe ich im letzten Tut auch ein bisschen etwas durcheinandergebracht; ich glaube ich habe behauptet, Linearkombinationen von Lösungen der Schrödinger-Gleichung erfüllen die Schrödinger-Gleichung *nicht*, „weil ja die Energien unterschiedlich sind“. Das war falsch. Richtig ist: Linearkombinationen $\sum_n c_n \psi_n$ von *Eigenfunktionen* des Hamiltonoperators ψ_n , die also die Eigenwertgleichung $H\psi_n = E_n\psi_n$ erfüllen, sind *nicht* auch Eigenfunktionen des Hamilton-Operators:

$$H \sum_n c_n \psi_n = \sum_n c_n H \psi_n = \sum_n c_n E_n \psi_n \neq \sum_n c_n \psi_n.$$

Linearkombinationen $\sum_i c_i \psi_i$ für Lösungen der *Schrödinger-Gleichung* hingegen sind auch wieder Lösungen der Schrödinger-Gleichung (da die Schrödinger-Gleichung eine lineare Differentialgleichung ist):

$$i\hbar \frac{\partial \psi_i}{\partial t} = H \psi_i \quad \Rightarrow \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_i c_i \psi_i = i\hbar \sum_i c_i \frac{\partial \psi_i}{\partial t} = \sum_i c_i H \psi_i = H \sum_i c_i \psi_i.$$

$$|\psi\rangle := A(3|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle)$$

ein anderer Zustand als

$$|\psi'\rangle := A'(|\psi_1\rangle + 3|\psi_2\rangle)$$

(hier sind A, A' wieder ein Normierungsfaktoren, die sich via $\langle\psi|\psi\rangle = \langle\psi'|\psi'\rangle = 1$ bestimmen lassen, wenn man $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ explizit kennt¹).

Insbesondere ist aber auch

$$|\psi\rangle := A(e^{i\phi}|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle)$$

für $\phi \neq 0$ ein anderer Zustand als

$$|\psi'\rangle := A'(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle).$$

Der Zustand $|\psi\rangle$ hängt also von der *relativen Phase* ϕ zwischen den Zuständen $|\psi_1\rangle$ und $|\psi_2\rangle$ ab. Um nachzurechnen/zu begründen, *warum diese* Phase ϕ nun relevant ist, lasst uns zunächst den allgemeinen Fall betrachten:

$$|\psi\rangle := A(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) = A(|c_1|e^{i\phi_1}|\psi_1\rangle + |c_2|e^{i\phi_2}|\psi_2\rangle) = Ae^{i\phi_1}(|c_1||\psi_1\rangle + |c_2|e^{i\Delta\phi}|\psi_2\rangle),$$

wobei wir die (beliebigen aber festen) komplexen Zahlen $c_i = |c_i|e^{i\phi_i}$ in ihrer Polardarstellung geschrieben haben und anschließend $e^{i\phi_1}$ ausgeklammert sowie die *relative Phase* $\Delta\phi := \phi_2 - \phi_1$ definiert haben. Hieraus folgt nun für einen beliebigen hermiteschen Operator O

$$\begin{aligned} \langle\psi|O|\psi\rangle &= \int dx \psi^*(x) O \psi(x) \\ &= \int dx \left(A^* e^{-i\phi_1} (|c_1|\psi_1^*(x) + |c_2|e^{-i\Delta\phi}\psi_2^*(x)) \right) O \left(A e^{i\phi_1} (|c_1|\psi_1(x) + |c_2|e^{i\Delta\phi}\psi_2(x)) \right) \\ &= |A|^2 \int dx \left(|c_1|^2 \psi_1^*(x) O \psi_1(x) + |c_1||c_2|e^{i\Delta\phi} \psi_1^*(x) O \psi_2(x) \right. \\ &\quad \left. + |c_1||c_2|e^{-i\Delta\phi} \psi_2^*(x) O \psi_1(x) + |c_2|^2 \psi_2^*(x) O \psi_2(x) \right). \end{aligned}$$

Die Abhängigkeit von der relativen Phase $\Delta\phi$ verschwindet im Allgemeinen nicht. Nehmen wir beispielsweise $O = X = x$ und $\psi_1, \psi_2 \in \mathbb{R}$ an, so folgt

$$\begin{aligned} \langle\psi|x|\psi\rangle &= |A|^2 \int dx \left(|c_1|^2 x \psi_1^2(x) + (e^{\Delta\phi} + e^{-\Delta\phi})|c_1||c_2| x \psi_1(x)\psi_2(x) + |c_2|^2 x \psi_2^2(x) \right) \\ &= |A|^2 \int dx \left(|c_1|^2 x \psi_1^2(x) + 2 \cos \Delta\phi |c_1||c_2| x \psi_1(x)\psi_2(x) + |c_2|^2 x \psi_2^2(x) \right). \end{aligned}$$

Da fliegt $\Delta\phi$ im Allgemeinen offensichtlich nicht raus.

Fazit

Zustände haben keine physikalisch relevanten Phasen. Wie wir die Phase von Normierungsfaktoren wählen, ist beliebig, also wählen wir $\phi = 0$. Phasen spielen nur beim Addieren/Superponieren von Zuständen eine Rolle: Abgesehen von den Beträgen der Linearkombination-Koeffizienten spielen in diesem Fall auch deren (relativen) Phasen eine Rolle.

¹ Angenommen, $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ wären orthogonal (also $\langle\psi_i|\psi_j\rangle = \delta_{ij}$), dann würden wir beispielsweise finden, dass

$$\langle\psi|\psi\rangle = |A|^2(3^2 + 1^2) \stackrel{!}{=} 1 \quad \Leftrightarrow \quad |A| = \frac{1}{\sqrt{10}}$$

Man beachte, dass die Phase von A (die der absoluten Phase von $|\psi\rangle$ entspricht) hier auch wieder unbestimmt und physikalisch irrelevant ist.

Hinweis gegen Verwirrung: Relative Phasen in Entwicklungen in Orthonormalbasen

Man beachte, dass wir oben *nicht* den Zustand $|\psi\rangle$ in den Zuständen $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ *entwickelt* haben; zumindest nicht in dem Sinne, dass $|\psi\rangle$ *bekannt* ist und wir die Entwicklungskoeffizienten c_1, c_2 *bestimmen* mussten. Vielmehr haben wir *feste* Koeffizienten c_1, c_2 *gewählt* und somit $|\psi\rangle$ *definiert*.

Betrachten wir den anderen Fall, dass wir annehmen, $|\psi\rangle$ sei bekannt und wir wollen dieses bekannte $|\psi\rangle$ in einer vollständigen Orthonormalbasis $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ entwickeln,¹ dann können wir ja die Entwicklungskoeffizienten c_1, c_2 *berechnen*, in dem wir die Entwicklung mit $\langle\psi_1|$ bzw. $\langle\psi_2|$ multiplizieren:

$$c_1 = \langle\psi_1|\psi\rangle, \quad c_2 = \langle\psi_2|\psi\rangle.$$

Im Allgemeinen kann es passieren, dass $\langle\psi_i|\psi\rangle$ eine nicht-verschwindende Phase hat (das ist bei uns nur noch nicht vorgekommen, weil unsere Wellenfunktionen bisher in der Regel alle reell waren und dann auch die Koeffizienten reell sind) und diese Phase spielt dann natürlich genau die wichtige Rolle einer relativen Phase.

¹ Ein Beispiel für eine vollständige Basis mit zwei Zuständen wäre etwa Spin-up und Spin-down $|\psi_1\rangle = |\uparrow\rangle$ und $|\psi_2\rangle = |\downarrow\rangle$; das obige Argument lässt sich aber natürlich auf eine beliebig dimensionale Basis erweitern.