

# Quantentheorie

Quantenmechanik WS 16/17

Skript zur Vorlesung von Prof. Dr. Fleischhauer

L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X und Zusammenfassungen von

Jan Herbst  
Markus Exner  
Christopher Weiß

Simon Ohler  
Matthias Rüb



Fakultät Physik  
TU Kaiserslautern  
20. Juni 2017

# Inhaltsverzeichnis

<b>Vorwort</b>	<b>4</b>
<b>0 Einleitung</b>	<b>8</b>
0.1 Analogie zu Elektrodynamik . . . . .	9
0.2 Wahrscheinlichkeitsinterpretation . . . . .	11
<b>1 Formulierung der Quantenmechanik Teil 1</b>	<b>13</b>
1.1 Quantenmechanischer Zustand und Hilbertraum . . . . .	13
1.2 Observablen in der Quantenmechanik . . . . .	15
1.3 Fundamentale Operatoren in der Quantenmechanik . . . . .	25
1.4 Messungen in der Quantenmechanik . . . . .	30
1.5 Dynamik in der Quantenmechanik . . . . .	39
<b>2 Einteilchen-QM in einer räumlichen Dimension</b>	<b>46</b>
2.1 Kontinuitätsgleichung für Wahrscheinlichkeitsdichte (3D) . . . . .	48
2.2 freies Teilchen in einer Dimension . . . . .	49
2.3 Gebundene Zustände: unendlich hohes Kastenpotential . . . . .	54
2.4 Gebundene Zustände und Streuzustände des endlichen Kastenpotentials	60
2.5 endliche Kastenbarrieren und Tunneleffekt . . . . .	67
2.6 attraktives $\delta$ - Potential . . . . .	69
<b>3 Der Harmonische Oszillator</b>	<b>71</b>
3.1 Hamiltonoperator und dessen Spektrum . . . . .	71
3.2 Eigenfunktionen . . . . .	75
3.3 kohärente Zustände des harmonischen Oszillators . . . . .	78
3.4 Die Sommerfeldsche Polynommethode . . . . .	84
<b>4 Beziehung zwischen klassischer und Quantenmechanik Ehrenfest Theorem und klassischer Grenzfall</b>	<b>88</b>
4.1 Vergleich Klassik/ Quanten-mechanik . . . . .	88
4.2 Ehrenfest-Gleichungen . . . . .	90

<b>5</b>	<b>Der Drehimpuls in der Quantenmechanik</b>	<b>93</b>
5.1	Elementare Eigenschaften . . . . .	93
5.2	Spektrum des Drehimpulses . . . . .	95
5.3	Drehimpuls in Ortsdarstellung . . . . .	100
5.4	Eigenfunktionen des Drehimpulses . . . . .	103
5.5	Translation und Rotation . . . . .	107
<b>6</b>	<b>Einteilchen-QM in drei Dimension</b>	<b>113</b>
6.1	Das freie Teilchen . . . . .	113
6.2	Gebundene Zustände in einem Zentralpotential . . . . .	120
6.3	Coulombpotential . . . . .	123
6.4	Das Wasserstoffatom -Teil 1 . . . . .	130
<b>7</b>	<b>Geladene Teilchen im elektrischen-Feld</b>	<b>132</b>
7.1	Minimale Kopplung und Eichtransformation . . . . .	132
7.2	geladenes Teilchen im homogenen Magnetfeld . . . . .	135
7.3	Der Aharonov-Bohm-Effekt . . . . .	138
<b>8</b>	<b>Der Spin</b>	<b>141</b>
8.1	Das Stern-Gerlach Experiment . . . . .	141
8.2	Spin und Rotationen; Gesamtdrehimpuls von Spin $\frac{1}{2}$ -Teilchen . . . . .	145
8.3	Superauswahlregel für den Gesamtdrehimpuls: . . . . .	154
8.4	Spin $\frac{1}{2}$ -Teilchen im äußeren Magnetfeld . . . . .	155
8.5	Spin-Bahn Kopplung . . . . .	158
<b>9</b>	<b>Schrödinger-,Heisenberg- und Wechselwirkungsbild</b>	<b>160</b>
9.1	Schrödingerbild . . . . .	160
9.2	Heisenbergbild . . . . .	161
9.3	Wechselwirkungsbild . . . . .	163
<b>10</b>	<b>Näherungsverfahren</b>	<b>167</b>
10.1	Zeitunabhängige Störungstheorie von nicht entarteten Zuständen . . . . .	167
10.2	Zeitunabhängige Störungstheorie entarteter Zustände . . . . .	171
10.3	Ritzsches Variationsverfahren . . . . .	177
10.4	Adiabatische Näherung,Berry Phase . . . . .	181
<b>11</b>	<b>Quantenmechanik von Systemen unterscheidbarer Teilchen</b>	<b>187</b>
11.1	Tensorprodukt von Hilberträumen . . . . .	187
11.2	Separable und verschränkte Zustände . . . . .	188
11.3	Bellsche Ungleichungen . . . . .	191

11.4 Quantenteleportation von Spin- $\frac{1}{2}$ -Zuständen . . . . .	193
<b>12 Quantenmechanik von Systemen identischer Teilchen</b>	<b>195</b>
12.1 Ununterscheidbarkeit identischer Teilchen . . . . .	195
12.2 Der Hilbertraum identischer Teilchen . . . . .	198
12.3 Zwei Elektronen im Coulombpotential (Helium) . . . . .	203
12.4 Fockraum, Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren . . . . .	207
<b>13 Zusammenfassungen der ersten Kapitel</b>	<b>217</b>
13.1 Schrödinger . . . . .	217
13.2 Spektralzerlegung von $f(\hat{A})$ . . . . .	220
13.3 Unitärer Operator $\hat{U}$ . . . . .	221
13.4 Kommutator . . . . .	222
13.5 Korrespondenzprinzip . . . . .	222
13.6 Messung in der Quantenmechanik . . . . .	224
13.7 Schwankungsquadrat . . . . .	225
13.8 Varianz . . . . .	225
13.9 Messung zweier Observablen $\hat{A}, \hat{B}$ . . . . .	226
13.10 Dynamik in der Quantenmechanik . . . . .	227
13.11 Zeitabhängige Schrödingergleichung . . . . .	227
13.12 Stationäre Schrödingergleichung . . . . .	228
13.13 Erhaltungsgrößen in der Quantenmechanik . . . . .	229
13.14 Einteilchenmechanik in einer räumlichen Dimension . . . . .	229
13.15 Propagatoren; $G$ . . . . .	230
13.16 Zerfließen von Wellenpaketen . . . . .	231
13.17 das unendlich hohe Kastenpotential . . . . .	232
13.18 Inversion (Paritätsoperator) . . . . .	234
13.19 Allg. Eigenschaften gebundener Zustände in 1D . . . . .	235
13.20 Der endliche Potentialtopf . . . . .	236

# **Vorlesung Quantenmechanik Theorie**

# Vorwort

Als Hörer der Vorlesung Quantentheorie bei Herrn Prof. Dr. Fleischhauer haben wir dieses Skript verfasst. In erster Linie dient es dazu, das in der Vorlesung vermittelte Wissen zu archivieren. Darüber hinaus soll eine strukturierte, geordnete Zusammenschrift beim Lernen der Inhalte helfen. Es soll weiterhin zum Diskutieren von Inhalten, zum Verbessern von Sachverhalten und zum allgemeinen Verständnis beitragen. Es bietet die Möglichkeit, Kommentare und Verbesserungen ohne großen Aufwand den mathematischen Sachverhalten beizufügen und/ oder mathematische Sachverhalte gegebenenfalls einfacher und/oder übersichtlicher darzustellen.

Da der Einstieg in die Quantentheorie sehr abstrakt ist, befindet sich ab Seite 217 eine besonders ausführliche Ausführung der ersten paar Kapitel.

## 1. Vorlesung

### Geschichtlicher Hintergrund

Die Physik zu Beginn des 20. Jahrhunderts bestand hauptsächlich aus den Gebieten der Mechanik, der Thermodynamik sowie der Elektrodynamik. Allmählich häuften sich aber die experimentellen Resultate, die nicht mit klassischer Physik erklärbar waren. Die meisten dieser Resultate betrafen das Verhalten von Atomen, deren Verständnis noch in den Kinderschuhen steckte.

Durch die Versuche von Thomson (1897), sowie durch den berühmten Milikan-Versuch (1909/10), war die Existenz des Elektrons als Träger einer quantisierten Ladung bewiesen. Auf dieser Tatsache stellte Thomson ein erstes Atommodell auf, das „Rosinenkuchenmodell“.

Dieses Modell wurde von Rutherford (1911) widerlegt, indem  $\alpha$ -Teilchen auf eine Goldfolie geschossen wurden. Aus den streutheoretischen Resultaten konnte man schließen, dass der Hauptteil der Masse des Atoms in einem sehr kleinen Kern konzentriert war, während eine leichte Hülle von Elektronen den Kern umgibt. Die klassische Theorie ging nun von einer Kreisbewegung der Elektronen analog zum Sonnensystem aus, jedoch war diese Annahme nicht ohne Probleme:

Eine kreisende Ladung wirkt wie eine Antenne. Die Kreisbewegung ist eine harmonische Oszillation in zwei Dimensionen, analog zu einem Herz'schen Dipol:

Das Elektron müsste aus der kinetischen Bewegung Energie abstrahlen, weswegen es in nach kürzester Zeit in den Atomkern stürzen würde.

Damit stellen sich nun einige Fragen:

- Warum sind Atome überhaupt stabil?
- Warum gibt es Spektrallinien bzw. warum fehlen im Sonnenspektrum einige Linien?
- Welche Mechanismen erzeugen die chemische Bindung?
- Woher stammen die Eigenschaften von Festkörpern (Isolator, Leiter, ...)?
- ...

# 0 Einleitung

- Planck (1900) formuliert eine **Quantenhypothese** mit der er die Schwarzkörperstrahlung quantitativ korrekt erklären konnte:

$$E = \hbar \cdot \omega$$

- Davisson & Germer 1925: Beugung von Elektronen am Doppelspalt  
→ Elektronen haben Welleneigenschaften (1928)
- de Broglie 1924: Hypothese der Materiewellen, Schrödinger 1926:

$$\boxed{\frac{\lambda}{2\pi} = \frac{\hbar}{mv}} \quad \text{mit } \lambda = \text{Wellenlänge, } v = \text{Geschwindigkeit} \quad (1)$$

→ **Elektronen sind auch Wellen** (Mikroskopische Teilchen haben Wellencharakter)

$$\vec{p} = \hbar \cdot \vec{k} \quad |\vec{p}| = m \cdot v \quad |\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$$

**Beispiel: (Staubkorn)** Warum sehen wir den Effekt der Materiewellen nicht im täglichen Leben?

$$m \approx 10^{-9} \text{ kg} \quad v = 10 \frac{\text{m}}{\text{s}}$$

nach (1) gilt:

$$\lambda = \frac{2\pi \cdot \hbar}{mv} = 6,67 \cdot 10^{-26} \text{ m}$$

Dies ist zu klein um nachweisbar zu sein.

**Beispiel: (Elektron)** In welchen Größenordnungen liegen die Materiewellenlängen



von mikroskopischen Teilchen?

$$m \approx 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

$$\boxed{\frac{p^2}{2m_e} = e \cdot U}$$

mit  $U = 100 \text{ V}$  errechnet sich  $\lambda$  mit (1)

$\lambda \approx 1,2 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ . Solch eine Wellenlänge fällt in den Bereich der Röntgenstrahlung und ist absolut nachweisbar.

## 0.1 Analogie zu Elektrodynamik

Wir betrachten die Wellengleichung für das Vektorpotential aus der Elektrodynamik:

$$\left( \Delta - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \vec{A}(\vec{r}, t) = 0 \quad (2)$$

$$\text{mit } \vec{A}(\vec{r}, t) = \int d^3\vec{k} \, \vec{A}_{\vec{k}} \cdot e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$$

Wir erhalten eine Lösung, wenn:

$$\rightarrow \left( -|\vec{k}|^2 + \frac{\omega^2}{c^2} \right) \vec{A}_{\vec{k}} = 0$$

$$\rightarrow k^2 = |\vec{k}|^2 = \frac{\omega^2}{c^2}$$

Dispersionsrelation

mit  $E = \hbar \cdot \omega$  und  $\vec{p} = \hbar \cdot \vec{k}$  folgt:

$$\left( |\vec{p}|^2 - \frac{E^2}{c^2} \right) \vec{A}_{\vec{k}} = 0 \quad (3)$$

Aus einem Vergleich mit der Gleichung 3 und 2 folgt:

$$\vec{p} \rightarrow -i\hbar \nabla \qquad E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

freies massives Teilchen gilt:

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

Daraus ergibt sich die Schrödingergleichung:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t)}$$

Dies ist eine **lineare partielle Differentialgleichung** erster Ordnung.

Aus der Linearität folgt das  $\Rightarrow$  **Superpositionsprinzip** ( Wenn wir Lösungen haben, ist die Summe dieser Lösungen auch wieder eine Lösung der Differentialgleichung)

$$\boxed{\text{falls } \psi_A(\vec{r}, t) \text{ und } \psi_B(\vec{r}, t) \text{ Lösungen} \Rightarrow \psi(\vec{r}, t) = \alpha \cdot \psi_A(\vec{r}, t) + \beta \cdot \psi_B(\vec{r}, t)}$$

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}} A_{\vec{k}} \cdot e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \frac{\hbar \vec{k}^2}{2m} t)}$$

$$\text{mit} \quad \omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{p^2}{2m\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

$$\psi(\vec{r}, t) = \int d^3k A_{\vec{k}} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \frac{\hbar k^2}{2m} t)}$$

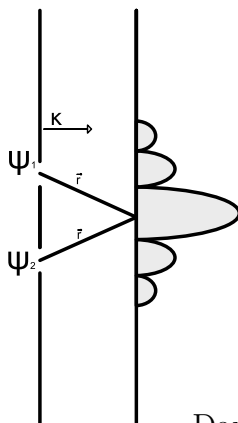
## Wellencharakter

Experimentell: Beugung von Teilchen am Doppelspalt

Was ist die Bedeutung von  $\psi(\vec{r}, t)$  ?

$\psi(\vec{r}, t)$  ist selber keine messbare Größe wie das elektrische - oder magnetische Feld.

Beispiel: (Elektronen am Doppelspalt)



$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1 e^{i\vec{k}\vec{r}_1} + \psi_2 e^{i\vec{k}\vec{r}_2})$$

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{2} |\psi_1|^2 + \frac{1}{2} |\psi_2|^2 + \frac{1}{2} \psi_1^* \psi_2 e^{i\vec{k}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} + \text{C.C.}$$

$$\text{Wenn gilt: } \psi_1^* = \psi_1 = \psi^* = \psi_2 = \psi_0$$

$$\text{Dann: } |\psi(x, t)|^2 = \psi_0^2 (1 + \cos(\vec{k}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2))) > 0$$

$|\psi(\vec{r}, t)|^2$  ist die Wahrscheinlichkeitsdichte das Teilchen am Ort  $\vec{r}$  zu finden.

## 0.2 Wahrscheinlichkeitsinterpretation

Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen in einem bestimmten Intervall (Volumen)  $I$  zu finden, lässt sich mit folgender Formel berechnen:

$$P(I) = \int_I d^3r |\psi(\vec{r})|^2$$

Es folgt die Normierungsbedingung:

$$\int_{V_\infty} d^3r |\psi(\vec{r})|^2 \stackrel{!}{=} 1$$

Die Wahrscheinlichkeit das Teilchen im gesamten Raum zu finden muss gleich eins sein.

### Kontinuitätsgleichung:

Analog zur Elektrodynamik lässt sich eine Kontinuitätsgleichung herleiten. Dazu wertet man die zeitliche Ableitung der Wahrscheinlichkeitsdichte ( $\rho = |\psi(\vec{r}, t)|^2$ ) aus

$$\frac{d}{dt} |\psi(\vec{r}, t)|^2 = \dot{\psi}^* \cdot \psi + \psi^* \cdot \dot{\psi}$$

Nun setzen wir die zeitabhängige Schrödingergleichung ein

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi$$

$$\Rightarrow \dot{\psi} = \frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 \psi$$

$$\Rightarrow \dot{\psi}^* = -\frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 \psi^*$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \frac{d}{dt} |\psi(\vec{r}, t)|^2 &= -\frac{i\hbar}{2m} (\nabla^2 \psi^*) \psi + \frac{i\hbar}{2m} \psi^* \nabla^2 \psi \\ &= -\frac{i\hbar}{2m} \nabla \cdot (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) \end{aligned}$$

definiere

$$\vec{j} \equiv \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$$

Es folgt die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla \cdot \vec{j} = 0$$

$\rho :=$  Wahrscheinlichkeitsdichte

$\vec{j} :=$  Wahrscheinlichkeitsstromdichte

Weiterhin gilt nach Satz von Gauß

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t} \int_V d^3r \, \rho(\vec{r}, t)}_{\text{Änderung der Wahrscheinlichkeit in } V} = - \int_V d^3r \, \nabla \cdot \vec{j} = \underbrace{- \int_{\partial V} d\vec{\Omega} \cdot \vec{j}}_{\text{Wahrscheinlichkeitsstrom durch Oberfläche}}$$

Für  $V \rightarrow \infty$  folgt:

$$\frac{d}{dt} \int_{V_\infty} d^3r \, \rho(\vec{r}, t) = 0$$

Dies war eine heuristische Motivation für die Quantenmechanik. Wie wir sehen werden, müssen einige Konzepte der klassischen Physik aufgegeben werden.

# 1 Formulierung der Quantenmechanik Teil 1

## 2. Vorlesung

### 1.1 Quantenmechanischer Zustand und Hilbertraum

Wir hatten argumentiert, dass Quantenmechanische Systeme durch Wellenfunktionen beschrieben werden sollen, die einer linearen Wellengleichung genügen und deren Betragsquadrat eine Wahrscheinlichkeitsdichte ist.

⇒ fordern: Superponierbarkeit, Normierbarkeit

#### Postulat 1

Der Zustand eines physikalischen Systems wird bis auf einen komplexen Vorfaktor von Betrag 1 durch einen normierten Vektor  $|\psi\rangle$  in einem Hilbertraum (linearer Raum mit gewissen Eigenschaften) beschrieben.

#### 1.1.1 Hilbertraum

Menge  $\mathcal{H}$  von Elementen  $|f\rangle, |g\rangle, |h\rangle, \dots$  (Vektoren) mit folgenden Eigenschaften

##### Axiom 1:

$\mathcal{H}$  ist ein linearer Raum über komplexen Zahlen:  $\alpha, \beta \in \mathbb{C}; |f\rangle, |h\rangle \in \mathcal{H}$

$$\text{i) } \alpha(|f\rangle + |g\rangle) = \alpha|f\rangle + \alpha|g\rangle \in \mathcal{H}$$

$$\text{ii) } (\alpha + \beta)|f\rangle = \alpha|f\rangle + \beta|f\rangle \in \mathcal{H}$$

$$\text{iii) } \alpha(\beta|f\rangle) = (\alpha \cdot \beta)|f\rangle \in \mathcal{H}$$

$$\text{iv) } 1|f\rangle = |f\rangle$$

$$\text{v) } 0|f\rangle = |0\rangle_v \\ \text{mit } |0\rangle_v := \text{Nullvektor}$$

$$\text{vi) } \alpha|0\rangle_v = |0\rangle_v$$

**Axiom 2:**

es existiert ein positiv definiertes Skalarprodukt:

$$|f\rangle, |g\rangle \in \mathcal{H} \longrightarrow (|f\rangle \cdot |g\rangle) = \langle f|g\rangle \in \mathbb{C}$$

$$|f\rangle \cdot |g\rangle = (|g\rangle \cdot |f\rangle)^*$$

Beziehungsweise:

$$\boxed{\langle f|g\rangle = \langle g|f\rangle^* > 0}$$

Damit können wir eine **Norm** definieren:

$$\text{i) } \| |f\rangle \| = \sqrt{\langle f|f\rangle} \\ 0 \text{ falls } |f\rangle \neq |0\rangle \checkmark$$

$$\text{ii) } \|\alpha \cdot |f\rangle\| = |\alpha| \cdot \| |f\rangle \| \quad \forall \alpha \in \mathbb{C}$$

$$\text{iii) Dreiecksungleichung: } \|\psi_1 + \psi_2\| \leq \|\psi_1\| + \|\psi_2\|$$

Ein Hilbertraum  $\mathcal{H}$  heißt separabel, wenn es eine abzählbare, vollständige Orthonormalbasis (ONB) gibt, wenn also gilt:

$$\{|\Phi_n\rangle\}_{n \in \mathbb{N}} \in \mathcal{H}$$

$$\langle \Phi_n | \Phi_m \rangle = \delta_{nm}$$

$$\forall |f\rangle \in \mathcal{H} : \quad |f\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \langle |f\rangle | \phi_n \rangle \cdot |\phi_n\rangle$$

Hat die Basis endlich viele Elemente  $d$ , so heißt  $\mathcal{H}$  endlichdimensional und  $d$  **Dimension** von  $\mathcal{H}$ .

**Beispiel:**

i)

$$\mathbb{C}^n, n \in \mathbb{N} \quad , c_1, \dots, c_n, d_1, \dots, d_n \in \mathbb{C}$$

$$(c_1, \dots, c_n) \cdot (d_1, \dots, d_n) = \sum_{i=1}^n c_i^* d_i$$

ii)  $L^2(\mathbb{R}^3)$  Raum der auf  $\mathbb{R}^3$  definierten **komplexwertigen** und quadratintegrierbaren Funktionen.

$$f \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) : \int_{\mathbb{R}^3} d^3x |f(x)|^2 < \infty \quad f : \mathbb{R}^3 \longrightarrow \mathbb{C}$$

$$f \cdot g = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x f^*(x) \cdot g(x)$$

## 1.2 Observablen in der Quantenmechanik

Messbare Größen sind immer reellwertig. Wir hatten gesehen, dass diese in der Mirkowelt statistischen Charakter haben.

$|\psi|^2$  ist die Wahrscheinlichkeitsdichte. Dann gilt für den Erwartungswert einer Ortsmessung:

$$\begin{aligned} & \int dx \ x |\psi(x)|^2 := \langle x \rangle \\ &= \int dx \ \psi^*(x) \underbrace{x \psi(x)}_{\phi(x)} \\ &= \int dx \ \psi^*(x) \phi(x) \\ &= \langle \psi | \phi \rangle = \langle \psi | x \psi \rangle \end{aligned}$$

$\Rightarrow$  Zustand:  $\phi(x) = x \cdot \psi(x)$  entsteht aus  $\psi$  durch Multiplikation ("Anwendung") mit  $x$  ("von  $x$ ").

$$P_x = \frac{\hbar}{i} \cdot \frac{d}{dx} \quad \text{stellt den Impuls eines Teilchens dar}$$

wir erwarten:

$$\langle \hat{p} \rangle = \int dx \psi^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi(x)$$

$$= \int dx \psi^*(x) \phi(x)$$

$$= \langle \psi | \phi \rangle = \langle \psi | p \psi \rangle$$

$$\phi = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi(x)$$

ist ein Zustand der aus  $\psi$  entsteht

Observablen  $\Rightarrow$  Operatoren

**Postulat 2:**

Jeder Observable eines quantenmechanischen Mikrosystems entspricht ein selbstadjungiert linearer Operator. Die möglichen Messwerte der Observablen entsprechen gerade den Eigenwerten des Operators.

**Definition (linearer Operator):**

$\hat{A}$  heißt linearer Operator in  $\mathcal{H}$ , falls:

$$\hat{A}(\alpha|f\rangle + \beta|g\rangle) = \alpha \cdot \hat{A}|f\rangle + \beta \cdot \hat{A}|g\rangle \quad \forall \alpha, \beta \in \mathbb{C}$$

**Definition (Norm):**

Norm von  $\hat{A}$

$$\|\hat{A}\| = \sup_{\hat{A} \neq |0\rangle} \frac{\|\hat{A} \cdot |f\rangle\|}{\||f\rangle\|} \quad (4)$$

falls  $\|\hat{A}\| < \infty$  heißt  $\hat{A}$  **beschränkt**

Ab jetzt betrachten wir, falls nicht anders angegeben, beschränkte Operator  $\hat{A}^\dagger$   
 $\dagger$  = Dagger

**Definition (hermitesch konjugierter Operator):**



zu  $\hat{A}$  konjugierter (hermitesch konjugierter) Operator  $\hat{A}^\dagger$

$$\hat{A} : \underset{\text{Def-Be}}{D_A} \longrightarrow \underset{\text{Werte-Be.}}{W_A}$$

$$\hat{A}^\dagger : D_{A^\dagger} \longrightarrow W_{\hat{A}^\dagger}$$

$$\text{im Allgemeinen : } D_A, W_A, D_A^\dagger, W_A^\dagger \subseteq \mathcal{H}$$

$$\boxed{\langle f | \hat{A} g \rangle = \langle \hat{A}^\dagger f | g \rangle}$$

$$\forall |f\rangle \in D_{A^\dagger}, |g\rangle \in D_A$$

**Definition (hermitesche Operatoren):**

$\hat{A}$  heißt hermitesch, falls:

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

auf  $D_A \cap D_{A^\dagger}$

**Definition (selbstadjungierte Operatoren):**

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A} \text{ und } D_A = D_{A^\dagger} = \mathcal{H}$$

Dann heißt  $\hat{A}$  selbstadjungiert.

**Bemerkung:**

Im unendlich dimensionalem nicht separablen Hilbertraum gilt im Allgemeinen **nicht** "hermitesch=selbstadjungiert"

**Beispiel:**

$$\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$$

$$A = \begin{pmatrix} a & b \\ b^* & c \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \begin{matrix} a, c \in \mathbb{R} \\ b \in \mathbb{C} \end{matrix}$$

$$\begin{aligned}
\langle f|A \cdot g\rangle &= (f_1^*, f_2^*) \cdot \begin{pmatrix} a & b \\ b^* & c \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} g_1 \\ g_2 \end{pmatrix} \\
&= (f_1^*, f_2^*) \cdot \begin{pmatrix} ag_1 & bg_2 \\ b^*g_1 & cg_2 \end{pmatrix} \\
&= af_1^*g_1 + \underbrace{bf_1^*}_{(b^*f_1)^*}g_2 + \underbrace{b^*f_2^*}_{(bf_2)^*}g_1 + cf_2^*g_2 \\
A^\dagger &= (A^T)^* = \begin{pmatrix} a & b^* \\ b & c \end{pmatrix}^* = \begin{pmatrix} a & b \\ b^* & c \end{pmatrix} = A \\
\Rightarrow |A^\dagger f\rangle &= \begin{pmatrix} a & b \\ b^* & c \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = \dots \Rightarrow \langle A^* f|g\rangle \\
&= \dots = \langle f|Ag\rangle
\end{aligned}$$

□

### 1.2.1 wichtige Eigenschaften selbstadjungierter Operatoren

Sei  $\hat{A}$  selbstadjungiert, dann gilt:

- i)  $\langle f|\hat{A}f\rangle$  ist reell
- ii) die Eigenwerte von  $\hat{A}$  sind reell
- iii) Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal
- iv) aus den Eigenvektoren von  $\hat{A}$  kann ein vollständiger Satz von normierten orthogonalen Basisvektoren konstruiert werden.

#### Folgerung:

$A$  ist selbstadjungiert, Eigenzustände  $|a_n\rangle$   
das heißt  $\hat{A}|a_n\rangle = a_n|a_n\rangle$

$$\text{i) } \forall |f\rangle \in \mathcal{H} \quad \boxed{|f\rangle = \sum_n c_n |a_n\rangle} \quad \text{wobei } c_n = \langle a_n|f\rangle$$

ii) für jeden linearen Operator  $\hat{B}$  gilt:

$$\begin{aligned}\hat{B}|f\rangle &= \sum_n \langle a_n | \hat{B} | f \rangle |a_n\rangle \\ &= \sum_{n,m} \langle a_n | \hat{B} | a_m \rangle c_m |a_n\rangle\end{aligned}$$

eingesetzt mit:

$$|f\rangle = \sum_m c_m |a_m\rangle$$

das heißt, es besteht ein eindeutiger Zusammenhang:

$$\boxed{\hat{B} \Longleftrightarrow B_{nm}} = \langle a_n | \hat{B} | a_m \rangle$$

Jeder Operator in einem separablen Hilbertraum kann als endlich oder unendlich dimensionale Matrix geschrieben werden. Es gilt:

$$\begin{aligned}\hat{A}|a_n\rangle &= a_n|a_n\rangle \\ f(\hat{A})|a_n\rangle &= f(a_n)|a_n\rangle \quad f(\hat{A}) \text{ ist definiert über } f(x) = a + bx + cx^2 + \dots \\ f(\hat{A}) &= a + b \cdot \hat{A} + c \cdot \hat{A}^2 + \dots \\ \hat{A}^n &= \underbrace{\hat{A} \cdot \dots \cdot \hat{A}}_n\end{aligned}$$

Das heißt jeder selbstadjungierte Operator  $\hat{A}$  bzw. jede Funktion von  $\hat{A}$  kann wie folgt durch die Eigenwerte dargestellt werden:

$$\boxed{f(\hat{A}) = \sum_n f(a_n) \hat{P}_n} \quad \text{Spektralzerlegung von } f(\hat{A})$$

$\hat{P}_n$  ist orthogonaler Projektor auf  $|a_n\rangle$

### 3. Vorlesung Wiederholung:

$$\begin{aligned}(|f\rangle \cdot |g\rangle) &= \langle f | g \rangle = \langle g | f \rangle^* \\ \langle f | f \rangle &\geq 0 \\ \| |f\rangle \| &= \sqrt{\langle f | f \rangle} \quad (\text{Norm})\end{aligned}$$

**Definition (Observable):**

Unter einer Observable versteht man eine Messapparatur für eine bestimmte physikalische Größe. (Nolting)

### Hilbertraum:

$\mathcal{H} :=$  Hilbertraum

Hilbertraum = linearer, komplexer Raum mit Skalarprodukt.

### hermitesche Adjungation $\hat{A}^\dagger$ :

$$\left. \begin{aligned} \hat{A}|g\rangle &= |\hat{A}g\rangle \in \mathcal{H} \\ \langle f|\hat{A}^\dagger g\rangle &= \langle \hat{A}f|g\rangle \\ \langle f|\hat{A}^\dagger g\rangle &= \langle \hat{A}f|g\rangle \end{aligned} \right\} \quad \text{versch. Definitionen von } \hat{A}, \hat{A}^\dagger$$

### hermitescher Operator:

$$\hat{A} = \hat{A}^\dagger \qquad D_A \cap D_{A^\dagger}$$

### für $n \times n$ -Matrizen:

$$\left( \begin{pmatrix} & \\ & \end{pmatrix} \right)^\dagger = \left( \left( \begin{pmatrix} & \\ & \end{pmatrix} \right)^T \right)^* \quad (\text{transponieren und komplex konjugieren})$$

### selbstadjungierter Operator:

$$\hat{A} = \hat{A}^\dagger \qquad D_{\hat{A}} = D_{\hat{A}^\dagger} = \mathcal{H}$$

Es muss ein hermitescher Operator sein, da ansonsten manche Messwerte nicht existieren (nicht reellwertig) wären. Ein selbstadjungierter Operator ist insbesondere auch hermitesch.

- $\langle f|\hat{A}f\rangle = \langle f|\hat{A}|f\rangle$  reell
- Eigenwerte von  $\hat{A}$  reell, Eigenwerte hermitescher Operatoren sind reell.  
 $\hat{A}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$  mit  $\lambda = \lambda^*$
- Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten sind **orthogonal**  
 $\langle \lambda_1|\lambda_2\rangle = 0$  für  $\lambda_1 \neq \lambda_2$
- alle Eigenvektoren eines selbstadjungierten Operators  $\hat{A}$  bilden einen vollständigen Satz da.

$$\frac{P^2}{2m} \longrightarrow \frac{\hat{p}^2}{2m} \quad \text{i.A. } f(\hat{A})$$

$$f(\hat{A}) = a_0 + a_1 + a_2 \hat{A}^2 + \dots$$

$$f(\hat{A}) = a_0 \mathbb{1} + a_1(\hat{A}) + a_2 \hat{A} \hat{A} + \dots$$

$$\boxed{f(\hat{A}) = \sum_n f(a_n) \hat{P}_n}$$

Mit  $\hat{P}$  als Projektionsoperator. Definiert als dyadisches Produkt:

$$\hat{P}_n := |a_n\rangle\langle a_n|.$$

Ein linearer, selbstadjungierter Operator  $P$  heißt **Projektionsoperator**, wenn gilt:  $\hat{P}^2 = \hat{P}$

$$\hat{A}|a_n\rangle = a_n|a_n\rangle$$

**Ende Wiederholung**

**Definition (Projektionsoperator):**

$$\hat{P}_n^2 = \hat{P}_n$$

$$\hat{Q}_n = \mathbb{1} - \hat{P}_n$$

hier mit Projektionsoperator:

$$\hat{P}_n|f\rangle = \langle a_n|f\rangle |a_n\rangle$$

$$= |a_n\rangle \langle a_n|f\rangle$$

$$\hat{P}_n = |a_n\rangle\langle a_n|$$

**Definition (unitär):**

ein beschränkter Operator auf  $\mathcal{H}$ ,  $\hat{U}$  heißt **unitär**, wenn  $\hat{U}^{-1}$  existiert

( $\hat{U}^{-1}\hat{U} = \mathbb{1} = \hat{U}\hat{U}^{-1}$ ) und  $\boxed{\hat{U}^{-1} = \hat{U}^\dagger}$

**Beispiel:**

$$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned}
(\hat{U} |f\rangle \cdot \hat{U} |g\rangle) &= \langle \hat{U} f | \hat{U} g \rangle \\
\langle f | \hat{U}^\dagger \hat{U} g \rangle &= \langle f | \hat{U}^{-1} \cdot \hat{U} g \rangle \\
&= \langle f | \hat{U}^{-1} \hat{U} g \rangle
\end{aligned}$$

**unitäre Transformation:**  $|f\rangle \longrightarrow \hat{U} |f\rangle = \langle f | g \rangle$

**Definition (Kommutator  $\hat{A}, \hat{B}$ ):**

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

$\hat{A}, \hat{B}$  kommutieren falls:  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$

**Beispiel (Drehungen):**

$$G_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad G_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad G_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Frage: Wie sieht der Kommutator aus?  $[G_x, G_y] = ?$

$$G_x G_y = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} = i G_z$$

$$G_x G_y = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} = i G_z$$

$$G_y G_x = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} = -i G_z$$

$$G^2 = G_x^2 + G_y^2 + G_z^2 = 3 \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$[G_x, G^2] = [G_y, G^2] = [G_z, G^2] = 0$$

**Satz:** Falls  $\hat{A}$  und  $\hat{B}$  kommutieren, d.h.  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$  (auf ganz  $\mathcal{H}$ ) . Dann existieren ein gemeinsamer vollständiger Satz von **Eigenvektoren**.

**Beweis:**

$$„\Rightarrow“ \text{ Sei: } \hat{A}|\lambda_1\rangle = \lambda_1|\lambda_1\rangle \quad \text{und} \quad \hat{B}|\lambda_1\rangle = \varepsilon_1|\lambda_1\rangle$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \hat{A}\hat{B}|\lambda_1\rangle &= \varepsilon_1\hat{A}|\lambda_1\rangle \\ &= \varepsilon_1\lambda_1|\lambda_1\rangle \\ &= \lambda_1\varepsilon_1|\lambda_1\rangle \\ &= \hat{B}\hat{A}|\lambda_1\rangle \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \hat{A}\hat{B}|\lambda_1\rangle - \hat{B}\hat{A}|\lambda_1\rangle = 0$$

$$\Rightarrow (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})|\lambda_1\rangle = 0$$

Teilen sich die Operatoren  $\hat{A}, \hat{B}$  nun mehrere Eigenvektoren, die eine vollständige Basis des Hilbertraumes bilden, so gilt die letzte Implikation für alle  $|\lambda\rangle \in \mathcal{H}$  und damit gilt  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ .

$$„\Leftarrow“ \text{ Sei nun } [\hat{A}, \hat{B}] = 0$$

$$\Rightarrow (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})|\psi\rangle = 0 \quad \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}.$$

Aus Basisdarstellung  $|\psi\rangle = \sum_i \langle\lambda_i|\psi\rangle |\lambda_i\rangle$  folgt direkt die Behauptung.  $\square$

Was nun passieren kann, ist, dass ein Operator ein **entartetes** Spektrum besitzt. Dann gilt z.B.:

$$\hat{A}|\lambda_1\rangle = \lambda|\lambda_1\rangle \text{ und } \hat{A}|\lambda_2\rangle = \lambda|\lambda_2\rangle \quad \text{sodass auch } \alpha|\lambda_1\rangle + \beta|\lambda_2\rangle \text{ Eigenzustand ist.}$$

Derselbe Eigenwert tritt also bei verschiedenen Eigenzuständen auf. Da die Eigenwerte das Einzige sind, was durch Messungen ermittelt werden kann, benötigt es weitere Informationen um den Zustand des Systems zu bestimmen. Dazu behilft man sich weiterer, kommutierender Operatoren, sodass durch die Kombination der Eigenwerte der gemessene Zustand eindeutig bestimmt wird:

## 1.2.2 Vollständige Sätze von Operatoren

Es sei  $(\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots)$  ein Satz kommutierender Operatoren.

Falls zu jedem Satz von Eigenwerten  $\lambda = (a_n, b_n, c_n, \dots)$  nur **ein** Eigenvektor  $|\lambda\rangle$  gehört, dann nennt man diesen Satz einen **vollständigen** Satz von Operatoren.

**Vollständigkeit:**

**Satz** Ein Operator  $\hat{c}$  der mit jedem Operator  $\{\hat{A}, \hat{B}, \dots\}$  eines vollständigen Satzes kommutiert, lässt sich als Funktion dieser Operatoren darstellen.

**Beispiel:**

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\lambda_+ = +1 \qquad |\lambda_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\lambda_- = -1 \qquad |\lambda_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}; \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_y^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{d.h. } [\sigma_x, \sigma_y^2] = 0$$

$$\sigma_x \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_x \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = -1 \cdot \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Also muss sich  $\sigma_y^2$  durch  $\sigma_x$  darstellen lassen:

$$\sigma_y^2 \stackrel{?}{=} \sigma_x^2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \checkmark$$

—→ am Ende kommt raus, dass bei vollständigem Satz von Operatoren nur ein 1 Eigenvektor gehört. siehe Definition 1.2.2



## 1.3 Fundamentale Operatoren in der Quantenmechanik

klassische Mechanik  $q_j, P_j$

$$\text{Poissonklammer } \{A(q_j, P_j), B(q_j, P_j)\} = \sum_j \left( \frac{\partial A}{\partial q_j} \cdot \frac{\partial B}{\partial P_j} - \frac{\partial A}{\partial P_j} \cdot \frac{\partial B}{\partial q_j} \right)$$

$$\{q_j, q_l\}_p = \{P_j, P_l\}_p = 0$$

$$\{q_j, P_l\} = \delta_{jl}$$

### 1.3.1 Korrespondenzprinzip

kartesische Koordinaten  $q$  und Impulse  $p$  werden durch selbstadjungierte Operatoren  $\hat{q}$  und  $\hat{p}$  ersetzt.

$$\text{Poisson Algebra} \longrightarrow \text{Heisenberg Algebra} \quad \underbrace{\{\cdot, \cdot\}_p}_{\delta_{jl}} = -\frac{i}{\hbar} [\cdot, \cdot]$$

$$\begin{aligned} [\hat{q}_j, \hat{q}_l] &= [\hat{P}_j, \hat{P}_l] = 0 \\ [\hat{q}_j, \hat{P}_l] &= i\hbar \delta_{jl} \end{aligned}$$

### 1.3.2 Mechanik

$$F(q_j, P_l) \longrightarrow F(\hat{q}_j, \hat{P}_l) \quad |_{\text{symm}}$$

$$\text{i) } x \cdot P = P \cdot x \longrightarrow \cancel{\hat{x}\hat{P}} \neq \cancel{\hat{P}\hat{x}} \\ \frac{1}{2}(\hat{P}\hat{x} + \hat{x}\hat{P})$$

$$\begin{aligned} \text{ii) } \vec{L} &= \vec{r} \times \vec{p} & \hat{\vec{L}} &= \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} \\ & & &= \vec{e}_i \sum_{ijk} \hat{x}_j \cdot \hat{P}_k \end{aligned}$$

Mit dem Levi-Civita kommt eine identische Darstellung zu Stande, da der Kommutator der einzelnen Komponenten=0 ist. Als Beispiel:

Erste Zeile:  $YPz - ZPy$  (diese sind unabhängig voneinander)

$$\text{iii) } H = \frac{p^2}{2m} + V(r) \qquad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r})$$

### 1.3.3 Ortsdarstellung

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle \qquad x \in \mathbb{R}, \text{ kontinuierlich}$$

Annahme: Ort sei diskret:  $x_n$ ;  $|x_n\rangle$

$$|\psi\rangle = \sum_n \underbrace{\langle x_n | \psi \rangle}_{\psi_n} |x_n\rangle$$

Die Zahl  $\psi_n$  heißt Ortsdarstellung von  $|\psi\rangle$

**im Kontinuum:**

$$|\psi\rangle = \int dx \langle x | \psi | x \rangle$$

$$\boxed{\psi(x) = \langle x | \psi \rangle} \text{ komplexwertige Funktion von } x, \text{ **Ortsdarstellung** von } |\psi\rangle$$

während im diskreten Fall

$$\langle x_n | x_m \rangle = \delta_{nm}$$

hat man im Kontinuum

$$\begin{aligned} \langle x | y \rangle &= \delta(x - y) \\ |y\rangle &= \int dx \langle x | y \rangle |x\rangle \\ &= \int dx \delta(x - y) |x\rangle = |y\rangle \checkmark \end{aligned}$$

### 4. Vorlesung Wiederholung:

$$\begin{array}{ll} q_j, p_l \longrightarrow \hat{q}_j, \hat{p}_l & \\ \{q_j, q_l\} = \{P_j, P_l\} = 0 & [\hat{q}_j, \hat{q}_l] = [\hat{P}_j, \hat{P}_l] = 0 \\ \{q_j, P_l\} = \delta_{jl} & [\hat{q}_j, \hat{P}_l] = i\hbar\delta_{jl} \\ f(q_j, P_j) \longrightarrow f(\hat{q}_j, \hat{P}_l) & \text{symmetrisch} \end{array}$$

## 1.3.4

Ortsdarstellung

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$$

 $x$  diskret:  $x_n|x_n\rangle$ 

$$\sum_n |x_n\rangle\langle x_n| = \mathbb{1} \quad \text{Vollständig}$$

$$|x_n\rangle\langle x_n| \text{ ist Operator} \quad |x_n\rangle \underbrace{\langle x_n|\psi\rangle}_{\substack{\text{komplexe} \\ \text{Zahl}}} \in \mathcal{H}$$

$$\hat{P}_n = |x_n\rangle\langle x_n|$$

$$\hat{P}_n^2 = \underbrace{|x_n\rangle\langle x_n|}_{\hat{P}_n} \underbrace{\overbrace{|x_n\rangle\langle x_n|}^{=1}}_{\hat{P}_n} = |x_n\rangle\langle x_n|$$

damit:

$$|\psi\rangle = \mathbb{1}|\psi\rangle = \sum_n |x_n\rangle \langle x_n|\psi\rangle$$

Linearkombination der  $|x_n\rangle$  mit Fakt.  $\langle x_n|\psi\rangle$  $\psi_n$  : Ortsdarstellung von  $|\psi\rangle$ Wenn  $x$  kontinuierlich:

$$|\psi\rangle = \int dx |x\rangle \langle x|\psi\rangle$$

mit  $\langle x|\psi\rangle :=$  Ortsdarstellung von  $|\psi\rangle$ 

$$\boxed{\psi(x) = \langle x|\psi\rangle}$$

diskret:

$$\langle x_n|x_m\rangle = \delta_{nm}$$

kontinuierlich:

$$|y\rangle = \delta(x-y)$$

nehmen:

$$|\psi\rangle = |y\rangle$$

$$\begin{aligned}
|y\rangle &= \int dx \quad |x\rangle \langle x|y\rangle \\
&= \int dx \quad |x\rangle \delta(x-y) \\
&= |y\rangle
\end{aligned}
\quad \square$$

**Ende Wiederholung**

$$\hat{A} \longleftrightarrow A_{nm} = \langle x_n | \hat{A} | x_m \rangle$$

**diskreter Fall:**

$$\begin{aligned}
\hat{A} &= \sum_{n,m} |x_n\rangle \langle x_n| \hat{A} |x_m\rangle \langle x_m| \\
&= \sum_{n,m} \underbrace{|x_n\rangle \langle x_m|}_{\text{Operator}} \underbrace{\langle x_n| \hat{A} |x_m\rangle}_{=A_{nm}}
\end{aligned}$$

**kontinuierlicher Fall:**

$$\hat{A} = \int dx \int dy \quad |x\rangle \langle y| \langle x| \hat{A} |y\rangle$$

mit  $\langle x| \hat{A} |y\rangle := \text{Ortsdarstellung von } \hat{A}$

$$A(x, y) \equiv \langle x | \hat{A} | y \rangle$$

$$\langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle \equiv \langle \phi | \hat{A} \psi \rangle = \int dx \int dy \quad \langle \phi | x \rangle \langle y | \psi \rangle A(x, y)$$

$$\langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle = \int dx \int dy \quad \phi^*(x) \psi(y) A(x, y)$$

$$\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \int dx \int dy \quad \psi^*(x) \psi(y) A(x, y)$$

$$\boxed{\langle x | \hat{x} | y \rangle = y \langle x | y \rangle = y \delta(x - y)}$$

das heißt:

$$\langle \phi | \hat{x} | \psi \rangle = \int dx \int dy \quad \phi^*(x) \psi(y) x \delta(x - y) = \int dx \quad \phi^*(x) x \psi(x)$$

$$\langle \phi | f(\hat{x}) | \psi \rangle = \int dx \phi^*(x) f(x) \psi(x)$$

Neue Frage:

$$\begin{aligned} \langle x | \hat{p} | y \rangle &= ? \\ [\hat{x}, \hat{p}] &= i\hbar \end{aligned}$$

$$\langle x | [\hat{x}, \hat{p}] | y \rangle = i\hbar \langle x | y \rangle = i\hbar \delta(x - y)$$

$$\underbrace{\langle x | \hat{x} \hat{p} | y \rangle}_{\langle x | \hat{x} = x | x \rangle} - \underbrace{\langle x | \hat{p} \hat{x} | y \rangle}_{= y | y \rangle} = i\hbar \delta(x - y)$$

aus:  $\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle \longrightarrow \langle \psi | \hat{x} = \langle \hat{x}^\dagger \psi | = \langle \hat{x}^\dagger \psi |$   
 $\Rightarrow \langle x | \hat{x} = x \langle x |$

$$x \langle x | \hat{p} | y \rangle - \langle x | \hat{p} | y \rangle y = i\hbar \delta(x - y)$$

$$\langle x | \hat{p} | y \rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \delta(x - y) = + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \delta(x - y)$$

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{i} \left( x \frac{\partial}{\partial y} \delta(x - y) - \frac{\partial}{\partial y} \delta(x - y) y \right) &= \frac{\hbar}{i} \left( x \cancel{\frac{\partial}{\partial y} \delta(x - y)} - \delta(x - y) - y \cancel{\frac{\partial}{\partial y} \delta(x - y)} \right) \\ &= i\hbar \delta(x - y) \checkmark \end{aligned}$$

$$\langle \phi | \hat{P} | \psi \rangle = \int dx \int dy \phi^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \delta(x - y) \psi(y) = \int dx \phi^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x)$$

$$\langle \phi | f(\hat{p}) | \psi \rangle = \int dx \phi^*(x) f\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi(x)$$

**Äquivalenzen:**

Ortsdarstellung	Impulsdarstellung
$\hat{x} x\rangle = x x\rangle$	$\hat{p} p\rangle = p p\rangle = \hbar k p\rangle$
$\mathcal{H} \leftrightarrow \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$	$\mathcal{H} \leftrightarrow \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$
$ \psi\rangle \leftrightarrow \psi(x)$	$ \psi\rangle \leftrightarrow \tilde{\psi}(k)$
$\langle\phi \psi\rangle \leftrightarrow \int dx \phi^*(x) \psi(x)$	$\langle\phi \psi\rangle \leftrightarrow \int dk \tilde{\phi}^*(k) \tilde{\psi}(k)$
$\hat{p} \psi\rangle \leftrightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x)$	$\hat{p} \psi\rangle \leftrightarrow p \tilde{\psi}(k) = \hbar k \tilde{\psi}(k)$
$\hat{x} \psi\rangle \leftrightarrow x \psi(x)$	$\hat{x} \psi\rangle \leftrightarrow i \frac{\partial}{\partial k} \tilde{\psi}(k)$

$$\psi(x) \Longleftrightarrow \tilde{\psi}(k) : \text{Fouriertransformation}$$

**1.4 Messungen in der Quantenmechanik**

Spektrum von selbstadjungierten Operatoren  $\hat{A}$   
 Eigenzustände/werte  $\hat{A}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$

diskretes Spektrum von  $\lambda$  :  $\lambda_n \quad n = 1, 2, 3, \dots$

kontinuierliches Spektrum von  $\lambda$  :  $\lambda \in \mathbb{R}$  oder Intervall

auch möglich:  $\lambda$  sowohl kontinuierliche Intervalle  
als auch diskrete Werte

$$\left. \begin{aligned} \hat{A}|\psi_1\rangle &= \lambda|\psi_1\rangle \\ \hat{A}|\psi_2\rangle &= \lambda|\psi_2\rangle \\ \hat{A}|\psi_n\rangle &= \lambda|\psi_n\rangle \end{aligned} \right\} \text{n-fache Entartung}$$

(mehrere Eigenzustände  
zu einem Eigenwert)

**Postulat 3a:** Die Messung einer Observablen  $\hat{A}$  mit nicht-entartetem, diskretem Spektrum in einem Zustand  $|\psi\rangle$  liefert als Messergebnis einen Eigenwert  $a_n$  mit der Wahrscheinlichkeit:

$$P(a_n) = |\langle a_n | \psi \rangle|^2$$

wobei  $|a_n\rangle$  Eigenvektor zum Eigenwert  $a_n$  ist. Der Zustand geht über in  $|a_n\rangle$

$$|\varphi\rangle \xrightarrow[\downarrow a_n]{\hat{A}} |a_n\rangle \quad (5)$$

$$p(a_n) = |\langle a_n | \psi \rangle|^2$$

**Bemerkung:**

$$\text{Entartung } p(a_n) = \sum_{|a_n\rangle} |\langle a_n | \psi \rangle|^2$$

**Beispiel:**

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

$$\text{Observable: } \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} \text{Eigenzustände:} \quad |\phi_+\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} & \text{mit } \lambda_+ &= 1 \\ |\phi_-\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} & \text{mit } \lambda_- &= -1 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} p(1) &= |\langle \phi_+ | \psi \rangle|^2 = \frac{1}{2} \\ p(-1) &= |\langle \phi_- | \psi \rangle|^2 = \frac{1}{2} \end{aligned}$$

**Momente der Wahrscheinlichkeitsverteilung:**

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

$$\begin{aligned} \text{wissen: } \sum_n |a_n\rangle\langle a_n| &= \mathbb{1} & \hat{A}|a_n\rangle &= a_n|a_n\rangle \\ \langle \hat{A} \rangle &= \langle \psi | \mathbb{1} \cdot \hat{A} \cdot \mathbb{1} | \psi \rangle \end{aligned}$$

Man multipliziert mit dem 1-Operator (neutrales Element) und setzt die Beziehung von Oberhalb ein.

$$\begin{aligned} &= \sum_{n,m} \langle \psi | a_n \rangle \underbrace{\langle a_n | \hat{A} | a_m \rangle}_{a_n \cdot \delta_{n,m}} \langle a_m | \psi \rangle \\ &= \sum_n |\langle a_n | \psi \rangle|^2 \cdot a_n \end{aligned}$$

$$\boxed{\langle \hat{A} \rangle = \sum_n p(a_n) \cdot a_n}$$

$$\langle \hat{A}^m \rangle = \sum_n p(a_n) \cdot a_n^m$$

**Schwankungsquadrat:**

$$\begin{aligned} \langle \Delta \hat{A}^2 \rangle &= \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle \\ &= \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2 \end{aligned}$$

**Varianz:**

$$\Delta \hat{A} = \sqrt{\langle \Delta \hat{A}^2 \rangle}$$



**Beispiel:**

$$\begin{aligned}
|\psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\
\langle \sigma_z \rangle &= p(+1) \cdot 1 + p(-1) \cdot (-1) \\
&= \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0 \\
\langle \Delta \hat{\sigma}_z^2 \rangle &= \langle \hat{\sigma}_z^2 \rangle - \underbrace{\langle \sigma_z \rangle^2}_{=0} \\
&= p(+1)(+1)^2 + p(-1)(-1)^2 = 1
\end{aligned}$$

**Wiederholte Messung einer Observable?**

Selbe Observable bildet von Zustand in den selben Zustand:

Messung zweier Observable  $\hat{A}, \hat{B}$

$$\begin{aligned}
\hat{A}|a_n\rangle &= a_n|a_n\rangle \\
\hat{B}|b_m\rangle &= b_m|b_m\rangle
\end{aligned}$$

I

$$\begin{array}{ccc}
|\psi\rangle & \xrightarrow{\hat{A}} & |a_n\rangle \\
\downarrow & & \downarrow \\
a_n & & a_n \\
p_1 = |\langle a_n | \psi \rangle|^2 & & p_2 = |\langle b_m | a_n \rangle|^2
\end{array}$$

II

$$\begin{array}{ccc}
|\psi\rangle & \xrightarrow{\hat{B}} & |b_m\rangle \\
\downarrow & & \downarrow \\
b_m & & b_m \\
p_3 = |\langle b_m | \psi \rangle|^2 & & p_4 = |\langle a_n | b_m \rangle|^2
\end{array}$$

$$p(b_m, a_n) = p_1 \cdot p_2$$

$$p(a_n, b_m) = p_3 \cdot p_4 = p_3 \cdot p_2 \stackrel{i.A.}{\neq} p(b_m, a_n)$$

$$\boxed{p(a_n, b_m) \neq p(b_m, a_n)}$$

$$\boxed{|\psi'\rangle \neq |\psi''\rangle}$$

Messwahrscheinlichkeit und Zustände nach der Messung hängen von der Reihenfolge der Messung ab!

Ausnahme:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0$$

$$\hat{A}|a_n\rangle = a_n|a_n\rangle$$

$$\hat{B}|a_n\rangle = b_n|a_n\rangle$$

$$p(b_m, a_n) = |\langle a_n|\psi\rangle|^2 \cdot \underbrace{|\langle a_m|a_n\rangle|^2}_{\delta_{m,n}} = \delta_{m,n} |\langle a_n|\psi\rangle|^2$$

$$p(a_n, b_m) = |\langle a_n|\psi\rangle|^2 \cdot \underbrace{|\langle a_n|a_m\rangle|^2}_{\delta_{m,n}} = \delta_{m,n} |\langle a_n|\psi\rangle|^2$$

$$p(b_m, a_n) = p(a_n, b_m)$$

Bei kommutierenden Operatoren sind wir in der Lage Gleichzeitig und in beliebiger Reihenfolge zu messen.

## 5. Vorlesung

## Wiederholung

$$|\varphi\rangle \xrightarrow{\boxed{\hat{A}}} |a_n\rangle \quad (6)$$

↓  
 $a_n$

$$\hat{A}|a_m\rangle = a_m|a_m\rangle$$

$$p(a_n) = |\langle a_n|\psi\rangle|^2$$

$$\sum_n p(a_n) = \sum_n |\langle a_n|\psi\rangle|^2 = \sum_n \langle\psi|a_n\rangle\langle a_n|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle = 1$$

$$\begin{aligned}
\langle \hat{A} \rangle &\stackrel{?}{=} \sum_n p(a_n) a_n \\
&= \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \\
&= \langle \psi | \hat{A} \cdot \underbrace{\sum_n |a_n\rangle \langle a_n|}_{\mathbb{1}} | \psi \rangle \\
&= \langle \psi | \sum_n a_n |a_n\rangle \langle a_n | \psi \rangle \\
&= \sum_n a_n \underbrace{\langle \psi | a_n \rangle \langle a_n | \psi \rangle}_{p(a_n)} \\
&= \sum_n a_n p(a_n)
\end{aligned}$$

$$\langle \Delta \hat{A} \rangle^2 = \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2 \geq 0$$

$$|\psi\rangle \xrightarrow[a_n]{\hat{A}} |a_n\rangle \xrightarrow[b_m]{\hat{B}} |b_m\rangle$$

$$p(b_m; a_n) = \underbrace{|\langle \psi | a_n \rangle|^2}_{1. \text{Messung}} \underbrace{|\langle a_n | b_m \rangle|^2}_{2. \text{Messung}}$$

$$|\psi\rangle \xrightarrow[b_m]{\hat{B}} |b_m\rangle \xrightarrow[a_n]{\hat{A}} |a_n\rangle$$

$$p(a_n; b_m) = |\langle \psi | b_m \rangle|^2 \cdot |\langle b_m | a_n \rangle|^2$$

$$p(a_n; b_m) \neq p(b_m; a_n)$$

In der Quantenmechanik ist im Allgemeinen die Reihenfolge der Messung relevant.

### Ende Wiederholung

$$\begin{aligned}
\text{Ausnahme : } [\hat{A}, \hat{B}] &= \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0 \\
&\Rightarrow p(a_n; b_m) = p(b_m; a_n)
\end{aligned}$$

Ein Satz paarweise kommutierender Observablen kann gleichzeitig genau gemessen werden, d.h. das Messergebnis hängt nicht von der Reihenfolge ab.

„verträgliche“ Observable

- $|\psi\rangle \longleftrightarrow \hat{A}$
- $|\psi\rangle \longleftrightarrow \hat{A}, \hat{B}, \dots$  falls alle paarweis kommutieren
- $|\psi\rangle \longleftrightarrow \hat{A}, \hat{B}, \dots$  mit  $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$

### 1.4.1 allgemeine Unschärferelation

$$\tilde{A} \equiv \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle$$

$$\tilde{B} \equiv \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle$$

$$[\tilde{A}, \tilde{B}] = [\hat{A}, \hat{B}]$$

$$\text{da } \langle \tilde{A} \rangle = \langle \tilde{B} \rangle = 0$$

$$\langle \Delta \hat{A}^2 \rangle = \langle \tilde{A}^2 \rangle$$

$$\langle \Delta \hat{B}^2 \rangle = \langle \tilde{B}^2 \rangle$$

$$||(\tilde{A} - i\lambda\tilde{B}) \cdot |\psi\rangle||^2 \quad \text{Norm}$$

$$\begin{aligned} &= \langle (\tilde{A} - i\lambda\tilde{B}) \cdot |\psi\rangle | (\tilde{A} - i\lambda\tilde{B}) \cdot |\psi\rangle \\ &= \langle \psi | \cdot (\tilde{A} - i\lambda\tilde{B})^\dagger \cdot (\tilde{A} - i\lambda\tilde{B}) \cdot |\psi\rangle \\ &= \langle \psi | \cdot (\tilde{A} + i\lambda\tilde{B})(\tilde{A} - i\lambda\tilde{B}) \cdot |\psi\rangle \\ &= \langle \psi | \cdot \tilde{A}^2 + \lambda^2 \tilde{B}^2 - i\lambda(\tilde{A}\tilde{B} - \tilde{B}\tilde{A}) \cdot |\psi\rangle \\ &= \langle \tilde{A}^2 \rangle + \lambda^2 \langle \tilde{B}^2 \rangle - i\lambda \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \geq 0 \end{aligned}$$

$$\text{Minimalterm : } \frac{d}{d\lambda} = 0$$

$$0 = 2 \cdot \lambda_0 \langle \tilde{B}^2 \rangle - i \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle$$

$$\leadsto \lambda_0 = \frac{i \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle}{2 \langle \tilde{B}^2 \rangle}$$

$$0 \leq \langle \tilde{A}^2 \rangle - \frac{\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle^2}{4 \langle \tilde{B}^2 \rangle} + \frac{\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle^2}{2 \langle \tilde{B}^2 \rangle}$$

$$0 \leq \langle \tilde{A}^2 \rangle + \frac{\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle^2}{4 \langle \tilde{B}^2 \rangle} = \langle \tilde{A}^2 \rangle - \frac{i \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle^2}{4 \langle \tilde{B}^2 \rangle}$$

$$\begin{aligned} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle^* &= \langle \hat{A}\hat{B} \rangle^* - \langle \hat{B}\hat{A} \rangle^* \\ &= \langle \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger \rangle - \langle \hat{A}^\dagger \hat{B}^\dagger \rangle \\ &= \langle \hat{B}\hat{A} \rangle - \langle \hat{A}\hat{B} \rangle \\ &= -\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \end{aligned}$$

$$(i [\hat{A}, \hat{B}])^\dagger = i [\hat{A}, \hat{B}] \Rightarrow \text{hermitesch}$$

$$\langle \tilde{A}^2 \rangle \langle \tilde{B}^2 \rangle \geq \frac{1}{4} \langle i [\hat{A}, \hat{B}] \rangle^2$$

**allgemeine Unschärferelation:**

$$\langle \Delta \hat{A}^2 \rangle \langle \Delta \hat{B}^2 \rangle \geq \frac{1}{4} \langle i [\hat{A}, \hat{B}] \rangle^2$$

„=“ für Zustände minimaler Unschärfe

**Beispiel:**

$$\hat{x}, \hat{p} [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

**Heisenbergsche Unschärferelation:**

$$\langle \Delta \hat{x}^2 \rangle \langle \Delta \hat{p}^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

Intervall  $a_1 < a \leq a_2 \Leftrightarrow \underbrace{\hat{p}(\hat{a}_1, \hat{a}_2)}_{\text{Projektor}}$

a seien Eigenwerte einer Observablen  $\hat{A}$  mit kontinuierlichem. Spektrum

**Postulat 3b:**

Die Messung einer Observable  $\hat{A}$  mit kontinuierlichem Spektrum im Zustand  $|\psi\rangle$  liefert ein Intervall  $I : a_1 < a \leq a_2$  von Eigenwerten mit Wahrscheinlichkeit:

$$p(I) = \langle \psi | \hat{p}(a_1, a_2) | \psi \rangle$$

(diskret  $p(a_n) = ||\langle a_n | \psi \rangle||^2 = \langle \psi | a_n \rangle \langle a_n | \psi \rangle$ )

Nach der Messung ist der Zustand  $|\psi\rangle = \mathcal{N} \hat{p}(a_1, a_2) |\psi\rangle$

mit  $\mathcal{N}$  := Normierung

**Beispiel:**

$$|\psi\rangle; \hat{x}$$

$$I : x_1 < x \leq x_2$$

$$\hat{p}(x_1, x_2) = ?$$

in Ortsdarstellung

$$\hat{p}(x_1, x_2) = \Theta(x_2 - x) \Theta(x - x_1)$$

$$\text{mit Heavyside-Funktion } \Theta(x) = \begin{cases} 1 & x \geq 0 \\ 0 & x \leq 0 \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \text{damit: } P(I) &= \langle \psi | \hat{p}(x_1, x_2) | \psi \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \psi^*(x) \Theta(x_2 - x) \Theta(x - x_1) \psi(x) \\ &= \int_{x_1}^{x_2} dx \, |\psi(x)|^2 \end{aligned}$$

## 1.5 Dynamik in der Quantenmechanik

$$|\psi(t_0)\rangle \longrightarrow |\psi(t)\rangle \tag{7}$$

linearer Operator:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$$

Norm soll erhalten bleiben!

$$\begin{aligned}
 \hat{U} &=? \\
 0 &= \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle \\
 &= \frac{d}{dt} \langle \hat{U}(t, t_0) \psi(t_0) | \hat{U}(t, t_0) \psi(t_0) \rangle \\
 &= \langle \dot{\hat{U}} \hat{U}^{-1} \psi(t_0) | \hat{U} \psi(t_0) \rangle + \langle \hat{U} \psi(t_0) | \dot{\hat{U}} \hat{U}^{-1} \psi(t_0) \rangle \\
 &= \langle \underbrace{\dot{\hat{U}} \hat{U}^{-1} \hat{U} \psi(t_0)}_{\psi(t)} | \underbrace{\hat{U} \psi(t_0)}_{\psi(t)} \rangle + \langle \underbrace{\hat{U} \psi(t_0)}_{\psi(t)} | \underbrace{\dot{\hat{U}} \hat{U}^{-1} \hat{U} \psi(t_0)}_{\psi(t)} \rangle \\
 &= \langle \psi(t) | (\dot{\hat{U}} \hat{U}^{-1})^\dagger | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \dot{\hat{U}} \hat{U}^{-1} | \psi(t) \rangle \\
 \Rightarrow 0 &= \dot{\hat{U}} \hat{U}^{-1} + \dot{\hat{U}} \hat{U}^{-1} \\
 (\dot{\hat{U}} \hat{U}^{-1})^\dagger &= -\dot{\hat{U}} \hat{U}^{-1} = \pm i \\
 \Rightarrow k^\dagger &= k
 \end{aligned}$$

**DGL:**

$$\frac{d}{dt} \hat{U} = \mp i k \hat{U}$$

Anfangsbedingungen:

$$\begin{aligned}
 \hat{U}(t_0, t_0) &= \mathbb{1} \\
 \hat{U}(t, t_0) &= e^{-ik(t-t_0)}
 \end{aligned}$$

Die einzige dimensionsbehaftete Größe in der Quantenmechanik ist:  $\hbar$ .

$$\begin{aligned}
 \tilde{k} &\hat{=} \frac{E}{\hbar} \\
 \tilde{k} &= \frac{1}{\hbar} \cdot \hat{H} \\
 \Rightarrow \hat{U}(t, t_0) &= e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} \\
 \text{unitär} \quad \hat{U}^{-1} &= \hat{U}^\dagger \Rightarrow \hat{U} \cdot \hat{U}^\dagger = 1
 \end{aligned}$$



$$\begin{aligned}\hat{U}^\dagger &= e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} = \hat{U}^{-1} \\ \hat{U}^{-1} \hat{U} &= e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} = 1\end{aligned}$$

**zeitabhängige Schrödingergleichung:**

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle &=? \\ &= \frac{d}{dt} \hat{U}(t-t_0) \cdot |\psi(t_0)\rangle = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \\ &= -\frac{i}{\hbar} \hat{H} |\psi(t)\rangle\end{aligned}$$

**zeitabhängige Schrödingergleichung:**

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$$

**Beispiel:**

1 Teilchen im Potential  $V(\vec{r})$ :

$$\begin{aligned}H &= \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \\ i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle &= \left( \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \right) |\psi(t)\rangle\end{aligned}$$

**Ortsdarstellung:**

$$\begin{aligned}|\psi(t)\rangle &\rightarrow \langle \vec{r} | \psi(t) \rangle = |\psi(t, \vec{r})\rangle \\ \hat{\vec{r}} &\rightarrow \vec{r} \\ \hat{\vec{p}} &\rightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla\end{aligned}$$

**Schrödingergleichung (im Ortsraum):**

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(\vec{r}, t)\rangle = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}, t) \right] |\psi(\vec{r}, t)\rangle$$

**stationäre Zustände; Zeitunabhängige (stationäre) Schrödingergleichung**

Physikalische Größen sollten Zeitunabhängig sein.

$$\langle \hat{A} \rangle_t = \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle \stackrel{!}{=} \langle \hat{A} \rangle_{t_0}$$

Das ist gerade der Fall für  $|\psi(t)\rangle \sim |\phi_n\rangle$ .

**stationäre Schrödingergleichung:**

$$\hat{H} |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle$$

Wir wollen diese Gleichung lösen.

**Ortsdarstellung:**

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}, t) \right] \phi_n(\vec{r}) = E_n \phi_n(\vec{r})$$

zur Zeit  $t = t_0$ :  $|\psi(t)\rangle = |\phi_n\rangle$

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\phi_n\rangle = E |\phi_n\rangle = E |\psi(t)\rangle$$

↪ Lösung

$$|\psi\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} E(t-t_0)} |\phi_n\rangle$$

$$\begin{aligned}
\langle \hat{A} \rangle_t &= \langle e^{-\frac{i}{\hbar} E(t-t_0)} \phi_n | \hat{A} | e^{-\frac{i}{\hbar} E(t-t_0)} \phi_n \rangle \\
&= \langle \phi_n | \hat{A} \underbrace{\left( e^{-\frac{i}{\hbar} E(t-t_0)} \right)^\dagger \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} E(t-t_0)}}_{=1} | \phi_n \rangle \\
&= \langle \phi_n | \hat{A} | \phi_n \rangle
\end{aligned}$$

□

Kenntnis aller Eigenvektoren  $|\phi_n\rangle$  und Eigenwerte  $E_n$  erlauben allgemeine Lösung der Schrödingergleichung.

$$\begin{aligned}
\hat{H}|\phi_n\rangle &= E|\phi_n\rangle \\
\{|\phi_n\rangle\} &\quad \text{bilden vollständige Orthonormal Basis (ONB)} \\
|\psi_n(t)\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar} E(t-t_0)} |\phi_n\rangle
\end{aligned}$$

wegen Vollständigkeit gilt für jeden Zustand:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \alpha_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E(t-t_0)} |\phi_n\rangle$$

einsetzen in die Schrödingergleichung:

$$\begin{aligned}
&\Rightarrow \dot{\alpha}_n(t) = 0 \\
&\quad \alpha_n(t) = \alpha_n = \text{const} \\
\text{d.h.:} \quad &|\psi(t=t_0)\rangle = |\psi_0\rangle \\
&i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
|\psi(t)\rangle &= \sum_n \alpha_n e^{-\frac{i}{\hbar} E(t-t_0)} |\phi_n\rangle \\
\alpha_n &= \langle \phi_n | \psi_0 \rangle
\end{aligned}$$

## 6. Vorlesung Wiederholung

Für die Dynamik in der Quantenmechanik erhielten wir folgende Relationen in der Übersicht:

$$\begin{aligned}\hat{U}(t, t_0) &= e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)} \\ |\psi(t)\rangle &= \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \\ i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle &= \hat{H} |\psi(t)\rangle \\ \hat{H} |\phi_E\rangle &= E |\phi_E\rangle \\ |\psi_E(t)\rangle &= e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar} \cdot (t)} |\phi_E\rangle\end{aligned}$$

**stationärer Zustand:**

$$\langle \hat{A} \rangle_t = \langle \psi_E(t) | \hat{A} | \psi_E(t) \rangle = \langle \hat{A} \rangle_{t_0}$$

Sei nun der Zustand eine lineare Superposition mehrerer Zustände:

$$\begin{aligned}\alpha \cdot |\psi_{E_1}(t)\rangle + \beta \cdot |\psi_{E_2}(t)\rangle &= |\psi(t)\rangle \\ \Rightarrow \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle &= |\alpha|^2 \cdot \langle \psi_{E_1}(t) | \hat{A} | \psi_{E_1}(t) \rangle \\ &\quad + |\beta|^2 \cdot \langle \psi_{E_2}(t) | \hat{A} | \psi_{E_2}(t) \rangle \\ &\quad + \alpha^* \beta e^{i\frac{(E_1-E_2)t}{\hbar}} \cdot \langle \psi_{E_1}(t) | \hat{A} | \psi_{E_2}(t) \rangle + \text{C.C.}\end{aligned}$$

Dieser Ausdruck ist im Allgemeinen **nicht** stationär.

**allgemeine Lösung der DGL:**

$$\begin{aligned}|\psi(t)\rangle &= \sum_n \alpha_n e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} |E_n\rangle \\ \alpha_n &= \langle E_n | \psi(t=0) \rangle\end{aligned}$$

**Ende Wiederholung**

Kenntnis der Eigenwerte und Eigenzustände von  $\hat{H}$  erlauben vollständige Lösung eines Anfangswertproblems.

**Erhaltungsgrößen in der Quantenmechanik:**

$\hat{A}$  ist Erhaltungsgröße falls:

$$\begin{aligned}
 \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle &= \text{const} \\
 \Rightarrow 0 &= \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle \\
 0 &\stackrel{!}{=} \left\langle \frac{d}{dt} \psi(t) \middle| \hat{A} \middle| \psi(t) \right\rangle + \left\langle \psi(t) \middle| \hat{A} \middle| \frac{d}{dt} \psi(t) \right\rangle \\
 &= \left\langle -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \psi(t) \middle| \hat{A} \middle| \psi(t) \right\rangle + \left\langle \psi(t) \middle| \hat{A} \middle| -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \psi(t) \right\rangle \\
 &= \left\langle \psi(t) \middle| \left( -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \right)^\dagger \hat{A} \middle| \psi(t) \right\rangle - \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | \hat{A} \cdot \hat{H} | \psi(t) \rangle \\
 &= \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | [\hat{H} \hat{A} - \hat{A} \hat{H}] | \psi(t) \rangle
 \end{aligned}$$

$\hat{A}$  ist Erhaltungsgröße, genau dann wenn:

$$[\hat{H}, \hat{A}] = 0$$

**Bemerkung:**

$$\begin{aligned}
 [\hat{H}, \hat{A}] &= 0 \\
 \Rightarrow \frac{d}{dt} \langle f(\hat{A}) \rangle &= 0
 \end{aligned}$$

**Beispiel (freies Teilchen):**

$$\begin{aligned}
 \hat{H} &= \frac{\vec{p}^2}{2m} \\
 &\hookrightarrow [\hat{\vec{p}}, \hat{H}] = 0 \\
 [\hat{\vec{p}}_x, \hat{H}] &= [\hat{\vec{p}}_y, \hat{H}] = [\hat{\vec{p}}_z, \hat{H}] = 0
 \end{aligned}$$

## 2 Einteilchen-QM in einer räumlichen Dimension

Die Klassische Hamiltonfunktion lautet:  $\hat{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r})$

**Schrödingergleichung**

**Ortsraum:**

$$|\psi\rangle \rightarrow \psi(\vec{r}, t) = \langle \vec{r} | \psi \rangle$$

$$\hat{\vec{r}} \rightarrow \vec{r} \quad \vec{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \cdot \nabla$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}) \psi(\vec{r}, t)$$

**Impulsraum:**

$$|\psi\rangle \rightarrow \tilde{\psi}(\vec{k}, t) = \langle \vec{k} | \psi \rangle$$

$$\hat{\vec{p}} \rightarrow \hbar \vec{k}, \quad \vec{r} \rightarrow i \nabla_{\vec{k}}$$

$$i\hbar \tilde{\psi}(\vec{k}, t) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tilde{\psi}(\vec{k}, t) + V(i \nabla_{\vec{k}}) \tilde{\psi}(\vec{k}, t)$$

**Zusammenhang**  $\psi(x, t) \leftrightarrow \tilde{\psi}(k, t)$ :

$$\psi(x, t) = \langle x | \psi \rangle$$

$$|k\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \quad |x\rangle \langle x | k \rangle$$

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}(\vec{k}, t) &= \langle k | \psi \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \quad \langle k | x \rangle \langle x | \psi \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \quad f(k, x) \psi(x) \end{aligned}$$

$$f(k, x) \equiv \langle k | x \rangle = ?$$

$$\begin{aligned} \text{dazu: } \langle k | \hat{p} | x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dy \quad \underbrace{\langle k | y \rangle}_{f(k, y)} \underbrace{\langle y | \hat{p} | x \rangle}_{-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \delta(y-x)} \\ &= -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} f(k, x) \end{aligned}$$

$$\text{andererseits: } \hat{p} | k \rangle = \hbar k | k \rangle$$

$$\langle k | \hat{p} | x \rangle = \hbar k \langle k | x \rangle$$

$$\hbar k \cdot f(k, x) = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} f(k, x)$$

$$f(k, x) = e^{-ikx} \tilde{\psi}(k, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \quad e^{-ikx} \psi(x, t)$$

$$\psi(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \quad e^{ikx} \cdot \tilde{\psi}(k, t)$$

**Bemerkung:**

Faktor  $\frac{1}{2\pi}$  kann verschieden sein „verteilt“ werden. Der Zusammenhang zwischen Orts- und Impulsraum ist also die Fouriertransformation.

## 2.1 Kontinuitätsgleichung für Wahrscheinlichkeitsdichte (3D)

Die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion lautet:

$$\begin{aligned}
 \rho(\vec{r}, t) &= |\psi(\vec{r}, t)|^2 \\
 \frac{d}{dt}\rho(\vec{r}, t) &= \dot{\psi}^* \psi + \psi^* \dot{\psi} \\
 &= -i \frac{\hbar}{2m} (\Delta \psi^*) \psi + \frac{\hbar}{2m} \psi^* \Delta \psi \\
 &\quad + \underbrace{\frac{i}{\hbar} V \psi^* \psi - \frac{i}{\hbar} \psi^* V \psi}_{=0} \\
 &= \frac{i\hbar}{2m} \nabla \left[ \psi^* \vec{\nabla} \psi - (\nabla(\psi^*)) \psi \right]
 \end{aligned}$$

Aus der obigen Relation folgt mit der passenden Definition die quantenmechanische Version der Kontinuitätsgleichung:

**Wahrscheinlichkeitsstromdichte:**

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = -\frac{i\hbar}{2m} \left[ \psi^* \nabla \psi - (\nabla(\psi^*)) \psi \right]$$

**Kontinuitätsgleichung:**

$$\frac{d}{dt}\rho(\vec{r}, t) + \nabla \cdot \vec{j} = 0$$

$$\begin{aligned}
 \psi(\vec{r}, t) &= \sqrt[2]{\rho(\vec{r}, t)} \exp \left\{ i \frac{\rho}{\hbar} \right\} \\
 \vec{j}(\vec{r}, t) &= \frac{\rho}{m} \nabla S
 \end{aligned}$$



**Beispiel:**

$$\begin{aligned}\psi_k(x, t) &= \langle x | k \rangle = e^{ikx} \\ \vec{j} &= \frac{1}{m} \nabla(\hbar k x) = \frac{\hbar k}{m} \cdot \vec{e}_x \\ \frac{\rho}{\hbar} &= kx\end{aligned}$$

Damit  $\vec{j}$  und  $\nabla \vec{j}$  definiert sind für endliche Potentiale  $V(r)$  müssen  $\psi(\vec{r})$  und  $\nabla \psi(\vec{r})$  stetig sein.

**Übergangsbedingungen:**

Wir müssen also die folgenden Forderungen für gültige Wellenfunktionen aufstellen:

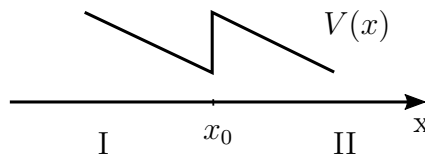


Abbildung 2.1: Übergangsbedingung

$$\begin{aligned}\psi_I(x_0) &\stackrel{!}{=} \psi_{II}(x_0) \\ \frac{d}{dx} \psi_I(x_0) &\stackrel{!}{=} \frac{d}{dx} \psi_{II}(x_0)\end{aligned}$$

**2.2 freies Teilchen in einer Dimension**

Wir betrachten nun das wohl einfachste System in der Quantenmechanik. "Frei" bedeutet hier, dass das Potential im ganzen Raum gleich null ist. Das Problem im Ortsraum zu lösen ist unnötig schwierig, da wir dort eine partielle Differentialgleichung (DGL) zweiter Ordnung im Ort zu lösen hätten, im Impulsraum jedoch nur eine gewöhnliche DGL erster Ordnung in der Zeit. Die Lösung im Ortsraum erhalten wir dann aus der Lösung im Impulsraum, in dem wir diese fouriertransformieren.

$$V(x) = 0$$

$$\text{Ortsraum:} \quad i\hbar \frac{d}{dt} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x, t)$$

$$\text{Impulsraum:} \quad i\hbar \frac{d}{dt} \tilde{\psi}(k, t) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tilde{\psi}(k, t)$$

$$\frac{d}{dt} \tilde{\psi} = -\frac{i\hbar k^2}{2m} \tilde{\psi}$$

$$\hookrightarrow \text{Lösung: } \tilde{\psi}(k, t) = \tilde{\psi}(k, t_0) \cdot e^{-\frac{i\hbar k^2 (t-t_0)}{2m}}$$

Ortsraum durch Rück-Fouriertransformation:

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \tilde{\psi}(k, t_0) \cdot e^{ikx} \cdot e^{-\frac{i\hbar k^2 (t-t_0)}{2m}} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \int_{-\infty}^{\infty} dy \psi(y, t_0) \cdot e^{-iky} \cdot e^{ikx} e^{-\frac{i\hbar k^2 (t-t_0)}{2m}} \end{aligned}$$

**Propagator des freien Teilchens:**

$$G(x, y, t, t_0) \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ik(x-y)} \cdot e^{-\frac{i\hbar k^2 (t-t_0)}{2m}}$$

Mit dieser Formulierung hat jedes Anfangswertproblem die Lösung:

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} dy G(x, y, t, t_0) \cdot \underbrace{\psi(y, t_0)}_{A, B} \\ \Rightarrow \dots \Rightarrow G(x, y, t, t_0) &= \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i(t-t_0)}} \cdot e^{\frac{im(x-y)^2}{2\hbar(t-t_0)}} \end{aligned}$$

Für die folgenden Themen ist es hilfreich, einige spezielle Integrale und deren Lösung zu kennen. Für dieses Zweck machen wir den folgenden Exkurs:

**Exkurs (Gaußintegrale):**

(i)

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} dx \, e^{-\alpha x^2} &= I_1 = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \\
\Rightarrow I_1^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \, e^{-\alpha x^2} \int_{-\infty}^{\infty} dy \, e^{-\alpha y^2} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \, e^{-\alpha(x^2+y^2)} \\
&\stackrel{Pol.}{=} \underbrace{\int_0^{\infty} dr \cdot r}_{(*) : = \frac{1}{2} dz} \cdot \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi}_{2\pi} \cdot e^{-\alpha r^2} \\
&= \pi \int_0^{\infty} dz \, e^{-\alpha z} = \frac{\pi}{\alpha}
\end{aligned}$$

$(*) : \text{Nebenrechnung: } z = r^2 \Rightarrow dz = 2r \, dr \Rightarrow \frac{dz}{2} = dr$

(ii)

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} dx \, e^{-\alpha x^2} e^{\beta x} &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \, e^{-\alpha(x+x_0)^2} \cdot e^{\alpha x_0^2} \\
\cancel{\alpha x^2} + \beta x &= -\alpha(x+x_0)^2 + \alpha x_0^2 \\
&= \cancel{\alpha x^2} - 2\alpha x x_0 - \alpha x_0^2 + \alpha x_0^2 \\
x_0 &= -\frac{\beta}{2\alpha} \\
I_2 &= \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx \, \exp \left\{ -\alpha \underbrace{(x+x_0)^2}_{y^2} \right\}}_{\int_{-\infty}^{\infty} dy \, e^{-\alpha y^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}} \cdot e^{\cancel{\alpha x_0^2} - \frac{\beta^2}{4\alpha}} \\
&= \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \cdot \exp \left\{ \frac{\beta^2}{4\alpha} \right\}
\end{aligned}$$

Die wichtigen Methoden bei der Lösung von Gaußintegralen sind also:

- Berechne das Quadrat des Integrals und gehe zu ebenen Polarkoordinaten über
- Führe quadratische Ergänzung im Exponent der Exponentialfunktion durch

Mit diesem Wissen lassen sich die folgenden Relationen zeigen:

$$\begin{aligned}\langle \hat{p}(t) \rangle &= \langle \hat{p}(0) \rangle \\ \Delta p(t) &= \Delta p(0) \equiv \langle \Delta \hat{p}(0) \rangle \\ \text{klar, da } [\hat{p}, \hat{H}] &= 0 \\ \Delta x^2(t) &= \Delta x^2(0) + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 \Delta x^2(0)}\end{aligned}$$

**Beispiel (Gauß'sches Wellenpaket):**

$$\begin{aligned}\tilde{\psi}(k, 0) &= A \cdot e^{-\frac{k^2}{4\sigma_k^2}} \longleftrightarrow \psi(x, 0) = \frac{A}{2\sigma_x \sqrt{\pi}} \cdot e^{-\frac{x^2}{4\sigma_x^2}} \\ \sigma_x &= \frac{1}{2\sigma_x} \psi(x, t) = \frac{A}{2\sqrt{\pi} \sqrt{\sigma_x^2 + \frac{i\hbar}{2m}}} \cdot e^{-\frac{x^2}{4(\sigma_x^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{2m})}}\end{aligned}$$

Aus diesem Beispiel mit den vorangegangenen Ausdruck für  $\Delta x^2(t)$  lässt sich erkennen, dass die Wellenfunktion mit fortschreitender Zeit "auseinanderläuft", der Bereich mit signifikanter Aufenthaltswahrscheinlichkeit also mit der Zeit anwächst.

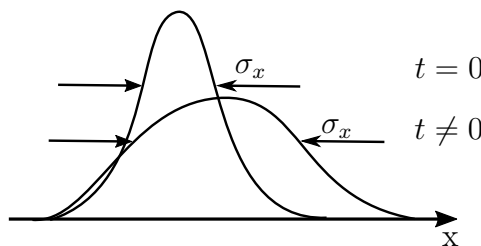


Abbildung 2.2: Auseinanderlaufen des Wellenpakets

Dies mag befremdlich erscheinen, jedoch stellt diese Tatsache eine einfache Konsequenz aus der Unschärferelation dar: Ist der Impuls zu  $t = t_0$  nicht exakt bekannt, so wird sich diese Unschärfe bei fortschreitender Zeit zu immer größeren Abweichungen

äufschaukeln".

Da die Quantenmechanik bei großen Energien in die klassische, newtonsche Mechanik übergehen muss, ist nun die Frage, warum der Effekt des Zerlaufens des Wellenpakets nicht im alltäglichen Leben beobachtet wird. Das folgende Zahlenbeispiel soll das illustrieren.

### Beispiel: (zerlaufendes Wellenpaket)

Wie lange dauert es, bis ein Wellenpaket auf das doppelte seiner ursprünglichen Größe auseinandergerlaufen ist?

$$\Delta x(T) = 2 \Delta x(0) \quad T = ?$$

$$T = 2\sqrt{3} \frac{m}{\hbar} \Delta x(0)^2$$

### Elektron:

$$\Delta x(0) = 1 \mu\text{m} \hat{=} 10^{-6} \text{ m}$$

$$m \hat{=} 9 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

$$T \hat{=} 3 \cdot 10^{-8} \text{ s} \hat{=} 30 \text{ ns}$$

### Murmel:

$$\Delta x(0) \hat{=} 1 \text{ cm} \hat{=} 10^{-2} \text{ m}$$

$$m \hat{=} 100g \hat{=} 10^{-1} \text{ kg}$$

$$T \hat{=} 3 \cdot 10^{29} \text{ s} \hat{=} 10^{22} \text{ Jahre}$$

## 7. Vorlesung Wiederholung

Zunehmende Unschärfe des Wellenpakets:

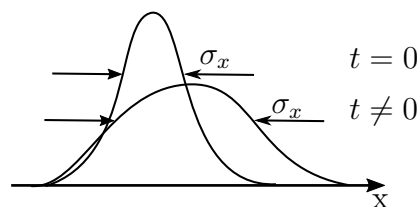


Abbildung 2.3: Dispersion des Wellenpakets

$$\Delta x^2(t) = \Delta x^2(0) + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 \Delta x^2(0)}$$

$$p(t) = p(0)$$

$$\Delta p(t) = \Delta p(0)$$

Ende Wiederholung

## 2.3 Gebundene Zustände: unendlich hohes Kastenpotential

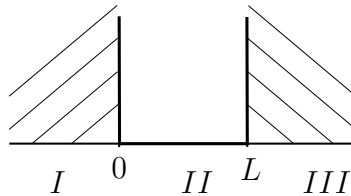


Abbildung 2.4: unendliches Kastenpotential

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq L \\ \infty & \text{sonst} \end{cases} \quad (8)$$

Es muss gelten:

$\int_{-\infty}^{\infty}  \psi ^2 dx = 1$	
<b>Übergangsbedingungen</b>	
$\Phi$	stetig
$\Phi'$	stetig falls $V(x) \neq \infty$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Phi_E(x) + V(x) \Phi_E(x) = E \Phi_E(x)$$

I und III:

$$V(x) = \infty \\ \Rightarrow \Phi_{I,III}(x) = 0$$

**II:**

$$V(x) = 0 \Rightarrow \Phi_{II}''(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2} \Phi_{II}(x)$$

Randbedingung:  $\Phi_{II}(0) = \Phi_{II}(L) = 0$

**$E < 0$ :**

$$\Phi_{II}(x) = e^{\pm i \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar}} x}$$

$$E = -|E|$$

$$\begin{aligned} \Phi_{II}(x) &= A e^{i \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar}} x} + B e^{-i \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar}} x} \\ 0 = \Phi_{II}(0) &= A + B & \Rightarrow A = -B \\ 0 = \Phi_{II}(L) &= A e^{i \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar}} L} + B e^{-i \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar}} L} \neq 0 \end{aligned}$$

Allgemein gilt also:

Es existiert keine Lösung der Schrödingergleichung mit  $E < \text{Minimum von } V(x)$

**$E > 0$ :**

$$\begin{aligned} \Phi_{II}(x) &\sim \exp \left\{ \pm i \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x \right\} \\ \Phi_{II}(x) &= A \cos \left\{ \pm \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x \right\} + B \sin \left\{ \pm \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x \right\} \end{aligned}$$

$$0 = \Phi_{II}(0) \quad \Rightarrow A = 0$$

$$0 = \Phi_{II}(L) = B \sin\left(\underbrace{\sqrt{\frac{2mE}{\hbar}}L}_{\text{vielfaches von } 2\pi}\right)$$

$$\Rightarrow B = 0 \quad \nexists \quad \text{keine Lösung oder} \quad \sqrt{\frac{2mE}{\hbar}}L = n\pi \quad n = 1, 2, 3, \dots, n$$

Randbedingung (Normierbarkeit) führt zur Quantisierung der Energie:

**Energieeigenwerte:**

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ml^2}$$

**Eigenfunktionen:**

$$\Phi_n(x) = B \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

Es bleibt, B zu bestimmen:

$$\int_0^L dx |\Phi_n(x)|^2 = 1 \quad \Rightarrow B = \sqrt{\frac{2}{L}}$$



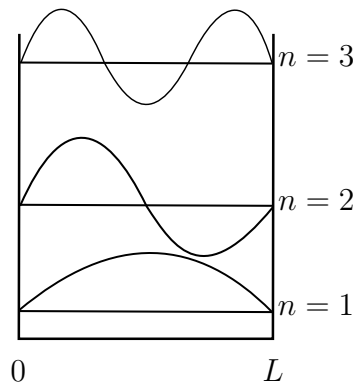


Abbildung 2.5: zustände im Potentialtopf

Verschiebe nun  $V(x)$  um  $\frac{L}{2}$  für ein symmetrisches Potential um die senkrechte Achse:

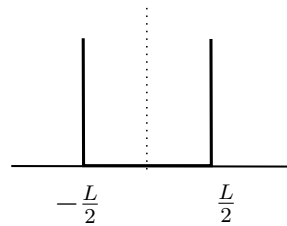


Abbildung 2.6: verschobener Potentialtopf

$$\Phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x + \frac{n\pi}{2}\right)$$

Wir beobachten zwei verschiedene Arten von Eigenfunktionen, die sich in ihrer Parität unterscheiden:

$n = 2m + 1$	$\Phi_n(-x) = \Phi_n(x)$	symmetrisch
$n = 2m$	$\Phi_n(-x) = -\Phi_n(x)$	antisymmetrisch

Für beides gilt aber:

$$|\Phi_n(-x)|^2 = |\Phi_n(x)|^2$$

### 2.3.1 Inversion (Paritätsoperator) (bezüglich $x = 0$ )

$$\hat{\Pi} \Phi(x) = \Phi(-x)$$

$$\begin{aligned} \hat{\Pi}^2 &= \mathbb{1} & \hat{\Pi}^\dagger &= \hat{\Pi} = \hat{\Pi}^{-1} \\ \Rightarrow \hat{\Pi} &\text{ ist hermitesch (selbstadjungiert) und unitär} \end{aligned}$$

Außerdem gilt:

$$\begin{aligned} \left[ \hat{\Pi}, \underbrace{\frac{\hat{p}^2}{2m}}_{E_{kin}} \right] &= 0 \\ \left[ \hat{\Pi}, -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right] \Phi(x) &= \hat{\Pi} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Phi(x) \right) - \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \hat{\Pi} \Phi(x) \right) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Phi(-x) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Phi(-x) = 0 \end{aligned}$$

$$[\hat{\Pi}, V(x)] = 0 \quad \text{da hier } V(-x) = V(x)$$

d.h es existiert ein gemeinsamer Satz von Eigenzuständen zwischen  $\hat{\Pi}$  und  $\hat{H}$ .  
Nun fragen wir nach dem Spektrum von  $\hat{\Pi}$ :

$$\hat{\Pi} \Phi(x) = \lambda \Phi(x)$$

$$\Phi(x) = \hat{\Pi}^2 \Phi(x) = \lambda \underbrace{\hat{\Pi} \Phi(x)}_{\lambda \Phi(x)} = \lambda^2 \Phi(x)$$

$$\Rightarrow \lambda_{\pm} = \pm 1$$

Es gibt also zwei Arten von Eigenfunktionen des Paritätsoperators:

$$\begin{aligned} \Phi_+(-x) &= \hat{\Pi} \Phi_+(x) = \Phi_+(x) && \text{symmetrische Wellenfunktionen} \\ \Phi_-(-x) &= \hat{\Pi} \Phi_-(x) = -\Phi_-(x) && \text{antisymmetrische Wellenfunktionen} \end{aligned}$$

**Allgemeine Eigenschaften gebundener Zustände in 1D:**

- i diskrete Eigenfunktionen von  $\hat{H}$  können reell gewählt werden.
- ii Sei  $E_m > E_n$ , dann hat  $\Phi_m(x)$  mindestens eine Nullstelle zwischen zwei Nullstellen (Knoten) von  $\Phi_n(x)$

**Beweis:**

Sei  $E_m > E_n$  und  $a < b$  Nullstellen von  $\Phi_n(x)$

OBdA  $\Phi_n(x) > 0$  in  $a < x \leq b$

$$\begin{aligned}
 -\frac{\hbar}{2m}\Phi_m''(x) + V(r)\Phi_m(x) &= E_m\Phi_m(x) & \Big| \cdot \int_a^b dx \quad \Phi_n(x) \\
 -\frac{\hbar}{2m}\Phi_n''(x) + V(r)\Phi_n(x) &= E_n\Phi_n(x) & \Big| \cdot \int_a^b dx \quad \Phi_m(x) \\
 -\frac{\hbar}{2m} \int_a^b dx \underbrace{(\Phi_n(x)\Phi_m''(x) - \Phi_n''(x)\Phi_m(x))}_{\frac{d}{dx}\Phi_n(x)\Phi_m'(x) - \Phi_n'(x)\Phi_m(x)} & \\
 &= (E_m - E_n) \int_a^b dx \quad \Phi_n(x)\Phi_m(x) \\
 &= \frac{\hbar}{2m}(\Phi_n(x)\Phi_m'(x)\Big|_a^b - \Phi_n'(x)\Phi_m(x)\Big|_a^b) \\
 &= (E_m - E_n) \int_a^b dx \quad \Phi_n(x)\Phi_m(x) \\
 &= -\frac{\hbar}{2m}(\underbrace{\Phi_n'(b)}_{<0} \Phi_m(b) - \underbrace{\Phi_n'(a)}_{>0} \Phi_m(a)) \\
 &= \underbrace{(E_m - E_n)}_{>0} \underbrace{\int_a^b dx \quad \Phi_n(x)\Phi_m(x)}_{>0}
 \end{aligned}$$

$\Rightarrow \Phi_n$  muss Vorzeichen wechsel in  $a \leq x \leq b$   $\square$

## 2.4 Gebundene Zustände und Streuzustände des endlichen Kastenpotentials

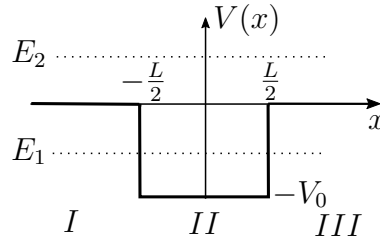


Abbildung 2.7: endliches Kastenpotential

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Phi_E''(x) + V(x)\Phi_E(x) = E\Phi_E(x)$$

Randbedingung:

$$\begin{array}{ll} \Phi_E(x) & \text{stetig} \\ \Phi_E'(x) & \text{stetig} \end{array}$$

**I, III:**

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Phi_{I,III}''(x) = E(\Phi_{I,III}(x)) \quad |x| \geq \frac{L}{2}$$

**II**

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Phi_{II}''(x) = (E + V_0)(\Phi_{II}(x)) \quad |x| \leq \frac{L}{2}$$

Übergangsbedingung:

$$\begin{array}{ll} \Phi_I\left(-\frac{L}{2}\right) = \Phi_{II}\left(-\frac{L}{2}\right) & \Phi_{II}\left(\frac{L}{2}\right) = \Phi_{III}\left(\frac{L}{2}\right) \\ \Phi_I'\left(-\frac{L}{2}\right) = \Phi_{II}'\left(-\frac{L}{2}\right) & \Phi_{II}'\left(\frac{L}{2}\right) = \Phi_{III}'\left(\frac{L}{2}\right) \end{array}$$

$$E \geq -V_0$$

A)	$-V_0 < E < 0$	gebundene Zustände
----	----------------	--------------------

**I, III:**

$$\begin{aligned}\Phi''(x) &= \frac{2m}{\hbar^2} |E| \Phi(x) = \kappa^2 \Phi(x) \\ \Phi(x) &= A_+ e^{\kappa x} + A_- e^{-\kappa x} \quad \kappa \in \mathbb{R}\end{aligned}$$

Normierbarkeit:

$$\begin{aligned}\Phi_I(x) &= A_+ e^{\kappa x} \\ \Phi_{III}(x) &= A_- e^{-\kappa x}\end{aligned}$$

**II:**

$$\begin{aligned}\Phi''(x) &= -\frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2} \Phi(x) = -k^2 \Phi(x) \\ \Phi_{II}(x) &= C_+ e^{ikx} + C_- e^{-ikx}\end{aligned}$$

Aufgrund der Symmetrie  $V(x) = V(-x)$  können wir unterscheiden:

$$\begin{aligned}\Rightarrow \text{symmetrische Lösung:} & \quad \Phi(x) = \Phi(-x) \\ \Rightarrow \text{antisymmetrische Lösung:} & \quad \Phi(x) = -\Phi(-x)\end{aligned}$$

$$\begin{array}{lll}\text{symmetrisch:} & A_+ = A_- & C_+ = C_- \\ \text{antisymmetrisch:} & A_+ = -A_- & C_+ = -C_-\end{array}$$

**Auswertung der Übergangsbedingung:**

$$\begin{array}{lll}\text{symmetrische Lösung} & \boxed{\kappa = k \tan\left(k \frac{L}{2}\right)} & \Rightarrow \quad \eta = \xi \tan(\xi) \\ \text{antisymmetrische Lösung} & \boxed{\kappa = -k \cot\left(k \frac{L}{2}\right)} & \Rightarrow \quad \eta = -\xi \cot(\xi)\end{array}$$

$$\eta := k \frac{L}{2} \qquad \xi := k \frac{L}{2}$$

stimmt das?

$$\eta^2 + \xi^2 = \frac{L^2}{4} \left[ -\frac{2m\mathcal{E}}{\hbar^2} + \frac{2m(\mathcal{E} + V_0)}{\hbar^2} \right] = \frac{L^2 m}{2\hbar} V_0 = R^2$$

Diese Gleichung lässt sich nicht analytisch lösen. Neben einer numerischen Lösung gibt es auch die Möglichkeit sie grafisch zu lösen. Dies ist in Abbildung 2.8 gezeigt wobei hier die Schnittpunkte möglichen Paare  $(\eta, \xi)$  sind. [Siehe dazu: Quantentheorie, Gernot Münster S.42/43 [Münster, 2010]]

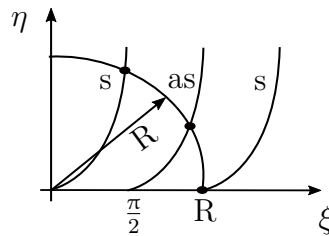


Abbildung 2.8: grafische Lösung

- es existiert stets einen gebundenen Zustand
- existieren nur endlich viele gebundene Zustände
- Grundzustände sind immer symmetrisch

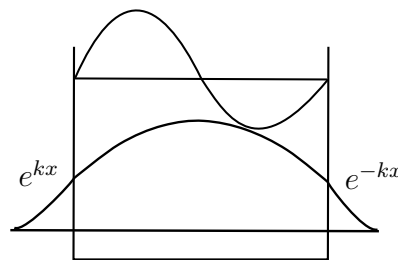


Abbildung 2.9: Zustände im endlichen Potentialtopf

Wir sehen, dass eine Aufenthaltswahrscheinlichkeit auch im klassisch verbotenen Bereich existiert, jedoch exponentiell mit der Eindringtiefe abnimmt.

Eindringtiefe:

$$-V_0 < E < 0 \quad d = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m|E|}} \quad |E| \rightarrow 0 \rightarrow \infty$$

B)

$$E > 0$$

Streuzustände

## 8. Vorlesung Wiederholung

### 2.4.1 Gebundene- und Streuzustände

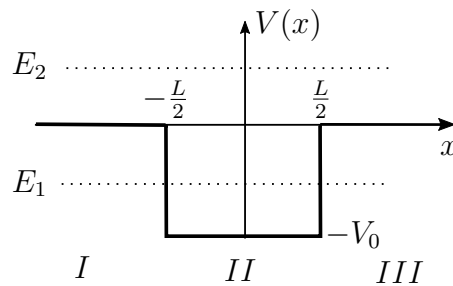


Abbildung 2.10: endliches Kastenpotential

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{für } -L/2 \leq x \leq L/2 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

A)

$$-V_z < E < 0$$

gebundene Zustände

B)

$$E > 0$$

Streuzustände

### Ende Wiederholung

Klassisch erlaubt: gesamte x-Achse

I, III:

$$\begin{aligned} \Phi'' &= -k_0^2 \Phi \\ k_0^2 &= \frac{2mE}{\hbar^2} \end{aligned} \quad (9)$$

II:

$$\Phi'' = -k^2 \Phi$$

$$k^2 = \frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2} > k_0^2$$

Ansatz:

$$\Phi_I = \alpha_+ e^{ik_0 x} + \alpha_- e^{-ik_0 x}$$

$$\Phi_{III} = \beta_+ e^{ik_0 x} + \beta_- e^{-ik_0 x}$$

$$\Phi_{II} = \gamma_+ e^{ikx} + \gamma_- e^{-ikx}$$

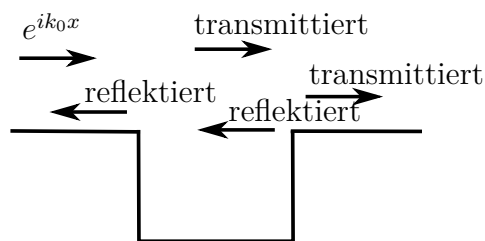


Abbildung 2.11: ebene Welle im Potentialtopf

Dabei stehen folgende Terme für:

$e^{ik_0 x - iE \frac{t}{\hbar}}$	einlaufende Welle
$\alpha_0 e^{-ik_0 x - iE \frac{t}{\hbar}}$	reflektierte Welle
$\beta_+ e^{ik_0 x - iE \frac{t}{\hbar}}$	transmittierte Welle

ebene Welle Wellenfunktion ist nicht normierbar! Ebene Wellen sind keine normierbaren Wellenfunktionen. Formal braucht es nun eine Erweiterung des Hilbertraumes.

$$\int dx \quad \psi^*(k, x) \psi(k', x) = \delta(k - k')$$

$$\Rightarrow \psi(k', x) \propto e^{ik'x}$$

$$\int dx \quad \psi_k^*(k, x) \psi_{k'}(x) = \delta_{k, k'}$$

$$\Rightarrow \psi(k', x) \propto e^{ik'x}$$

Normierung auf  $\delta$ -Distribution



**Aber:** Wellenpakete, das heißt Superposition von ebenen Wellen **sind** normierbar!

⇒ Es ist sinnvoll, auch ebene Wellen und analoge Streuzustände als Wellenfkt. zuzulassen.

Was ist die physikalische Bedeutung von  $\alpha_-$  und  $\beta_+$ ?

**Stromdichte:** (Abschnitt 2.1)

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi}(\Phi^* \Phi' - \Phi \Phi'^*)$$

für einlaufende Welle:	$j_{\text{ein}} = \frac{\hbar k_0}{m}$
für reflektierte Welle:	$j_{\text{refl}} = \frac{-\hbar k_0}{m}  \alpha_- ^2$
für transmittierte Welle:	$j_{\text{trans}} = \frac{\hbar k_0}{m}  \beta_- ^2$

Aus diesen Einzelstromdichten definiert man folgende Koeffizienten:

**Transmissionskoeffizient:**

$$T = \frac{|j_{\text{trans}}|}{|j_{\text{ein}}|} = |\beta_+|^2$$

**Reflexionskoeffizient:**

$$R = \frac{|j_{\text{refl}}|}{|j_{\text{ein}}|} = |\alpha_-|^2$$

Bei den Koeffizienten  $\alpha_+$ ,  $\alpha_-$ ,  $\beta_+$ , ... hat man gegebenenfalls die Wahlfreiheit einer Größe. Die anderen passen sich entsprechend an, da T und R materialabhängige Konstanten sind.

**Kontinuitätsgleichung:**

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &= |\psi(x, t)|^2 = |\phi(x)|^2 = \text{const}_t \\ \Rightarrow \frac{\partial j}{\partial x} &= -\rho = 0 & \Rightarrow j &= \text{const}_x \end{aligned}$$

**I:**

$$\begin{aligned}
 j_I &= \frac{\hbar}{2mi} (\phi_I \phi'_I - \phi_I \phi'_I) \\
 &= \frac{\hbar}{2mi} \left[ (e^{-ikx} + \alpha_-^* e^{ik_0 x}) i k_0 (e^{ik_0 x} - \alpha_- e^{ik_0 x}) - \text{c.c.} \right] \\
 &= \frac{\hbar}{2mi} 2(1 - |\alpha_-|^2) i k_0 \\
 &= \frac{\hbar}{mi} (1 - |\alpha_-|^2) = j_{\text{ein}} + j_{\text{ref}}
 \end{aligned}$$

**III:**

$$j_{III} = \frac{2\hbar}{2im} i k_0 |\beta_-|^2 = j_{\text{trans}}$$

$$j_{\text{ein}} + j_{\text{ref}} = j_{\text{trans}}$$

$$T + R = 1$$

$$\Rightarrow T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2 \sin^2(kL)}{4E(E+V_0)}}$$

mit  $L = \text{breite des Potentialtopfs}$   $k = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}$

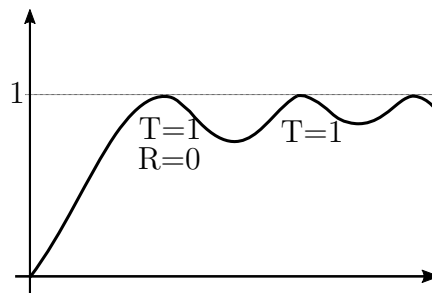


Abbildung 2.12: Transmissionsanteil mit eingezeichneten Resonanzen

Betrachtet man den Plot bzw. die Funktion, so lässt sich feststellen, dass bei

$$kL = n\pi \quad \text{mit } n \in \mathbb{N} \quad \Rightarrow T = 1$$

auftritt. Diese Stellen bezeichnet man als Transmissionsresonanzen. Dieser Effekt liegt an destruktiver Interferenz der an der ersten Kante (von links kommend) und

der an der zweiten Kante reflektierten Wellenanteile.

## 2.5 endliche Kastenbarrieren und Tunneleffekt

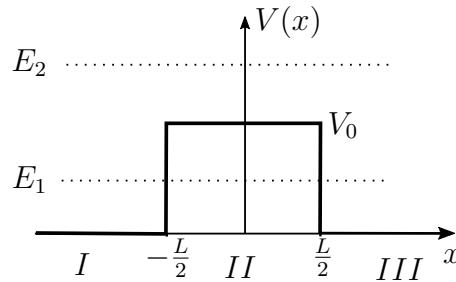


Abbildung 2.13: endliche Kastenbarriere

**$E > V_0$ :**

Mit unserer bisherigen Erfahrung mit Kastenpotentialen setzen wir folgende Fälle für einlaufende, reflektierte und transmittierte Wellenteile an:

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ik_0x} + \alpha_- e^{-ik_0x} & x \leq -\frac{L}{2} \\ \gamma_+ e^{ikx} + \gamma_- e^{-ikx} & -\frac{L}{2} < x \leq \frac{L}{2} \\ \beta_+ e^{ik_0x} & x > \frac{L}{2} \end{cases}$$

$$k_0^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \qquad k_1^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} > 0$$

analog zu  $2L$  mit  $k \rightarrow k_1$

**Interessanter ist der Fall:**

$$\boxed{0 < E < V_0}$$

Klassisch gibt es in diesem Fall keine Transmission.

Ansatz:

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ik_0x} + \alpha_- e^{-ik_0x} & x \leq -\frac{L}{2} \\ \gamma_+ e^{kx} + \gamma_- e^{-kx} & -\frac{L}{2} < x \leq \frac{L}{2} \\ \beta_+ e^{ik_0x} & x > \frac{L}{2} \end{cases}$$

mit

$$k^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} > 0$$

analog zu 9 mit  $k = ik$

$$\Rightarrow T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sinh^2(kL)}$$

$\Rightarrow$  Es gibt Transmission im klassisch verbotenen Energiebereich

$\Rightarrow$  **Tunneleffekt**

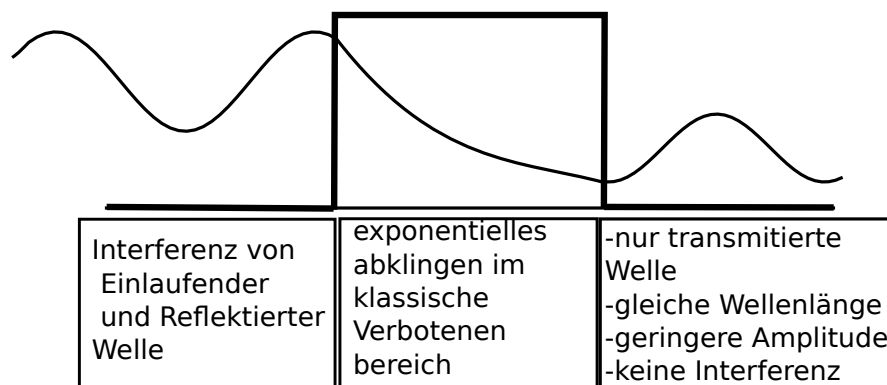


Abbildung 2.14: Tunneleffekt

### Gamow Formel:

Nachdem wir nun eine (sehr idealisierte) Potentialbarriere behandelt haben, wollen wir nun allgemeinere Barrieren betrachten. Eine Möglichkeit dafür bietet der folgende Ansatz:

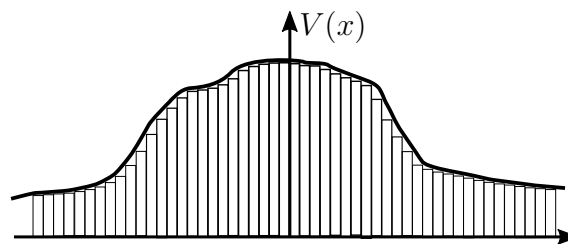


Abbildung 2.15: allgemeine Kastenbarriere

Näherung von  $V(x)$  durch kleine Kastenpotential

· einzelne Kastenbarriere habe Länge  $L$ ;  $L$  sei groß, sodass:  $kL \gg 1$

$$\Rightarrow \sinh^2(kL) \approx \frac{1}{4} e^{2kL}$$

$$\Rightarrow T \approx \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-\frac{2\sqrt{2m(V_0 - E)}L}{\hbar}}$$

Abfolge von Kästen mit

$$T_i \sim e^{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(V(x_i) - E)} \Delta x}$$

$$\Rightarrow T = \prod_{i=1}^N T_i \sim e^{-\frac{2}{\hbar} \sum_{i=1}^N \sqrt{2m(V(x_i) - E)} \Delta x}$$

$$T \approx e^{-\frac{2}{\hbar} \int_a^b dx \sqrt{2m(V(x) - E)}}$$

Dieses approximative Resultat bezeichnet man als die Gamow Formel.

## 2.6 attraktives $\delta$ - Potential

(A) **Betrachteter Potentialtopf aus 2.4.1 mit**  $V_0 \rightarrow -\infty$ ,  $L \rightarrow 0$

Aber  $V_0 L = A = \text{const.}$  Anschaulich machen wir also den Kasten unendlich tief, aber auch unendlich schmal.

$$\int dx V(x) = V_0 L = A = \text{const}$$

dh.  $V(x) \rightarrow A\delta(x)$  analog zur Rechnung aus (2.5)

$$R^2 = \eta^2 + \xi^2 = \frac{L^2}{2} \frac{mV_0}{\hbar^2} = \frac{Lm}{2\hbar^2} A \xrightarrow{L \rightarrow 0} 0$$

$\Rightarrow$  Es existiert nur **ein** gebundener Zustand

$$\kappa = k \tan\left(k \frac{L}{2}\right) \xrightarrow{L \rightarrow 0} \frac{k^2 L}{2}$$

$$\sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar}} = \frac{m(E + V_0)L}{\hbar}$$

$$|E| = \frac{mL^2}{2\hbar} (E^2 - 2EV_0 + V_0^2) \approx \frac{mL^2 V_0^2}{2\hbar^2}$$

$$E = -\frac{mA^2}{2\hbar^2}$$

$$\Phi(x) = N e^{k|x|} = N e^{-\frac{mA(x)}{\hbar^2}}$$

(B) diskrete Rechnung:

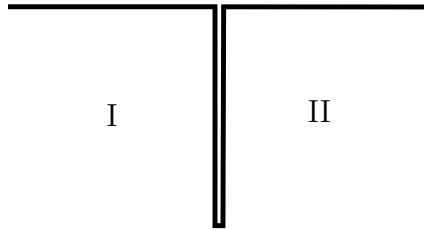


Abbildung 2.16: delta Potential

$$V(x) = -a\delta(x)$$

freies Teilchen       $x < 0$        $x > 0$

$$\Phi_I(0) = \Phi_{II}(0) \quad \text{Stetigkeit}$$

$$\Phi'_I(0) = ? \quad \text{Stetigdifferenzierbarkeit}$$

Die Stetigkeit der Ableitung der Wellenfunktion soll nun untersucht werden. Dafür bilden wir das Integral über die Schrödingergleichung in einer  $\varepsilon$ -Umgebung um null:

$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} dx \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Phi_E(x)}{dx^2} - A\delta(x)\Phi_E(x) \right] = E\Phi_E(0)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Phi_E(x)}{dx^2} \Big|_{-\varepsilon}^{\varepsilon} - A\delta(x)\Phi_E(x) = E\Phi_E(x)$$

$$\boxed{\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \Phi'_E(\varepsilon) - \Phi'_E(-\varepsilon) = -\frac{2mA}{\hbar^2} \Phi_E(0)}$$

Wir sehen also, dass bei einem  $\delta$ -Potential die Ableitung der Wellenfunktion an dieser Stelle eine Unstetigkeit besitzt.

# 3 Der Harmonische Oszillator

## 9. Vorlesung

### 3.1 Hamiltonoperator und dessen Spektrum

- klassisches Federpendel

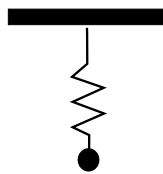


Abbildung 3.1: klassisches Federpendel

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \quad \text{mit } \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

- beliebiges Potential ( $V(x)$  mit Minimum bei  $x_0$ )

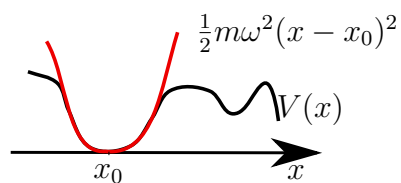


Abbildung 3.2: Potential mit Taylorentwicklung bis  $x^2$

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \quad \text{für 1D}$$

charakteristische Längenskala

$$l_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

**Oszillatorlänge**

normierte Koordinaten / Impulse

$$\hat{\xi} = \frac{\hat{x}}{l_0}$$

$$\hat{\pi} = \hat{P} \frac{l_0}{\hbar} \quad [\hat{x}, \hat{P}] = i\hbar$$

$$\Rightarrow \hat{H} = \hbar\omega \frac{1}{2} (\hat{\pi}^2 + \hat{\xi}^2)$$

symmetrisch in  $\hat{\xi}, \hat{\pi}$

$$[\hat{\xi}, \hat{\pi}] = \left[ \frac{\hat{x}}{l_0}, \frac{l_0}{\hbar} \hat{P} \right] = i$$

$\hat{H}$  **positiv**

$$\underbrace{\hat{H} \stackrel{?}{=} \hat{A}^\dagger \hat{A}}$$

$$\langle \psi | \hat{A}^\dagger \hat{A} | \psi \rangle = ||\hat{A}|\psi\rangle||^2 \geq 0$$

man kann eine solche Darstellung finden

definiere

$$\begin{aligned} \hat{a} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{\xi} + i\hat{\pi}) \\ \hat{a}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{\xi} - i\hat{\pi}) \end{aligned}$$

nicht selbstadjungiert

$$\hat{a} \neq \hat{a}^\dagger$$

$$\hat{\xi} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$$

$$\hat{\pi} = \frac{1}{\sqrt{2}i} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)$$

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{\xi}^2 + \hat{\pi}^2) = \frac{\hbar\omega}{4} \left( (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^2 - (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)^2 \right)$$

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger)$$

Vertauschungsregeln

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \frac{1}{2} [\hat{\xi} + i\hat{\pi}] = \frac{1}{2}(1 + 1) = 1$$

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \Rightarrow \hat{a} \hat{a}^\dagger = 1 + \hat{a}^\dagger \hat{a}$$



$$\begin{array}{ll}
\text{aus} & \boxed{\hat{H} = \hbar\omega \left( \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right)} \\
\text{folgt} & E \geq \frac{\hbar\omega}{2} \\
\text{da:} & \langle \psi | \hat{a}^\dagger \hat{a} | \psi \rangle = ||\hat{a}|\psi\rangle||^2 \geq 0
\end{array}$$

Nun folgen die Eigenschaften von  $\hat{a}$  und  $\hat{a}^\dagger$

i) Sei  $\lambda$  Eigenwert/Eigenvektor

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} \quad \text{ist positiv, d.h.} \quad \hat{a}^\dagger \hat{a} |\lambda\rangle = \lambda |\lambda\rangle$$

$$\begin{aligned}
0 \leq ||\hat{a}|\lambda\rangle||^2 &= \langle \lambda | \hat{a}^\dagger \hat{a} | \lambda \rangle = \lambda \underbrace{\langle \lambda | \lambda \rangle}_1 = \lambda \\
&\Rightarrow \lambda \geq 0
\end{aligned}$$

ii)

falls  $\lambda$  Eigenwert von  $\hat{a}^\dagger \hat{a}$  dann ist  $\lambda + 1$  ebenfalls Eigenwert mit Eigenzustand  $\sim \hat{a}^\dagger |\lambda\rangle$

$$\begin{aligned}
\hat{a}^\dagger \hat{a} (\hat{a}^\dagger |\lambda\rangle) &= \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a}^\dagger |\lambda\rangle = \hat{a}^\dagger (\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1) |\lambda\rangle \\
&= \hat{a}^\dagger |\lambda\rangle + \hat{a}^\dagger \underbrace{(\hat{a}^\dagger \hat{a} |\lambda\rangle)}_{\lambda |\lambda\rangle} = (1 + \lambda) (\hat{a}^\dagger |\lambda\rangle)
\end{aligned}$$

$\rightarrow$  Zustand  $\sim \hat{a}^\dagger |\lambda\rangle$  ist Eigenzustand von  $\hat{a}^\dagger \hat{a}$  zu  $\lambda + 1$  (falls  $\hat{a}^\dagger |\lambda\rangle$  nicht der Nullvektor ist)

iii)

falls  $\lambda$  ein Eigenwert von  $\hat{a}^\dagger \hat{a}$  daraus folgt  $\lambda - 1$  ist Eigenwert mit Eigenzustand  $\sim (\hat{a} |\lambda\rangle)$ :

**Beweis:**

$$\begin{aligned}
\hat{a}^\dagger \hat{a} (\hat{a} |\lambda\rangle) &= \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a} |\lambda\rangle = (\hat{a} \hat{a}^\dagger - 1) \hat{a} |\lambda\rangle \\
&= \hat{a} \hat{a}^\dagger \hat{a} |\lambda\rangle - \hat{a} |\lambda\rangle \\
&= (\lambda - 1) \hat{a} |\lambda\rangle
\end{aligned}$$

$\rightarrow$  Zustand  $\sim \hat{a} |\lambda\rangle$  ist Eigenzustand von  $\hat{a}^\dagger \hat{a}$  mit  $\lambda - 1$  (falls  $\hat{a} |\lambda\rangle$  nicht der Nullvektor)

$\rightarrow$

$$\boxed{\hat{a}, \hat{a}^\dagger \text{ sind Leiteroperatoren}}$$

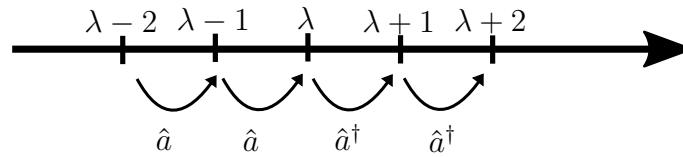


Abbildung 3.3: Aufsteigeoperator

iv)

aus (i)-(iii) folgt:

$$\boxed{\lambda = 0, 1, 2, 3, 4, \dots}$$

$$\lambda = n \in N$$

Bew: Sei  $\lambda$  Eigenwert  $\geq 0$ 

$$\hat{a}|\lambda\rangle$$

Eigenzustand zu  $\lambda - 1$ 

$$\hat{a}^2|\lambda\rangle$$

Eigenzustand zu  $\lambda - 2$  etc.

$$\begin{aligned} |\lambda - 1| &= C_1 \hat{a}|\lambda\rangle \\ |\lambda - 2| &= C_2 \hat{a}^2|\lambda\rangle \\ ||\hat{a}^{n+1}|\lambda\rangle||^2 &= \langle \lambda | \hat{a}^{+(n+1)} \hat{a}^{(n+1)} | \lambda \rangle = \underbrace{\langle \lambda - n | \hat{a}^\dagger \hat{a} | \lambda - n \rangle}_{|C_n|^2} \end{aligned}$$

$$= \frac{\lambda - n}{|C_n|} \geq 0 \quad \rightarrow \lambda = 0, 1, 2, \dots, n \quad n \in N$$

$$\lambda = 0$$

$$\lambda_n = n$$

$$\begin{aligned} |n\rangle &= C_n \hat{a}^\dagger |n-1\rangle \\ 1 = \langle n | n \rangle &= |C_n|^2 \langle n-1 | \hat{a} \hat{a}^\dagger | n-1 \rangle \\ &= |C_n| \langle n-1 | \hat{a}^\dagger \hat{a} + 1 | n-1 \rangle \\ &= |C_n|^2 \underbrace{\langle n-1 | n-1 \rangle}_1 \cdot n = n |C_n|^2 \end{aligned}$$

$$\hookrightarrow |c_n|^2 = \frac{1}{n}$$

OBdA

$$c_n = \frac{1}{\sqrt{n}}$$

$$\begin{aligned}
 E_n &= \hbar \omega \left( n + \frac{1}{2} \right) & n = 0, 1, 2, \dots \\
 \hat{a}|n\rangle &= \sqrt{n}|n-1\rangle \\
 \hat{a}^\dagger|n\rangle &= \sqrt{n+1}|n+1\rangle
 \end{aligned}$$

Spektrum der Energie, sowie bestimmende Gleichung der Auf- und Absteigeoperatoren

$$\begin{aligned}
 |n\rangle &= \frac{\hat{a}^\dagger}{\sqrt{n}}|n-1\rangle \\
 &= \frac{\hat{a}^\dagger \cdot \hat{a}^\dagger}{\sqrt{n}\sqrt{n-1}}|n-2\rangle
 \end{aligned}$$

Setzen wir dies fort, so folgt nach n schritten:

$$|n\rangle = \frac{\hat{a}^{\dagger n} |0\rangle}{\sqrt{n!}}$$

## 3.2 Eigenfunktionen

Wir müssten eigentlich die Schrödingergleichung lösen

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi_n(x) + \frac{m}{2} \omega^2 x^2 \phi_n(x) = \hbar \omega \left( n + \frac{1}{2} \right) \phi_n(x)$$

Aber: Die DGL ist im k-Raum genauso schwer: Schrödinger in Fourier-raum:  
(im k-Raum)

$$\hbar^2 k^2 \tilde{\phi}(k) - \frac{m}{2} \omega^2 \frac{d^2}{dk^2} \tilde{\phi}_n(k) = \hbar \omega \left( n + \frac{1}{2} \right) \tilde{\phi}_n(k)$$

**Grundzustand:** (niedrigste Energie )

Einfacher: es muss ja gelten:  $\hat{a}|0\rangle = 0$

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \hat{\xi} + i\hat{\pi} \right) |0\rangle &= 0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{\hat{x}}{l_0} + i \frac{l_0}{\hbar} \hat{p} \right) |0\rangle = 0 \\
 \Rightarrow \frac{x}{l_0} + \frac{\cancel{y}_i \cdot l_0}{\cancel{\hbar}} \frac{\hbar \partial}{\cancel{y}_i \partial x} &= 0
 \end{aligned}$$

**Ortsraum:**

$$\left(\frac{x}{l_0} + l_0 \frac{\partial}{\partial x}\right) \phi(x) = 0$$

Definiere neue Variablen:  $y := \frac{x}{l_0}$ 

$$\rightarrow \left(y + \frac{d}{dy}\right) \phi(y) = 0 \Rightarrow \phi_0(y) = -y \phi_0(y)$$

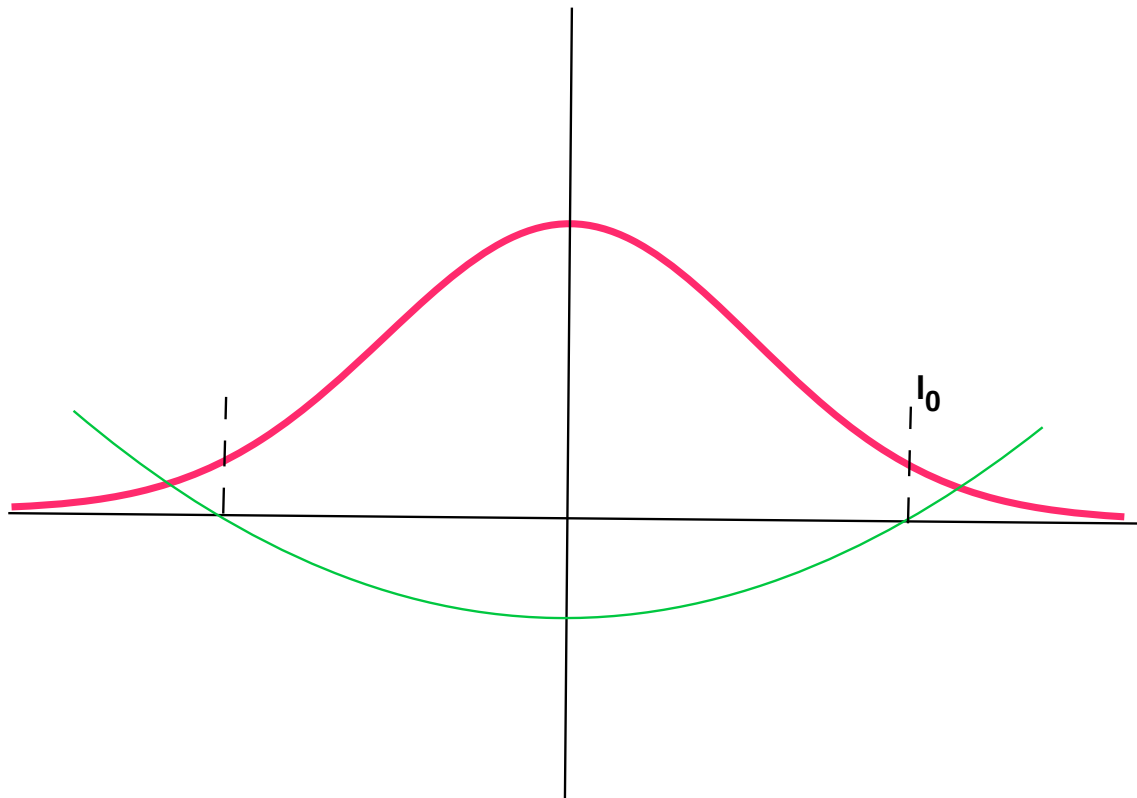
**Einschub:**

$$y' = -x y = \frac{dy}{dx}$$

$$\int \frac{dy}{y} = - \int x dx \quad \ln(y) = -\frac{x^2}{2} \quad y = e^{-\frac{x^2}{2}}$$

Einsetzen und normieren mit:  $y = \frac{x}{l_0}$  und  $y = e^{-\frac{x^2}{2}}$ 

$$\text{liefert: } \phi(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi l_0^2}} \cdot e^{-\frac{x^2}{2l_0^2}}$$

**Oszillatorlänge= Ausdehnung des Grundzustandes**

**Angeregte Zustände:**

$$|n\rangle = \frac{\hat{a}^{\dagger n}}{\sqrt{n!}}|0\rangle \qquad \hat{a}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{x^2}{P_0} - \frac{i\hbar\hat{P}}{l_0} \right)$$

Ortsraum und  $y = \frac{x}{l_0}$ :

$$\phi_n(y) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left( \frac{1}{\sqrt{2}} \left( y - \frac{\partial}{\partial y} \right) \right)^n \phi_0(y)$$

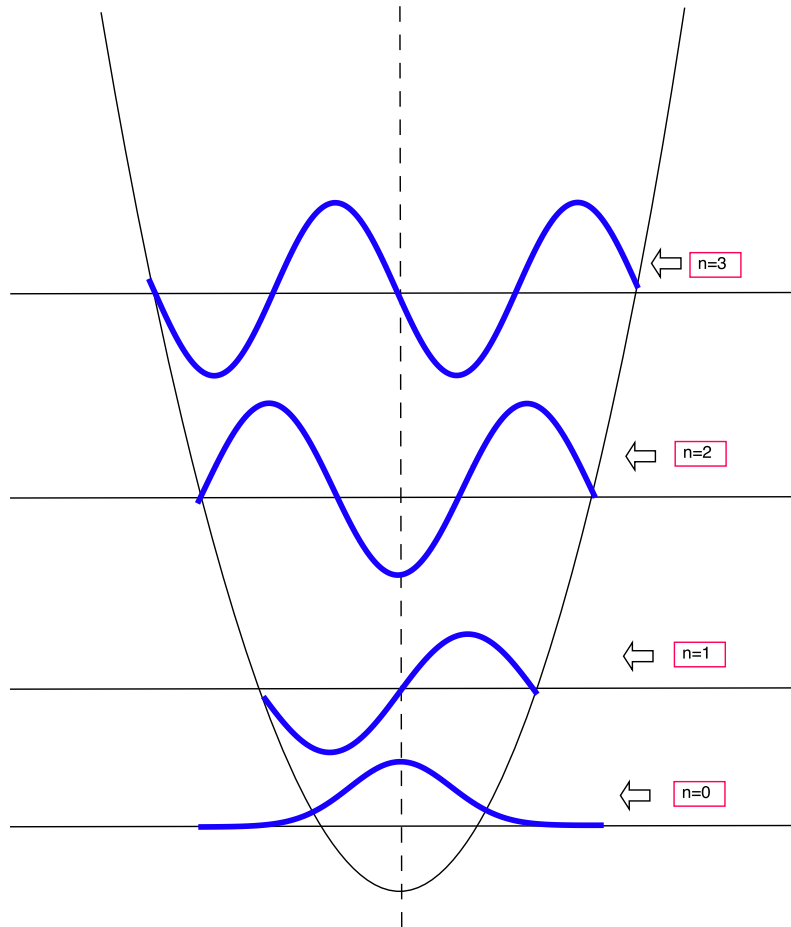
$$\phi_n(y) = c \cdot \frac{1}{\sqrt{2^n \cdot n!}} H_n(y) e^{-\frac{y^2}{2}}$$

wobei  $H_n(y)$  definiert ist als:

$$H_n(y) \equiv (-1)^n \cdot e^{y^2} \cdot \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2}$$

**Hermite Polynome:**

$$\begin{aligned} H_0(y) &= 1 & H_3(y) &= 8y^3 - 12y \\ H_1(y) &= 2y \\ H_2(y) &= 2y^2 - 2 \end{aligned}$$



Moden

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!} \sqrt{\pi} l_0} H_n\left(\frac{x}{l_0}\right) e^{-\frac{x^2}{2l_0^2}}$$

### 3.3 kohärente Zustände des harmonischen Oszillators

**Definition:** (kohärente Zustände)

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} |n\rangle \quad \alpha \in \mathbb{C}$$

dies ist kein Eigenzustand von  $H$  mehr und es ist normiert

$$\begin{aligned}
\langle \alpha | \alpha \rangle &= \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{\alpha^{*n}}{\sqrt{n!}} \frac{\alpha^m}{\sqrt{m!}} e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \underbrace{\langle n | m \rangle}_{\delta_{nm}} \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \underbrace{\frac{|\alpha|^{2n}}{n!}}_{e^{|\alpha|^2}} e^{-|\alpha|^2} = 1
\end{aligned}$$

**Leiteroperator:**

$$\begin{aligned}
&\hat{a}|\alpha\rangle = ? \\
\hat{a}|\alpha\rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \underbrace{\hat{a}|n\rangle}_{=\sqrt{n}|n-1\rangle} \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{(n-1)!}} e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} |n-1\rangle \quad \text{Def: } m = n - 1 \\
&= \alpha \underbrace{\sum_{m=0}^{\infty} \frac{\alpha^m}{\sqrt{m!}} e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} |m\rangle}_{|\alpha\rangle} \\
&= \alpha|\alpha\rangle \\
&\Rightarrow \boxed{\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle}
\end{aligned}$$

**Rechtseigenzustand von  $\hat{a}$  :**

~~$\langle \beta | \hat{a} = \lambda \langle \beta |$~~

existiert nicht! Denn  $\hat{a}$  ist nicht selbstadjungiert.

**Eigenschaften:**

- i)  $\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \Rightarrow \langle \alpha | \hat{a}^\dagger = \alpha^* \langle \alpha |$
- ii)  $\langle \alpha | \hat{a}^\dagger \hat{a} | \alpha \rangle = \alpha^* \underbrace{\langle \alpha | \alpha \rangle}_{=1} \alpha = |\alpha|^2$

Das Quadrat davon ist:

$$\begin{aligned}
 \langle \alpha | \hat{n}^2 | \alpha \rangle &= \langle \alpha | \hat{a}^\dagger \underbrace{\hat{a} \cdot \hat{a}^\dagger}_{\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1} \hat{a} | \alpha \rangle \\
 &= \langle \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a} | \alpha \rangle + \langle \alpha | \hat{a}^\dagger \hat{a} | \alpha \rangle \\
 &= |\alpha|^4 + |\alpha|^2
 \end{aligned}$$

## 10. Vorlesung Wiederholung: kohärente Zustände

Zur Erinnerung dies sind die kohärenten Zustände:

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} |n\rangle$$

Wie wir sehen sind diese bereits normiert

$$\begin{aligned}
 \langle \alpha | \alpha \rangle &= \sum_{n,m} \frac{\alpha^{xn} \alpha^{ym}}{\sqrt{n!} \sqrt{m!}} e^{-|\alpha|^2} \underbrace{\langle n, n \rangle}_{\delta_{nm}} \\
 &= \sum_{n,m} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} e^{-|\alpha|^2} = 1
 \end{aligned}$$

- i) Wir betrachten nun einige Eigenschaften der kohärenten Zustände. Die kohärenten Zustände sind Eigenfunktionen des Vernichtungsoperators/ Reduzierungsoperator

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \qquad \langle \alpha | \hat{a}^\dagger = \alpha^* \langle \alpha |$$

Es existieren aber **nicht**:

$$\cancel{\langle \beta | \hat{a} = \beta \langle \beta |} \qquad \cancel{\hat{a}^\dagger | \beta \rangle = \beta | \beta \rangle}$$

- ii)

$$\begin{aligned}
 \langle \alpha | \hat{a}^\dagger \hat{a} | \alpha \rangle &= ||\hat{a}|\alpha\rangle||^2 = |\alpha|^2 = \langle \hat{n} \rangle \stackrel{\text{Def.}}{=} \langle \hat{a}^\dagger \hat{a} \rangle \\
 \langle \hat{n}^2 \rangle &= \langle \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a}^\dagger \hat{a} \rangle = \langle \hat{a}^\dagger (\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1) \hat{a} \rangle = |\alpha|^4 + |\alpha|^2
 \end{aligned}$$

$$\langle \Delta \hat{n}^2 \rangle = |\alpha|^2 = \langle \hat{n} \rangle$$



Dies ist die **Poissonstatistik** also eine Statistik zufälliger unabhängiger Ereignisse.

### Ende Wiederholung

iii)

$$\begin{aligned}\langle \hat{x} \rangle &= l_0 \langle \hat{\xi} \rangle = \frac{l_0}{\sqrt{2}} \langle \hat{a}^\dagger + \hat{a} \rangle \\ &= \frac{l_0}{\sqrt{2}} [\langle \alpha | \hat{a}^\dagger | \alpha \rangle + \langle \alpha | \hat{a} | \alpha \rangle] \\ &= \frac{l_0}{\sqrt{2}} \underbrace{[\alpha^* + \alpha]}_{2\text{Re}(\alpha)} = \sqrt{2} l_0 \text{Re}(\alpha) \\ \langle \hat{P} \rangle &= \frac{\hbar}{l_0} \langle \hat{\pi} \rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{2} l_0 i} \langle \hat{a}^\dagger - \hat{a} \rangle = \frac{\hbar}{l_0} \sqrt{2} \text{Im}(\alpha)\end{aligned}$$

iv)

**Schwankungsquadrat:**

$$\Rightarrow \langle \alpha | \Delta \hat{x}^2 | \alpha \rangle = l_0^2 \langle \Delta \hat{\xi}^2 \rangle = \frac{l_0^2}{2}$$

$$\langle \alpha | \Delta \hat{p}^2 | \alpha \rangle = \frac{\hbar^2}{l_0^2} \langle \Delta \hat{\pi}^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{2 l_0^2}$$

$$\Rightarrow \boxed{(\Delta \hat{x}^2) \langle \Delta \hat{p}^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4}} \quad \text{Also } |\alpha\rangle \text{ sind Zustände minimaler Unschärfe}$$

v) Wie sieht die Zeitentwicklung (wende  $\hat{U}(t, t_0)$  an) der kohärenten Zustände aus?

$$\begin{aligned}|\psi(t=0)\rangle &= |\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \underbrace{|n\rangle}_{\substack{\text{Eigen-} \\ \text{zustand} \\ \text{von } \hat{H}}} \\ |\psi(t)\rangle &= e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-i\omega(n+\frac{1}{2})t} |n\rangle \quad \text{mit } e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} = e^{-i\omega(n+\frac{1}{2})t} \\ &= e^{-\frac{i\omega}{2}t} e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \underbrace{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}}}_{\text{Nur Phasenänderung zu vorher}} |n\rangle\end{aligned}$$

Mit  $|\alpha e^{-i\omega t}| = |\alpha|$  folgt:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{1}{2}i\omega t} \underbrace{|\alpha e^{-i\omega t}\rangle}_{\equiv \alpha(t)}$$

Also wieder ein kohärenter Zustand: Einmal kohärenter Zustand immer kohärenter Zustand.

Weiterhin können wir sehen:

$$\langle \hat{x}(t) \rangle = \langle \psi(t) | \hat{x} | \psi(t) \rangle = \sqrt{2}l_0 \operatorname{Re}(\alpha e^{-i\omega t})$$

$$\langle \hat{p}(t) \rangle = \langle \psi(t) | \hat{p} | \psi(t) \rangle = \frac{\sqrt{2}\hbar}{l_0} \operatorname{Im}(\alpha e^{-i\omega t})$$

Spezialfall  $\alpha = \alpha^* \alpha_0$  Also ist  $\alpha$  reell

$$\langle \hat{x}(0) \rangle = \sqrt{2}l_0 \alpha_0$$

$$\langle \hat{x}(t) \rangle = \sqrt{2}l_0 \cos(\omega t)$$

$$\langle \hat{p}(0) \rangle = 0$$

$$\langle \hat{p}(t) \rangle = \sqrt{2} \frac{\hbar}{l_0} \sin(\omega t)$$

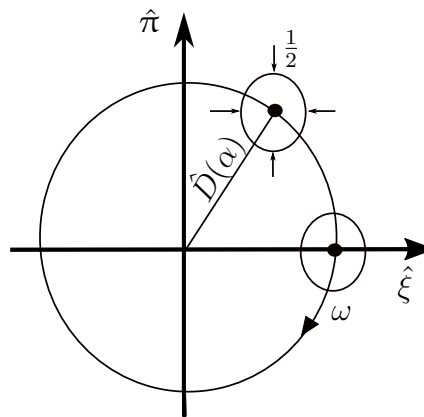


Abbildung 3.4: mit kohärente Zustände

Wir sehen, dass in den kohärenten Zuständen der quantenmechanische harmonische Oszillator eine Kreisbewegung beschreibt, sehr analog zum klassischen harmonischen Oszillator im Phasenraum. Zusammen mit der minimalen Unschärfe erkennen wir also eine große Analogie zwischen den klassischen und quantenmechanischen Pendants.

vi)

kohärente Zustände sind nicht orthogonal (siehe Aufgabe)

$$|\alpha|\beta\rangle = e^{\alpha^*\beta - \frac{|\alpha|^2}{2} - \frac{|\beta|^2}{2}}$$

$$|\langle\alpha|\beta\rangle|^2 = e^{-|\alpha-\beta|^2} = e^{(\alpha^*\beta + \beta^*\alpha - \alpha^*\alpha - \beta^*\beta)}$$

vii)

Sind übervollständig

$$\frac{1}{\pi} \int d\alpha^2 \alpha^2 |\alpha\rangle \langle \alpha| = \frac{1}{\pi} \int du \int dv |\alpha\rangle \langle \alpha| = \mathbb{1}$$

$$u = \text{Re}(\alpha)$$

$$v = \text{Im}(\alpha)$$

$$|\alpha=0\rangle = ? = \text{Grundzustand}, \text{ da } \underbrace{|\alpha\rangle}_0 = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{0^n}{\sqrt{n!}} e^{\frac{|0|^2}{2}} |n\rangle$$

$$\Rightarrow 0^0 = 1 \text{ einziger Term, also: } |\alpha=0\rangle = 0^0 e^0 |0\rangle = 1|0\rangle$$

viii)

kohärenter Verschiebungsoperator ( $\hat{D}, A$ )

$$|\alpha\rangle = \hat{D}(\alpha)|0\rangle = e^{\alpha^*\hat{a} - \alpha\hat{a}^\dagger}|0\rangle$$

$$\hat{D}(\alpha)^{-1} = \hat{D}(\alpha)^\dagger$$

$$\hat{D}(\alpha)^\dagger = e^{\hat{A}t} = e^{\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a}} = e^{-\hat{A}}$$

$$\underbrace{\hat{D}(\alpha)^\dagger}_{\hat{D}^{-1}} \hat{D}(\alpha) = e^{\hat{A}} e^{\hat{A}} = \mathbb{1}$$

### 3.3.1 Baker-Hausdorff Theorem

$$e^\alpha e^\beta = e^{\alpha+\beta} \text{ wenn gilt } [\alpha, \beta] = 0$$

$$\text{Wenn } [\hat{A}, \hat{B}] \neq 0 \text{ aber mit } [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = [\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0.$$

dann gilt:

$$e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} = e^{\hat{A} + \hat{B} + \frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]} = e^{\hat{A} + \hat{B}} e^{\frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]}$$

### 3.4 Die Sommerfeldsche Polynommethode

Wir wollen nun noch einmal die Lösung des harmonischen Oszillators finden, nun aber direkt mit der Lösung der Schrödingergleichung. Dies bewerkstelligen wir mithilfe der **Sommerfeldschen Polynommethode**:

- i) Wir überführen zuerst die Differentialgleichung selbst in eine einheitenlose Form, indem wir neue Parameter einführen.
- ii) Wir lösen die Differentialgleichung in den Grenzfällen der Variablen, üblicherweise null und unendlich.
- iii) Wir setzen den Produktansatz der Grenzfall-Lösungen mit einer Restfunktion in die Differentialgleichung ein und erhalten eine weitere Differentialgleichung für die Restfunktion.
- iv) Aus den Bedingungen an das Grenzwertverhalten und Normierbarkeit lässt sich die Form der Restfunktion bestimmen und weitere Bedingungen an deren Aussehen stellen.

Beginnen wir also:

i) **Einheitenlose Parameter:**

$$\frac{d^2}{dx^2}\Phi_E(x) + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)\Phi_E(x) = 0$$

$$y = \frac{x}{l_0} \qquad \epsilon = \frac{2E}{\hbar\omega} l_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

$$\Rightarrow \frac{d^2}{dy^2}\Phi_E(y) + (\epsilon - y^2)\Phi_E(y) = 0 \quad \text{kann vernachlässigt werden}$$

Lösungen müssen normierbar sein (dh. müssen im unendlichen verschwinden)

ii) **Asymptotisches Verhalten bei  $|y| \rightarrow \infty$ :**

$$\Phi'' - y^2 \Phi = 0$$

$$\text{Ansatz: } \Phi = e^{-\frac{y^2}{2}} \quad \Phi' = -y e^{-\frac{y^2}{2}}$$

$$\Phi'' = -e^{-\frac{y^2}{2}} + y^2 e^{-\frac{y^2}{2}}$$

$$\Rightarrow \Phi'' - y^2 \Phi = \underbrace{-e^{-\frac{y^2}{2}}}_0 + \cancel{y^2 e^{-\frac{y^2}{2}}} - \cancel{y^2 e^{-\frac{y^2}{2}}} \xrightarrow{y \rightarrow \infty} 0$$

iii) **Ansatz für die Gesamtlösung:**

Wählen einen Polynomansatz für  $F(y)$ . Das ist möglich, da  $F(y)$  im unendlichen langsamer wachsen muss, als eine Exponentialfunktion

$$\boxed{\begin{aligned} \Phi(y) &= F(y) e^{-\frac{y^2}{2}} \\ F(y) &= \sum_{n=0}^{\infty} c_n y^n \end{aligned}}$$

einsetzen in DGL

$$\begin{aligned} \Phi'' &= F''(y) e^{-\frac{y^2}{2}} + 2F'(y)(-y) e^{-\frac{y^2}{2}} + y^2 F(y) e^{-\frac{y^2}{2}} - F(y) e^{-\frac{y^2}{2}} \\ \Phi'' + (\epsilon - y^2)\Phi &= F''(y) - 2yF'(y) + (\epsilon - 1)F(y) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \sum_n n(n-1)c_n y^{n-2} - 2 \sum_n n c_n y^n + (\epsilon - 1)c_n y^n = 0$$

Vergleich der Potenz von  $y$

$$\sum_n \underbrace{[(n+2)(n+1)c_{n+2} - 2nc_n + (\epsilon - 1)c_n]}_0 y^n = 0$$

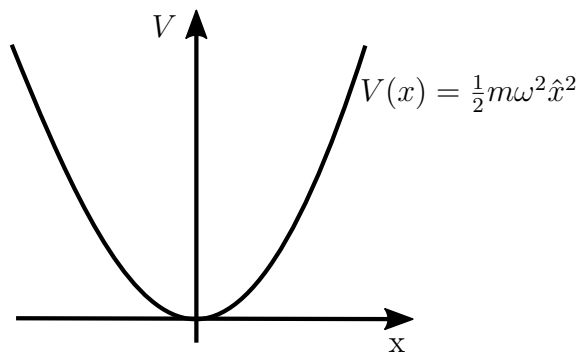


Abbildung 3.5: Potential

$$\Rightarrow c_{n+2} = \frac{2n+1-\epsilon}{(n+2)(n+1)} c_n$$

iv) **Rekursionsbedingung:**

- a) gerade Koeffizienten  $\Rightarrow$  symmetrische Lösung  
 b) ungerade Koeffizienten  $\Rightarrow$  antisymmetrische Lösung

**symmetrische Lösung**

$$c_1 = c_3 = c_5 = \dots = 0$$

$$c_2 = \frac{1-\epsilon}{2} c_0 \quad \Rightarrow \quad c_{n+2} = \frac{2n+1-\epsilon}{(n+2)(n+1)} c_n$$

Die Bedingung der Normierbarkeit erfordert, dass alle ab einem gewissen  $m$  die Reihe abbricht, da sonst unendlich viele Terme aufsummiert werden. Nach der Rekursionsvorschrift reicht dafür ein  $c_m = 0$  für  $n$  gerade aus, da dann alle weiteren Terme verschwinden. Es muss also der Zähler der Rekursionsvorschrift verschwinden. Dafür muss  $\epsilon = 2n + 1$  gesetzt man dies in die Definition so folgt direkt die quantisierte Energie

$$\Rightarrow \boxed{E_m = \frac{\hbar\omega}{2}(2m+1) = \hbar\omega(m + \frac{1}{2})}$$

antisymmetrische Lösung analog

$$\boxed{\Phi_m(y) = \text{Polynom } e^{-\frac{y^2}{2}} \sim H_m(y) e^{-\frac{y^2}{2}}}$$

Also ein Polynom, welches proportional zu den hermiteschen Polynomen ist.

# 4 Beziehung zwischen klassischer und Quantenmechanik Ehrenfest Theorem und klassischer Grenzfall

## 11. Vorlesung

### 4.1 Vergleich Klassik/ Quanten-mechanik

klassische Mechanik:	Quantenmechanik:
Massenpunkt: $\vec{r}(t), \vec{P}(t)$	Wellenfunktion (Zustand): $\psi(\vec{r}, t)$
deterministisch	Wahrscheinlichkeitsdichte $ \psi(\vec{r}, t) ^2$ im Ortsraum $ \tilde{\psi}(\vec{k}, t) ^2$ im Impulsraum
klassisches statistisches Ensemble (zb statistisch schwankende Kraft) $\bar{x} = \int dx \ w(x)x$ $\bar{p} = \int dp \ w(p)p$	$\langle \hat{x} \rangle = \int dx \ \psi^*(x)x\psi(x) = \int dx \  \psi(x) ^2 x$ $\langle \hat{p} \rangle = \hbar \int dk \ \tilde{\psi}^*(k)k\tilde{\psi}(k) = \hbar \int dk \  \tilde{\psi}(k) ^2 k$
$\Delta p = 0$ $p = p_0$ deterministisch	Unschärferelation $\langle \Delta x^2 \rangle \langle \Delta p^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$ $\langle \Delta p^2 \rangle = 0 \Rightarrow \langle \Delta x^2 \rangle = \infty$
Beispiel: siehe Abbildung 4.1a ,4.1b und 4.3a	z.B. ebene Welle $\psi_k(x) \sim e^{ikx}$ siehe Abbildung 4.2a,4.2b und 4.3b



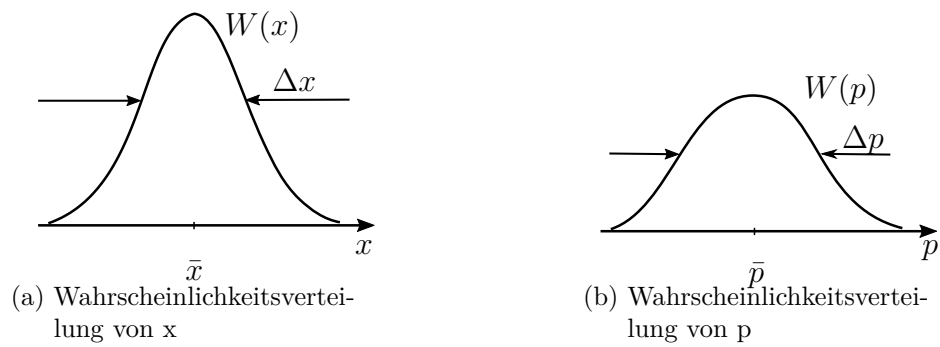


Abbildung 4.1: Wahrscheinlichkeitsverteilung

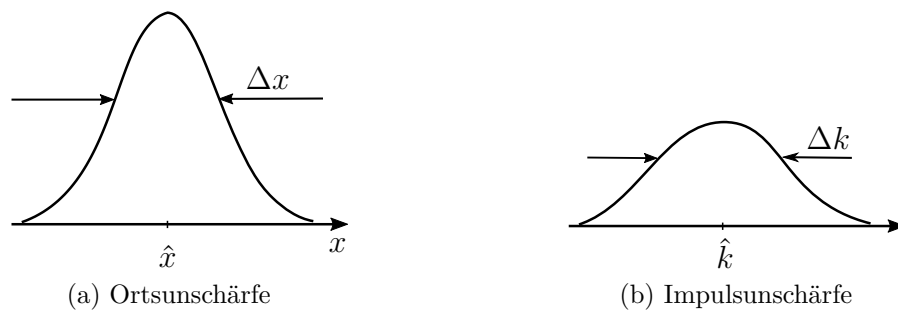


Abbildung 4.2: Unschärfe

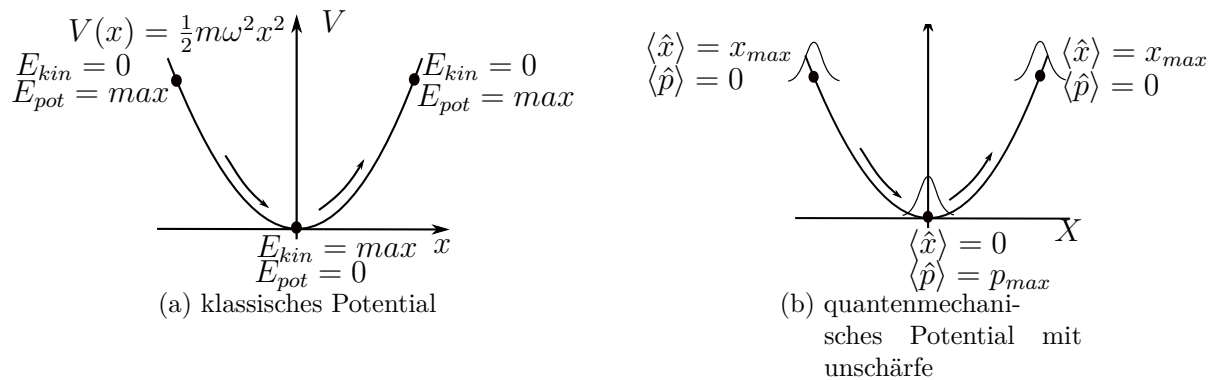


Abbildung 4.3: klassisches und quantenmechanisches Potential

klassischen Mechanik:	Quantenmechanik:
Hamiltonfunktion $H(q, p)$	Schrödingergleichung
	$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}  \psi(t)\rangle = \hat{H}  \psi(t)\rangle$
$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} = \{p, H\}_p$	$\frac{d}{dt} \langle f(\hat{x}, \hat{p}, t) \rangle = \frac{d}{dt} \langle \psi(t)   f(\hat{q}, \hat{p}, t)   \psi(t) \rangle$
$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} = \{q, H\}_p$	$= \frac{d}{dt} \langle \psi(t)   f   \psi(t) \rangle$
	$+ \langle \psi(t)   f \left( \frac{d}{dt}  \psi(t)\rangle \right) + \left\langle \frac{\partial f}{\partial t} \right\rangle$
$\frac{d}{dt} f(q, p, t) = \frac{\partial f}{\partial t} + \{f, H\}_p$	$\frac{d}{dt} \langle \hat{f} \rangle = \left\langle \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} \right\rangle - \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{f}, \hat{H}] \rangle$
$\{a, b\}_p = \sum_i \left\{ \frac{\partial a}{\partial q_i} \frac{\partial b}{\partial p_i} \right\} - \left\{ \frac{\partial a}{\partial p_i} \frac{\partial b}{\partial q_i} \right\}$	$\{\cdot, \cdot\}_p \rightarrow -\frac{i}{\hbar} [\cdot, \cdot]$
$\{f, H\} = \left\{ \frac{\partial f}{\partial q} \frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial q} \right\} = \dot{q} \frac{\partial f}{\partial q} + \dot{p} \frac{\partial f}{\partial p}$	$[a, b] = ab - ba \quad \{a, b\} = ab + ba$
	$\{\cdot, \cdot\} := \text{Antikommutator}$

## 4.2 Ehrenfest-Gleichungen

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$$

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\langle\hat{x}\rangle &= -\frac{i}{\hbar}\langle[\hat{x}, \hat{H}]\rangle \\
&= -\frac{i}{\hbar}\left\langle\left[\hat{x}, \frac{\hat{p}^2}{2m}\right]\right\rangle + \langle[\hat{x}, V(\hat{x})]\rangle \\
&= -\frac{i}{2\hbar m}\underbrace{\langle[\hat{x}, \hat{p}^2]\rangle}_{2i\hbar\langle\hat{p}\rangle}
\end{aligned}$$

**1. Ehrenfestgleichung**

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{x}\rangle = \frac{1}{m}\langle\hat{p}\rangle$$

Das Ergebnis überrascht uns nicht, da ja  $(\frac{dx}{dt} = v, \frac{p}{m} = v)$  aus der klassischen Mechanik bekannt ist

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{p}\rangle = -\frac{i}{\hbar}\langle[\hat{p}, \hat{H}]\rangle = -\frac{i}{\hbar}\langle[\hat{p}, V(\hat{x})]\rangle$$

Aber was ist der Kommutator vom Impuls mit einem allgemeinen, von  $x$  abhängigen Potential

$$\begin{aligned}
[\hat{p}, V(\hat{x})]|\psi\rangle &= \left[\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}, V(x)\right]\psi(x) \\
&= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}V(x)\psi(x) - V(x)\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x) \\
&= \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial V(x)}{\partial x}\right)\psi(x)
\end{aligned}$$

**2. Ehrenfestgleichung**

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{p}\rangle = -\left\langle\frac{\partial V(x)}{\partial x}\right\rangle = \langle F(x)\rangle$$

Aber

$$\langle F(x)\rangle \neq F(\langle x\rangle)$$

**klassische Näherung:**

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle\hat{p}\rangle &= \langle\nabla V(\vec{r})\rangle \neq \nabla V(\langle\hat{\vec{r}}\rangle) \\ \frac{d}{dt}\langle\hat{\vec{r}}\rangle &= \frac{\langle\hat{p}\rangle}{m}\end{aligned}$$

Wann gilt zumindest approximativ die Gleichheit?  
 $\Rightarrow$  Taylorentwicklung von

$$\begin{aligned}\vec{F}(\vec{r}) &= -\nabla V(\vec{r}) \\ \text{in } \hat{\vec{r}} - \langle\hat{\vec{r}}\rangle\end{aligned}$$

In 1D:

$$\begin{aligned}F(\hat{x}) &= F(\langle\hat{x}\rangle) + F'(x)|_{x=\langle x\rangle} \cdot (\hat{x} - \langle x\rangle) + \frac{1}{2!} \cdot F''(x)|_{x=\langle x\rangle} \cdot (\hat{x} - \langle x\rangle)^2 + \dots \\ \langle F(\hat{x}) \rangle &= F(\langle\hat{x}\rangle) + 0 + \frac{1}{2!} \cdot F''(x)|_{x=\langle x\rangle} \cdot \underbrace{\langle (\hat{x} - \langle\hat{x}\rangle)^2 \rangle}_{\langle\Delta\hat{x}^2\rangle} + \dots\end{aligned}$$

Also  $\langle F(\hat{x}) \rangle \cong F(\langle\hat{x}\rangle)$  falls  $\langle\Delta\hat{x}^2\rangle$  klein

**Die beiden Ehrenfest-Gleichungen:**

1.Ehrenfest-Gleichung:	$\frac{d\langle\hat{x}\rangle}{dt} = \frac{\langle\hat{p}\rangle}{m}$
2.Ehrenfest-Gleichung:	$\frac{d\langle\hat{p}\rangle}{dt} = F(\langle\hat{x}\rangle)$

# 5 Der Drehimpuls in der Quantenmechanik

## 5.1 Elementare Eigenschaften

klassische Mechanik	$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$	
Quantenmechanik	$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i \hbar \delta_{i,j}$	
	$L_i = \varepsilon_{ijk} x_j p_k$	$(\varepsilon_{ijk} := \text{Levi Civita})$

Wir benutzen die Einstein'sche-Summenkonvention und können auf Symmetrisieren verzichten.

$$\hat{L}_i = \varepsilon_{ijk} \hat{x}_j \hat{p}_k = \varepsilon_{ijk} \hat{p}_k \hat{x}_j$$
$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}$$

$$\hat{L}_x = \hat{y} \hat{p}_z - \hat{z} \hat{p}_y$$
$$\hat{L}_y = \hat{z} \hat{p}_x - \hat{x} \hat{p}_z$$
$$\hat{L}_z = \hat{x} \hat{p}_y - \hat{y} \hat{p}_x$$

In Ortsdarstellung gilt:

$$\hat{\vec{L}} = -i\hbar \vec{r} \times \nabla$$

elementare Vertauschungsregeln:

$$\begin{aligned}
 [\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= [\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z] \\
 &= \hat{y}\hat{p}_x \cdot (-i\hbar) + i\hbar \cdot \hat{x}\hat{p}_y \\
 &= i\hbar \cdot (\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x) \\
 &= i\hbar \hat{L}_z
 \end{aligned}$$

Analog folgen die anderen:

$$\begin{aligned}
 [\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= i\hbar \cdot \hat{L}_z \\
 [\hat{L}_y, \hat{L}_z] &= i\hbar \cdot \hat{L}_x \\
 [\hat{L}_z, \hat{L}_x] &= i\hbar \cdot \hat{L}_y \\
 \Rightarrow [\hat{L}_i, \hat{L}_j] &= i\hbar \cdot \varepsilon_{ijk} \hat{L}_k \quad (\text{zyklische Vertauschung})
 \end{aligned}$$

Im folgenden benutzen wir die Einstein'sche-Summenkonvention.

$$\begin{aligned}
 \hat{\vec{L}} &= \hat{L}_x \vec{e}_x + \hat{L}_y \vec{e}_y + \hat{L}_z \vec{e}_z \\
 \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{L}} &= \hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = \hat{L}_j \cdot \hat{L}_j \\
 [\hat{L}_i, \hat{L}^2] &= [\hat{L}_i, \hat{L}_j \hat{L}_j] = \hat{L}_j \cdot [\hat{L}_i, \hat{L}_j] + [\hat{L}_i, \hat{L}_j] \cdot \hat{L}_j \\
 &= i\hbar \underbrace{\varepsilon_{ijk}}_{\text{anti-symmetrisch}} \cdot \underbrace{(\hat{L}_j \cdot \hat{L}_k + \hat{L}_k \cdot \hat{L}_j)}_{\text{symmetrisch}} \equiv 0
 \end{aligned}$$

$$[\hat{L}_i, \hat{L}^2] = 0$$

Es existiert ein gemeinsamer Satz von Eigenzuständen zwischen  $L_x$  und  $L^2$ , zwischen  $L_y$  und  $L^2$  etc. Dies darf aber nicht zu der Annahme verführen, dass damit auch  $L_x$  und  $L_y$  eine Basis teilen. Die Basen von  $L^2$  und den anderen sind aufgrund von Entartung nicht eindeutig und damit auch nicht deckungsgleich.

**allgemeine Unschärferelation:**

$$\langle \Delta \hat{L}_x \rangle \cdot \langle \Delta \hat{L}_y \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} |\langle \hat{L}_z \rangle|^2$$

d.h. außer für  $\langle \hat{L}_z \rangle = 0$   
können  $\hat{L}_x$  und  $\hat{L}_y$  nicht gleichzeitig gemessen werden.

## 5.2 Spektrum des Drehimpulses

z.B.  $[\hat{L}_z, \hat{L}^2] = 0$

was sind Eigenwerte und Eigenzustände von  $\hat{L}_z$  und  $\hat{L}^2$  ?

**Leiteroperatoren:**

$$\hat{L}_{\pm} \equiv \hat{L}_x \pm i \hat{L}_y$$

$$\hat{L}_+^\dagger = \hat{L}_-$$

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_+] = [\hat{L}_z, \hat{L}_x + i \hat{L}_y]$$

$$= i \hat{L}_y - i \hbar \cdot \hat{L}_x = \hbar (\hat{L}_x + i \hat{L}_y) = \hbar \hat{L}_+$$

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_+] = \hbar \hat{L}_+$$

analog:

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_-] = -\hbar \hat{L}_-$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_{\pm}] = [\hat{L}^2, \hat{L}_x \pm i \hat{L}_y] = 0$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_\pm] = 0$$

Spektrum von  $\hat{L}_z$ :

$$\hat{L}_z |\psi_m\rangle \stackrel{!}{=} \hbar m |\psi_m\rangle$$

$$m = ?$$

$$|\psi_m\rangle = ?$$

$$\text{betrachten } \hat{L}_+ |\psi_m\rangle$$

$$\hat{L}_z \hat{L}_+ |\psi_m\rangle = (\hat{L}_+ \hat{L}_z + \hbar \hat{L}_x) |\psi_m\rangle = \hbar (m+1) \hat{L}_x |\psi_m\rangle$$

$$\begin{array}{ll} \hat{L}_+ \cdot |\psi_m\rangle \propto |\psi_{m+1}\rangle & \text{Aufsteigeoperator} \\ \text{analog: } \hat{L}_- \cdot |\psi_m\rangle \propto |\psi_{m-1}\rangle & \text{Absteigeoperator} \end{array}$$

## 12. Vorlesung 30.11.16

### 5.2.1 Spektrum von $\hat{L}^2$

$$[\hat{L}_z, \hat{L}^2] = 0$$

$$|\psi_m\rangle = |\psi_{km}\rangle$$

k sind Eigenwerte von  $\hat{L}^2$

$\hat{L}^2$  kommutiert mit den Leiteroperatoren ( $L_\pm$ ):  $[L^2, L_\pm] = 0$



$$k^2 = ? \quad \begin{aligned} \hat{L}^2 |\psi_{km}\rangle &= \hbar^2 k^2 |\psi_{km}\rangle \\ \hat{L}^2 \hat{L}_\pm |\psi_{km}\rangle &= \hat{L}_\pm \hat{L}^2 |\psi_{km}\rangle = \hbar^2 k^2 \hat{L}_\pm |\psi_{km}\rangle \end{aligned}$$

Die Eigenzustände  $|\psi_{km}\rangle$  haben denselben Eigenwert  $\hbar^2 k^2$  für alle  $m(m \pm 1, m \pm 2, \dots)$

$$\langle \psi_{km} | \underbrace{\hat{L}^2}_{\hbar^2 k^2} | \psi_{km} \rangle = \underbrace{\langle \hat{L}_x^2 \rangle}_{\geq 0} + \underbrace{\langle \hat{L}_y^2 \rangle}_{\geq 0} + \underbrace{\langle \hat{L}_z^2 \rangle}_{\geq 0} \geq \hbar^2 m^2$$

$$\Rightarrow k^2 \geq m^2$$

k vorgegeben:  $|m| \leq k$

Es existiert ein maximaler Wert ( $\leq k$ ) und minimalen Wert ( $\geq (-k)$ ) von m  
k legt also min/max von m fest.

$$\begin{aligned} \hat{L}_+ |\psi_{km_{max}}\rangle &= 0 \\ \hat{L}_- |\psi_{km_{min}}\rangle &= 0 \end{aligned}$$

Nun wollen wir  $\hat{L}^2$  durch Leiteroperatoren  $\hat{L}_+$  und  $\hat{L}_-$  und  $\hat{L}_z$  ausdrücken.

$$\begin{aligned} \hat{L}_+ \hat{L}_- &= (\hat{L}_x + i\hat{L}_y)(\hat{L}_x - i\hat{L}_y) \\ &= \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + i\hat{L}_y \hat{L}_x - i\hat{L}_x \hat{L}_y \\ &= \underbrace{\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2}_{\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2} + \hbar \hat{L}_z = \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 + \hbar \hat{L}_z \end{aligned}$$

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_+ \hat{L}_- + \hat{L}_z^2 - \hbar \hat{L}_z$$

$$\begin{aligned}
\text{bzw. } \hat{L}^2 &= \hat{L}_\pm \hat{L}_\mp + \hat{L}_z^2 \mp \hbar \hat{L}_z \\
\hat{L}^2 |\Psi_{km}\rangle_{\min} &= (\hat{L}_+ \hat{L}_- + \hat{L}_z^2 - \hbar \hat{L}_z) |\Psi_{km}\rangle_{\min} \\
&= \hbar^2 (m_{\min}^2 - m_{\min}) |\Psi_{km}\rangle_{\min} \\
\hbar^2 k^2 |\Psi_{km}\rangle_{\min} &= \hbar^2 m_{\min} (m_{\min} - 1) |\Psi_{km}\rangle_{\min}
\end{aligned}$$

Nun können wir  $k^2$  ablesen.

$$\begin{aligned}
k^2 &= m_{\min}(m_{\min} - 1) \\
\hat{L} |\Psi_{km}\rangle_{\max} &= (\hat{L}_- \hat{L}_+ + \hat{L}_z^2 + \hbar \hat{L}_z) |\Psi_{km}\rangle_{\max} \\
k^2 &= m_{\max}(m_{\max} + 1) \stackrel{!}{=} m_{\min}(m_{\min} - 1)
\end{aligned}$$

$-m_{\max} = m_{\min}$

Vereinbarung:  $m_{\max} = l \quad \Rightarrow \quad k^2 = l(l+1)$

Eigenwertgleichungen von  $\hat{L}^2$  und  $\hat{L}_z$ :

$$\begin{aligned}
\hat{L}^2 |\Psi_{lm}\rangle &= \hbar^2 l(l+1) |\Psi_{lm}\rangle \\
\hat{L}_z |\Psi_{lm}\rangle &= \hbar m |\Psi_{lm}\rangle \\
-l \leq m &\leq +l
\end{aligned}$$

Wir wissen dabei noch nicht, was die Zahlen  $m$  und  $l$  bedeuten, werden diese später aber als Drehimpulsquantenzahl  $l$  (Form des Atomorbitals) und magnetische Quantenzahl  $m$  (räumliche Orientierung des Drehimpulses) identifizieren.

$m = ?$

$l = ?$

$$\begin{aligned}
L_{\pm}|\psi_{lm}\rangle &= \alpha_{lm}^{\pm}|\psi_{lm\pm 1}\rangle \\
||\hat{L}_{\pm}\psi_{lm}\rangle|^2 &= \langle\psi_{lm}|L_{\mp}L_{\pm}|\psi_{lm}\rangle \\
&= \langle\psi_{lm}|\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 \mp \hbar\hat{L}_z|\psi_{lm}\rangle \\
&= \hbar^2 l(l+1) - \hbar^2 m^2 \mp \hbar^2 m \\
&= \hbar^2 [l(l+1) - m(m \mp 1)] = |\alpha_{lm}^{\pm}|^2
\end{aligned}$$

$$\hat{L}_{\pm}|\psi_{lm}\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m \mp 1)}|\psi_{lm\pm 1}\rangle$$

$$m_{\max} = l$$

$$m_{\min} = -l$$

$l$  kann entweder

$l = 0, 1, 2, 3$	oder	$l = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$
In jedem Fall:		
$m =$		
$-l, (l-1), \dots, -1, 0, 1, \dots, (l-1), l$		$-l - (l-1), \dots, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \dots, (l-1), l$

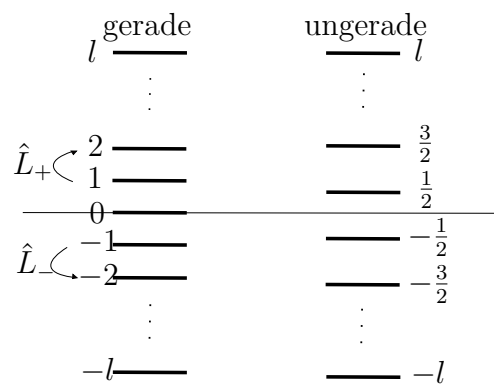


Abbildung 5.1: Drehimpuls

**diskreter Drehimpuls:**

Grenzfall  $m \simeq -l + n$  und  $n \ll l$

$$\hat{L}_{\pm}|\psi_{lm}\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1) - (-l+n)(-(n+1))}|\psi_{lm\pm 1}\rangle$$

$$\hat{L}_{\pm}|\psi_{lm}\rangle = \hbar\sqrt{l^2 + l - l^2 + l - n^2 - n + 2ln}|\psi_{lm\pm 1}\rangle$$

$$\hat{L}_{\pm}|\psi_{lm}\rangle = \hbar\sqrt{2l(l+1) - n(n+1)}|\psi_{lm\pm 1}\rangle$$

Dabei ist  $n(n+1)$  unter der Wurzel  $\approx 0$  da  $n \ll l$

$$\begin{aligned} \underbrace{\frac{1}{\hbar\sqrt{2l}}\hat{L}_+}_{\hat{a}^\dagger}|\psi_{lm}\rangle &= \sqrt{n+1}|\psi_{lm+1}\rangle \\ &\simeq \hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \end{aligned}$$

**5.3 Drehimpuls in Ortsdarstellung**

$$\hat{r} \rightarrow \vec{r}$$

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla$$

$$L_i = \epsilon_{jkl}\hat{x}_j\hat{p}_k$$

$$L_j = -i\hbar\epsilon_{jkl}x_k\frac{d}{dx_l}$$

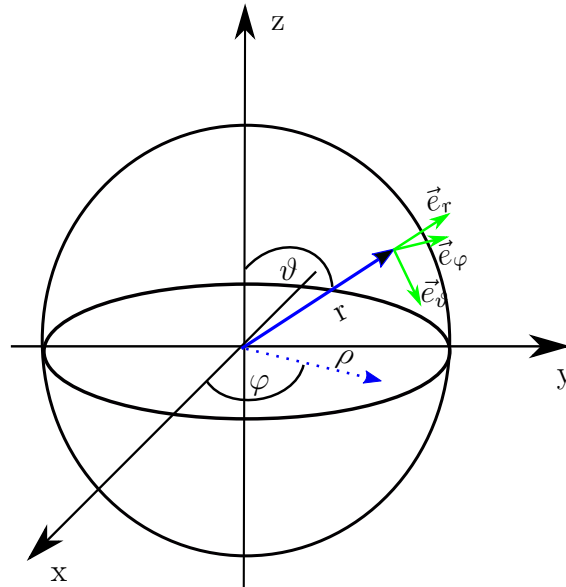
**Polarkoordinaten:**

Abbildung 5.2: Kugelkoordinaten

$$\begin{aligned}x &= r \sin(\vartheta) \cos(\varphi) \\y &= r \sin(\vartheta) \sin(\varphi) \\z &= r \cos(\vartheta)\end{aligned}$$

Einheitsvektor in krummlinigen Koordinaten

$$\vec{e}_\xi = \frac{1}{b_\xi} \frac{\partial \vec{r}}{\partial \xi} \qquad b_\xi \left| \frac{\partial \vec{r}}{\partial \xi} \right|$$

$$\vec{r} = r \left( \sin(\vartheta) \cos(\varphi), \sin(\vartheta) \sin(\varphi), \cos(\vartheta) \right)^T$$

$$\vec{e}_r = \sin(\vartheta) \cos(\varphi) \vec{e}_x + \sin(\vartheta) \sin(\varphi) \vec{e}_y + \cos(\vartheta) \vec{e}_z$$

$$\vec{e}_\vartheta = \cos(\vartheta) \cos(\varphi) \vec{e}_x + \cos(\vartheta) \sin(\varphi) \vec{e}_y - \sin(\vartheta) \vec{e}_z$$

$$\vec{e}_\varphi = -\sin(\varphi) \vec{e}_x + \cos(\varphi) \vec{e}_y$$

$$\vec{r} = r \cdot \vec{e}_r$$

$$\nabla = \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\vartheta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \vec{e}_\varphi \frac{1}{r \sin(\vartheta)} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$\hat{\vec{L}} = r \vec{e}_r \times \left( \frac{\hbar}{i} \nabla \right) = -i\hbar \left[ \vec{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \vec{e}_\vartheta \frac{1}{\sin(\vartheta)} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right]$$

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= \vec{e}_x \hat{\vec{L}} = i\hbar \left( \sin(\varphi) \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \cos(\varphi) \cot(\vartheta) \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ \hat{L}_y &= \vec{e}_y \hat{\vec{L}} = i\hbar \left( -\cos(\varphi) \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \sin(\varphi) \cot(\vartheta) \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ \hat{L}_z &= \vec{e}_z \hat{\vec{L}} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{aligned}$$

$$\hat{L}^2 = \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{L}}$$

Vorsicht Eigenvektoren  $\vec{e}_r, \vec{e}_\vartheta, \vec{e}_\varphi$  sind vom Ort abhängig  
z.B.

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} \vec{e}_\vartheta = \cos(\vartheta) \vec{e}_\varphi$$

$\Rightarrow \dots \Rightarrow$  Übungsaufgabe

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin(\vartheta)} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin(\vartheta) \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{(\sin(\vartheta))^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]$$

Laplaceoperator in Kugelkoordinaten

$$\Delta = \underbrace{\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r}}_{\text{Radialanteil}} - \underbrace{\frac{L^2}{\hbar^2 r^2}}_{\text{Rotationsanteil}}$$

## 13. Vorlesung

## 5.4 Eigenfunktionen des Drehimpulses

$\hat{L}_j, \hat{L}^2$  sind nur Funktionen welche von  $\varphi, \vartheta$  abhängen  
Wellenfunktion im  $\mathbb{R}^3 : \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$

$$\mathbb{R}^3 \longleftrightarrow \mathbb{R}_+ \otimes S^2$$

Mit  $\mathbb{R}_+ :=$  Abstand  $r$  und  $S^2 :=$  Winkel  $\vartheta, \varphi$

Die Eigenfunktionen von  $\hat{L}_j, \hat{L}^2$  sind sinnvollerweise im  $\mathcal{L}^2(S^2)$  definiert

**Skalarprodukt auf  $S^2$ :**

$$\begin{aligned} \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle &= \int d\Omega \psi_1^*(\vartheta, \varphi) \psi_2(\vartheta, \varphi) \\ &= \int_0^\pi d\vartheta \sin(\vartheta) \int_0^{2\pi} d\varphi \psi_1^*(\vartheta, \varphi) \psi_2(\vartheta, \varphi) \end{aligned}$$

**Zuerst untersuchen wir das Spektrum von  $L_z$ :**

$$\begin{aligned} \hat{L}_z \psi_{lm}(\vartheta, \varphi) &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi_{lm}(\vartheta, \varphi) = \hbar m \psi_{lm}(\vartheta, \varphi) \\ \Rightarrow \psi_{lm}(\vartheta, \varphi) &= e^{im\varphi} u_{lm}(\vartheta) \\ \psi_{lm}(\vartheta, \varphi + 2\pi) &\stackrel{!}{=} \psi_{lm}(\vartheta, \varphi) \\ \Rightarrow e^{im2\pi} &= 1 \\ \Rightarrow \boxed{m \in \mathbb{Z}} \end{aligned}$$

Für den Bahndrehimpuls kommen nur ganzzahlige Werte von  $l$  in Frage

**Nun untersuchen wir das Spektrum von  $L^2$ :**

$$[\hat{L}_z, \hat{L}^2] = 0$$

$$\begin{aligned} \hat{L}_{lm}^2 \psi_{lm}(\vartheta, \varphi) &= -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin(\vartheta)} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin(\vartheta) \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2(\vartheta)} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \psi_{lm}(\vartheta, \varphi) \\ &= \hbar^2 l(l+1) \psi_{lm}(\vartheta, \varphi) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \left[ \frac{1}{\sin(\vartheta)} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin(\vartheta) \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \frac{m^2}{\sin^2(\vartheta)} + l(l+1) \right] u_{lm}(\vartheta) = 0$$

Koordinatentransformation  $\xi = \cos(\vartheta) \quad \Rightarrow \quad d\xi = -\sin(\vartheta) d\vartheta$

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial \xi} (1 - \xi^2) \frac{\partial}{\partial \xi} u_{lm} + \left( l(l+1) - \frac{m^2}{1 - \xi^2} \right) u_{lm} = 0}$$

Müssen nun diese Gleichung lösen wobei  $-1 \leq \xi \leq 1$

i)

Spezialfall  $m = 0$

Dies ergibt die Legendre Differentialgleichung:

$$\boxed{\frac{d}{d\xi} (1 - \xi^2) \frac{d}{d\xi} u_{lm} + l(l+1) u_{lm} = 0}$$

Das ist eine Differentialgleichung 2. Ordnung  $\Rightarrow$  man bekommt 2 Lösungen wobei nur eine im  $\mathcal{L}^2(S^2)$  liegt

$$u_{lm}(\xi) = P_l(\xi) = P_l(\cos(\vartheta))$$

**Legendre-Polynome:**

$$\boxed{P_l(\xi) \equiv \frac{1}{2^l l!} \frac{\partial^l}{\partial \xi^l} (\xi^2 - 1)^l}$$

Beweis durch Einsetzen:

Grad von l

$$P_l(-\xi) = (-1)^l P_l(\xi) \quad l \text{ gerade} \Rightarrow \text{symmetrisch}$$

$$l \text{ ungerade} \Rightarrow \text{antisymmetrisch}$$

$$P_0(\xi) = 1$$

$$P_1(\xi) = \xi$$

$$P_2(\xi) = \frac{3}{2}\xi^2 - \frac{1}{2}$$

$$P_3(\xi) = \frac{5}{2}\xi^3 - \frac{3}{2}\xi$$



**Eigenschaften:**

a) Orthogonalität

$$\int_0^1 d\xi \, P_l(\xi) P_{l'}(\xi) = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}$$

b) Symmetrie

$$P_l(-\xi) = (-1)^l P_l(\xi)$$

c) Rekursionen

$$(l+1) P_{l+1} = (2l+1) \xi P_l - P_{l-1}$$

$$(1-\xi^2) \frac{\partial}{\partial \xi} P_l = -l \xi P_l + l P_{l-1}$$

d) erzeugende Funktion

$$\frac{1}{\sqrt{1+s^2-2s \cdot \cos(\vartheta)}} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos(\vartheta)) s^l$$

$$P_l(\cos(\vartheta)) = \left. \frac{\partial^l}{\partial s^l} (\dots) \right|_{s=0}$$

ii)

$$m \neq 0$$

Lösungen sind die zugeordneten Legendrepolynome

$$0 \leq m \leq l$$

$$P_l^m(\xi) = (-1)^m (1-\xi^2)^{\frac{m}{2}} \frac{\partial^m}{\partial \xi^m} P_l(\xi)$$

$$P_l^{-m}(\xi) = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(\xi)$$

$l$  kann maximal  $m$  sein da man maximal  $l$  mal differenzieren kann bis Null raus kommt

**Zusammenfassung Kugelflächenfunktionen:**

$$\psi_{lm}(\vartheta, \varphi) = Y_l^m(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_{lm}(\cos(\vartheta)) e^{im\varphi}$$

$$\hat{L}_z Y_l^m(\vartheta, \varphi) = \hbar m Y_l^m(\vartheta, \varphi)$$

$$\hat{L}^2 Y_l^m(\vartheta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\vartheta, \varphi)$$

Orthonormalität (auf Kugeloberfläche  $r=1$ )

$$\int d\Omega Y_l^{m*}(\vartheta, \varphi) Y_{l'}^{m'}(\vartheta, \varphi) = \int_0^\pi d\vartheta \sin(\vartheta) \int_0^{2\pi} d\varphi Y_l^{m*}(\vartheta, \varphi) Y_{l'}^{m'}(\vartheta, \varphi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

$$f(\vartheta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l c_{ml} Y_l^m(\vartheta, \varphi)$$

$$\int d\Omega Y_{l'}^{m'*}(\vartheta, \varphi) f(\vartheta, \varphi) = c_{m'l'}$$

$$Y_0^0(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$$

$$Y_1^{-1}(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin(\vartheta) \cdot e^{-i\varphi}$$

$$Y_1^0(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos(\vartheta)$$

$$Y_1^1(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin(\vartheta) e^{-i\varphi}$$

$$Y_l^0(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos(\vartheta))$$

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2}$$

$$\frac{\vec{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$$

Was passiert wenn man ein Problem gelöst hat und dann das System dreht? Was passiert mit den Eigenfunktionen?

## 5.5 Translation und Rotation

### 5.5.1 Translation im Ortsraum

Es gibt 2 Möglichkeiten zum Verschieben

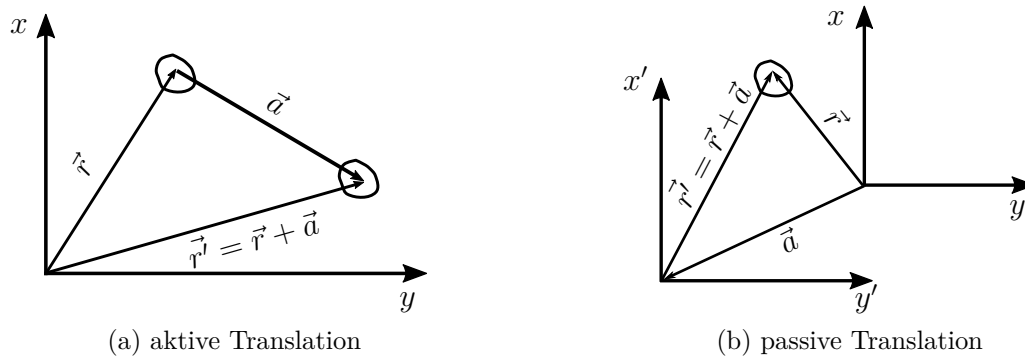


Abbildung 5.3: Translation

Frage

$$|\psi\rangle \xrightarrow{?} |\psi'\rangle = \hat{U}|\psi\rangle \quad \hat{U} = ?$$

Ortsdarstellung (passive Interpretation):

$$\psi(\vec{r}) \quad \psi'(\vec{r}) = \psi(\vec{r} + \vec{a}) = \hat{U}\psi(\vec{r})$$

**Taylorreihe:**

$$\begin{aligned}
 \psi(\vec{r} + \vec{a}) &= \psi(\vec{r}) + \vec{a} \nabla \psi(\vec{r}) + \frac{1}{2!} (\vec{a} \nabla)^2 \psi(\vec{r}) + \dots \\
 &= \left( 1 + \vec{a} \nabla + \frac{1}{2!} (\vec{a} \nabla)^2 + \frac{1}{3!} (\vec{a} \nabla)^3 + \dots \right) \psi(\vec{r}) \\
 &= e^{\vec{a} \nabla} \psi(\vec{r}) \\
 &= e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{a} \hat{\vec{p}}} \psi(\vec{r})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \hat{U}(\vec{a}) &= e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{a} \hat{\vec{p}}} \\
 \hat{U}^{-1}(\vec{a}) &= \hat{U}^\dagger(\vec{a}) = e^{i\hbar \vec{a} \hat{\vec{p}}} = \hat{U}(-\vec{a})
 \end{aligned}$$

i) **Abel'sche Gruppe:**

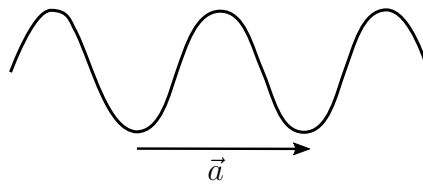
$$\begin{aligned}
 \hat{U}(\vec{a}) \hat{U}(\vec{b}) &= \hat{U}(\vec{b}) \hat{U}(\vec{a}) \\
 &= \hat{U}(\vec{a} + \vec{b})
 \end{aligned}$$

ii) **infinitesimale Verschiebung:**

$$\hat{U}(\delta \vec{a}) \cong 1 - \frac{i}{\hbar} \delta \vec{a} \hat{\vec{p}} \quad \hat{\vec{p}} := \text{Generator der Translation}$$

iii) Falls gilt  $\hat{U}(\vec{a}) \hat{H} \hat{U}^{-1}(\vec{a}) = \hat{H}$  dann ist das System invariant unter einer Translation von  $\vec{a}$

**Beispiel (Potential):**



iv)

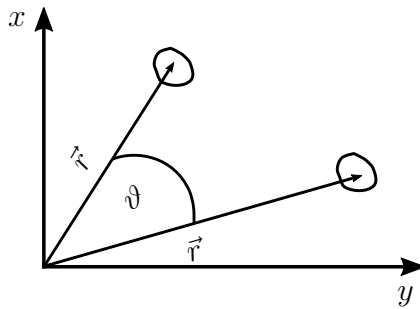
$$\text{falls} \quad \hat{U}(\vec{a}) \hat{H} \hat{U}^{-1}(\vec{a}) = \hat{H} \quad \forall \vec{a}$$

$$\Leftrightarrow [\hat{H}, \hat{\vec{p}}] = 0$$

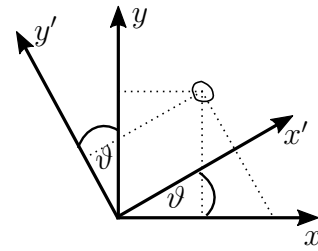
$$\Leftrightarrow \hat{\vec{p}} \text{ ist eine Erhaltungsgröße d.h. } \langle E | \hat{\vec{p}} | E \rangle = \text{const}$$

Entspricht dem klassischen Noethertheorem

### 5.5.2 Rotation



(a) aktive Rotation



(b) passive Rotation

Abbildung 5.4: Rotation

in 2D:

$$\text{passiv:} \quad \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \cos \vartheta & -\sin \vartheta \\ \sin \vartheta & \cos \vartheta \end{pmatrix}}_{D(\vartheta)} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

$$\text{aktiv:} \quad \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \cos \vartheta & \sin \vartheta \\ -\sin \vartheta & \cos \vartheta \end{pmatrix}}_{D(-\vartheta)=D^{-1}(\vartheta)} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

in 3D:

Rotation um die z-Achse

$$D_z(\vartheta) = \begin{pmatrix} \cos \vartheta & -\sin \vartheta & 0 \\ \sin \vartheta & \cos \vartheta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

infinitesimale Drehung  $|\vartheta| \ll 2\pi \quad \vartheta = \epsilon$

$$D_z(\epsilon) = \begin{pmatrix} 1 & -\epsilon & 0 \\ \epsilon & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$D_x(\epsilon) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -\epsilon \\ 0 & \epsilon & 1 \end{pmatrix}$$

$$D_y(\epsilon) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \epsilon \\ 0 & 1 & 0 \\ -\epsilon & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$D_x(\epsilon) D_y(\epsilon) - D_y(\epsilon) D_x(\epsilon) = \begin{pmatrix} 0 & -\epsilon^2 & 0 \\ \epsilon^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = D_z(\epsilon^2) - 1 \neq 0$$

$\Rightarrow$  Rotationen sind nicht kommutativ! Frage nun:

$$|\psi'\rangle = \hat{D}|\psi\rangle \quad D = ?$$

Rotation wird durch  $\hat{L}$  generiert.

## 14. Vorlesung Wiederholung (Rotation)

aktiv:

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \cos(\vartheta) & \sin(\vartheta) \\ -\sin(\vartheta) & \cos(\vartheta) \end{pmatrix}}_{=:\hat{D}(-\vartheta)} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

passiv:

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \cos(\vartheta) & -\sin(\vartheta) \\ \sin(\vartheta) & \cos(\vartheta) \end{pmatrix}}_{=:\hat{D}^{-1}(-\vartheta)=\hat{D}(\vartheta)} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

**Ende Wiederholung**

**Frage:**

$$|\psi'\rangle = \hat{D}|\psi\rangle$$

( $\hat{D}$  verknüpft Zustand nach der Drehung)

passive Interpretation:

$$\psi'(\vec{r}) = \hat{D}\psi(\vec{r}) = \psi(D^{-1}(\vartheta)\vec{r})$$

$$\text{infinitesimale Rotation: } \hat{D} = \hat{D}_z(\varepsilon)$$

$$\Rightarrow \hat{D}_z(\varepsilon)\psi(\vec{r}) = \psi(D_z(-\varepsilon)\vec{r})$$

$$= \psi(x + y\varepsilon, -\varepsilon x + y, z)$$

$$\stackrel{\text{Taylor}}{=} \psi(x, y, z) + \varepsilon \cdot \underbrace{\left(y \frac{d\psi}{dx} - x \frac{d\psi}{dy}\right)}_{=\hat{L}_z} + \sigma(\varepsilon^2)$$

$$\Rightarrow \boxed{\hat{D}_z(\varepsilon) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \cdot \hat{L}_z + \sigma(\varepsilon^2)}$$

endliche Drehung:  $\vartheta = n\varepsilon$

mit:  $n \rightarrow \infty, \varepsilon \rightarrow 0$

$$\left[\hat{D}_z(\varepsilon)\right]^n = \hat{D}_z(\vartheta) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left[1 - \frac{i}{\hbar} \frac{\vartheta}{n} \hat{L}_z\right]^n = e^{-\frac{i}{\hbar} \vartheta \hat{L}_z}$$

(wie bei Translation)

Beliebige Richtung:  $\vec{n}, |\vec{n}| = 1$

$$\boxed{\hat{D}_{\vec{n}}(\vartheta) = e^{-\frac{i}{\hbar} \vartheta \vec{n} \cdot \hat{\vec{L}}}} \quad (10)$$

**Bemerkung:**

i Drehungen sind eine nicht-abelsche Gruppe. D.h. dass sie nicht kommutativ sind.

ii Wenn:  $\hat{D}_{\vec{n}}(\vartheta) \cdot \hat{H} \cdot \hat{D}_{\vec{n}}^{-1}(\vartheta) = \hat{H}$ ,

$\Rightarrow$  System ist invariant unter Drehung um  $\vec{n}$  Achse um Winkel  $\vartheta$ .

iii Gilt (ii)  $\forall$  Winkel  $\vartheta \in (0, 2\pi]$ :

$$\Rightarrow \left[\hat{H}, \vec{n} \cdot \hat{\vec{L}}\right] = 0$$

$\Rightarrow \vec{L}_n$  bleibt erhalten! (Drehimpuls bleibt erhalten)

**Behauptung:**

(10) ist definierende Eigenschaft für Drehimpuls

$\hookrightarrow$  müssten Vertauschungsregeln erhalten

**Vertauschungsregeln für den Drehimpuls:**

$$\begin{aligned}
 & \underbrace{\hat{D}_x(\varepsilon)}_1 \cdot \underbrace{\hat{D}_y(\varepsilon)}_2 - \underbrace{\hat{D}_y(\varepsilon)}_3 \cdot \underbrace{\hat{D}_x(\varepsilon)}_4 = \hat{D}_z(\varepsilon^2) - \mathbb{1} \\
 & \underbrace{\left(1 - \frac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{L}_x - \frac{1}{2\hbar^2}\varepsilon^2\hat{L}_x^2\right)}_1 \cdot \underbrace{\left(1 - \frac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{L}_y - \frac{1}{2\hbar^2}\varepsilon^2\hat{L}_y^2\right)}_2 \\
 & - \underbrace{\left(1 - \frac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{L}_y - \frac{1}{2\hbar^2}\varepsilon^2\hat{L}_y^2\right)}_3 \cdot \underbrace{\left(1 - \frac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{L}_x - \frac{1}{2\hbar^2}\varepsilon^2\hat{L}_x^2\right)}_4 \\
 & = \cancel{\mathbb{1}} - \frac{i}{\hbar}\varepsilon^2\hat{L}_z + \sigma(\varepsilon^3) \cancel{\mathbb{1}} \\
 & \text{also: } -\frac{\varepsilon^2}{\hbar^2}[\hat{L}_x, \hat{L}_y] + \sigma(\varepsilon^3) = -\frac{i}{\hbar}\varepsilon^2\hat{L}_z \\
 & \Rightarrow \boxed{[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z}
 \end{aligned}$$

□



# 6 Einteilchen-QM in drei Dimension

## 6.1 Das freie Teilchen

Wollen stationäre Schrödinger Gleichung lösen.

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$$

(A) Schrödingergleichung in kartesischen Koordinaten:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2} \right) \cdot \varphi_E(\vec{r}) = E \cdot \varphi_E(\vec{r})$$

$$\text{setzen: } E := \frac{\hbar^2 \cdot k^2}{2m} \stackrel{!}{>} 0$$

setzen spezielle Lösung an  $\vec{r}$  (Schrödingergleichung ist linear):

$$\varphi_E(\vec{r}) = X(x) \cdot Y(y) \cdot Z(z) \quad (\text{Separationsansatz})$$

$$\Rightarrow E \cdot \underbrace{XYZ}_{\varphi} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( X''(x)YZ + XY''(y)Z + XYZ''(z) \right) \quad | \cdot \frac{1}{XYZ}$$

$$\Rightarrow -k^2 = \frac{X''}{X(x)} + \frac{Y''}{Y(y)} + \frac{Z''}{Z(z)}$$

jeder Term muss const. sein!

also:

$$\begin{aligned}\frac{X''}{X} &= -k_x^2 \\ \frac{Y''}{Y} &= -k_y^2 \\ \frac{Z''}{Z} &= -k_z^2 \\ \Rightarrow k^2 &= \sum_{i=x,y,z} k_i^2\end{aligned}$$

Lösungen also:

$$\begin{aligned}\boxed{X(x) \sim e^{\pm i k_x \cdot x}} & \quad y, z \text{ analog} \\ \Rightarrow \varphi_E(\vec{r}) = C e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}} & \quad , \vec{k} = (k_x, k_y, k_z) \\ \Rightarrow \underbrace{E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}}_{E=\hbar\omega} & \quad , k = |\vec{k}| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}\end{aligned}$$

gilt für alle  $\vec{k} \in \mathbb{R}^3$

Zeitabhängige Lösung:

$$\boxed{\psi_E(\vec{r}, t) = C e^{i \vec{k} \cdot \vec{r} - i \frac{\hbar k^2}{2m} t}} \quad \omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

**Entartung:** alle  $\vec{n}$  mit  $|\vec{n}| = |\vec{k}|$  liefern gleiche Lösung, jede Linearkombination ebener Wellen mit  $|\vec{k}| = \text{const}$  ist Eigenfunktion von  $\hat{H}$  mit  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ .

- kartesische Koordinaten vorteilhaft, falls Randwertproblem mit entsprechender Symmetrie, z.B: Boxpotential:

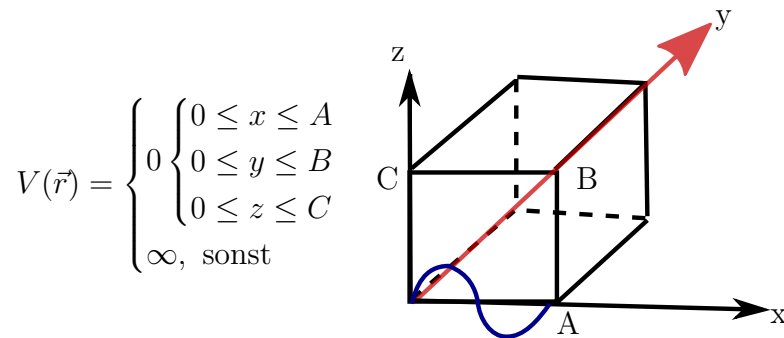


Abbildung 6.1: Beispiel Boxpotential

- unendliches Boxpotential:

$$\varphi_E = 0 \quad \text{für} \quad \begin{aligned} \vec{r} &= (0, y, z), \vec{r} = (A, y, z) \\ \vec{r} &= (x, 0, z), \vec{r} = (x, B, z) \\ \vec{r} &= (x, y, 0), \vec{r} = (x, y, C) \end{aligned}$$

übersetze Randbedingungen an Funktionen  $X(x)$  etc.:

$$X(0) = 0, X(A) = 0 \Rightarrow X(x) = \sin\left(\frac{2\pi}{A}nx\right) \quad n \in \mathbb{Z}$$

$$\text{analog:} \quad Y(y) = \sin\left(\frac{2\pi}{B}my\right) \quad m \in \mathbb{Z}$$

$$Z(z) = \sin\left(\frac{2\pi}{C}pz\right) \quad p \in \mathbb{Z}$$

$$\Rightarrow \quad \varphi_E(x, y, z) = \mathcal{N} \sin\left(\underbrace{\frac{\pi}{A}n x}_{k_x}\right) \sin\left(\frac{\pi}{B}my\right) \sin\left(\frac{\pi}{C}pz\right)$$

$$\Rightarrow \quad E_{n,m,p} = \frac{\hbar^2}{2m} \underbrace{\left[ \left(\frac{\pi}{A}\right)^2 n^2 + \left(\frac{\pi}{B}\right)^2 m^2 + \left(\frac{\pi}{C}\right)^2 p^2 \right]}_{K^2}$$

für  $n, m, p \neq 0 \rightarrow$  sonst nicht normierbar.

### 6.1.1 (B) Kugelkoordinaten:

- klass. Hamiltonfunktion:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} = \underbrace{\frac{p_r^2}{2m}}_{\text{Radial-impuls}} + \frac{L^2}{2mr^2}$$

- Für den Radialimpuls gilt:

$$m\dot{r} = \frac{\vec{r} \cdot \vec{p}}{|\vec{r}|} = p_r = \vec{n}_r \cdot \vec{p} \quad \text{als Projektion}$$

- und:

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

$$\vec{L}^2 = (\vec{r} \times \vec{p})(\vec{r} \times \vec{p}) = r^2 p^2 - (\vec{r} \cdot \vec{p})^2$$

$$\Leftrightarrow r^2 \cdot p^2 = L^2 + (\vec{r} \cdot \vec{p})^2$$

$$\Leftrightarrow p^2 = \frac{L^2}{r^2} + \frac{(\vec{r} \cdot \vec{p})^2}{r^2} \quad \text{erweitern mit } \frac{1}{2m} \text{ liefert:}$$

$$H = \frac{p^2}{2m} = \frac{(\vec{r} \cdot \vec{p})^2}{2m r^2} + \frac{L^2}{2mr^2} \checkmark$$

- Nun Quantenmechanik:

$$\hat{p}_r = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{r} \vec{r} \cdot \hat{\vec{p}} + \vec{p} \vec{r} \frac{1}{r} \right)$$

- Was ist mit  $\frac{L}{r^2}$  ?

- Ist  $[\hat{L}^2, f(\hat{r})] = 0$  ?

**Beweis (Ortsdarstellung)**

$$D_{\vec{n}}(\delta\varphi)f(r) = f(r)$$

$$\left(1 - \frac{i}{\hbar} \delta\varphi \vec{n} \cdot \vec{L}\right) f(r) \stackrel{!}{=} f(r)$$

$$\Rightarrow \vec{n} \cdot \vec{L} f(r) = 0 \text{ und}$$

$$\left[\hat{L}^2, f(r)\right] \psi(r) = \hat{L}^2(f(r) \psi(r)) - f(r) \hat{L}^2 \psi(r) = 0$$

$$\text{Also: } \boxed{\hat{H} = \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2}}$$

$$\text{Ortsdarstellung: } \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right] - \frac{\hat{L}^2}{2mr^2}$$

$$\begin{aligned} \text{Radialimpuls: } \frac{1}{r} \cdot \vec{r} \cdot \hat{\vec{p}} &= \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \vec{r} \cdot \nabla = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r} \\ \hat{\vec{p}} \cdot \vec{r} \frac{1}{r} &= -i\hbar \nabla \cdot \vec{e}_r \end{aligned}$$

$\vec{\nabla}$  wirkt auf Wellenfunktion und auf  $\hat{e}_r$

$$\begin{aligned} \hat{p}_r \psi(r) &= -\frac{i\hbar}{2} \left( \frac{\partial}{\partial r} + \nabla \cdot \vec{e}_r \right) \psi(\vec{r}) \\ &= -\frac{i\hbar}{2} \left( \frac{\partial \psi}{\partial r} + \underbrace{\vec{e}_r \cdot \nabla \psi}_{\frac{\partial}{\partial r} \psi} + \underbrace{\psi (\nabla \cdot \vec{e}_r)}_{\frac{2}{r}} \right) \\ &= -i\hbar \left( \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\psi}{r} \right) = -i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \psi(\vec{r}) = P_r \cdot \psi(\vec{r}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{P}_r^2 &= \left[ -i\hbar \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \right) \right]^2 = -\hbar^2 \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \right) \right) \\ &= -\hbar^2 \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r = -\hbar^2 \left[ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right] \\ &= -\hbar^2 \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} \end{aligned}$$

**Übungsaufgabe:**

$$[\hat{p}, \hat{L}^2] = 0$$

$$[r, \hat{p}_r] = i\hbar$$

mit  $r$  in Ortsdarstellung

**6.1.2 Eigenfunktionen von  $\hat{H}$  in Kugelkoordinaten:**

$$\left( \frac{1}{2m} \hat{p}_r^2 + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} \right) \varphi_E(\vec{r}) = E \varphi_E(\vec{r})$$

Es gilt wohl:  $\varphi_E(\vec{r}) = R_{KL}(\vec{r}) y_l^m(\vartheta, \varphi)$

$$\Rightarrow \left[ -\frac{1}{r} \frac{d}{dr^2} r + \frac{L(L+1)}{r^2} \right] R_{KL}(r) = K^2 R_{KL}(r)$$

Def:  $x = kr$

**sphärische Bessel-DGL:**

$$\frac{d}{dx^2} R_{KL}(x) + \frac{2}{x} \frac{d}{dx} R_{KL}(x) + \left[ 1 - \frac{l(l+1)}{x^2} \right] R_{KL}(x) = 0$$

**15. Vorlesung Wiederholung**

$$[\hat{L}_j, f(r)] = 0 \quad (11)$$

Wir sahen, dass das Quadrat des Drehimpulses mit jeder Funktion kommutiert, die nur vom Abstand und nicht von den Winkeln abhängig ist  
freies Teichen

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} = \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} \\ \hat{p}_r &= \frac{1}{2} \left( \frac{1}{r} \hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{r}} \frac{1}{r} \right) \\ &= -i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \end{aligned}$$

$$[\hat{p}, \hat{L}^2] = 0 \quad [\hat{r}, \hat{p}_r] = i\hbar \quad (\text{in Ortsdarstellung})$$

(siehe Aufgabe 26)

$$\hat{L}_z Y_l^m(\vartheta, \varphi) = \hbar m Y_l^m(\vartheta, \varphi) \quad (12)$$

### Eigenfunktionen auf freie Teilchen in Polarkoordinaten

$$\frac{1}{2m} \left( \hat{p}_r^2 + \frac{\hat{L}^2}{r^2} \right) \varphi_E(\vec{r}) = E \varphi_E(\vec{r}) \quad (13)$$

Ansatz:

$$\phi_E(\vec{r}) = R(r) Y_l^m(\vartheta, \varphi) \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (14)$$

$$\left[ -\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_{kl}(r) = k^2 R_{kl}(r) \quad (15)$$

nach einer Koordinatentransformation  $x = kr$  erhält man die **sphärische Bessel Differentialgleichung**

$$\boxed{\frac{d}{dx^2} R_{kl}(x) + \frac{2}{x} \frac{d}{dx} R_{kl}(x) + \left[ 1 - \frac{l(l+1)}{x^2} \right] R_{kl}(x) = 0}$$

### Ende Wiederholung

Die Lösung lässt sich als superposition von den **sphärische Besselfunktionen** und den **sphärische Neumannfunktionen** schreiben wobei wir sehen werden, dass die sphärischen Neumannfunktionen nicht normierbar sind und somit nur die sphärischen Besselfunktionen in Frage kommen.

---

#### sphärische Besselfunktionen

#### sphärische Neumannfunktion

---

$$j_0(x) = \frac{\sin(x)}{x}$$

$$n_0(x) = -\frac{\cos(x)}{x}$$

$$j_1(x) = \frac{\sin(x)}{x^2} - \frac{\cos(x)}{x}$$

$$n_1(x) = -\frac{\cos(x)}{x^2} - \frac{\sin(x)}{x}$$

$$j_2(x) = \left( \frac{3}{x^2} - \frac{1}{x} \right) \sin(x) - \frac{3}{x^2} \cos(x)$$

$$n_2(x) = -\left( \frac{3}{x^2} - \frac{1}{x} \right) \cos(x) - \frac{3}{x^2} \sin(x)$$


---

$$\varphi_{klm}(r, \vartheta, \varphi) = j_l(k, r) Y_l^m(\vartheta, \varphi)$$

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \neq E(l, m)$$

Wir sehen, dass die Energien hochgradig entartet ist, da E weder von l noch von m abhängt

**Spezialfall Kugelwellen:**

$$l = m = 0$$

$$\varphi_{k,0,0}(r) = j_0(kr) = \frac{\sin(kr)}{kr} = \left( \frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{-ikr}}{r} \right) \frac{1}{2ik} \quad (16)$$

**unendliches Kugelpotential:**

$$V(x) = \begin{cases} 0 & |\vec{r}| \leq r_0 \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$

Siehe Aufgabe auf Übungsblatt. Die Lösungsfunktion müssen auf der Oberfläche des Potentials verschwinden, wir erwarten ein diskretes Spektrum von Eigenfunktionen. Weiterhin ist das Potential kugelsymmetrisch, Lösungen werden also Kugelflächenfunktionen sein, durch die mindesten zwei Quantenzahlen enthalten sind

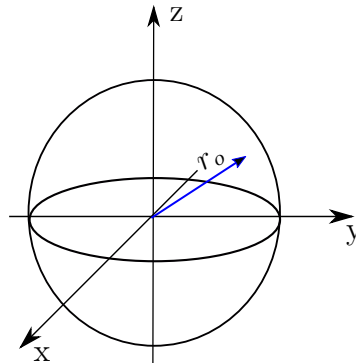


Abbildung 6.2: unendliches Kugelpotential

## 6.2 Gebundene Zustände in einem Zentralpotential

$$V(|\vec{r}|) = V(|\vec{r}| = r) \quad (17)$$



Wir wechseln zu sphärischen Polarkoordinaten, da wir wissen dass die Bewegung in Zentralpotentialen in einer Ebene verläuft.

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + V(r) \quad (18)$$

da  $[V(r), L_j] = 0$  existiert ein gemeinsames System von Eigenzuständen  $\hat{L}_z, \hat{L}^2$  und  $\hat{H}$

**Ansatz:**

$$\varphi_E(\vec{r}) = \frac{u(r)}{r} Y_l^m(\vartheta, \varphi)$$

Diesen Ansatz setzen wir in die Eigenwertgleichung (Schrödingergleichung) ein

$$\hat{H}\varphi_E(\vec{r}) = E\varphi_E(\vec{r}) \quad (19)$$

Durch einsetzen des Hamiltonoperators (18) folgt

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) \right] u(r) = Eu(r) \quad (20)$$

Dies ist ein Eindimensionales Problem im  $L^2([0, \infty))$  also auf einem Hilbertraum von null bis unendlich

Wir erhalten ein effektives Potential, was wir als Zentrifugalpotential aus der klassischen Mechanik identifizieren:

$$V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2}}_{\text{Zentrifugalpotential}}$$

- Sätze aus dem 1 dimensionalen Fall gelten
  - Knotensatz
  - $U(r)$  (Radialfunktion) können reell gewählt werden

Wir sehen, dass  $V_{\text{eff}}$  von  $l$  abhängig ist. Daher wird auch die Energie von  $l$  abhängig sein:  $E = E(l)$ . Wichtig ist jedoch, dass  $V_{\text{eff}}$  nicht von  $m$  abhängt, wie sehen also die sogenannte "natürliche Entartung" von  $(2l+1)$ .

$$\Rightarrow \quad E = E_l \quad (21)$$

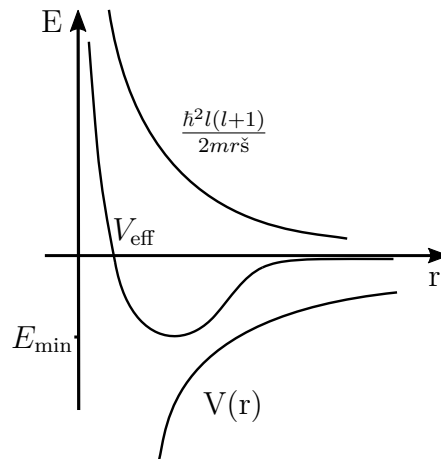


Abbildung 6.3: effektives Potential

Beispiele für Zentralpotentiale

- (i)  $V(r) = -\frac{a}{r}$       Coulombpotential
- (ii)  $V(r) = -\frac{a}{r} e^{-\mu r}$       Yukawa Potential
- (iii)  $V(r) = \alpha e^{-\mu r}$       Exponentialpotential
- (iv)  $V(r) = ar^2$       isotroper harmonischer Oszillator

### Anzahl der gebundenen Zustände:

Es gibt nicht in jedem Potential gebundene Zustände, und nicht immer unendlich viele. Die **Bargmannsche Schranke** liefert für  $\boxed{V(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0}$  eine Abschätzung für die Anzahl der gebundenen Zustände:

$$\boxed{n_l \leq \frac{1}{2l+1} \frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty dr \, r |V(r)| \theta(-V)}$$

Hier ist  $\theta(-V)$  die Heaviside-Funktion sie beschränkt das Integral auf Bereiche mit  $V \leq 0$

- falls das Integral endlich ist, dann existiert ein  $l_{\max}$

Für das Coulombpotential ist das Integral nicht endlich ( wie man leicht verifizieren kann), das Yukawa-Potential sowie das Exponentialpotential hingegen besitzen maximale l.

- Es existieren keine gebundenen Zustände falls  $\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty dr \ r |V(r)| \theta(-V) < 1$

## 6.3 Coulombpotential

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \quad Z \in \mathbb{N} \quad (22)$$

Dabei setzen wir in den Hamiltonoperator  $H = \frac{p^2}{2m} + V(r)$  das effektive Potential:

$$V_{\text{eff}}(r) = \underbrace{\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}}_{\text{Zentrifugalpotential}} - \underbrace{\frac{Ze^2}{r}}_{V_{\text{Coulomb}}} \quad (23)$$

(A) gebundene Zustände und Spektrum:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{r} \right] u(r) = Eu(r) \quad (24)$$

gebundene Zustände sind nur für  $E = -|E| \leq 0$  möglich

Zur Vereinfachung der Differentialgleichung führen wir **skalierte Größen** ein:

$$|E| = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \rho = 2kr \quad (25)$$

$$\left[ \frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2Z}{\rho\rho_0} \right] u(\rho) = \frac{1}{4} u(\rho) \quad (26)$$

$$\rho_0 = 2ka_0 \quad (27)$$

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{e^2 m}$$

Bohrscher Radius

Zur Lösung der Differentialgleichung betrachten wir verschiedene Grenzfälle, um dann einen gezielten Ansatz für die Lösungsfunktion aufstellen zu können

$\rho \rightarrow \infty$  :

$$\frac{d^2}{d\rho^2} u(\rho) = \frac{1}{4} u(\rho) \quad (28)$$

$$\Rightarrow u(\rho) = Ae^{-\frac{\rho}{2}} + Be^{\frac{\rho}{2}} \xrightarrow{\text{nicht normierbar}} \quad (29)$$

$\rho \rightarrow 0$  :

$$\frac{d^2}{d\rho^2} u(\rho) = \frac{l(l+1)}{\rho^2} u(\rho) \quad (30)$$

$$\rightarrow u(\rho) = C\rho^{l+1} + D\rho^{-l} \quad \text{nicht normierbar} \quad (31)$$

Der zielführende Ansatz ist also:

$$u(\rho) = F(\rho)\rho^{l+1}e^{-\frac{\rho}{\rho_0}} \quad (32)$$

Durch einsetzen dieses Ansatzes in 24 erhält man eine neue Differentialgleichung, dieses Mal für die bisher unbekannte Funktion  $F(\rho)$ . Diese Gleichung trägt den Namen **konfluente hypergeometrische Differentialgleichung**

$$\rho \frac{d^2 F}{d\rho^2} + (2l+2-\rho) \frac{dF}{d\rho} - \left( l+1 - \frac{2Z}{\rho_0} \right) F = 0$$

Aus der Grenzwertbetrachtung für  $\rho$  sehen wir, dass die Funktion  $F$  maximal ein Polynom sein darf, da  $F$  nicht schneller wachsen darf als eine Exponentialfunktion. Wir machen also den Ansatz einer Polynomfunktion nach der Sommerfeldschen Polynommethode und gehen danach wie folgt vor:

$$F(\rho) = \sum_{j=0}^{\infty} C_j \rho^j \quad \text{Sommerfeldsche Polynommethode} \quad (33)$$

- Einsetzen
- sortieren nach Potenzen von  $\rho$
- Koeffizientenvergleich

Dies ergibt eine Rekursionsvorschrift

$$\Rightarrow C_{j+1} = \frac{(j+l+1) - \frac{2Z}{\rho_0}}{(j+1)(j+2l+2)} C_j \quad (34)$$

Die Polynomfunktion muss einen maximalen Grad besitzen, da sie als unendliche Potenzreihe einer Exponentialfunktion gleich ziehen können und damit die geforderte Normierbarkeit gefährdet.

Abbruch der Rekursion bei  $j = j_{\max}$

$$j_{\max} + l + 1 = \frac{2Z}{\rho_0} = \frac{Z}{ka_0} \equiv n \quad n \in \mathbb{N}_{>0} \quad (35)$$

mit  $n := \text{Hauptquantenzahl}$

Sodass  $j_{\max+1} = 0$

Wir erhalten eine **Quantisierung der Energie**:

$$E_n = -|E_n| = -\frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{Z^2}{a_0^2 n^2} = -\frac{Z^2}{n^2} R_y^*$$

Hierbei ist  $R_y^*$  die **Rydbergkonstante**:

$$R_y^* = \frac{\hbar^2}{2ma_0^2}$$

Die Rydbergkonstante ist die charakteristische Energieskala des Coulomb-Problems, die Dynamik wir sich also in der Größenordnung der Rydbergkonstante abspielen

Aus Gleichung 35 folgt:

$$l \leq n - 1$$

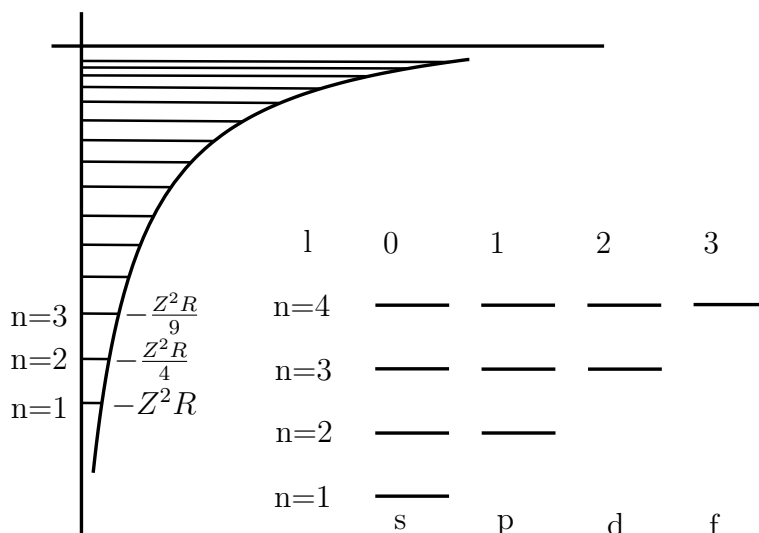


Abbildung 6.4: quantisierte Energie

Man beachte hierbei die Abhängigkeit von  $n^2$  in der Position der Energieniveaus. Als Entartungsgrad hatten wir die natürliche Entartung von  $(2l+1)$  erwartet, stattdessen sehen wir, dass die Entartung mit 36 sehr viel höher ist. Wir werden sehen, dass diese zusätzliche Entartung aufgrund der zusätzlichen Symmetrie des Coulombproblems entsteht (der Ruge-Lenz-Vektor).

Entartungsgrad:

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2 \quad (36)$$

Als Lösung für die Funktionen von  $F(\rho)$  erhalten wir schlussendlich die **Laguerre Polynome**:

$$L_m(x) = \frac{e^x}{m!} \frac{d^m}{dx^m} (x^m e^{-x})$$

sowie daraus die

**assoziierte Laguerre Polynome**:

$$L_m^q(x) = (-1)^q \frac{d^q}{dx^q} L_m(x)$$

Als Beispiel seien hier die ersten Laguerre-Polynome angegeben:

$$L_0(x) = 1 \quad (37)$$

$$L_1(x) = 1 - x \quad (38)$$

$$L_2(x) = \left(1 - 2x + \frac{x^2}{2}\right) \quad (39)$$

## 16. Vorlesung Wiederholung

**Das Coulomb Potential:**

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] u_l(r) = E u_l(r)$$

$$\varphi_E(r, \vartheta, \varphi) = \frac{u_l(r)}{r} \cdot Y_l^m(\vartheta, \varphi)$$

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$$

$$r_0 = \frac{\hbar^2}{l^2 m}$$

Bohr'scher Radius

$$u_l(\rho) = \rho^{l+1} \cdot e^{-\frac{\rho}{2}} \cdot F(\rho)$$

$$F(\rho) = \sum_{j=0}^{\infty} C_j \rho^j$$

$$\Rightarrow C_{j+1} = \frac{(j+l+1) - \frac{2Z}{\rho_0}}{(j+1)(j+2l+1)} C_j$$

$$C_j = 0 \quad j > j_0$$

$$n = j_{\max} + l + 1 = \frac{2Z}{\rho_0} = \frac{Z}{ka_0}$$

$$\boxed{l \leq n - 1}$$

Die Reihe muss abbrechen!

$$\boxed{E_n = -\frac{\hbar^2 Z^2}{2ma_0^2 n^2}}$$

Die Eigenfunktionen ( $F(\rho)$ ) sind die **Laguerrepolynome** und die **assoziierte Laguerrepolynome**

### Ende Wiederholung

Wir fragen uns also, welche nun die Eigenfunktionen des Coulombpotentials insgesamt sind:

$$\boxed{u_{nl}(\rho) \sim e^{-\frac{\rho}{2}} \cdot \rho^{l+1} \cdot L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)}$$

$$\rho = 2kr = \frac{wZ}{na_0} r$$

Spezialfall  $Z = 0$  Wasserstoffatom

**Eigenfunktionen des Wasserstoffatoms:**

$$\begin{aligned}
 \psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) &= \underbrace{\mathcal{N}_{nl}}_{\text{Normierung}} \cdot \underbrace{e^{-\frac{r}{na_0}}}_{\text{exponentieller Abfall}} \cdot \underbrace{r^l L_{n-l+m}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right)}_{\text{polynominaler Term}} \cdot \underbrace{Y_l^m(\vartheta, \varphi)}_{\text{Winkelanteil durch } L^2} \\
 \psi_{100}(r, \vartheta, \varphi) &= \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}} \\
 \psi_{200}(r, \vartheta, \varphi) &= \frac{1}{4\sqrt{2\pi a_0^3}} \left[2 - \frac{r}{a_0}\right] e^{-\frac{r}{2a_0}}
 \end{aligned}$$

Wir beobachten folgende Eigenschaft der Lösungsfunktion: Der exponentielle Abfall, benötigt für die Normierbarkeit, geschieht in Einheiten des Bohrschen Radius', welche die natürliche Energieskala des Wasserstoffproblems darstellt. Weiterhin können wir erkennen, dass, wenn die Quantenzahl  $n$  in diesem Exponenten groß wird ( $n=50;60,\dots$ ), wir noch von Null stark verschiedene Aufenthaltswahrscheinlichkeiten des Elektrons weit vom Kern erhalten, das Atom also an Größe stark zunimmt. Dies ist die grundlegende Eigenschaft sogenannter Rydbergatome, auf die wir hier nicht näher eingehen.

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = 0$$

$$\sum_{l=0}^{n-1} n - 1(2l+1) = n^2 \gg 2l+1 \quad E_1 = -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2} \quad \text{Grundzustand}$$

Wie sehr häufig ist der Grundzustand nicht entartet

**Eigenschaften der Laguerpolynome:****i) Orthogonalität:**

Woher kann der geneigte Leser bereits wissen, dass eine Orthogonalitätsrelation existieren wird? (Hinweis: Eigenfunktionen hermitescher Operatoren)

$$\begin{aligned}
 \int_0^\infty dx \quad L_n(x) L_m(x) e^{-x} &= \delta_{nm} \\
 \int_0^\infty dx \quad L_n^q(x) L_m^q(x) e^{-x} x^q &= n! [(n+q)!]^3 \delta_{nm}
 \end{aligned}$$



**ii) expizite Darstellung:**

$$L_n(x) = \sum_{j=0}^n (-1)^j \frac{n!}{(j!)^2 (n-j)!} x^j$$

**iii) erzeugende Funktion:**

$$(1-t)^{-1} e^{-\frac{xt}{1-t}} = \sum_{n=0}^{\infty} L_n(x) t^n$$

**(B\*) dynamische Symmetrie des Coulomb-Problem:**

klassische Mechanik  $V(r) = -\frac{\alpha}{r}$

**Runge-Lenz Vektor:**

$$\vec{F} = \frac{1}{m}(\vec{p} \times \vec{L}) - \frac{\alpha \vec{r}}{r} \vec{L} \cdot \vec{F} = 0$$

Quantenmechanisch

$$\vec{F} = \frac{1}{2m}(\vec{p} \times \vec{L} - \vec{L} \times \vec{p}) - \frac{\alpha \vec{r}}{r}$$

In Einer Übungsaufgabe wird gezeigt, dass  $[\hat{\vec{F}}, \hat{H}] = 0$  gilt

Wir sehen, dass der Runge-Lenz Vektor eine Drehimpuls ähnliche Algebra aufweist. Daher definieren wir zwei Operatoren  $J_1$  und  $J_2$ :

Unterraum konstanter Energie E

$$[L_i, F_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{L}_k \cdot [\hat{L}_i, \hat{F}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{F}_k$$

$$[F_i, F_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \left(-\frac{2E}{m}\right) \hat{L}_k$$

$$\hat{\vec{J}}_1 \equiv \frac{1}{2} \left( \hat{L} + \left( \frac{m}{-2E} \right)^{\frac{1}{2}} \hat{\vec{F}} \right)$$

$$\hat{\vec{J}}_2 \equiv \frac{1}{2} \left( \hat{L} - \left( \frac{m}{-2E} \right)^{\frac{1}{2}} \hat{\vec{F}} \right)$$

$$[J_{1i}, J_{1j}] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{J}_{1k}$$

$$[\hat{J}_{1j}, \hat{J}_{2k}] = 0$$

$$[\hat{J}_{2i}, \hat{J}_{2j}] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{J}_{2k}$$

algebraische bestimmung von  $E_n$

In der Tat stellt sich heraus, dass diese Operatoren Drehimpulse sind. Mit ihnen wird die algebraische Bestimmung von  $E_n$  möglich sein

## 6.4 Das Wasserstoffatom -Teil 1

2 Teilchenproblem:

<b>Proton:</b>	$\vec{r}_p, \vec{p}_p$	$q_p = e$	Masse: $m_p$
<b>Elektron:</b>	$\vec{r}_e, \vec{p}_e$	$q_e = -e$	Masse: $m_e$

Was ist  $\psi(\vec{r}_p, \vec{r}_e)$  ?

$$V(\vec{r}_e, \vec{r}_p) = -\frac{e^2}{|\vec{r}_e - \vec{r}_p|}$$

$$[\hat{\vec{r}}_p, \hat{\vec{r}}_e] = [\hat{\vec{p}}_p, \hat{\vec{p}}_e] = 0$$

$$[\hat{\vec{r}}_p, \hat{\vec{p}}_e] = [\hat{\vec{r}}_e, \hat{\vec{p}}_p] = 0$$

Aufgrund dieser Relation können also Protonen und Elektronen getrennt voneinander behandelt werden.

**Relativkoordinaten:**

Wie auch in der klassischen Mechanik gehen wir in Relativ- und Schwerpunktskoordinaten über, um dieses Zweikörperproblem zu lösen.

$$\vec{r} \equiv \vec{r}_e - \vec{r}_p$$

**Schwerpunktskoordinate:**

$$\vec{R} = \frac{m_e \vec{r}_e + m_p \vec{r}_p}{m_e + m_p}$$

**klassische Hamiltonfunktion:**

$$H = \frac{M}{2} \dot{\vec{R}}^2 + \frac{\mu}{2} \dot{\vec{r}}^2 + V(\vec{r})$$

Mit

$$M = m_e + m_p \qquad \mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \approx m_e$$

Der Schwerpunktsimpuls ist eine Erhaltungsgröße und kommutiert somit mit dem Hamiltonoperator

$$\frac{d}{dt} (M \dot{\vec{R}}) = 0 = \frac{\partial \hat{H}}{\partial \vec{R}} = 0 \quad \left[ \hat{\vec{R}}, \hat{H} \right] = 0$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\vec{R}} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\vec{r}} + V(\vec{r})$$

Hierbei ist der erste Summand die kinetische Energie des Schwerpunkts und der zweite Summand die kinetische Energie der Relativbewegung

$$[\hat{H}, \hat{P}_{sp}] = 0$$

$$\psi(\vec{R}, \vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{R}} \phi_E(\vec{r}) = \epsilon \phi_E(\vec{r})$$

Für die Schwerpunktsbewegung ohne äußere Einflüsse können wir also das Modell des freien Teilchens anwenden.

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\vec{r}} + V(r) \right) \cdot \phi_E(r) = \epsilon \cdot \phi_E(\vec{r})$$

$$E = \epsilon + \underbrace{\frac{\hbar^2 k^2}{2M}}_{\text{Schwerpunktsenergie}}$$

# 7 Geladene Teilchen im elektrischen-Feld

## 7.1 Minimale Kopplung und Eichtransformation

Hier wird im Gaußschen CGS-System gerechnet das bedeutet:

$$\underbrace{F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q_1 Q_2}{r^2}}_{\text{SI Einheiten}} \quad \rightarrow \quad \underbrace{F = \frac{Q_1 Q_2}{r^2}}_{\text{CGS-system}}$$

$$\dot{\vec{p}} = \vec{F} = q \cdot \left( \vec{E} + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B} \right)$$

Maxwellgleichungen im Vakuum

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \vec{E} &= 4\pi\rho & \nabla \cdot \vec{B} &= 0 \\ \nabla \times \vec{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{B} &= 0 & \nabla \times \vec{B} - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{E} &= \frac{4\pi}{c} \vec{j} \end{aligned}$$

**Lösung durch Potentiale**

da  $\nabla \cdot \vec{B} = 0$  gilt lässt sich  $\vec{B}$  folgendermaßen schreiben

$$\boxed{\vec{B} = \nabla \times \vec{A}}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \quad \nabla \times \left[ \vec{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{A} \right] &= 0 \\ \vec{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{A} &= -\nabla\phi \end{aligned}$$

Damit lässt sich  $\vec{E}$  darstellen

$$\vec{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{A}$$

### Eichtransformation

$$\begin{aligned}\vec{A} &\rightarrow \vec{A}' = \vec{A} + \nabla\Lambda(\vec{r}) \\ \phi &\rightarrow \phi' = \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \Lambda(\vec{r})\end{aligned}$$

$$\vec{E} = \vec{E}' \qquad \vec{B} = \vec{B}'$$

klassische Hamiltonfunktion

$$H = \frac{1}{2m} \left( \vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A}(\vec{r}) \right)^2 + q\phi(\vec{r}) + V(\vec{r})$$

Quantenmechanisch (hier kommutieren A und r im Allgemeinen nicht, also symmetrisieren wir)

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \hat{\vec{p}} - \frac{q}{c} \hat{\vec{A}}(\hat{\vec{r}}) \right) \left( \hat{\vec{p}} - \frac{q}{c} \hat{\vec{A}}(\hat{\vec{r}}) \right) + q\phi(\hat{\vec{r}}) + V(\hat{\vec{r}})$$

Um diesen Missstand zu beheben, nutzen wir die Wahlfreiheit des komplexen Vorfaktors vom Betrag eins einer jeden Wellenfunktion. Dabei ergänzen wir die Eichtransformation durch eine Transformation dieses Vorfaktors und gelangen zu Eichphasentransformationen:

$\hat{H}$  ist hier **nicht** invariant unter Eichtransformation

$$\begin{aligned}\vec{A} &\rightarrow \vec{A}' = \vec{A} + \nabla\Lambda(\vec{r}, t) \\ \phi &\rightarrow \phi' = \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \Lambda(\vec{r}, t) \\ \psi &\rightarrow \psi'(\vec{r}, t) = \exp \left\{ \frac{iq}{\hbar c} \Lambda(\vec{r}, t) \right\} \psi(\vec{r}, t)\end{aligned}$$

Die Schrödingergleichung ist invariant unter Eich-Phasentransformation

**17. Vorlesung Wiederholung**

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \hat{\vec{P}} - \frac{q}{c} \vec{A}(\hat{\vec{r}}) \right) \left( \hat{\vec{P}} - \frac{q}{c} \vec{A}(\hat{\vec{r}}) \right) + q \cdot \Phi + V$$

**7.1.1 Vektorpotential in neues Potential:**

$$\begin{aligned} \vec{A} \longrightarrow \vec{A}' = \vec{A} + \nabla \Lambda(\vec{r}, t) \\ \Phi \longrightarrow \Phi' = \Phi - \frac{1}{c} \cdot \frac{\partial}{\partial t} \Lambda(\vec{r}, t) \end{aligned} \left\{ \begin{aligned} \vec{B}(\vec{r}, t) &= \nabla \times \vec{A}(\vec{r}, t) \\ \vec{E}(\vec{r}, t) &= -\frac{1}{c} \cdot \frac{\partial A}{\partial t} - \nabla \Phi \end{aligned} \right.$$

$$\psi(\vec{r}, t) \longrightarrow \psi'(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}, t) \exp \left\{ \frac{iq}{\hbar c} \Lambda(\vec{r}, t) \right\} \quad \text{Eichphasenverschiebung}$$

können spezielle Eichung nehmen:

**Ende Wiederholung**

**7.1.2 Coulomb-Eichung:**

$$\nabla \cdot \vec{A}(\vec{r}, t) = 0 \quad \text{dann gilt:} \quad [\hat{\vec{P}}, \vec{A}(\vec{r}, t)] = 0$$

$$\text{da:} \quad \left[ -\frac{\hbar}{i} \nabla, \vec{A}(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = -\frac{\hbar}{i} \nabla \cdot (\vec{A}(\vec{r}) \psi(\vec{r})) + \frac{\hbar}{i} \vec{A}(\vec{r}) \nabla \psi(\vec{r})$$

mit:

$$\left[ -\frac{\hbar}{i} \nabla, \vec{A}(\vec{r}) \right] = \hat{\vec{P}} \vec{A} - \vec{A} \hat{\vec{P}}$$

ergibt sich:

$$\begin{aligned} \hat{\vec{P}} \vec{A} - \vec{A} \hat{\vec{P}} \psi(\vec{r}) &= -\frac{\hbar}{i} \nabla \cdot (\vec{A}(\vec{r}) \psi(\vec{r})) + \frac{\hbar}{i} \vec{A}(\vec{r}) \nabla \psi(\vec{r}) \\ &= -\frac{\hbar}{i} \underbrace{(\nabla \cdot \vec{A})}_{=0} \psi(\vec{r}) = 0 \end{aligned}$$

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \hat{\vec{P}} - \frac{q}{c} \vec{A}(\hat{\vec{r}}) \right)^2 + q \cdot \Phi + V$$

mit  $\hat{\vec{P}}$  : kanonischer Impuls und  $m\hat{\vec{v}} = \hat{\vec{P}} - \frac{q}{c} \vec{A}(\hat{\vec{r}}) = \hat{\vec{\pi}}$  : kinetischer Impuls

- kanonischer Impuls ist keine Observable, da die Eichphasentransformation  $\hat{U}$  :

$$\hat{U} \hat{\vec{P}} \hat{U}^{-1} = \hat{\vec{P}} - \frac{q}{c} \nabla \Lambda(\vec{r}, t) \neq \hat{\vec{P}}$$

$$\text{mit } \hat{U} = \exp \left\{ \frac{iq}{\hbar c} \Lambda(\vec{r}, t) \right\}$$

diesen nicht invariant lässt. Damit ist der kanonische Impuls keine gute Observable.

aber:

$$\begin{aligned} \hat{U} \left( \hat{\vec{P}} - \frac{q}{c} \right) \hat{U}^{-1} &= \hat{\vec{P}} - \frac{q}{c} \nabla \Lambda(\vec{r}) - \frac{q}{c} \vec{A} \\ &= \vec{P} - \frac{q}{c} \vec{A}' \end{aligned}$$

Es gilt:

$$[\hat{x}_j, \hat{\pi}_k] = i\hbar \delta_{jk}$$

$$[\hat{\pi}_j, \pi_k] = i\hbar \frac{q}{c} \epsilon_{jkl} B_l$$

mit  $\hat{x}_j$  : Ort und  $\hat{\pi}_k$  : Impuls

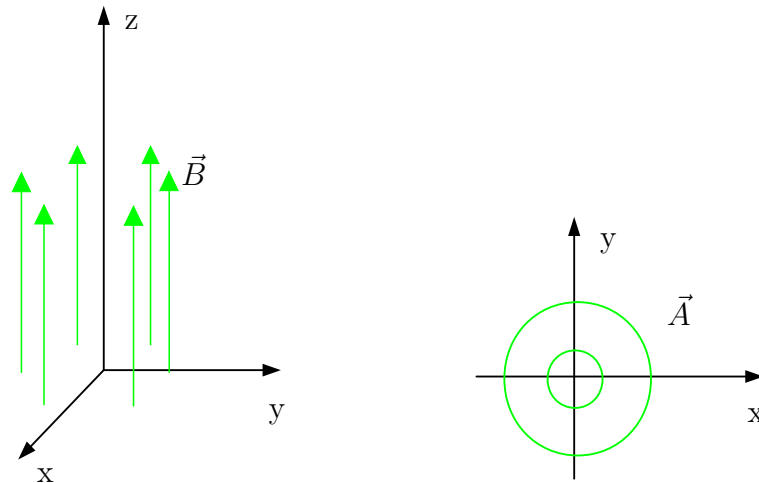
## 7.2 geladenes Teilchen im homogenen Magnetfeld

$$\vec{B}(\vec{r}, t) = \hat{B}(\vec{r}) = \text{const}_{\vec{r}, t}$$

Wir setzen:

$$\Phi(\vec{r}) = 0 \qquad \vec{B} = \nabla \times \vec{A} \qquad \vec{F}_L = \frac{q}{c} \cdot (\vec{v} \times \vec{B})$$

außerdem soll:  $\nabla \cdot \vec{A} = 0$



$$\vec{A} = -\frac{1}{2} (\vec{r} \times \vec{B})$$

### 7.2.1 Hamiltonoperator in Ortsdarstellung

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) + \frac{q\hbar}{2mc} \frac{1}{i} \cdot (\vec{r} \times \vec{B}) \nabla + \frac{q^2}{8mc^2} (\vec{r} \times \vec{B})^2$$

$$\frac{\hbar}{i} (\vec{r} \times \vec{B}) \cdot \nabla = -\frac{\hbar}{i} \vec{B} \cdot (\vec{r} \times \nabla) = -\vec{B} \cdot \hat{\vec{L}}$$

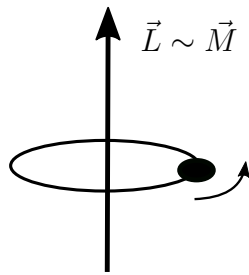
$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) + \frac{q^2}{8mc^2} (\vec{r} \times \vec{B})^2 - \text{sgn}(q) \frac{\mu \cdot \vec{B} \cdot \hat{\vec{L}}}{\hbar} \quad (40)$$

Der Letzte Term von  $\hat{H}$  stellt dabei die Kopplung von  $\vec{L}$  und  $\vec{B}$  dar, also die Kopplung des durch die Bahnbewegung erzeugten magnetischen Moments an das äußere Magnetfeld.

$$\mu = \frac{|q| \cdot \hbar}{2m_e} \text{ beschreibt dabei das Bohr'sche Magneton}$$

$$\mu_{\text{Bahn}} = \text{sgn}(q) \cdot \frac{\mu}{\hbar} \hat{\vec{L}} \text{ Das Moment des Elektrons (Ladung)}$$





### 7.2.2 Landau Niveaus:

Sei:

$$\vec{B} = (0, 0, B) = B\vec{e}_z \quad \underbrace{V + \frac{q^2}{8mc^2}(r \times B)^2 = 0}_{V=0}$$

$$\text{wählen } \vec{A} = (-yB, 0, 0) \quad \Phi = 0$$

(Landaueichung)

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left[ \left( \hat{p}_x + \frac{q\hat{y}B}{c} \right)^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 \right]$$

**Lösungen der stationären Schrödingergleichung?**  $\hat{H}\phi_E = E\phi_E$ :

Welche Größen kommutieren mit dem Hamiltonoperator?

$$p_x \quad \text{und} \quad p_z$$

$$[\hat{p}_z, \hat{H}] = 0 = [p_x, H] \quad \hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \hat{\vec{p}} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2 + q\Phi + V$$

Eigenzustände:  $e^{iK_x x + i k_z z} f_E(y)$

$$\left[ \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{m}{2} \Omega^2 (y - y_0)^2 \right] f_E(y) = \left( E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \right) f_E(y)$$

$$y_0 = -\frac{c\hbar k_x}{qB} := \text{1D Schrödingergleichung}$$

$$\Omega = \frac{|q|B}{mc} := \text{Zyklotronfrequenz}$$

$\hat{=}$  harmonischer Oszillator mit Frequenz  $\Omega$

$$E_n = \hbar\Omega \left( n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \quad \text{Landau Niveaus}$$

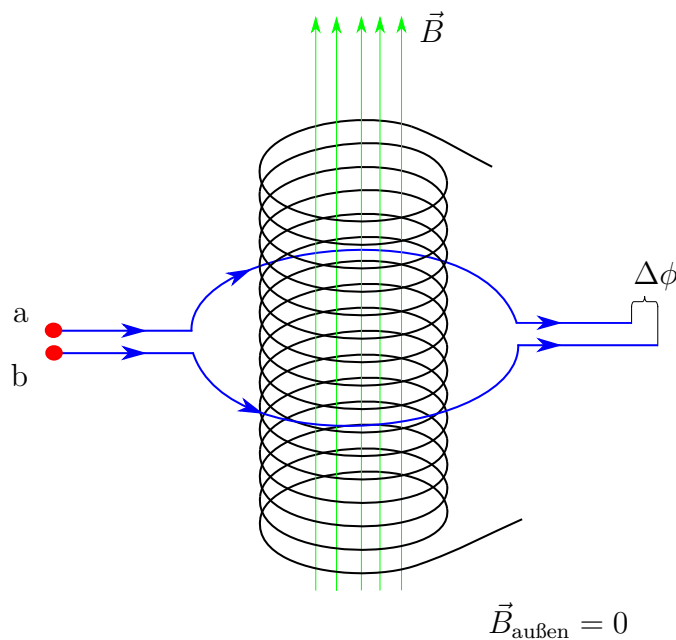
$\Omega :=$  harmonischer Oszillator in  $x, y$ -Ebene

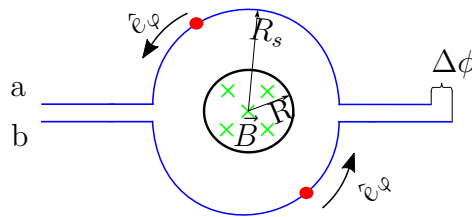
$\frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} :=$  Kontinuum freie Bewegung in  $z$ -Richtung

### 7.2.3 Grundzustand des Harmonischen Oszillators

$$l_m = \sqrt{\frac{\hbar}{m\Omega}} = \sqrt{\frac{\hbar c}{|e|B}} \quad \text{magnetische Länge}$$

## 7.3 Der Aharonov-Bohm-Effekt





$\vec{B} = 0$  außen, aber:

$$\vec{A} = \frac{BR_s^2}{2R} \vec{e}_\varphi = \frac{\Phi_{\text{mag}}}{2\pi R} \cdot \vec{e}_\varphi \neq 0$$

### 7.3.1 Hamiltonoperator für Elektronen

Hamiltonoperator für Elektronen  $q = -e$  auf Kreisbahnen (a), (b)

(a)

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{i} \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{e B R_s^2}{c} \frac{1}{2R} \right)^2$$

(b)

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{i} \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{e B R_s^2}{c} \frac{1}{2R} \right)^2$$

$$\psi_a^{\text{out}} = e^{i(K + \frac{eBR_s^2}{2cR})\pi R} \cdot \psi^{\text{in}}$$

$$\psi_b^{\text{out}} = e^{i(K - \frac{eBR_s^2}{2cR})\pi R} \cdot \psi^{\text{in}}$$

$$\Delta\phi = \frac{\pi e B R_s^2}{c\hbar} = \frac{e}{\hbar c} \Phi_{\text{mag}}$$

### 7.3.2 Aharonov-Bahn Phase

- $\Delta\phi$  hängt nicht von der kinetischen Energie (Zeit des Durchlaufs) ab.
- $\Delta\phi$  hängt nicht von  $R$  (genauer vom konkreten Weg ) ab, solange die Spule eingeschlossen ist.

$\Rightarrow$  **topologische Phase:**

Grundlage für  $\longrightarrow$  Quanten-Hall Effekt, topologische Isolatoren

Es ist jedoch nicht so, dass durch die Aharonov-Bohm-Phase das Vektorpotential direkt messbar wird und damit eine mathematische Hilfsfunktion physikalische Bedeutung erhält. Durch die Definition des magnetischen Flusses durch das Ringintegral über das Vektorpotential verfällt die Eichfreiheit und der magnetische Fluss ist eindeutig definiert.

# 8 Der Spin

## 8.1 Das Stern-Gerlach Experiment

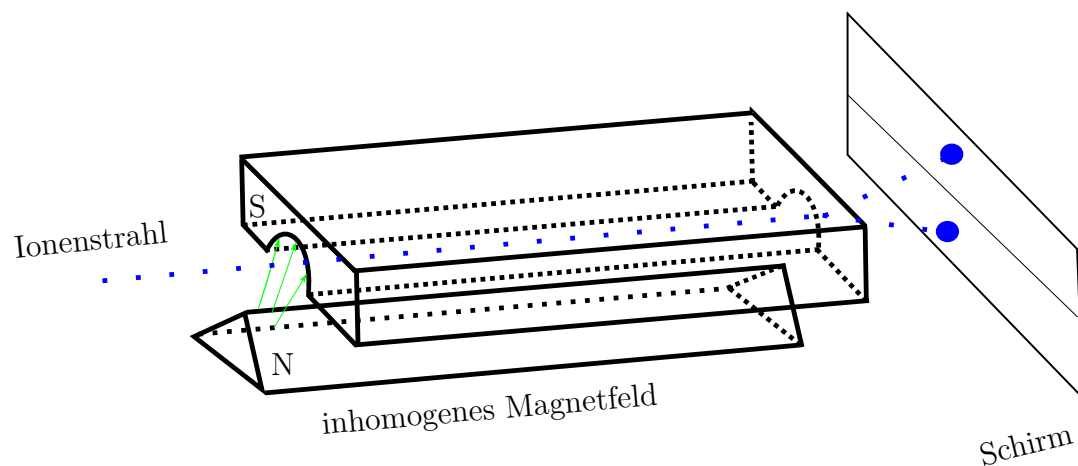


Abbildung 8.1: Stern Gerlach Versuch

Wir beobachten, dass der Strahl von Elektronen im inhomogenen Magnetfeld in zwei Strahlen aufspalten, und keine von beiden im Vergleich zum ursprünglichen Strahl unabgelenkt bleibt. Das legt nahe, einen inneren Freiheitsgrad des Elektronen zu postulieren, der ein Drehimpuls ist (weil er mit einem äußeren Magnetfeld wechselwirkt) und nur zwei Einstellungsmöglichkeiten hat  $\rightarrow$  also nur  $+\frac{1}{2}$  und  $-\frac{1}{2}$  sein kann. Diesen nennt man Spin. Da jedoch der bisherige Hilbertraum diesen Freiheitsgrad nicht abdecken kann, müssen wir ihn erweitern um den Hilbertraum des Spins, den  $\mathbb{C}^2$ .

### 8.1.1 Hilbertraum des Elektrons

Das Spin-behaftete Elektron muss also in folgendem Raum beschrieben werden:

$$L^2(\mathbb{R})^3 \otimes \mathbb{C}^2$$

wobei  $\mathbb{R}^3$  externe und  $\mathbb{C}^2$  die internen Freiheitsgrade angibt

### 8.1.2 Pauli-Matrizen

$$\begin{aligned}\sigma_0 = \mathbb{1} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} & \sigma_1 = \sigma_x &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \sigma_2 = \sigma_y &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} & \sigma_3 = \sigma_z &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Eigenschaften  $(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$

- i)  $\sigma_j = \sigma_j^+$  selbstadjungiert
- ii)  $\text{Tr}\{\sigma_j\} = 0 \quad \det\{\sigma_j\} = -1$
- iii)  $[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k$
- iv)

$$\begin{aligned}\{\sigma_i, \sigma_j\} &:= \sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = 2\delta_{ij} \\ \sigma_i^2 &= \mathbb{1}\end{aligned}$$

aus (iii) folgt:

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{S}} &= \frac{\hbar}{2} (\sigma_x \vec{e}_x + \sigma_y \vec{e}_y + \sigma_z \vec{e}_z) \\ [\hat{S}_i, \hat{S}_j] &= i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{S}_k \\ [\hat{S}^2, \hat{S}_k] &= 0 \\ \hat{S}^2 &= \frac{\hbar^2}{4}(\mathbb{1} + \mathbb{1} + \mathbb{1}) = \frac{3}{4}\hbar^2 = \hbar^2 \frac{1}{2} \left( \frac{1}{2} + 1 \right) \\ \Rightarrow S &= \frac{1}{2}\end{aligned}$$

**18. Vorlesung** Wiederholung

$$\mathcal{H} = \mathcal{L}^{(2)}(\underbrace{\mathbb{R}}_{\text{externe Bewegung}}) \otimes \underbrace{\mathbb{C}^2}_{\text{interne Bewegung}}$$

$$\mathbb{1} = \sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k$$

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}$$

$$\sigma_i^2 = 1$$

$$\hat{\vec{S}} = \frac{\hbar}{2}(\sigma_x \vec{e}_x + \sigma_y \vec{e}_y + \sigma_z \vec{e}_z)$$

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{S}_k$$

$$\begin{aligned} \hat{S}^2 &= \hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + \hat{S}_3^2 \\ &= \frac{\hbar^2}{4} \cdot 3 \cdot \mathbb{1} \\ &= \hbar^2 \cdot \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{1}{2} + 1\right) \end{aligned}$$

$$[\hat{S}_i, \hat{S}^2] = 0$$

innerer Drehimpuls mit Betrag  $\frac{1}{2}$

**Ende Wiederholung**

$$\text{Eigenzustände } \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$|\chi_+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \lambda = \frac{\hbar}{2}$$

$$|\chi_-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \lambda = -\frac{\hbar}{2}$$

Alle bisherigen Operatoren, die den Spin nicht betrafen, müssen nun erweitert werden, um auf den Produktraum von  $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$  und  $\mathcal{C}^2$  zu wirken. Diese Erweiterung wird durch die Einheitsmatrix  $\mathbb{1}$  im  $\mathcal{C}^2$  beziehungsweise  $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$  erreicht, die wir von nun an aber weglassen.

$$\hat{\mathbf{p}}_1 \rightarrow \hat{\mathbf{p}} \otimes \mathbb{1}$$

$$\hat{\mathbf{S}}_1 \rightarrow \mathbb{1} \otimes \hat{\mathbf{S}}$$

**8.1.3 Teilchen mit n inneren Freiheitsgraden**

$$\mathcal{H} = \mathcal{L}^{(2)}(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^n$$

$$n = 2s + 1$$

$$\boxed{\hat{S}^2 = \hbar^2 \cdot s(s+1) \cdot \mathbb{1}_n}$$

$$\hat{S}_z |m, s\rangle = \hbar |m, s\rangle$$

Spinquantenzahlen:  $m_s = -s, -(s-1), \dots, (s-1), s$



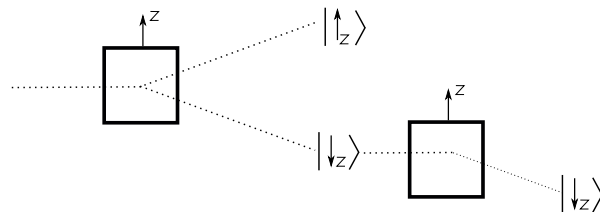
## 8.2 Spin und Rotationen; Gesamtdrehimpuls von Spin $\frac{1}{2}$ -Teilchen

Nun soll untersucht werden, ob folgende Gleichung gilt, wobei  $\hat{D}$  eine Drehung in  $\mathbb{C}^2$  beschreibt.

$$\hat{D} \begin{pmatrix} \psi_1(\vec{r}) \\ \psi_2(\vec{r}) \end{pmatrix} \stackrel{?}{=} \begin{pmatrix} \psi_1(D^{-1}\vec{r}) \\ \psi_2(D^{-1}\vec{r}) \end{pmatrix} \quad (41)$$

kann so nicht sein!

Wir betrachten zwei Stern-Gerlach-Apparate hintereinander. Die erste Kombination ist problemlos, da dort zweimal nach  $S_z$  geprüft wird.



Beim Zweiten jedoch sehen wir: Ist die Up- oder Downkomponente null, so würde sie nach der Transformationsregel von oben auch für immer null bleiben. Dies kann nicht sein, da  $S_x$  und  $S_z$  nicht kommutieren und deshalb hinter dem zweiten Apparat wieder Up- und Down-Komponente auftreten. Folglich ist obige Transformationsregel falsch.

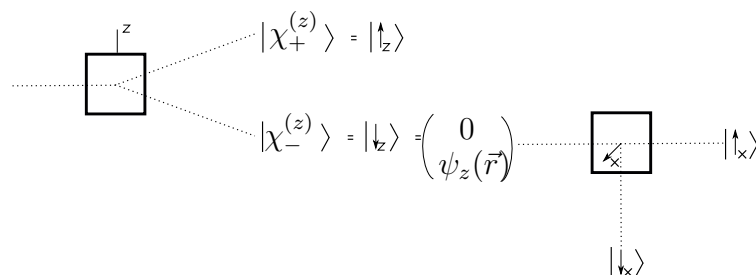


Abbildung 8.2: Aufteilung beim Stern-Gerlach Versuch

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_z] \neq 0$$

falls (41) korrekt wäre, müsste bei diesem Experiment nun  $|\downarrow_x\rangle$  herauskommen.  $\nabla$

$$\hat{D} \begin{pmatrix} \psi_1(\vec{r}) \\ \psi_2(\vec{r}) \end{pmatrix} = \underbrace{D^{-1}}_{\text{Drehung in } \mathbb{C}^2} \underbrace{\begin{pmatrix} \psi_1(D^{-1}\vec{r}) \\ \psi_2(D^{-1}\vec{r}) \end{pmatrix}}_{\text{Drehung in } \mathbb{R}^3}$$

$$\hat{D}_{\vec{n}} = e^{-i\Theta \vec{n} \cdot \frac{\hat{\vec{S}}}{\hbar}} \cdot e^{-i\Theta \vec{n} \cdot \frac{\hat{\vec{L}}}{\hbar}}$$

falls  $\hat{S}$  halbzahlig liefert nur Drehung um  $4\pi n$  den Anfangszustand, da  $[\hat{S}_i, \hat{L}_j] = 0$  da L mit der Einheitsmatrix aus  $\mathbb{C}^2$  kommutiert und analog S mit der Einheitsmatrix aus  $\mathbb{R}^3$

Definiere also einen neuen Operator, der diese beiden Drehungen zusammenfasst:

$$\hat{D}_{\vec{n}}(\Theta) = e^{-i\Theta \vec{n} \cdot \frac{\hat{\vec{J}}}{\hbar}}$$

**Gesamtdrehimpuls (des Elektrons):**

$$\begin{aligned} \hat{\vec{J}} &= \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}} \\ &= \mathbb{1}_{L^2(\mathbb{R}^3)} \otimes \hat{\vec{S}} + \hat{\vec{L}} \otimes \mathbb{1}_{\mathbb{C}^2} \end{aligned}$$

$\hat{\vec{J}}$  ist Gesamtdrehimpuls, da gilt:

$$\begin{aligned} [\hat{J}_i, \hat{J}_j] &= [\hat{L}_i + \hat{S}_i, \hat{L}_j + \hat{S}_j] \\ &= [\hat{L}_i, \hat{L}_j] + [\hat{S}_i, \hat{S}_j] \\ &= i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{L}_k + i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{S}_k \end{aligned}$$

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{J}_k$$

$$\hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 = \hat{S}^2 + \hat{L}^2 + 2\hat{L}\hat{S}$$

$$\begin{aligned}
[\hat{J}_i, \hat{J}^2] &= [\hat{L}_i + \hat{S}_i, \hat{S}^2 + \hat{L}^2 + \underbrace{2\hat{L}_j\hat{S}_j}_{\hat{L}\hat{S}}] \\
&= 2 \cdot \{ [\hat{L}_i, \hat{L}_j\hat{S}_j] + [\hat{S}_i, \hat{L}_j\hat{S}_j] \} \\
&= 2 \cdot \left\{ \sum_{j=1}^3 \underbrace{[\hat{L}_i, \hat{L}_j]}_{i\epsilon_{ijk}\hat{L}_k} \hat{S}_j + \sum_{j=1}^3 \underbrace{[\hat{L}_j, \hat{S}_i]}_{i\epsilon_{ijk}\hat{S}_k} \hat{S}_j \right\} \\
&= 2i \underbrace{\epsilon_{ijk}}_{\substack{\text{antisymmetrisch} \\ \text{in } j,k}} \underbrace{(\hat{L}_k\hat{S}_j + \hat{L}_j\hat{S}_k)}_{\substack{\text{symmetrisch} \\ \text{in } j,k}} \\
&= 0
\end{aligned}$$

Der letzte Term wird null, da die Einsteinsche Summenkonvention gilt und die Summe über einen symmetrischen und einen antisymmetrischen Term verschwindet.

$$\boxed{[\hat{J}_i, \hat{J}^2] = 0}$$

so gilt ferner:

$$\left. \begin{aligned} [\hat{J}_i, \hat{J}^2] &= 0 \\ [\hat{J}_i, \hat{S}^2] &= 0 \end{aligned} \right\} [\hat{J}^2, \hat{S}^2] = [\hat{J}^2, \hat{L}^2] = 0$$

$$[\hat{J}^2, \hat{S}_z] \neq 0$$

$$[\hat{J}^2, \hat{L}_z] \neq 0$$

Aus diesen Relationen sehen wir, dass zwei Sätze kommutierender Operatoren existieren:

### 8.2.1 Gekoppelte und ungekoppelte Basis

a) ungekoppelte Basis:

$$\hat{L}^2, \hat{L}_z, \hat{S}^2, \hat{S}_z \quad |l, m_l, s, m_s\rangle$$

b) gekoppelte Basis:

$$\hat{J}^2, \hat{J}_z, \hat{L}^2, \hat{S}^2 \quad |j, m_j, l, s\rangle$$

$$\hat{J}^2 |j, m_j, l, s\rangle = \hbar j(j+1) |j, m_j, l, s\rangle$$

$$\hat{J}_z |j, m_j, l, s\rangle = \hbar m_j |j, m_j, l, s\rangle$$

$$m_j = -j, \dots, j$$

Was sind Werte von j?

$$|j, m_j, l, s\rangle = \sum_{m_s, m_l} C_{m_j, m_l, m_s}^j |l, m_l, s, m_s\rangle$$

mit  $C_{m_j, m_l, m_s}^j$  = Clebsch-Gordan-Koeffizienten

Die Clebsch-Gordan-Koeffizienten helfen uns also, von einer Basis in die andere zu transformieren.

Errechne zunächst Koeffizienten für  $s = \frac{1}{2}$

i)

$$\begin{aligned}
\hat{J}_z |j, m_j, l, s\rangle &= \sum_{m_s} \sum_{m_l} C_{m, m_l, m_s}^j (\hat{S}_z + \hat{L}_z) \left| l, m_l, \underbrace{s, m_s}_{=|\chi_{\pm}\rangle} \right\rangle \\
&= \hbar \sum_{m_s, m_l} \left[ C_{m, m_l - \frac{1}{2}}^j \left( m_l + \frac{1}{2} \right) \left| l, m_l \right\rangle \cdot \left| \chi_+ \right\rangle \right. \\
&\quad \left. + C_{m, m_l - \frac{1}{2}}^j \cdot \left( m_l - \frac{1}{2} \right) \left| l, m_l \right\rangle \cdot \left| \chi_- \right\rangle \right] \\
&= \hbar m \left| j, m, l, s \right\rangle
\end{aligned}$$

in Summe nur Terme mit  $m_l = m \pm \frac{1}{2}$ 

$$\Rightarrow C_{m, m_l - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^j \equiv \alpha \qquad C_{m, m_l + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}^j \equiv \beta$$

$$\left| j, m, l, s \right\rangle = s \cdot \left| l, m - \frac{1}{2} \right\rangle \cdot \left| \chi_+ \right\rangle + \beta \cdot \left| l, m + \frac{1}{2} \right\rangle \cdot \left| \chi_- \right\rangle$$

ii)

$$\begin{aligned}
\hat{J} \left| j, m, l, s \right\rangle &= \hbar^2 \cdot j(j+1) \left| j, m, l, s \right\rangle \\
\hat{J}^2 &= \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2 \cdot \hat{\vec{L}} \hat{\vec{S}} \\
&= \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2 \cdot \hat{L}_z \hat{S}_z + 2 \cdot (\hat{L}_x \hat{S}_x + \hat{L}_y \hat{S}_y)
\end{aligned}$$

andererseits gilt auch:

$$\begin{aligned}
\hat{L}_- \hat{S}_+ + \hat{L}_+ \hat{S}_- &= (\hat{L}_x - i\hat{L}_y) \cdot (\hat{S}_x + i\hat{S}_y) + (\hat{L}_x + i\hat{L}_y) \cdot (\hat{S}_x - i\hat{S}_y) \\
&= 2 \cdot \hat{L}_x \hat{S}_x + 2 \cdot \hat{L}_y \hat{S}_y
\end{aligned}$$

$$\left( \hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2 - 2 \cdot \hat{L}_z \hat{S}_z - \hat{L}_- \hat{S}_+ - \hat{L}_+ \hat{S}_- \right) \cdot \left| j, m, l, s \right\rangle = 0$$

$$\begin{aligned}
&\Leftrightarrow [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] \\
&\quad \cdot \left( \alpha \left| l, m - \frac{1}{2} \right\rangle \cdot \left| \chi_+ \right\rangle + \beta \left| l, m + \frac{1}{2} \right\rangle \cdot \left| \chi_- \right\rangle \right) \\
&\quad - \alpha \cdot \left( m - \frac{1}{2} \right) \cdot \left| l, m - \frac{1}{2} \right\rangle \cdot \left| \chi_+ \right\rangle + \beta \cdot \left( m + \frac{1}{2} \right) \cdot \left| l, m + \frac{1}{2} \right\rangle \cdot \left| \chi_- \right\rangle \\
&\quad - \sqrt{l(l+1) - \left( m + \frac{1}{2} \right) \left( m - \frac{1}{2} \right)} \\
&\quad \cdot \left( \beta \left| l, m - \frac{1}{2} \right\rangle \cdot \left| \chi_+ \right\rangle + \alpha \left| l, m + \frac{1}{2} \right\rangle \cdot \left| \chi_- \right\rangle \right) \\
&= 0
\end{aligned}$$

Da  $|l, m - \frac{1}{2}\rangle \cdot |\chi_+\rangle$  und  $|l, m + \frac{1}{2}\rangle \cdot |\chi_-\rangle$  orthogonal zueinander stehen, müssen die Koeffizienten beider Vektoren unabhängig voneinander verschwinden:

$$\begin{aligned}
&\underline{\left| l, m - \frac{1}{2} \right\rangle \cdot \left| \chi_+ \right\rangle} : \\
&\quad \alpha \cdot \left[ j(j+1) - l(l+1) - \frac{1}{2} \left( \frac{1}{2} + 1 \right) - \left( m - \frac{1}{2} \right) \right] \\
&\quad - \beta \cdot \left[ (l(l+1) - \left( m + \frac{1}{2} \right) \left( m - \frac{1}{2} \right)) \right]^{\frac{1}{2}} \\
&= 0
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\underline{\left| l, m + \frac{1}{2} \right\rangle \cdot \left| \chi_- \right\rangle} : \\
&\quad - \alpha \cdot \left[ (l(l+1) - \left( m + \frac{1}{2} \right) \left( m - \frac{1}{2} \right)) \right]^{\frac{1}{2}} \\
&\quad + \beta \cdot \left[ j(j+1) - l(l+1) - \frac{1}{2} \left( \frac{1}{2} + 1 \right) - \left( m - \frac{1}{2} \right) \right] \\
&= 0
\end{aligned}$$

Wir erhalten somit ein homogenes Gleichungssystem für  $\alpha, \beta$ :

$$M \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = 0$$

$$\begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11}\alpha + M_{12}\beta \\ M_{21}\alpha + M_{22}\beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

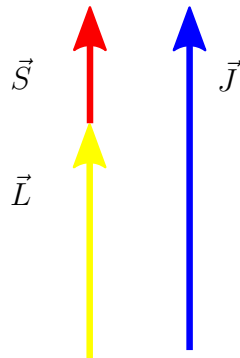
linear abhängig von m:  $\det(M) \stackrel{!}{=} 0$

$$\Leftrightarrow \boxed{j = l + \frac{1}{2}}$$

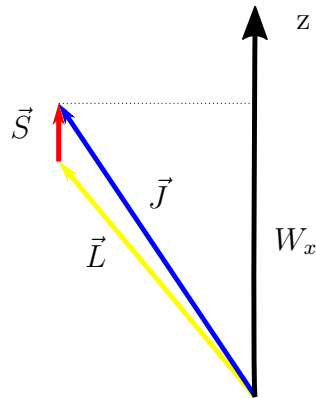
$$\boxed{j = l - \frac{1}{2}}$$

$$j = l + \frac{1}{2} :$$

$$m_j = m_j^{max} = j$$



$$m_j < m_j^{max} = j$$



$$\underline{j = l + \frac{1}{2} :}$$

$$C_{m, m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^{l + \frac{1}{2}} = \left( \frac{l + m + \frac{1}{2}}{2l + 1} \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$C_{m, m + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^{l + \frac{1}{2}} = \left( \frac{l + m - \frac{1}{2}}{2l + 1} \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\underline{j = l - \frac{1}{2} :}$$

$$C_{m, m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^{l - \frac{1}{2}} = - \left( \frac{l + m - \frac{1}{2}}{2l + 1} \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$C_{m, m + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^{l - \frac{1}{2}} = \left( \frac{l + m + \frac{1}{2}}{2l + 1} \right)^{\frac{1}{2}}$$

Eine andere Methode zum Errechnen der Koeffizienten ist die Addition von Drehimpulsen in der Quantenmechanik II

**Bemerkung:**

$$\hat{\vec{J}}_1 + \hat{\vec{J}}_2 = \hat{\vec{J}}$$

$$j = |j_1 - j_2|, \dots, j_1 + j_2$$



**19. Vorlesung**

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{J}}_i, \hat{\mathbf{J}}_j] &= i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{J}_k \\ [\hat{J}^2, \hat{L}^2] &= 0 \\ [\hat{J}^2, \hat{S}^2] &= 0 \end{aligned}$$

i)  $\hat{L}^2, \hat{L}_z, \hat{S}^2, \hat{S}_z$  ungekoppelte Basis

ii)  $\hat{J}^2, \hat{J}_z, \hat{L}^2, \hat{S}^2$  gekoppelte Basis

**8.2.2 Clebsch-Gordan-Koeffizienten**

$$|j, m, l, s\rangle = \sum_{m_l} \sum_{m_s} C_{m, m_l, m_s}^j |l, s, m_l, m_s\rangle$$

$$s = \frac{1}{2}, j = l + \frac{1}{2} \quad C_{m, m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^{l + \frac{1}{2}} = \left( \frac{l + m + \frac{1}{2}}{2l + 1} \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$C_{m, m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}^{l + \frac{1}{2}} = \left( \frac{l - m + \frac{1}{2}}{2l + 1} \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$j = l - \frac{1}{2} \text{ mit } l > 0 \quad C_{m, m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^{l - \frac{1}{2}} = - \left( \frac{l - m + \frac{1}{2}}{2l + 1} \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$C_{m, m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}^{l - \frac{1}{2}} = - \left( \frac{l + m + \frac{1}{2}}{2l + 1} \right)^{\frac{1}{2}}$$

**Bemerkung:**

Wir fassen nun den Gesamtdrehimpuls der einzelnen Teilchen in dem Gesamtdrehimpuls des Systems zusammen:  $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{J}}_1 + \hat{\mathbf{J}}_2$  Die möglichen Werte dieses neuen Operators sind damit (Stichwort Addition von Drehimpulsen):

$$j = j_{\min}, \dots, j_{\max}$$

$$\boxed{j_{\min} = |j_1 - j_2| \quad j_{\max} = j_1 + j_2}$$

### 8.3 Superauswahlregel für den Gesamtdrehimpuls:

Wir stellen uns nun die Frage, ob Bedingungen an den Drehimpuls von Zuständen existieren.

Dazu betrachten wir zuerst eine Drehung im Raum um  $2\pi$ :

$$\hat{D}_{\vec{n}}(2\pi) |j_{m_l s}\rangle = (-1)^{2j} |j_{m_l s}\rangle$$

Mit der Bedingung der Invarianz unter Rotation um  $2\pi$  ist das nur möglich, falls:

$|\phi\rangle$  ist Superposition aus zwei Zuständen mit:  $j = 0, 1, 2, \dots$

oder  $|\phi\rangle$  ist Superposition aus zwei Zuständen mit:  $j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$

**Beweis:**

Diese Bedingung ist einleuchtend: Kombinationen aus halbzahligen und ganzzahligen Drehimpulsen führen in beiden Fällen zu ganzzahligem  $j$ .

$|\phi_+\rangle$  sei Zustand mit:  $j = 0, 1, 2, \dots$

$|\phi_-\rangle$  sei Zustand mit:  $j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$

$$|\tilde{\phi}_+\rangle = \hat{D}_{\vec{n}}(2\pi) |\phi_+\rangle = |\phi_+\rangle$$

$$|\tilde{\phi}_-\rangle = \hat{D}_{\vec{n}}(2\pi) |\phi_-\rangle = -|\phi_-\rangle$$

$$\langle \tilde{\phi}_+ | \hat{A} | \tilde{\phi}_+ \rangle = \langle \phi_+ | \hat{A} | \phi_+ \rangle \checkmark$$

$$\langle \tilde{\phi}_- | \hat{A} | \tilde{\phi}_- \rangle = \langle \phi_- | \hat{A} | \phi_- \rangle \checkmark$$

aber:

$$|\phi\rangle = \alpha \cdot |\phi_+\rangle + \beta \cdot |\phi_-\rangle \quad \alpha, \beta \neq 0$$

$$|\tilde{\phi}\rangle = \alpha \cdot |\phi_+\rangle - \beta \cdot |\phi_-\rangle$$

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\phi} | \hat{A} | \tilde{\phi} \rangle &= |\alpha|^2 \cdot \langle \phi_+ | \hat{A} | \phi_+ \rangle + |\beta|^2 \cdot \langle \phi_- | \hat{A} | \phi_- \rangle - \alpha^* \beta \cdot \langle \phi_+ | \hat{A} | \phi_- \rangle - \alpha \beta^* \cdot \langle \phi_- | \hat{A} | \phi_+ \rangle \\ &\neq \langle \phi | \hat{A} | \phi \rangle \quad \nexists \end{aligned}$$

⇒ Bei jedem dynamischen Prozess kann sich der Gesamtdrehimpuls nur um ganzzahlige Schritte ändern.

## 8.4 Spin $\frac{1}{2}$ -Teilchen im äußeren Magnetfeld

Wir hatten gesehen, dass der Bahndrehimpuls eines geladenen Teilchens ein magnetisches Moment mit sich bringt. Wir wollen nun der Frage nachgehen, ob dies auch für den Spin gilt.

Wellenfunktion eines Spin  $1/2$ -Teilchens lautet (aufgrund des Produktraums aus Hilbertraum der Bewegungs- und Hilbertraum der Spinfreiheitsgrade):

$$\psi(\vec{r}, t) \longrightarrow \begin{pmatrix} \psi_1(\vec{r}, t) \\ \psi_2(\vec{r}, t) \end{pmatrix} \quad \begin{matrix} m_s = \frac{1}{2} \\ m_s = -\frac{1}{2} \end{matrix}$$

aus relativistischer Quantenmechanik (Dirac-Theorie, Quantenmechanik II)

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left[ \left( \hat{\vec{p}} - \frac{q}{c} \vec{A}(\hat{\vec{r}}) \right) \cdot \vec{\sigma} \right]^2 + q \Phi \mathbb{1}_{2 \times 2}$$

Dabei benutzen wir den Vektor der Pauli-Matrizen:  $\vec{\sigma} = \sigma_x \vec{e}_x + \sigma_y \vec{e}_y + \sigma_z \vec{e}_z$

Mit dem kinetischen Impuls  $\hat{\pi}_k = \hat{p}_k - \frac{q}{c} \vec{A}_k$  erhalten wir:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \sum_{k,l=1}^3 \hat{\pi}_k \sigma_k \hat{\pi}_l \sigma_l + q \Phi$$

mit  $\sigma_k \sigma_l = \frac{1}{2} [\sigma_k, \sigma_l] + \frac{1}{2} \{ \sigma_k, \sigma_l \} = \delta_{kl} + i \epsilon_{klj} \sigma_j$

Die Pauli-Matrizen lauten :  $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

$$\Rightarrow \hat{H} = \frac{1}{2m} \sum_{k,l=1}^3 \hat{\pi}_k \hat{\pi}_l (\delta_{kl} + i \epsilon_{klj} \sigma_j) + q \Phi$$

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \hat{\vec{p}} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2 - \frac{q \hbar}{2m c} \vec{B} \cdot \vec{\sigma} + q \Phi$$

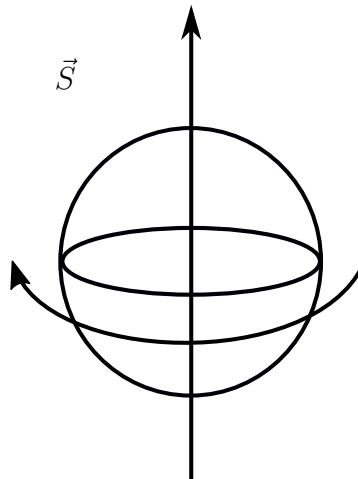
$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \hat{\vec{p}} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2 - \text{sgn}(q) \frac{2 \cdot \mu}{\hbar} \vec{B} \cdot \vec{S} + q \Phi$$

Der Faktor 2 im Kopplungsterm mit  $\mathbf{B}$  und  $\mathbf{S}$  ist dabei als das anomale magnetische Moment des Elektrons bekannt. Im Spezialfall eines konstanten Magnetfeldes erhalten wir damit insgesamt, also mit dem Term aus dem Bahndrehimpuls:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + q \cdot \Phi + \frac{q^2}{8mc^2}(\vec{r} \times \vec{B})^2 - \text{sgn}(q)\frac{\mu}{\hbar}\vec{B} \cdot (\hat{\vec{L}} + 2\hat{\vec{S}})$$

In diesem Ausdruck steht  $\Phi$  für das elektrische Potential, der Term danach bildet das Zentrifugalpotential und der letzte Term gibt die nun vollständige Kopplung von Bahndrehimpuls und Spin mit dem äußeren Magnetfeld wieder.

Aus dem anomalen magnetischen Moment folgt: Elektron ist **keine** geladene Kugel mit Eigendrehimpuls  $\vec{s}$



**Spinpräzession:** Wir betrachten nun nur die internen Freiheitsgrade.

$$\text{sgn}(q) = -1$$

$$\vec{B} = (0, 0, B)$$

$$\hat{H} = \frac{2\mu}{\hbar} B \hat{S}_z$$

Die Eigenzustände erhalten wir sofort aus der einfachen Matrixdarstellung von  $\vec{S}_z$ ,

die Eigenwerte sind dann offensichtlich:

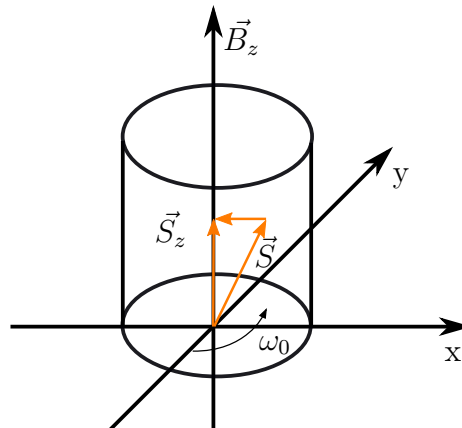
$$\begin{aligned} |\chi_+\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} & E_+ &= \mu B \\ |\chi_-\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} & E_- &= -\mu B \end{aligned}$$

Zeitentwicklung einer Superposition:

$$\begin{aligned} |\chi(t=0)\rangle &= \alpha \cdot |\chi_+\rangle + \beta \cdot |\chi_-\rangle \\ |\chi(t)\rangle &= \alpha \cdot e^{\frac{i\mu B}{\hbar}t} |\chi_+\rangle + \beta \cdot e^{\frac{-i\mu B}{\hbar}t} |\chi_-\rangle \end{aligned}$$

**Speziell:**

$$\begin{aligned} \alpha = \beta &= \frac{1}{\sqrt{2}} & |\chi(t=0)\rangle &\text{Eigenzustand von } \sigma_x \text{ mit } m_x = +1 \\ \Rightarrow \langle \sigma_x(t) \rangle &= \frac{1}{2} (e^{-i\omega_0 t}, e^{i\omega_0 t}) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} e^{i\omega_0 t} \\ e^{-i\omega_0 t} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \cos(2\omega_0 t) \langle \sigma_y(t) \rangle \\ &= \frac{1}{2} \sin(2\omega_0 t) & \omega_0 &= \frac{\mu B}{\hbar} \end{aligned}$$



Eine solch oszillierende Schwankung der beiden Werte ist uns nicht unbekannt: Wir identifizieren dies als eine Präzessionsbewegung, in diesem Fall präzediert also der Spin um die  $\vec{S}_z$ -Achse, in der auch das B-Feld verläuft.

## 8.5 Spin-Bahn Kopplung

### Feinstruktur bei H-artigen Atomen (Wasserstoffartigen):

$\hat{\vec{S}} \rightarrow$  magnetisches Moment  $\rightarrow$  Magnetfeld  $\xleftrightarrow{\text{Wechselwirkung}}$  Bahn-magnetisches Moment

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{Ze^2}{r} + \underbrace{f(r)}_{\text{aus rel. O.M.}} \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} = H_0 + \hat{H}_{SB}$$

$$\boxed{\hat{H}_{SB} = f(r) \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}}} \quad \text{Spin-Bahn-Komponente}$$

Nebenrechnung:

$$\begin{aligned} \hat{\vec{J}} &= \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}} \\ \hat{J}^2 &= \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} \end{aligned}$$

$L^2, S^2$  kommutiert mit allen Komponenten von  $\vec{L}$  und  $\vec{S}$  !

$\hat{J}^2, \hat{J}_z, \hat{L}^2, \hat{S}^2$  kommutieren mit  $\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}}$ :

$$\boxed{\hat{H}_{SB} = \frac{f(r)}{2}(\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2)}$$

$\Rightarrow$  Wir betrachten die Spin-Bahn-Kopplung natürlich in der gekoppelten Basis  $|j, m, l, s\rangle$  Eigenzustände von  $\hat{H}_0$  :

$$\phi_E(\vec{r}) = \frac{U_{njl}(r)}{r} \phi_{jmls} = \frac{1}{2} \begin{cases} \nearrow j = l + \frac{1}{2} \\ \searrow j = l - \frac{1}{2} \end{cases}$$

Was sind Eigenzustände von  $\hat{H}_0 + \hat{H}_{SB}$  ?

$$\begin{aligned} & \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{Ze^2}{r} + \frac{\hbar^2}{2} \left[ j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \cdot f(r) \right\} \cdot U_{njl}(r) \\ &= E U_{njl}(r) \end{aligned}$$

$$\underline{j = l + \frac{1}{2}} :$$

Abkürzung:  $U_{nl}^+(r)$

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{Ze^2}{r} + \underbrace{\frac{\hbar}{2} l f(r)}_{\text{Spin-Bahn-Kopplung}} \right] \cdot U_{nl}^+(r) = E U_{nl}^+$$

$$\underline{j = l - \frac{1}{2}}$$

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{Ze^2}{r} - \frac{\hbar}{2} (l+1) f(r) \right] \cdot \bar{U}_{nl}(r) = E \bar{U}_{nl}$$

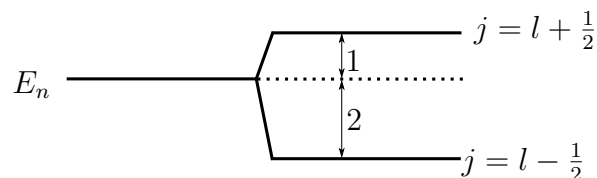
**Näherung:**

$$f(r) \longrightarrow \langle f(r) \rangle_{nl} = \langle U_{nl}(r) | f(r) | U_{nl}(r) \rangle = \mathbb{C} = \text{const}$$

$\langle U_{nl}(r) |$  ist ohne SB-Kopplung

$$E_{nlj} = E_n + \frac{\hbar^2}{2} \underbrace{\langle f(r) \rangle}_{=0} \begin{cases} +l, & j = l + \frac{1}{2} \\ -(l+1), & j = l - \frac{1}{2} \end{cases}$$

Aufspaltung der Energieniveaus (Feinstruktur)



**Bemerkung:**

Auch der Kern hat einen Spin und damit ein magnet. Moment. Dieser Kernspin wird als  $\hat{I}$  bezeichnet. Es entsteht eine Kopplung von  $\hat{I}$  an  $\hat{J}$ . Dies ist Ursache der Hyperfeinstrukturaufspaltung.

# 9 Schrödinger-, Heisenberg- und Wechselwirkungsbild

## 9.1 Schrödingerbild

**20. Vorlesung** Physik: Zustand im Hilbertraum; Observable; Zeitentwicklung ist eine unitäre Evolution

$$\boxed{i\hbar \frac{d}{dt} |\varphi(t)\rangle = \hat{H} |\varphi(t)\rangle}$$

Formale Lösung durch einen unitären Operator

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(t - t_0)$$

Dies gilt jedoch nur wenn der Hamiltonoperator ( $\hat{H}$ ) nicht Zeitabhängig ist

$$\boxed{|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle}$$

Es gilt  $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$  damit das Skalarprodukt erhalten bleibt

$$\begin{aligned} \langle \psi(t) | \phi(t) \rangle &= \langle \hat{U} \psi(t_0) | \hat{U} \phi(t_0) \rangle = \langle \psi(t_0) | \underbrace{\hat{U}^\dagger \hat{U}}_1 | \phi(t_0) \rangle \\ &= \langle \psi(t_0) | \phi(t_0) \rangle \end{aligned}$$

$$\hat{U}(t_0, t_0) = \mathbb{1}$$

Wie sieht  $\hat{U}$  explizit aus?

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H} \hat{U}(t, t_0)$$



$$\hat{U}(t, t_0) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t, t_0) \right\}$$

**Generator der Zeitentwicklung:**

$$t = t_0 + \delta t \qquad \hat{U}(t, t_0) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \hat{H} \delta t$$

Die Auswertung von  $e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}$  ist nicht trivial doch falls  $\hat{H}|E_n\rangle = E_n|E_n\rangle$  bekannt ist dann wird es sehr einfach

$$\begin{aligned} \hat{U}(t, t_0) &= \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n(t-t_0)} |E_n\rangle \langle E_n| \\ \hat{U}(t, t_0)|\phi\rangle &= \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n(t-t_0)} |E_n\rangle \underbrace{\langle E_n|\phi\rangle}_{\text{Basisdarstellung}} \end{aligned}$$

Wie sieht die Zeitentwicklung von Observablen aus?

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle_t &= \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle \\ &= \langle \hat{U} \psi(t_0) | \hat{A} | \hat{U} \psi(t_0) \rangle \\ &= \langle \psi(t_0) | \hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U} | \psi(t_0) \rangle \\ &= \langle \psi(t_0) | \hat{U}^{-1}(t, t_0) \hat{A} \hat{U}(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle \end{aligned}$$

Dies entspricht einem Erwartungswert im Zustand zum Zeitpunkt  $t_0$

$$\hat{A}_k(t) = \hat{U}^{-1}(t, t_0) \hat{A} \hat{U}(t, t_0) \qquad \text{Unitär transformierter Operator}$$

Wie wir sehen, gib es eine andere Betrachtungsweise der Dynamik in der Quantenmechanik, nämlich eine, in der die Operatoren selbst die Zeitentwicklung beinhalten. Dies führt zum:

## 9.2 Heisenbergbild

Operatoren lassen sich wie folgt im Heisenbergbild schreiben

$$\hat{A}_H(t) \equiv \hat{U}^{-1}(t, t_0) \hat{A} \hat{U}(t, t_0)$$

Erwartungswerte werden im Zustand  $|\psi(t_0)\rangle = \text{const}_t$  ausgewertet (Aus Schrödingergleichung, konjugiert transponiert). Was ist die Bewegungsgleichung für die Ope-

ratoren?

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt}\hat{A}_H(t) &= \left(\frac{d}{dt}\hat{U}^{-1}(t, t_0)\right) \hat{A} \hat{U}(t, t_0) + \hat{U}^{-1}(t, t_0) \hat{A} \left(\frac{d}{dt}\hat{U}(t, t_0)\right) \\
 &= \frac{i}{\hbar} [\hat{U}^{-1} \hat{H} \hat{A} \hat{U} - \hat{U}^{-1} \hat{A} \hat{H} \hat{U}] \\
 &= \frac{i}{\hbar} [\hat{U}^{-1} \hat{H} \hat{U} \hat{U}^{-1} \hat{A} \hat{U} - \hat{U}^{-1} \hat{A} \hat{U} \hat{U}^{-1} \hat{H} \hat{U}] \\
 &= \frac{i}{\hbar} [\hat{H} \hat{A}_H(t) - \hat{A}_H(t) \hat{H}] \\
 &= \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}_H(t)]
 \end{aligned}$$

Solange A nicht explizit zeitabhängig ist.

$$\Rightarrow \boxed{\frac{d}{dt}\hat{A}_H(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}_H(t)]}$$

Dies ist die Allgemeine Bewegungsgleichung im Heisenbergbild. Für die fundamentalen Operatoren  $\hat{r}, \hat{p}$  gilt:

$$\frac{d}{dt}\hat{r}_H = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{r}_H] \qquad \frac{d}{dt}\hat{p}_H = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{p}_H]$$

Dies ist sehr analog zur klassischen Mechanik nur das aus dem Kommutator eine Poisson-Klammer wird

$$\frac{d}{dt}\vec{r} = \frac{i}{\hbar} \{H, \vec{r}\} \qquad \frac{d}{dt}\vec{p} = \frac{i}{\hbar} \{H, \vec{p}\}$$

Also folgt für die Analogie:

$$\begin{array}{ccc}
 \text{klassische Mechanik} & \Leftrightarrow & \text{Quantenmechanik} \\
 \{\cdot, \cdot\} & \Leftrightarrow & \frac{1}{i\hbar} \cdot [\cdot, \cdot]
 \end{array}$$

## 9.3 Wechselwirkungsbild

Aufteilung der Dynamik auf Zustände und Operatoren  
oft hat man

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$$

mit  $\hat{H}_0 :=$  „freier“ Hamiltonoperator  
 $\hat{H}_1 :=$  Wechselwirkungsoperator

$\hat{H}_0$  hat z.B. bekanntes Spektrum

dann kann

$$\hat{U}_0(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0(t-t_0)}$$

explizit angewendet werden

es gilt:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$$

$U(t, t_0)$  ist dabei der Zeitentwicklungsoperator des gesamten Hamiltonoperators,  $U_0$  ist nur der, der  $H_0$  enthält, mit:

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)}$$

Nun definieren wir den Zeitentwicklungsoperator im Wechselwirkungsbild:

$$\hat{U}_I(t, t_0) \equiv \hat{U}_0^{-1}(t, t_0) \hat{U}(t, t_0)$$

sowie:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}_I(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad \leftarrow \text{Zeitentwicklung gemäß } \hat{H}_1 \quad (42)$$

$$\hat{A}_I(t) = \hat{U}_0^{-1}(t, t_0) \cdot \hat{A} \hat{U}_0(t, t_0) \quad \leftarrow \text{Zeitentwicklung gemäß } \hat{H}_0 \quad (43)$$

es gilt offensichtlich die Äquivalenz der Bilder

$$\begin{aligned}\langle \hat{A} \rangle_t &= \overbrace{\langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle}^{\text{Schrödingerbild}} = \overbrace{\langle \psi(t_0) | \underbrace{\hat{U}^{-1} \hat{A} \hat{U}}_{\hat{A}_I(t)} | \psi(t_0) \rangle}^{\text{Heisenbergbild}} \\ &= \langle \hat{U}_I \psi(t_0) | \hat{A}_I(t) | \hat{U}_I \psi(t_0) \rangle\end{aligned}$$

Wechselwirkungsbild

$$= \langle \psi(t_0) | \underbrace{\hat{U}_I^{-1} \hat{U}_0^{-1}}_{\hat{U}^{-1}} \hat{A} \underbrace{\hat{U}_0 \hat{U}_I}_{\hat{U}} | \psi(t_0) \rangle$$

Differentialgleichung für  $|\psi_I(t)\rangle$  bzw.  $\hat{A}_I(t)$

$$\frac{d}{dt} \hat{A}_I(t) = \left( \frac{d}{dt} \hat{U}_0^{-1} \right) \hat{A} \hat{U}_0 + \hat{U}_0^{-1} \hat{A} \left( \frac{d}{dt} \hat{U}_0 \right) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_0, \hat{A}_I(t)]$$

$$\Leftrightarrow \boxed{\frac{d}{dt} \hat{A}_I(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_0, \hat{A}_I(t)]}$$

$$\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \frac{d}{dt} \hat{U}_I(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle = ?$$

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \hat{U}_I &= \frac{d}{dt} \left\{ e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0(t-t_0)} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} \right\} \\ &= \frac{i}{\hbar} \left[ \left( \hat{H}_0 \underbrace{\hat{U}_0^{-1} \hat{U}}_{\hat{U}_I} \right) - \left( \hat{U}_0^{-1} \hat{H} \underbrace{\hat{U}_0 \hat{U}_I}_{\hat{U}_0 \hat{U}_0^{-1}} \right) \right] \\ &= \frac{i}{\hbar} \left[ \left( \hat{H}_0 \hat{U}_I \right) - \left( \hat{U}_0^{-1} \hat{H} \hat{U}_0 \hat{U}_I \right) \right]\end{aligned}$$

nun ist

$$\begin{aligned}\hat{U}_0^{-1} \hat{H} \hat{U}_0 &= \left( \hat{U}_0^{-1} \hat{H}_0 \hat{U}_0 \right) + \left( \hat{U}_0^{-1} \underbrace{\hat{H}_1}_{\text{mit (43)}} \hat{U}_0 \right) \\ &= \hat{H}_0 + \hat{H}_1(t)\end{aligned}$$

$$\boxed{\frac{d}{dt} \hat{U}_1 = -\frac{i}{\hbar} \hat{H}_1(t) \hat{U}_1}$$

**Nebenrechnung:**

$$\frac{d}{dt} = -i f(t) y$$

$$\frac{1}{y} \frac{d}{dt} y = -i f(t)$$

$$\frac{d}{dt} \ln(y) = -i f(t)$$

$$\ln(t) - \ln(t_0) = -i \int_{t_0}^t d\tau f(\tau)$$

$$y(t) = y(t_0) \exp \left\{ -i \int_{t_0}^t d\tau f(\tau) \right\}$$

naiv würde man sagen:

$$\hat{U}_I(t, t_0) \stackrel{\text{falsch!}}{=} \hat{U}_I(t, t_0) e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \hat{H}_{1I}(\tau)} \quad (44)$$

$$e^{\sum_i \hat{a}_i} \stackrel{?}{=} \prod_i e^{\hat{a}_i} \quad (45)$$

da i.A.  $[\hat{H}_1(t), \hat{H}_1(t')] \neq 0$

$$U_1(t + \delta t, t) = 1 - \frac{i}{\hbar} \hat{H}_1(t) \delta t$$

$$U_1(t + 2\delta t, t) = \hat{U}_1(t + 2\delta t, t + \delta t) \cdot U_1(t + \delta t, t)$$

$$= 1 - \frac{i}{\hbar} \left( \hat{H}_1(t + \delta t) + \hat{H}_1(t) \right) \delta t + \left( -\frac{i}{\hbar} \right)^2 \hat{H}_1(t + \delta t) \hat{H}_1(t) \delta t^2$$

**Zeitgeordnet!**

### 9.3.1 Dyson'sche Reihe

$$\begin{aligned}
 \hat{U}_1(t, t_0) = & 1 + \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \int_{t_0}^t d\tau \hat{H}_1(\tau) \\
 & + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t d\tau \int_{t_0}^{\tau} d\tau' \hat{H}_1(\tau) \hat{H}_1(\tau') \\
 & + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^3 \int_{t_0}^{\tau} d\tau \int_{t_0}^{\tau'} d\tau' \int_{t_0}^{\tau''} d\tau'' \hat{H}_1(\tau) \hat{H}_1(\tau') \hat{H}_1(\tau'') \\
 & + \dots
 \end{aligned}$$

mit  $\tau \geq \tau' \geq \tau''$

es tauchen nur Zeitgeordnete Operatorprodukte auf!

### 9.3.2 Dyson'scher Zeitordnungsoperator

**Definition:**

$$\begin{aligned}
 T \hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2) &\equiv \begin{cases} \hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2) & t_1 > t_2 \\ \hat{B}(t_2) \hat{A}(t_1) & t_1 < t_2 \end{cases} \\
 \bar{T} \hat{A}(t_2) \hat{B}(t_1) &\equiv \begin{cases} \hat{B}(t_2) \hat{A}(t_1) & t_1 > t_2 \\ \hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2) & t_1 < t_2 \end{cases}
 \end{aligned}$$

damit

$$\begin{aligned}
 \hat{U}_I(t, t_0) &= T \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \hat{H}_{1I}(\tau) \right\} \\
 \hat{U}_I^{-1}(t, t_0) &= \bar{T} \exp \left\{ +\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \hat{H}_{1I}(\tau) \right\}
 \end{aligned}$$

# 10 Näherungsverfahren

**21.Vorlesung** Für den Hamilton des harmonischen Oszillators ist uns die exakte Lösung wohl bekannt. Wird nun eine kleine Störung hinzugefügt (was "klein" heißt sehen wir noch), so würden wir erwarten, dass sich die Eigenenergien des Systems nicht allzu viel ändern, wir das Problem also nicht komplett von vorne angehen müssen sondern lediglich die vorherigen Lösungen leicht abändern können. Mit dem Ermitteln dieser Abänderungen beschäftigt sich die Störungstheorie.

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega^2\hat{x}^2$$
$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right)$$

jetzt:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega^2\hat{x}^2 + 0,001\hat{x}^4$$

## 10.1 Zeitunabhängige Störungstheorie von nicht entarteten Zuständen

### Problem:

Wir betrachten also einen Hamiltonoperator, der aus zwei Teilen besteht: der Störhamilton  $H_1$  ist dabei neu.

$$\hat{H}_\lambda = \hat{H}_0 + \lambda\hat{H}_1$$

- im gewissen Sinne sei  $\hat{H}_1$  klein  $\rightarrow$  formaler Parameter  $\lambda$  (später  $\lambda = 1$  )
- Eigenzustand und Eigenwert von  $\hat{H}_0$  seien bekannt:  $\lambda \rightarrow 0$  : Problem gelöst.

jetzt: Näherungsverfahren als Reihenentwicklung nach  $\lambda$  bekannt:

$$\hat{H}_0 |\phi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\phi_n^{(0)}\rangle$$

Zuerst nehmen wir an, die Lösung der Hamilton weise keine Entartung auf.

$$|\phi_n^{(0)}\rangle \neq |\phi_m^{(0)}\rangle \quad \Rightarrow \quad E_n^{(0)} \neq E_m^{(0)}$$

Da die Störung klein sein soll, können wir einen Reihenansatz für die neuen Eigenzustände wählen.

$$|\tilde{\phi}_n\rangle = |\phi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\phi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\phi_n^{(2)}\rangle + \dots$$

nicht normiert:

$$|\phi_n\rangle = \frac{|\tilde{\phi}_n\rangle}{\| |\tilde{\phi}_n\rangle \|}$$

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots$$

Einsetzen von  $|\tilde{\phi}\rangle$  und  $E_n$  in zeitunabhängige Schrödingergleichung:

$$\begin{aligned} & (\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1) (|\phi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\phi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\phi_n^{(2)}\rangle + \dots) \\ &= (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots) (|\phi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\phi_n^{(1)}\rangle + \dots) \end{aligned}$$

wobei gilt das  $\hat{H}_0$  und  $\hat{H}_1$  auf  $|\phi_n^{(n)}\rangle$  wirken wie folgt:

$$\hat{H}_0 \text{ auf } |\phi_n^{(1)}\rangle, \dots, \hat{H}_0 \text{ auf } \lambda^2, \dots, \hat{H}_1 \text{ auf } |\phi_n^{(0)}\rangle, \dots, \hat{H}_1 \text{ auf } |\phi_n^{(1)}\rangle$$

und:

$$E_n^{(0)} \text{ auf } |\phi_n^{(1)}\rangle, \dots, \lambda \text{ auf } |\phi_n^{(1)}\rangle, \dots, \lambda^2 \text{ auf } |\phi_n^{(0)}\rangle$$

Wir sortieren nun nach Potenzen von  $\lambda$ :

$$\underline{\lambda^0}: \quad (\hat{H}_0 - E_n^{(0)}) |\phi_n^{(0)}\rangle = 0 \checkmark \rightarrow \text{gelöst, ungestörtes Problem} \quad (46)$$

$$\underline{\lambda^1}: \quad (\hat{H}_0 - E_n^{(0)}) |\phi_n^{(1)}\rangle = -(\hat{H}_1 - E_n^{(1)}) |\phi_n^{(0)}\rangle \quad (47)$$

$$\underline{\lambda^2}: \quad (\hat{H}_0 - E_n^{(0)}) |\phi_n^{(2)}\rangle = -(\hat{H}_1 - E_n^{(1)}) |\phi_n^{(1)}\rangle + \Delta E_n^{(2)} |\phi_n^{(0)}\rangle \quad (48)$$



### 10.1.1 1. Ordnung Störungstheorie

- multipliziere Gleichung 47 mit  $\langle \phi_n^{(0)} |$  :

$$\underbrace{\langle \phi_n^{(0)} | (\hat{H}_0 - \hat{E}_n^{(0)}) | \phi_n^{(1)} \rangle}_{=0} = -\langle \phi_n^{(0)} | (\hat{H}_1 - E_n^{(1)}) | \phi_n^{(0)} \rangle$$

$$= -\langle \phi_n^{(0)} | \hat{H}_1 | \phi_n^{(0)} \rangle + E_n^{(1)}$$

daraus folgt schließlich:

$$\boxed{E_n^{(1)} = \langle \phi_n^{(0)} | \hat{H}_1 | \phi_n^{(0)} \rangle} \quad (49)$$

die erste Energiekorrektur ist also der Erwartungswert des Störoperators  $\hat{H}_1$  im Eigenzustand des ungestörten Hamiltonoperators  $\hat{H}_0$ .

- multipliziere nun Gleichung (47) mit  $\langle \phi_m^{(0)} |$  wobei  $m \neq n$  gilt

$$\langle \phi_m^{(0)} | (\hat{H}_0 - E_n^{(0)}) | \phi_n^{(1)} \rangle = -\langle \phi_m^{(0)} | (\hat{H}_1 - E_n^{(1)}) | \phi_n^{(0)} \rangle$$

$$\underbrace{(E_m^{(0)} - E_n^{(0)})}_{\neq 0} \langle \phi_m^{(0)} | \phi_n^{(1)} \rangle = -\langle \phi_m^{(0)} | \hat{H}_1 | \phi_n^{(0)} \rangle$$

da keine Entartung

Es gilt dabei  $\langle \phi_m^{(0)} | \phi_n^{(0)} \rangle = 0$ , somit gilt insgesamt:

$$\boxed{\langle \phi_m^{(0)} | \phi_n^{(1)} \rangle = \frac{\langle \phi_m^{(0)} | \hat{H}_1 | \phi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad \forall m \neq n} \quad (50)$$

Mit diesen Koeffizienten bietet sich natürlich eine Entwicklung in dieser Basis an, mit der wir die erste Korrektur zum Eigenzustand darstellen können:

$$\Rightarrow |\phi_n^{(1)}\rangle = \underbrace{\sum_m |\phi_m^{(0)}\rangle \langle \phi_m^{(0)} | \phi_n^{(1)} \rangle}_{=1} \quad (51)$$

hier ist die Voraussetzung, dass gilt:  $m \neq n$  ausreichend, d.h. es gilt oBdA  $\langle \phi_n^{(1)} | \phi_n^{(0)} \rangle = 0$ , da  $|\tilde{\phi}_n\rangle$  bereits  $|\phi_n^{(0)}\rangle$  enthält.

$$\boxed{|\phi_n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \phi_m^{(0)} | \hat{H}_1 | \phi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |\phi_m^{(0)}\rangle} \quad (52)$$

- Da diese Summe über  $m \neq n$  geht sehen wir, dass die erste Korrektur zum

Eigenzustand proportional zu den nicht diagonalen Matrixelementen des Hamiltons ist.

- Korrektur wird groß, falls gilt:  $E_n^{(0)} \approx E_m^{(0)}$

### 10.1.2 2. Ordnung Störungstheorie

- Multiplikation von Gleichung (48) mit  $\langle \phi_n^{(0)} |$

$$\underbrace{\langle \phi_n^{(0)} | (\hat{H}_0 - E_n^{(0)}) | \phi_n^{(2)} \rangle}_{=0} = -\langle \phi_n^{(0)} | (\hat{H}_1 - E_n^{(1)}) | \phi_n^{(1)} \rangle + E_n^{(2)}$$

Durch Umstellen und Einsetzen der Relation für die erste Korrektur des Zustandes 52 erhält man:

mit:

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \phi_n^{(0)} | \hat{H}_1 | \phi_n^{(0)} \rangle \langle \phi_m^{(0)} | \hat{H}_1 | \phi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \phi_m^{(0)} | \hat{H}_1 | \phi_n^{(0)} \rangle|^2}{\underbrace{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}_{\substack{\text{Falls } E_n \text{ kleinste Energie} \\ \text{Nenner negativ } < 0}}}$$

Da der Zähler nur positiv oder Null sein kann sehen wir, dass der Grundzustand durch eine kleine Störung in jedem Fall abgesenkt wird: Da  $E_n(0)$  dann die niedrigstmögliche Energie ist, wird jeder Korrekturterm negativ.

**Beispiel: (1D anharmonischer Oszillator)**

$$\hat{H} = \underbrace{\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega_0^2 \hat{x}^2}_{\hat{H}_0} + \alpha \cdot \frac{m^2\omega_0^2}{\hbar} \hat{x}^4$$

$$\hat{H}_0 = \hbar\omega \left( \hat{a} + \hat{A} + \frac{1}{2} \right) \quad \hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$$

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \quad \hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_1 &= \alpha \cdot \frac{\hbar\omega_0}{4} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^4 \\ &= \alpha \cdot \frac{\hbar\omega}{4} (\hat{a}^4 + \hat{a}^{\dagger 4} + \hat{a}^2 \hat{a}^{\dagger 2} + 4\hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a}^\dagger \hat{a} + 4\hat{a}^\dagger \hat{a} + 2\hat{a}^\dagger \hat{a}^3 + \dots + 1) \end{aligned}$$

Wir wollen nun  $\langle n | \hat{H}_1 | n \rangle$  auswerten, dabei bleiben nur Beiträge von Termen mit **gleicher Anzahl von  $\hat{a}$  und  $\hat{a}^\dagger$**  existent.

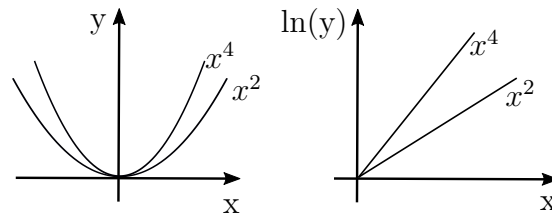
$$\Rightarrow \underline{\underline{E_n^{(1)} = \alpha \cdot \frac{3}{4} \hbar \omega_0 (2n(n+1) + 1)}} \quad (53)$$

Wann war die Störungstheorie nun gut?

Sie war gut, wenn gilt:  $E_n^{(1)} < |E_n^{(0)} - E_{n+1}^{(0)}|$ , also wenn die Energie höherer Ordnung zur Energie nur kleine Differenzen aufweist.

$\Rightarrow$  im Allgemeinen gilt dies (leider) nicht:

So zu Beispiel beim harmonischen Oszillator: Die Eigenzustände sind äquidistant, die Differenz im Nenner der Korrekturen bleiben also gleich groß und der Bruch konvergiert nie gegen Null. Im Zweifel muss in Betracht gezogen werden, dass die Annahme kleiner Abweichung nicht mehr gerechtfertigt und daher die Reihenentwicklung nach  $\lambda$  ungenügend ist.



## 10.2 Zeitunabhängige Störungstheorie entarteter Zustände

$$\langle \phi_m^{(0)} | \phi_n^{(1)} \rangle = \frac{\langle \phi_m^{(0)} | \hat{H}_1 | \phi_n^{(0)} \rangle}{\underbrace{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}_{\text{wann nicht 0?}}} \rightarrow \infty \quad \text{!}$$

**Bestimme Entartungsgrad:**

$$\{|\phi_{n,\alpha}^0\rangle\} \text{ mit: } \alpha = 1, 2, \dots, q \quad (54)$$

seien alle Eigenzustände von  $\hat{H}_0$  zum Eigenwert  $E_n^{(0)}$ , wie beheben wir nun das Problem, dass  $E_n^{(0)} - E_m^{(0)} = 0$  ist?

$\Rightarrow$  Es gibt **kein Problem**, falls gleichzeitig auch:  $\langle \phi_m^{(0)} | \hat{H}_1 | \phi_n^{(0)} \rangle = 0$  ist.

Wir suchen also nun nach einer Basis:

$$|\psi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle \longleftrightarrow |\phi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle$$

so dass:

$$\langle \psi_{n,\alpha}^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_{n,\beta}^{(0)} \rangle \sim \delta_{\alpha,\beta} \quad (\text{Diagonalisierungsproblem})$$

d.h.:  $\{|\psi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle\}$  diagonalisiert  $\hat{H}_1$  im Unterraum zur Energie  $E_n^{(0)}$  (Dass diese Diagonalisierung möglich ist liegt daran, dass  $H = H_0 + H_1$  und  $H=0$  selbstadjungiert sind und damit  $H_1$  ebenfalls)

Man finde eine Basis:

$$\langle \psi_{n,\alpha}^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_{n,\beta}^{(0)} \rangle = \delta_{\alpha,\beta} \langle \psi_{n,\alpha}^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_{n,\alpha}^{(0)} \rangle$$

Ansatz:

$$\begin{aligned} |\tilde{\psi}_{n,\alpha}\rangle &= |\psi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle + \lambda |\psi_{n,\alpha}^{(1)}\rangle + \dots \\ E_{n,\alpha} &= E_n^{(0)} + \lambda E_{n,\alpha}^{(1)} \end{aligned}$$

Einsetzen in stationäre Schrödingergleichung liefert:

$$\underline{\lambda^0}: \quad (\hat{H}_0 - E_n^{(0)}) |\psi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle = 0 \quad \checkmark \quad \text{gelöst} \quad (55)$$

$$\underline{\lambda^1}: \quad (\hat{H}_0 - E_n^{(0)}) |\psi_{n,\alpha}^{(1)}\rangle = -(\hat{H}_1 - E_{n,\alpha}^{(1)}) |\psi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle \quad (56)$$

mit  $\langle \psi_{n,\beta}^{(0)} | \cdot$ . Gleichung (56) und da  $|\psi_{n,\beta}^{(0)}\rangle$  eine ONB folgt daraus:

$$0 = -\langle \psi_{n,\beta}^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_{n,\alpha}^{(0)} \rangle - \delta_{\alpha,\beta} E_{n,\alpha}^{(1)}$$

$$\boxed{\Rightarrow E_{n,\alpha}^{(1)} = \langle \psi_{n,\alpha}^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_{n,\alpha}^{(0)} \rangle} \quad (57)$$

- Korrekturen geben in der Regel  $q$  verschiedene Werte  $\alpha = 1, 2, \dots, q$ . Daraus folgt eine (teilweise) Aufhebung der Entartung.

## 22. Vorlesung Wiederholung: (Zeitunabhängige Störungstheorie entarteter Zustände)

**geg:**  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1$  mit  $\lambda$  formaler Parameter, klein. Wir wissen die Lösung des ungestörten Problems:

$$\hat{H}_0 |\phi_{m,\alpha}^{(0)}\rangle = E_m^{(0)} \quad E_m^{(0)} \neq E_{m'}^{(0)} \text{ mit } m \neq m'$$

Wir müssen dabei beachten, dass für  $\alpha$  (Index für die verschiedenen Zustände)  $\alpha = 1, \dots, q$  gilt. Im nicht entarteten Fall, gilt also:  $q = 1$ . Ein Reihenansatz liefert:

$$\begin{aligned} E_m &= E_m^{(0)} + \lambda E_m^{(1)} + \lambda^2 E_m^{(2)} \dots \\ |\phi_m\rangle &= |\phi_m^{(0)}\rangle + \lambda |\phi_m^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\phi_m^{(2)}\rangle + \dots \end{aligned} \quad \text{nicht normierter Zstd.}$$

OBdA ist anzunehmen, dass gilt:

$$\begin{aligned} \langle \phi_m^{(0)} | \phi_m^{(1)} \rangle &= 0 \\ \Rightarrow |\phi_m^{(1)}\rangle &= \sum_{n \neq m} c_n^{(m)} |\phi_n^{(0)}\rangle & c_n^{(m)} &= \frac{\langle \phi_n^{(0)} | \hat{H}_1 | \phi_m^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \\ E_n^{(1)} &= \langle \phi_n^{(0)} | \hat{H}_1 | \phi_n^{(0)} \rangle \\ E_n^{(2)} &= \sum_{n \neq m} \frac{\langle \phi_n^{(0)} | \hat{H}_1 | \phi_m^{(0)} \rangle \langle \phi_m^{(0)} | \hat{H}_1 | \phi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \\ &\vdots \end{aligned}$$

**Mit Entartung:** d.h.  $q > 1$ , hier ist:

$$\frac{\langle \phi_{n,\alpha}^{(0)} | \hat{H}_1 | \phi_{n,\beta}^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_n^{(0)}} = \infty \quad \text{Problem!}$$

Obwohl  $|\phi_{n,\beta}^{(0)}\rangle \neq |\phi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle$ , das heißt hier gibt es ein Problem!

### Ende Wiederholung

**Lösung:** alle Zustände  $\{|\phi_{m,\alpha}^{(0)}\rangle\}$  mit  $\alpha = 1, \dots, q$  bilden  $q$  – dim Unterraum von Eigenzuständen zum selben Eigenwert von  $\hat{H}_0 : E_m^{(0)}$

- Jede Linearkombination aus den  $\{|\phi_{m,\alpha}^{(0)}\rangle\}$  ist wiederum ein Eigenzustand von  $\hat{H}_0$  zum Eigenwert  $E_m^{(0)}$  d.h. wir dürfen:

$$|\psi_{m,\alpha}^{(0)}\rangle = U_{\alpha,\beta} |\phi_{m,\beta}^{(0)}\rangle$$

setzen. mit  $U$  unitäre  $q \times q$  Matrix

Jetzt wählen wir  $U_{\alpha,\beta}$  bzw.  $\hat{U}$  so, dass:

$$\langle \psi_{m,\alpha}^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_{m,\beta}^{(0)} \rangle \stackrel{!}{=} \delta_{\alpha,\beta} \underbrace{\langle \psi_{m,\alpha}^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_{m,\alpha}^{(0)} \rangle}_{\substack{\text{Eigenwerte von } \hat{H}_1 \\ \text{in } \{|\phi_{m,\alpha}^{(0)}\rangle\}}}$$

Das heißt, H wird durch U diagonalisiert.

Jetzt:

$$c_{n,\alpha}^{m,\beta} = \begin{cases} \frac{\langle \psi_{n,\alpha}^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_{m,\beta}^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} & \text{für } n \neq m \\ 0 & \text{für } n = m \text{ und } \alpha \neq \beta \\ 0 & \text{für } n = m \text{ und } \alpha = \beta \end{cases}$$

$$\boxed{E_{n,\alpha} = E_n^{(0)} + \langle \psi_{n,\alpha}^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_{n,\alpha}^{(0)} \rangle} \quad (58)$$

wobei  $E_n^{(0)}$  q-Fach entartet ist und  $\hat{H}_1$  im Allgemeinen von  $\alpha$  abhängt, d.h. dass die Entartung (teilweise) aufgehoben wird.

$$\Delta E_{n,\alpha} = E_{n,\alpha} - E_n^{(0)} = \underbrace{\langle \psi_{n,\alpha}^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_{n,\alpha}^{(0)} \rangle}_{\substack{\text{Eigenwerte der} \\ q \times q \text{ Matrix}}} \quad (\text{Korrekturen})$$

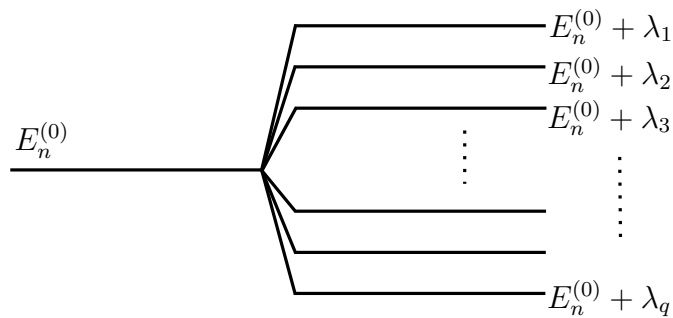
$$\boxed{\det [\langle \phi_{n,\alpha}^{(0)} | \hat{H}_1 | \phi_{m,\beta}^{(0)} \rangle - \lambda \delta_{\alpha,\beta}] = 0} \quad \text{Sekulargleichung} \quad (59)$$

Zum Finden der Eigenwerte errechnen wir folgende Determinante:

$\lambda \equiv$  Eigenwerte

$$\det \begin{pmatrix} H_1^{11} - \lambda & H_1^{12} & H_1^{13} & \dots & H_1^{1q} \\ H_1^{21} & H_1^{22} - \lambda & H_1^{23} & \dots & H_1^{2q} \\ \vdots & & \ddots & & \vdots \\ H_1^{q1} & \dots & & \dots & H_1^{qq} - \lambda \end{pmatrix} = 0$$

Diese Gleichung ist eine algebraische Gleichung q-ter Ordnung mit q Lösungen:  $\lambda_1 \dots \lambda_q$



im Allgemeinen Aufhebung der Entartung, falls wir Glück haben sind alle  $\lambda_q$  verschieden  $\Rightarrow$  Entartung vollständig aufgehoben, höhere Ordnung wie im ungestörten Fall.

### Beispiel: (linearer Stark-Effekt im H-Atom für $n=2$ )

Der Stark-Effekt ist das elektrische Analogon zum Zeeman-Effekt und bewirkt ebenfalls eine Aufspaltung der Energieniveaus bei äußerem elektrischen Feld.

ohne Schwerpunkt:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \underbrace{e \cdot \vec{E} \cdot \hat{\vec{r}}}_{=\hat{H}_1} \quad \vec{E} = E \cdot \vec{e}_z$$

Dipolmoment:  $-e \cdot \hat{\vec{r}} = \hat{\vec{d}}$

Ohne Spin:

$$\hat{H}_0 |n, l, m\rangle = E_n |n, l, m\rangle \quad \text{Es gibt Entartung!}$$

Mit  $n$ =Hauptquantenzahl,  $l$ =Gesamtdrehimpuls (da ohne Spin),  $m$ = Drehimpuls in z-Richtung

$$E_n = -\frac{e^2}{2a_0} \cdot \frac{1}{n^2}$$

Ortsdarstellung in Kugelkoordinaten:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - e E r \cos(\vartheta)$$

Bei  $n = 1 \rightarrow$  Trivial, da  $l = n - 1 = 0 \Rightarrow$  keine Entartung!

$n = 2$  gilt:

$$\psi_{2,0,0} = \frac{1}{\sqrt{2a_0^3}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}} Y_0^0(\vartheta, \varphi)$$

$$\psi_{2,1,m} = \frac{1}{\sqrt{24a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} Y_1^m(\vartheta, \varphi)$$

Notation:

$$|1\rangle := |2, 0, 0\rangle \quad |2\rangle := |2, 1, 0\rangle \quad |3\rangle := |2, 1, 1\rangle \quad |4\rangle := |2, 1, -1\rangle$$

Matrizelemente von  $\hat{H}_1$  in  $\{|1\rangle, \dots, |4\rangle\}$

$$\langle i | H_1 | i \rangle \sim \int_0^\pi \underbrace{d\vartheta \sin(\vartheta)}_{\text{Integral}} \underbrace{\cos(\vartheta)}_{H_1} |Y_l^m|^2 = 0$$

außerdem:

$$\begin{aligned} \langle n, l, m | \hat{H}_1 | n, l', m' \rangle &\sim \int_0^{2\pi} d\varphi \ y_l^{m*} y_{l'}^{m'} \\ &\sim \int_0^{2\pi} d\varphi \ e^{-i(m-m')\varphi} \sim \delta_{mm'} \end{aligned}$$

Einzig verbleibende Matrizelemente sind:

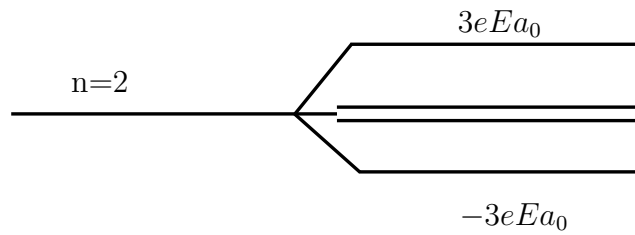
$$\langle 1 | \hat{H}_1 | 2 \rangle = \langle 2 | \hat{H}_1 | 1 \rangle = -3e \cdot E \cdot a_0$$

**Sekulargleichung:**

$$\det \begin{pmatrix} -\lambda & -3eEa_0 & 0 & 0 \\ -3eEa_0 & -\lambda & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\lambda \end{pmatrix} = \lambda^2 (\lambda^2 - (3eEa_0)^2) \stackrel{!}{=} 0 \quad (60)$$

**Eigenwerte:**  $\lambda_{1,2} = 0 \ \lambda_{\pm} = \pm 3eEa_0$





Abschließend wollen wir uns noch einmal die Frage stellen, in welchen Fällen die Störungstheorie brauchbare Ergebnisse erzielen wird.

Energiekorrekturen müssen mit steigender Ordnung kleiner werden, die Reihe der Korrekturterme muss konvergieren. Zudem müssen die Energiekorrekturen kleiner als die Differenz zweier ungestörter Eigenenergien sein.

Ein weiteres Verfahren wäre:

## 10.3 Ritzsches Variationsverfahren

Die Störungstheorie setzt die Kenntnis der Lösung des ungestörten Problems voraus. Was ist wenn wir keine Kenntnis über die Lösung des ungestörten Problems haben?

Wähle eine diskrete ONB  $\{|n\rangle\}$  mit  $n = 0, 1, 2, \dots$

Satz: Falls  $\hat{H}$  von unten beschränkt

$$\frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \geq E_0 \quad (61)$$

Wobei  $E_0$  kleinster Eigenwert von  $\hat{H}_1$  ist.

$|\psi\rangle$  ist **beliebiger** unnormierter Zustand  $\neq |0\rangle$

**Beweis:**

$$|\psi\rangle = \sum_n \langle n | \psi \rangle |n\rangle$$

$$\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \sum_{n,m} \underbrace{\langle n | \hat{H} | m \rangle}_{E_n \delta_{nm}} \langle m | \psi \rangle \langle \psi | n \rangle$$

sei nun  $|n\rangle$  eine unbekannte Eigenbasis von  $\hat{H}$

$$= \sum_n E_n |\langle n | \psi \rangle|^2 \geq E_0 \underbrace{\sum |\langle n | \psi \rangle|^2}_{\langle \psi | \psi \rangle}$$

Daraus folgt das:

$$\frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \geq E_0$$

□

Ansatz für Näherungslösung:

$$|\psi\rangle = |\tilde{\psi}(\alpha, \beta, \gamma, \dots)\rangle \quad \alpha, \beta, \gamma, \dots \in \mathbb{C} \text{ endlich (überschaubar viele) } \odot$$

$$\hat{H}(\alpha, \beta, \gamma, \dots) := \frac{\langle \tilde{\psi} | \hat{H} | \tilde{\psi} \rangle}{\langle \tilde{\psi} | \tilde{\psi} \rangle}$$

Minimum von  $\hat{H}$  bei Variation der Parameter  $\alpha, \beta, \gamma, \dots$  liefert mehr oder weniger gute obere Schranke für  $E_0$

$$\frac{\partial \bar{H}}{\partial \alpha} = \frac{\partial \bar{H}}{\partial \beta} = \dots \stackrel{!}{=} 0 \rightsquigarrow \quad \alpha = \alpha_0$$

$$\beta = \beta_0$$

$$\gamma = \gamma_0$$

**Bemerkung:**  $\alpha, \beta, \gamma, \dots$  komplexe Zahlen das heißt wir müssen sowohl Realteil  $Re(\alpha)$  also auch Imaginärteil  $Im(\alpha)$  betrachten:

$$\Rightarrow \frac{\partial \bar{H}}{\partial Re(\alpha)} = \frac{\partial \bar{H}}{\partial Im(\alpha)} = 0 \quad \text{etc.}$$

Daraus folgt für uns:

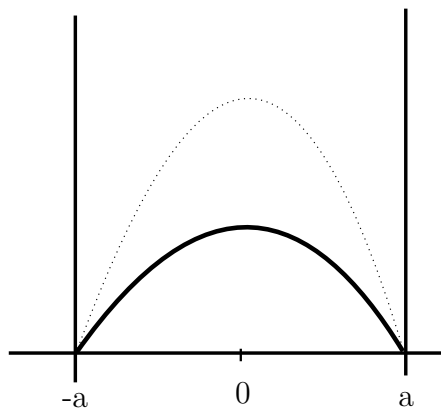
$$\frac{|\tilde{\psi}(\alpha_0, \beta_0, \gamma_0, \dots)\rangle}{\|\tilde{\psi}\|} \approx |E_0\rangle \quad (62)$$

$$E_0 \approx \bar{H}(\alpha_0, \beta_0, \gamma_0, \dots) \quad (63)$$

streng genommen gilt:  $E_0 \leq \bar{H}(\alpha_0, \beta, \gamma, \dots)$

**Beispiel (1-D-Box):**

$$V(x) = \begin{cases} 0 & |x| < a \\ \infty & |x| \geq a \end{cases}$$



- exakte Lösung:

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left(\frac{\pi x}{2a}\right)$$

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\pi^2}{a^2}$$

- Variationsansatz:

$$\psi_\lambda(x) = a^\lambda - |x|^\lambda \quad |x| \leq a$$

diese erfüllen die Randbedingungen  $\psi_\Omega(\pm a) = 0$

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} \\ \bar{H}(\lambda) &= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\int_{-a}^a (a^\lambda - |x|^\lambda) dx \frac{d^2}{dx^2} (a^\lambda - |x|^\lambda)}{\int_{-a}^a (a^\lambda - |x|^\lambda)^2 dx} \\ &= \dots = \frac{(\lambda + 1) \cdot (2\lambda + 1)}{2\lambda - 1} \cdot \frac{\hbar^2}{4ma^2}\end{aligned}$$

Nun setzen wir die Ableitung von  $\bar{H} = 0$  um das Minimum zu erhalten:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \bar{H}(\lambda)}{\partial \lambda} = 0 &\Rightarrow \dots \Rightarrow \lambda_0 = \frac{1 + \sqrt{6}}{2} \approx 1,72 \\ \bar{H}(\lambda = \lambda_0) &= \dots = \left( \frac{5 + 2\sqrt{6}}{\pi^2} \right) E_0 \approx 1,00298 E_0\end{aligned}$$

Damit ist das Ergebnis recht gut mit einer Abweichung von gerade mal 0,2%. Das Ergebnis sollte größer 1 sein, da man nicht unterhalb der Schranke ( $E_0$ , Grundzustand) ein sinnvolles Ergebnis erhalten kann.

### 10.3.1 endlicher Superpositionsansatz

$$\begin{aligned}|\psi\rangle &= \sum_{n=1}^N \alpha_n |\phi_n\rangle && \{|\phi_n\rangle\} \text{ „geeignete Basis“} \\ \Rightarrow \bar{H} &= \langle \psi(\alpha_1, \dots, \alpha_N) | \hat{H} | \psi(\alpha_1, \dots, \alpha_N) \rangle\end{aligned}$$

$$\frac{\partial \bar{H}}{\partial \alpha_n} = 0 \quad \frac{\partial \bar{H}}{\partial \alpha_n^*} = 0 \quad \text{äquivalent zu } \text{Re}(\alpha_n), \text{Im}(\alpha_n)$$

$$\bar{H} = \frac{\sum_{n,m} \alpha_n^* \alpha_m H_{nm}}{\sum_{n,m} \alpha_n^* \alpha_m \langle \phi_n | \phi_m \rangle} \bigg|_{\min} \approx E_0$$

Wenn nun aber  $\frac{\partial \bar{H}}{\partial \alpha_n^*} = 0 \Rightarrow$  wann gibt es dann eine Lösung?

$$\sum_m \left( \bar{H}_{nm} - E_0 \langle \phi_n | \phi_m \rangle \right) \alpha_m = 0$$

$\Rightarrow$  lineares Gleichungssystem in  $\alpha_m$  ist homogen

$$\det \left( \bar{H}_{nm} - E_0 \underbrace{\langle \phi_n | \phi_m \rangle}_{\delta_{nm}} \right) = 0$$

Der kleinste Eigenwert ist die beste Schranke für die Grundzustandsenergie.

## 23. Vorlesung

### 10.4 Adiabatische Näherung, Berry Phase

Bisher hatten wir immer einen zeitunabhängigen Hamiltonoperator betrachtet. Jetzt werden wir zu einem **zeitabhängigen** Hamiltonoperator übergehen wobei hier nur eine „langsame“ Abhängigkeit bestehen soll.

Wir betrachten:

$$\hat{H}(R), \quad R = R(t) : \quad \text{Parameter des Hamiltonoperator}$$

**Instantane Eigenzustände/Eigenwerte:**

$$\hat{H}(R(t)) |n(R(t))\rangle = E_n(R(t)) |n(R(t))\rangle \quad (64)$$

**Adiabatisches Theorem:**

Falls  $R(t)$  hinreichend langsam von der Zeit  $t$  abhängig ist, wird ein anfänglich in einem instantanen Eigenzustand präpariertes System in diesem Zustand verbleiben.

Es gilt:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) e^{i\alpha_n(t)} |n(R(t))\rangle \quad (65)$$

mit

$$\alpha_n(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t d\tau \quad E_n(R(\tau)) \quad \text{dynamische Phase} \quad (66)$$

Einsetzen von 65 in Schrödingergleichung 64 liefert:

$$\begin{aligned}
 \hat{H}(R(t))|n(R(t))\rangle &= i\hbar \frac{d}{dt} |n(R(t))\rangle \\
 &= \sum_n \dot{c}_n(t) e^{i\alpha_n(t)} |n(R(t))\rangle + \underbrace{c_n(t) e^{i\alpha_n(t)} |\dot{n}(t)\rangle}_{-\frac{E_n(t)}{\hbar}} + i \underbrace{\dot{\alpha}_n(t)}_{-\frac{E_n(t)}{\hbar}} c_n(t) e^{i\alpha_n(t)} |n(t)\rangle \\
 &= -\frac{i}{\hbar} \sum_n c_n e^{i\alpha_n t} \underbrace{\hat{H} |n(t)\rangle}_{E_n(t)|n(t)\rangle} = 0
 \end{aligned}$$

Multipliziere von links mit  $\langle m(t)|$  (beachte, dass  $\langle m|n\rangle = \delta_{nm}$ ):

$$\dot{c}_m(t) e^{i\alpha_m(t)} + \sum_n c_n(t) e^{i\alpha_n(t)} \langle m, \dot{n} \rangle = 0 \quad |n\rangle = |n(t)\rangle$$

Was ist hier  $\langle m|\dot{n}\rangle$ ?

$$\underbrace{\frac{d}{dt} \hat{H}(t) |n(t)\rangle}_{E_n(t)|n(t)\rangle} = \left( \frac{d}{dt} \hat{H}(t) \right) |n(t)\rangle + \hat{H}(t) |\dot{n}(t)\rangle$$

durch multiplizieren  $\langle m|$  von links folgt:

$$\left\langle m \left| \frac{d}{dt} \hat{H}(t) |n(t)\rangle \right. \right\rangle = \left\langle m \left| \frac{d}{dt} \hat{H}(t) |n(t)\rangle \right. \right\rangle + E_m(t) \langle m | \dot{n} \rangle$$

( $m \neq n$ )

$$\begin{aligned}
 \underbrace{\dot{E}_n(t) \langle m | n \rangle}_0 + E_n(t) \langle m | \dot{n} \rangle &= \left\langle m \left| \frac{d}{dt} \hat{H}(t) |n\rangle \right. \right\rangle + E_m(t) \langle m | \dot{n} \rangle \\
 \Rightarrow \langle m | \dot{n} \rangle &= \frac{\langle m | \frac{d}{dt} \hat{H} | n \rangle}{E_n(t) - E_m(t)}
 \end{aligned}$$

$$\dot{c}_m(t) = - \sum_{n \neq m} c_n(t) e^{i(\alpha_n(t) - \alpha_m(t))} \frac{\langle m | \frac{d}{dt} \hat{H} | n \rangle}{E_n(t) - E_m(t)}$$

**Annahme:** Zum Zeitpunkt  $t = 0$  sei das System im instantanen Eigenzustand

$$c_n(0) = 1 \quad c_{m \neq n}(0) = 0$$

$$\forall m \neq n$$

$$\dot{c}_m|_{t=0} = e^{i(\alpha_n(t)-\alpha_m(t))} \frac{\langle m | \frac{d}{dt} \hat{H} | n \rangle}{E_n(t) - E_m(t)}$$

Annahme:  $E_n(t), \hat{H}(t)$  ist nur langsam von der Zeit abhängig

$$e^{i(\alpha_n(t)-\alpha_m(t))} \approx e^{i \frac{E_n - E_m}{\hbar} t}$$

$$(m \neq n)$$

$$c_m(\delta t) \approx -\frac{i\hbar \langle m | \frac{d}{dt} \hat{H} | n \rangle}{(E_n - E_m)^2} (e^{-i \frac{(E_m - E_n)}{\hbar} \delta t} - 1)$$

- falls  $|m\rangle \neq |n\rangle$  existieren mit  $E_n(t) = E_m(t)$

$$|c_m(t + \delta t)| \rightarrow \infty \quad \nexists$$

•

$$|c_m(t + \delta t)| \approx 0 \quad \Leftrightarrow \quad \left| \frac{\hbar \langle m | \frac{d}{dt} \hat{H} | n \rangle}{(E_m - E_n)^2} \right| \ll 1$$

„hinreichend langsam“ bzw. **adiabatisch Evolution** liegt vor falls für alle Eigenzustände  $|m\rangle \neq |n\rangle$  gilt:

$$\left| \left\langle m \left| \frac{d}{dt} \hat{H} \right| n \right\rangle \right| \ll \frac{(E_m - E_n)^2}{\hbar}$$

$\Rightarrow$  i.A. gibt es kein adiabatisches Verhalten bei entarteten Zuständen, es sei denn alle relevanten Matrixelemente ( $\langle m | \frac{d}{dt} \hat{H} | n \rangle = 0$ ) sind Null.

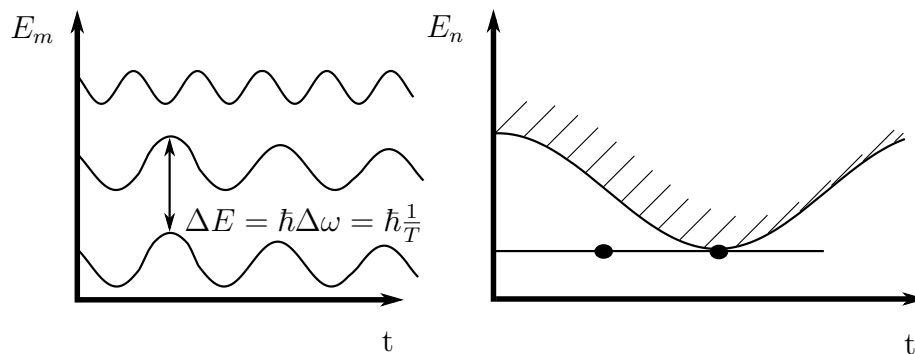


Abbildung 10.1: Adiabatische Phase ist in der linken Abbildung möglich, in der rechten nicht, da dort ein Kontinuum der Eigenenergien auftritt.

Adiabatische Zeitentwicklung führt neben der dynamischen Phase zu einer geometrischen- oder Berry-Phase:

im adiabatischen Limes gilt:

$$m \neq n$$

$$\begin{aligned} |c_m(t)| &= 0 & \text{und} & & c_{n'}(0) &= 1 \\ \Rightarrow & & |c_n(t)| &\stackrel{!}{=} 1 \end{aligned}$$

aber was passiert mit der Phase?

$$c_n(t) = \underbrace{|c_n(t)|}_1 e^{i\gamma_n(t)} \quad \dot{c}_n(t) = i\dot{\gamma}_n(t)c_n(t)$$

außerdem haben wir (von vorhin):

$$\sum_n \dot{n} e^{i\alpha_n(t)} |n\rangle + c_n e^{i\alpha_n(t)} |\dot{n}\rangle$$

durch multiplizieren mit  $\langle n|$  von links folgt:

$$\dot{c}_n = -c_n \langle n | \dot{n} \rangle \quad \text{da} \quad c_m(t) \equiv 0 \quad m \neq n$$

daraus folgt nun

$$\boxed{\dot{\gamma}_n(t) = i \left\langle n(t) \left| \frac{d}{dt} \right| n(t) \right\rangle}$$



und damit die **Berry-Phase**:

$$\gamma_n(t) = i \int_0^t d\tau \left\langle n(\tau) \left| \frac{d}{d\tau} \right| n(\tau) \right\rangle$$

Die Berry-Phase ist nicht von der Geschwindigkeit oder der Dynamik des Durchlaufs abhängig, im Gegensatz zur:  
Dynamischen Phase:

$$\alpha_n(t) = \frac{1}{\hbar} \int_0^t d\tau E_n(\tau), \quad |n(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau E_n(\tau)} e^{i \int_0^t d\tau \langle n(\tau) | \frac{d}{dt} | n(\tau) \rangle} |n(0)\rangle$$

$$\begin{aligned} \hat{H} \vec{R}(t) |n(t)\rangle &= |n(\vec{R}(t))\rangle \\ \dot{\gamma}_n(t) &= i \left\langle n(\vec{R}) \left| \nabla_{\vec{R}} \right| n(\vec{R}) \right\rangle \cdot \dot{\vec{R}}(t) \end{aligned}$$

Was ist die Änderung der Phase?

$$\Delta\gamma_n \equiv \gamma_n(T) - \gamma_n(0) = \int_0^T d\tau \dot{\gamma}_n(t) = i \int d\tau \vec{R} \left\langle n(\vec{R}) \left| \nabla_{\vec{R}} \right| n(R) \right\rangle$$

Betrachte periodisches System:

$$\begin{aligned} \vec{R}(T) &= \vec{R}(0) \\ \Rightarrow \Delta\gamma_n &= i \oint d\vec{R} \vec{R} \left\langle n(\vec{R}) \right| \end{aligned}$$

$\Delta\gamma_n$  hängt nur noch vom (geschlossenen) Pfad im Phasenraum ab, nicht mehr von der Geschwindigkeit des Durchlaufens des Weges! (**geometrische** Phase)

Frage: Wann ist  $\Delta\gamma_n \neq 0$ ?

Satz von Stokes:

$$\Delta\gamma_n = i \oint_C d\vec{R} \vec{R} \langle n | \nabla_R | n \rangle = i \iint_{s(c)} d\vec{S} \nabla_R \times (\langle n | \vec{R}_R | n \rangle)$$

$\Delta\gamma_n \neq 0$  falls endlicher Fluss durch Fläche

Definiere:

$$\vec{V}_n(\vec{R}) = \nabla_R \times (\langle n | \vec{R}_R | n \rangle)$$

daraus folgt:

$$\vec{V}_n(R) = \text{Im} \sum_{m \neq n} \frac{\langle n | \nabla_{\vec{R}} \hat{H} | m \rangle \times \langle m | \nabla_{\vec{R}} \hat{H} | n \rangle}{(E_m - E_n)^2}$$

Die Form dieser Gleichung erinnert an die des magnetischen Feldes; daher wird es üblicherweise als „Berry Magnetfeld“ oder „Berry-Curvature“ bezeichnet.

Treten Entartungspunkte auf, so:

$E_m = E_n \Rightarrow$  Monopole des effektiven Berry-Magnetfeldes.

Zusammenfassend lässt sich also sagen: Wenn sich Zustände im adiabatischen Limes befinden, so verbleiben diese dort und alle anderen Zustände konvergieren gegen null. Die Zustände sammeln zwei verschiedene Phasen auf, davon neu ist die Berry-Phase, die eine geometrische Phase ist.

# 11 Quantenmechanik von Systemen unterscheidbarer Teilchen

## 11.1 Tensorprodukt von Hilberträumen

$$\begin{array}{ll} \text{System 1 : } |\psi\rangle \in \mathcal{H}_1 & \Rightarrow \text{Zustand des Gesamtsystem} \\ \text{System 2 : } |\phi\rangle \in \mathcal{H}_2 & |\psi\rangle \otimes |\phi\rangle = |\psi\rangle|\phi\rangle \in \mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \end{array}$$

$\mathcal{H}$ : Raum aller Linearkombinationen  $\sum_n c_{nm}|\psi_n|c_n\rangle$

i)

$\mathcal{H}$  ist ein linearer Raum

ii)

Es gibt ein inneres Produkt  $\langle\chi_1|\chi_2\rangle = \langle\psi_1|\psi_2\rangle\langle\phi_1|\phi_2\rangle$

Sind  $\{|f_n\rangle\}$  und  $\{|g_n\rangle\}$  ONB in  $\mathcal{H}_1$  und in  $\mathcal{H}_2$  dann ist:

$$\{|f_n|g_n\rangle\} \quad \text{ONB in } \mathcal{H} \quad \dim(\mathcal{H}_1) = N_1 \quad \dim(\mathcal{H}_2) = N_2 \quad \dim(\mathcal{H}) = N_1 N_2$$

Also wächst die Dimension den Hilbertraums aus M Teilchen exponentiell mit M an

iii) Operatoren in  $\mathcal{H}$ :

$$\begin{array}{lll} \hat{A} \otimes \hat{B} & \hat{A} \text{ in } \mathcal{H}_1 & \hat{B} \text{ in } \mathcal{H}_2 \\ \langle \hat{A} \times \hat{B} | \chi \rangle = \hat{A} | \psi \rangle \otimes \hat{B} | \phi \rangle \end{array}$$

Jeder Vektor  $|\chi\rangle \in \mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  mit  $\dim(\mathcal{H}_1) = N_1$  und  $\dim(\mathcal{H}_2) = N_2$  lässt sich schreiben als:

$$|\chi\rangle = \sum_{i=1}^{\min(N_1, N_2)} \lambda_i |f_i\rangle |g_i\rangle \quad |f_i\rangle \in \mathcal{H}_1 \quad \text{und} \quad |g_i\rangle \in \mathcal{H}_2$$

**Beweis:** OBdA gelte  $N_1 \leq N_2$

$$\begin{aligned} \{|k\rangle_1\} & \text{ ONB in } \mathcal{H}_1 & \{|l\rangle_2\} & \text{ ONB in } \mathcal{H}_2 \\ \Rightarrow \{|k\rangle_1 |l\rangle_2\} & \text{ ist ONB in } \mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \end{aligned}$$

Es gilt stets:

$$|\chi\rangle = \sum_{k=1}^{N_1} \sum_{l=1}^{N_2} c_{kl} |k\rangle_1 |l\rangle_2 = \sum_{k=1}^{N_1} |k\rangle_1 \underbrace{\sum_{l=1}^{N_2} c_{kl} |l\rangle_2}_{\substack{\text{Superposition in } \mathcal{H}_2, \\ \text{abh. von } k, := \lambda_k |k\rangle_2}} = \sum_{k=1}^{N_1} \lambda_k |k\rangle_1 |l\rangle_2$$

## 24. Vorlesung

### 11.2 Separable und verschränkte Zustände

#### Gedankenexperiment von Einstein, Podolsky und Rosen (EPR) (1935)

##### Definition:

Ein quantenmechanischer Zustand  $|\psi\rangle$  von zwei Teilsystemen A und B mit  $\mathcal{H}_A$  und  $\mathcal{H}_B$  heißt **separabel**, falls es eine Darstellung der Form  $|\psi\rangle = |\phi_A\rangle |\phi_B\rangle$  (Schmidtzahl  $n = 1$ ) gibt. Andernfalls nennen wir  $|\psi\rangle$  **verschränkt** (Schmidtzahl  $n > 1$ ).

##### Beispiel: (2 Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen)

$$\sigma_z |\downarrow\rangle = -|\downarrow\rangle$$

$$\sigma_z |\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle$$

$$|\psi\rangle = |\uparrow\rangle_A |\downarrow\rangle_B \quad \text{seperabel}$$

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |\uparrow\rangle_A |\uparrow\rangle_B + |\downarrow\rangle_A |\downarrow\rangle_B \right) \quad \text{verschränkt}$$

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{4}} \left( |\uparrow\rangle_A |\uparrow\rangle_B + |\uparrow\rangle_A |\downarrow\rangle_B + |\downarrow\rangle_A |\uparrow\rangle_B + |\downarrow\rangle_A |\downarrow\rangle_B \right) \\ &= \left( \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle_A + |\downarrow\rangle_A) \right) \cdot \left( \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle_B + |\downarrow\rangle_B) \right) \quad \text{seperabel} \end{aligned}$$

Wir sehen bereits, dass verschränkt bedeutet, dass Information über System A auch in System B steckt.

$\Rightarrow$  Korrelation

Wir betrachten hier die Bell'sche Variante:

System aus 2 Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen:

$$|\text{EPR}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |\uparrow\rangle_A |\downarrow\rangle_B - |\downarrow\rangle_A |\uparrow\rangle_B \right)$$

**Behauptung:**

$|\text{EPR}\rangle$  ist Eigenzustand von  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$

$$\hat{S}_x = \hat{S}_x^A + \hat{S}_x^B \quad \hat{S}_y = \hat{S}_y^A + \hat{S}_y^B \quad \hat{S}_z = \hat{S}_z^A + \hat{S}_z^B$$

mit Eigenwert = 0

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \sigma_z \quad \text{etc.}$$

$$\sigma_x = |\downarrow\rangle$$

$$\sigma_x = |\uparrow\rangle$$

$$\begin{aligned} S_x |\text{EPR}\rangle &= (S_x^A + S_x^B) |\text{EPR}\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2} (\sigma_x^A + \sigma_x^B) |\text{EPR}\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2\sqrt{2}} \left( |\downarrow\rangle_A |\downarrow\rangle_B - |\uparrow\rangle_A |\uparrow\rangle_B + |\uparrow\rangle_A |\uparrow\rangle_B - |\downarrow\rangle_A |\downarrow\rangle_B \right) \\ &= 0 \end{aligned}$$

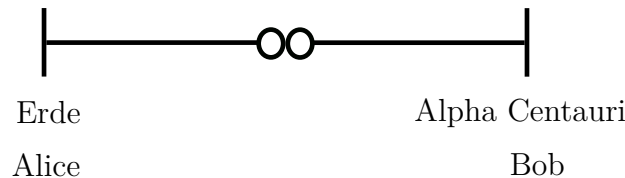
analog  $S_y, S_z$ .

d.h.:

$$\begin{aligned}
 |\text{EPR}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |m_z = \frac{1}{2}\rangle_A |m_z = -\frac{1}{2}\rangle_B - (|m_z = -\frac{1}{2}\rangle_A |m_z = \frac{1}{2}\rangle_B) \right) \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |m_x = \frac{1}{2}\rangle_A |m_x = -\frac{1}{2}\rangle_B - (|m_x = -\frac{1}{2}\rangle_A |m_x = \frac{1}{2}\rangle_B) \right) \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |m_y = \frac{1}{2}\rangle_A |m_y = -\frac{1}{2}\rangle_B - (|m_y = -\frac{1}{2}\rangle_A |m_y = \frac{1}{2}\rangle_B) \right)
 \end{aligned}$$

Also egal ob  $S_x, S_y$  oder  $S_z$ !

Die Tatsache, dass Messung von  $S_z$  bei A instantan den Wert von  $S_z$  bei B festlegt wird häufig als Problem der Quantenmechanik beschrieben. Dem ist jedoch nicht so, da die dem zugrundeliegende Korrelation auch im klassischen existiert. Das Problem entsteht, weil  $|\text{EPR}\rangle$  Eigenzustand von  $S_x, S_y$  und  $S_z$  ist und diese drei Operatoren nicht kommutieren.



$$\begin{aligned}
 |\uparrow\rangle_A |\downarrow\rangle_B - |\downarrow\rangle_A |\uparrow\rangle_B &\Rightarrow \text{Messung von } \sigma_z^A \text{ liefert } \begin{matrix} +1 \\ -1 \end{matrix} \\
 &\Rightarrow \text{Messung von } \sigma_z^B \text{ liefert } \begin{matrix} -1 \\ +1 \end{matrix}
 \end{aligned}$$

### Problem:

Messung von  $\sigma_x, \sigma_y$  oder  $\sigma_z$  bei A legt instantan den Wert von  $\sigma_x, \sigma_y$  bzw.  $\sigma_z$  bei B fest!

Folgende Konsequenzen wären im Stande, diesen Problem zu lösen:

- (i) Die Quantenmechanik ist nicht lokal. („Fernwirkung“?)
- (ii) Die Quantenmechanik ist unvollständig, dh. es existieren verborgene Parameter die jede Messung festlegt, aber unbekannt sind.

Wir werden sehen, dass (ii) falsch ist (zumindest im Sinne von verborgenen Parameter, die lokal sind).

## 11.3 Bellsche Ungleichungen

Können wir im Prinzip feststellen ob eine Theorie mit verborgenen Parameter richtig oder falsch ist?

**Antwort:**

- Im allgemeinen: Nein!
- Falls die verborgenen Parameter lokal sind Ja!

**J.Bell (1964)**

Betrachte die Spin-Korrelation und seinen  $\vec{a}, \vec{b}$  Einheitsvektoren

$$P(\vec{a}, \vec{b}) = \langle \vec{a} \cdot \sigma_A \cdot \vec{b} \cdot \sigma_B \rangle \quad P^{\text{EPR}}(\vec{a}, \vec{b}) = -\vec{a} \cdot \vec{b}$$

Annahme:  $\exists$  lokale verborgene Parameter  $\lambda$  mit Wahrscheinlichkeitsverteilung  $p(\lambda)$

$$P(\vec{a}, \vec{b}) = \int d\lambda \, p(\lambda) A(\vec{a}, \lambda) B(\vec{b}, \lambda)$$

A ist hier der Wert des Spins bei A bei einer Messung in Richtung  $\vec{a}$

$$\begin{aligned} |P(\vec{a}, \vec{b}) - P^{\text{EPR}}(\vec{a}, \vec{b})| &= \left| \int d\lambda \, p(\lambda) \cdot \left\{ [A(\vec{a}) B(\vec{b}) - A(\vec{a}) B(\vec{b})] \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \pm \underbrace{[A(\vec{a}) B(\vec{b}) A(\vec{a}') B(\vec{b}') - A(\vec{a}) B(\vec{b}) A(\vec{a}') B(\vec{b}')]_0}_{0} \right\} \right| \\ &= \left| \int d\lambda \, p(\lambda) \cdot A(\vec{a}) B(\vec{b}) [1 \pm A(\vec{a}') B(\vec{b}')] \right. \\ &\quad \left. - \int d\lambda \, p(\lambda) \cdot A(\vec{a}) B(\vec{b}') [1 \pm A(\vec{a}') B(\vec{b})] \right| \end{aligned}$$

Da  $|A| \leq 1$  und  $|B| \leq 1$  folgt:

$$\begin{aligned} &\leq \int d\lambda \, p(\lambda) \cdot |A(\vec{a}) B(\vec{b})| \cdot |[1 \pm A(\vec{a}') B(\vec{b}')]| \\ &\quad + \int d\lambda \, p(\lambda) \cdot |A(\vec{a}) B(\vec{b}')| \cdot |[1 \pm A(\vec{a}') B(\vec{b})]| \\ &\leq 2 \pm [P(\vec{a}', \vec{b}') + P(\vec{a}', \vec{b})] \end{aligned}$$

$$\boxed{S \equiv |P(\vec{a}, \vec{b}) - P(\vec{a}, \vec{b}')| + P(\vec{a}', \vec{b}') + P(\vec{a}', \vec{b}) \leq 2}$$

Bellsche Ungleichung für klassische Theorie mit verborgenen Parameter

**wähle speziell:**  $\vec{b} \equiv \vec{a}'$

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = \cos(\theta) \stackrel{!}{=} \vec{a}' \cdot \vec{b}'$$

$$|P(\theta) - P(2\theta)| + P(\theta) + P(0) \leq 2$$

$$\text{aber: } P^{\text{EPR}}(\theta) = -\cos(\theta)$$

$$\begin{aligned} |P^{\text{EPR}}(\theta) - P^{\text{EPR}}(2\theta)| + |P^{\text{EPR}}(\theta) + P^{\text{EPR}}(0)| &= |-\cos(\theta) + \cos(2\theta)| + |-\cos(\theta) - 1| \\ &= 2(2\cos(\theta) - \cos(2\theta)) \end{aligned}$$

Für  $\theta = \frac{\pi}{3}$  folgt:

$$= 2(1 - (-0,5)) \leq 2 \quad \nlessgtr$$

$$\boxed{\text{EPR Zustand verletzt die Bellsche Ungleichung!}}$$

experimenteller Nachweis: Clauser, Aspect,...

$\Rightarrow$  Bellsche Ungleichung ist verletzt!

$\Rightarrow$  Quantenmechanik ist im strengen Sinne **nicht** lokal!

Verschränkung erlaubt kein Informationstransport mit  $v > c$



Weiterhin kann man zeigen, dass die Bellschen Ungleichungen nur dann verletzt sind, wenn der Zustand verschränkt ist. Eine Verallgemeinerung der Ungleichungen ist damit ein Kriterium zur Überprüfung der Verschränktheit von Zuständen.

## 11.4 Quantenteleportation von Spin- $\frac{1}{2}$ -Zuständen

### No-Cloning-Theorem

Es existiert kein unitärer Operator der beliebige und **unbekannte** nichtorthogonale Zustände dupliziert.

$$\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}_1 \text{ und } |0\rangle \in \mathcal{H}_2 \text{ mit } \dim(\mathcal{H}_1) = \dim(\mathcal{H}_2)$$

$$\hat{U} |\psi\rangle |0\rangle = |\psi\rangle |\psi\rangle$$

### Beweis:

Seien  $|a\rangle, |b\rangle$  2 orthogonale Zustände und  $\hat{U}$  existiert

$$\hat{U}|a\rangle|0\rangle = |a\rangle|a\rangle$$

$$\hat{U}|b\rangle|0\rangle = |b\rangle|b\rangle$$

$$\begin{aligned} \hat{U} \frac{1}{\sqrt{2}} (|a\rangle + |b\rangle) |0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{U}|a\rangle|0\rangle + \hat{U}|b\rangle|0\rangle) \\ &= \frac{1}{2} (|a\rangle|a\rangle + |b\rangle|b\rangle) \\ &\neq \frac{1}{2} (|a\rangle + |b\rangle) \cdot (|a\rangle + |b\rangle) \end{aligned}$$

### Folgerung:

Ein unbekannter Quantenzustand kann durch eine Messung nicht vollständig bestimmt werden. Ansonsten wäre es möglich, die gesamte Information, die für eine Reproduktion des Zustandes nötig wäre, zu extrahieren und den Zustand daraus zu rekonstruieren.

### 25. Vorlesung Problem:

$$|\phi\rangle = \alpha |\uparrow\rangle + \beta |\downarrow\rangle$$

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$

$\alpha, \beta$  beliebig.

und System von  $A$  nach  $B$  schicken:

### 11.4.1 (B) Teleportation:



**Annahme:**  $A$  und  $B$  besitzen Bell-Zustand (im Folgenden keine Normierung)

$$|EPR\rangle = |\uparrow\rangle_A |\downarrow\rangle_B - |\downarrow\rangle_A |\uparrow\rangle_B$$

- habe  $A$  zusätzlich  $|\phi\rangle$  :

$$\begin{aligned} |\phi\rangle |EPR\rangle &= (\alpha |\uparrow\rangle + \beta |\downarrow\rangle) \cdot (|\uparrow\rangle_A |\downarrow\rangle_B - |\downarrow\rangle_A |\uparrow\rangle_B) \\ &= \left\{ \begin{aligned} &(|\uparrow\rangle_A |\uparrow\rangle_A + |\downarrow\rangle_A |\downarrow\rangle_A) \cdot (\alpha |\downarrow\rangle_B - \beta |\uparrow\rangle_B) \\ &+ (|\uparrow\rangle_A |\uparrow\rangle_A - |\downarrow\rangle_A |\downarrow\rangle_A) \cdot (\alpha |\downarrow\rangle_B + \beta |\uparrow\rangle_B) \\ &- (|\uparrow\rangle_A |\downarrow\rangle_A + |\downarrow\rangle_A |\uparrow\rangle_A) \cdot (\alpha |\uparrow\rangle_B - \beta |\downarrow\rangle_B) \\ &- (|\uparrow\rangle_A |\downarrow\rangle_A - |\downarrow\rangle_A |\uparrow\rangle_A) \cdot (\alpha |\uparrow\rangle_B + \beta |\downarrow\rangle_B) \end{aligned} \right\} \end{aligned}$$

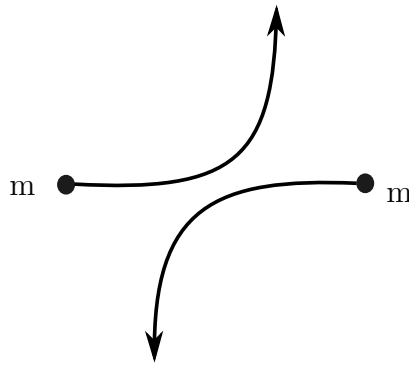
Nach der Messung: Projektion auf einen der 4 Zustände, darin sind keine Informationen enthalten. Alle 4 Zustände haben eine gleich verteilte Wahrscheinlichkeit von  $\frac{1}{4}$  und Spins von  $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ .

- Orthogonale Zustände sind immer durch eine Messung eindeutig unterscheidbar.
- Bei der Messung kollabiert das System auf einen von vier Bell-Zuständen.

# 12 Quantenmechanik von Systemen identischer Teilchen

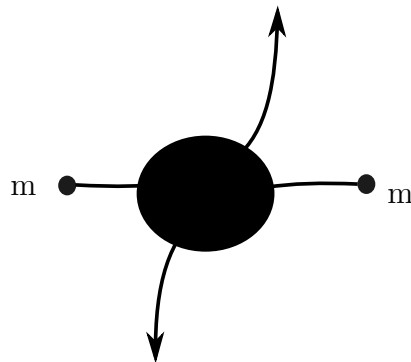
## 12.1 Ununterscheidbarkeit identischer Teilchen

- klassisch: Stoß zweier Teilchen (im Prinzip)



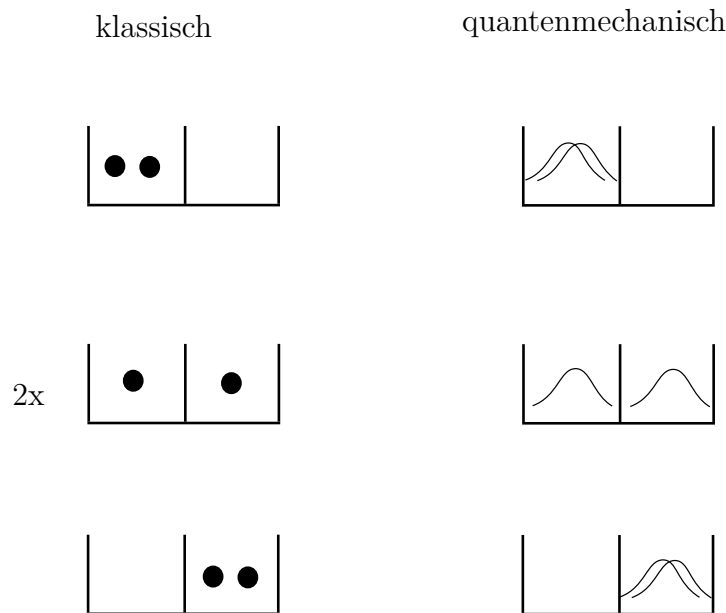
- bel. gut auflösbar  $\rightarrow$  Unterscheidbar (durch “draufsehen“)

- Quantenmechanisch:



Durch Unschärferelation existiert eine prinzipielle Grenze der Auflösung. Dadurch ist die Historie der Teilchen bei einem Stoß prinzipiell nicht nachvollziehbar.

$\Rightarrow$  identische Teilchen sind ununterscheidbar



### 12.1.1 Transpositionsoperator

$$\hat{P}_{ij} \quad i < j$$

Der Transpositionsoperator wirke auf den Produktraum von mehreren Teilchen und vertausche genau zwei Einteilchenzustände. Formal gilt also:

- im  $\mathcal{H}$ -Raum von  $n$ -identischen Teilchen:

$$\mathcal{H}_n = \mathcal{H}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_n$$

mit

$$\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_2 = \dots = \mathcal{H}_n \quad \text{identisch}$$

Gilt:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= |\phi_1\rangle |\phi_2\rangle \dots |\phi_n\rangle & \hat{P}_{ij} |\phi_1\rangle \dots |\phi_i\rangle \dots |\phi_j\rangle \dots |\phi_n\rangle \\ & & = |\phi_1\rangle \dots |\phi_j\rangle \dots |\phi_i\rangle \dots |\phi_n\rangle \end{aligned}$$

- Eigenschaften:

$$\begin{aligned} \hat{P}_{ij}^\dagger &= \hat{P}_{ij}, \hat{P}_{ij} \hat{P}_{ij} = \mathbb{1} \\ \text{Eigenwerte:} \quad & \lambda = \pm 1 \end{aligned}$$

Die erste Konsequenz der Ununterscheidbarkeit findet sich in den erlaubten Operatoren auf Räumen ununterscheidbarer Teilchen: Wenn wir die einzelnen Teilchen nicht unterscheiden können, dann darf es keinen Unterschied machen, welches wir nun messen. Hinge die Messung vom Teilchen ab, so wären sie unterscheidbar. Es muss also gelten:

$$\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \hat{P}_{ij} \psi | \hat{A} | \hat{P}_{ij} \psi \rangle \quad \forall i, j$$

Diese Bedingung formulieren wir im ersten von zwei Symmetriepostulaten:

### 12.1.2 Schwaches Symmetriepostulat

Alle zugelassenen Observablen eines Systems identischer Teilchen sind selbstadjungierte Operatoren  $\hat{A}$ , die symmetrisch unter Transposition sind:

$$[\hat{A}, \hat{P}_{ij}] = 0 \quad \text{also} \quad \hat{A} \hat{P}_{ij} = \hat{P}_{ij} \hat{A} \quad \Rightarrow \quad \hat{P}_{ij} \hat{A} \hat{P}_{ij} = \hat{A}$$

$$\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \hat{P}_{ij} \psi | \hat{A} | \hat{P}_{ij} \psi \rangle$$

Für alle Observablen, da:

$$\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{P}_{ij} \hat{A} \hat{P}_{ij} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{P}_{ij}^\dagger \hat{A} \hat{P}_{ij} | \psi \rangle$$

Erwartungswerte von physikalischen Größen sind invariant unter Transposition identischer Teilchen.

**Beispiel:**

- Schwerpunkt:

$$\hat{\mathbf{R}} = \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{r}}_1 + \hat{\mathbf{r}}_2) \quad \checkmark$$

- Relativkoordinate:

$$\hat{\mathbf{r}} = \hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2 \quad \times$$

$$\hat{\mathbf{r}} = |\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2| \quad \checkmark$$

Für identische Teilchen: Operatoren der Form  $\hat{H}(\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2)$  sind unmöglich!

Nur  $\hat{H}(|\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2|)$ , also:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m} + \underbrace{V_1(\hat{\mathbf{r}}_1) + V_1(\hat{\mathbf{r}}_2)}_{\text{identisch!}} + V(|\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2|)$$

## 12.2 Der Hilbertraum identischer Teilchen

### Bosonen und Fermionen

- Die Menge aller Transpositionen ( $\hat{P}_{ij}$  für  $N$  Teilchen) bilden eine nicht-abelsche Gruppe bzgl. Hintereinanderausführung (**Permutationsgruppe**  $S_N$ ) (mit Elementen  $\tau$ ).
- Sei  $1, 2, 3, \dots, N$  die natürliche Anordnung, dann ist das Signum einer Permutation  $\tau \in S_N$  gleich  $(-1)^n$ , wobei  $N$  die Anzahl der Transpositionen ist, die man benötigt, um von der natürlichen Anordnung zur Gegebenen zu kommen.

Beispiel:

123	natürlich
213	$\rightarrow \text{sign} = -1$
231	$\rightarrow \text{sign} = +1$

### 12.2.1 Raum der total (anti-) symmetrischen Zustände

$$\mathcal{H}_S = \{|\psi\rangle \in \mathcal{H} : \hat{P}_{ij} |\psi\rangle = +|\psi\rangle \quad \forall \hat{P}_{ij}\}$$

und der Raum der total antisymmetrischen Zustände:

$$\mathcal{H}_{AS} = \{|\psi\rangle \in \mathcal{H} : \hat{P}_{ij} |\psi\rangle = -|\psi\rangle \quad \forall \hat{P}_{ij}\}$$

Haben gesehen: erlaubte Variablen bilden ab:

$$\hat{A} : \mathcal{H}_S \rightarrow \mathcal{H}_S \quad \text{oder} \quad \hat{A} : \mathcal{H}_{AS} \rightarrow \mathcal{H}_{AS}$$

$$\left( \text{damit } \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \hat{P}_{ij} \psi | \hat{A} | \hat{P}_{ij} \psi \rangle \text{ gilt} \right)$$

Das zweite Symmetriepostulat betrifft nun die erlaubten Zustände. Sei  $|\phi_N\rangle$  ein solcher Zustand und  $|\phi_N\rangle\langle\phi_N|$  dann ein Operator, der das schwache Symmetriepostulat erfüllt. Es folgt:

$$|\phi_N\rangle\langle\phi_N| = \hat{P}_{ij} |\phi_N\rangle\langle\phi_N| \hat{P}_{ij} = |\hat{P}_{ij}\phi_N\rangle\langle\hat{P}_{ij}\phi_N|$$

Wir sehen, dass sowohl  $|\phi_N\rangle$  als auch  $\hat{P}_{ij} |\phi_N\rangle$  den gleichen Raum aufspannen. Das ist nur möglich, wenn die beiden parallel stehen, also gilt:  $\hat{P}_{ij} |\phi_N\rangle = \lambda |\phi_N\rangle$ , also wenn der Zustand ein Eigenzustand des Permutationsoperators ist [siehe: Nolting 5.2 8. Auflage S.255 [Nolting, 2015]]. Wir erhalten also zwei Möglichkeiten für Zustände, die im folgenden Postulat formuliert sind:

### 12.2.2 starkes Symmetriepostulat

Die erlaubten Zustände von Systemen identischer Teilchen sind entweder total symmetrisch (Bosonen) oder total antisymmetrisch (Fermionen).

Also z.B:

$$|\phi\rangle_A |\psi\rangle_B - |\psi\rangle_A |\phi\rangle_B$$

$$|\phi\rangle_A |\psi\rangle_B + |\psi\rangle_A |\phi\rangle_B$$

$$\text{also} \quad \mathcal{H}^{(2)} = \mathcal{H}_s^{(2)} \oplus \mathcal{H}_{As}^{(2)}$$

Es gibt keine Mischräume/Zwischensituationen! (Also nicht:  $\hat{P}_{12}$  symm. und  $\hat{P}_{23}$  antisymm.)

## 26. Vorlesung Wiederholung: Der Hilbertraum identischer Teilchen: Bosonen und Fermionen

symmetrische Zustände :=  $\mathcal{H}_S = \{|\psi\rangle \in \mathcal{H} : \hat{P}_{i,j} |\psi\rangle = +|\psi\rangle \quad \forall \hat{P}_{i,j}\}$

antisymmetrische Zustände :=  $\mathcal{H}_{AS} = \{|\psi\rangle \in \mathcal{H} : \hat{P}_{i,j} |\psi\rangle = -|\psi\rangle \quad \forall \hat{P}_{i,j}\}$

$\mathcal{H}_S$  und  $\mathcal{H}_{AS}$  bilden Hilberträume

### starkes Symmetriepostulat:

Die erlaubten Zustände von Systemen identischer Teilchen sind entweder total symmetrisch (d.h.  $\in \mathcal{H}_S$ ) oder total antisymmetrisch (d.h.  $\in \mathcal{H}_{AS}$ ) unter Permutation zweier Teilchen.

Es gibt somit keine Observable, die  $\mathcal{H}_S$  und  $\mathcal{H}_{AS}$  verknüpft.

### für 2 Teilchen:

$$\mathcal{H}_{N=2} = \mathcal{H}_{N=2}^{AS} \oplus \mathcal{H}_{N=2}^S$$

### Ende Wiederholung

### aber für n Teilchen:

$$\dim(\mathcal{H}_{N=n}^S), \dim(\mathcal{H}_{N=n}^{AS}) \ll \frac{1}{2} \dim(\mathcal{H})$$

### Folgerung: (Superauswahlregel)

Die Unterräume  $\mathcal{H}_S$  und  $\mathcal{H}_{AS}$  können durch keine erlaubte unitäre Transformation verknüpft werden.

### Bemerkung: (Zeitevolution)

antisym. bleibt antisym., sym. bleibt sym.  $\Leftrightarrow$  kann Boson und Fermion nicht miteinander verknüpfen, solange Teilchenzahl erhalten bleibt.

### Fermi-Dirac Statistik:

$$\mathcal{H}_{AS}^{(N)} = \bigotimes_{AS}^N \mathcal{H}$$

$\mathcal{H}_{AS}^{(N)}$  ist Abschließung des Raumes aller Linearkombinationen.

$$|\psi\rangle = \sum_{\tau \in S_N} \text{sgn}(\tau) \cdot |\psi\rangle_{\tau(1)} \cdot |\psi\rangle_{\tau(2)} \cdot \dots \cdot |\psi\rangle_{\tau(N)},$$

wobei  $|\psi\rangle_i \in \mathcal{H}$  (1-Teilchenraum)



**Bemerkung:**

$|\psi\rangle \neq 0$  nur falls alle  $|\psi\rangle_j$  linear unabhängig sind. Insbesondere: Falls 2 gleich oder auch nur linear abhängig sind, so ist der N-Teilchenzustand  $|\psi\rangle = 0$ , da dann zu beliebigen Permutationen diese linear abhängigen zusätzlich permutiert werden können und so jeder Term mit beiden Vorzeichen auftritt und die Summe über die Zustände verschwindet.

**Pauli-Prinzip:**

Jeder linear unabhängige 1-Teilchenzustand in einem fermionischen System kann nur von einem Teilchen angenommen werden.

**Bose-Einstein-Statistik:**

$$\mathcal{H}_S^{(N)} = \bigotimes_{S=1}^N \mathcal{H}$$

$\mathcal{H}_S^{(N)}$  ist Abschließung des Raums aller Linearkombinationen.

$$|\psi\rangle = \sum_{\tau \in S_N} |\psi\rangle_{\tau(1)} \cdot |\psi\rangle_{\tau(2)} \cdot \dots \cdot |\psi\rangle_{\tau(N)},$$

wobei  $|\psi\rangle_j \in \mathcal{H}$

**Bemerkung:**

jeder 1-Teilchenzustand kann mit beliebig vielen Teilchen besetzt sein.

**Spin-Statistik-Theorem:** (Beweis Quantenfeldtheorie)

identische Teilchen mit **ganzzahligem Spin** werden durch Zustände im  $\mathcal{H}_S^{(N)}$  beschrieben (Bosonen), identische Teilchen mit **halbzahligem Spin** werden durch Zustände im  $\mathcal{H}_{AS}^{(N)}$  beschrieben (Fermionen).

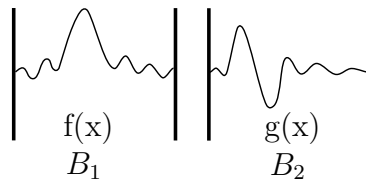
**Unterscheidbarkeit identischer Teilchen:**

Wann sehen wir eine Konsequenz der (Anti-)Symmetrisierung? In anderen Worten, muss Ich für mein lokales System von Teilchen auch die Bosonen/Fermionen auf dem Mond beachten?

dazu: Seien 1-Teilchenzustände  $\{|f\rangle, |g\rangle, \dots\}$

Träger von  $\langle x|f\rangle$  sei in Raumbereich  $B_1$  Träger von  $\langle x|g\rangle$  sei in Raumbereich  $B_2$

$$B_1 \cap B_2 = 0$$

**Bemerkung:**

Man kann zeigen, dass das nur approximativ richtig ist (kann nicht kompakt sein).

$\hat{P}_j$  Projektor auf  $B_j$

$$\hat{P}_1 |f\rangle = |f\rangle$$

$$\hat{P}_1 |g\rangle = 0$$

$$\hat{P}_2 |f\rangle = 0$$

$$\hat{P}_2 |g\rangle = |g\rangle$$

lokale 1-Teilchenobservable

$$\hat{P}_2 \hat{A} \hat{P}_1 = \hat{P}_1 \hat{A} \hat{P}_2 = 0$$

Matrixelemente zwischen beiden ergeben null!

$$|\psi\rangle_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |f\rangle_1 |g\rangle_2 \pm |g\rangle_1 |f\rangle_2 \right)$$

$$\hat{A} = \underbrace{\hat{A}_1}_{\text{nur in } B_1} + \underbrace{\hat{A}_2}_{\text{nur in } B_2}$$

$$\pm \langle \psi | \psi \rangle_{\pm} = \frac{1}{2} \left\{ {}_1 \langle f | \hat{A}_1 | f \rangle_1 + {}_2 \langle g | \hat{A}_2 | g \rangle_2 + {}_1 \langle g | \hat{A}_1 | g \rangle_1 + {}_2 \langle f | \hat{A}_2 | f \rangle_2 \pm \underbrace{({}_1 \langle g | \hat{A}_1 | f \rangle_1 + \dots)}_{=0} \right\}$$

$\hat{A}$  ist lokale 1-Teilchenobservable mit  $\hat{P}_2 \hat{A} \hat{P}_1 = \hat{P}_1 \hat{A} \hat{P}_2$

$\Leftrightarrow$  Für lokale Observablen nur lokale Anti-/Symmetrisierung relevant!

## 12.3 Zwei Elektronen im Coulombpotential (Helium)

Der gesamte Hilbertraum der zwei Elektronen ist:

$$\mathcal{H} = (L^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^2) \overset{AS}{\otimes} (L^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^2)$$

$\nwarrow$   
 räumliche  
Freiheitsgrade

$\searrow$   
 Spin

Da die Räume beider Elektronen antisymmetrisiert zusammengeführt werden müssen.

Daraus folgt der Hamiltonoperator des Systems:

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^2 \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{Ze^2}{|\vec{r}_j|} \right) + \frac{Ke^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

Er besteht aus den einzelnen Hamiltonoperatoren der beiden Elektronen zusammen mit deren Coulombwechselwirkung.

**Erhaltungsgrößen:**

$$\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2 \quad \vec{L} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2 \quad (\text{da rotationssymmetrisch})$$

Es ist zu beachten, dass nicht nach einzelnen Teilcheneigenschaften wie  $\vec{S}_1$  gefragt werden kann, da dieser Operator nicht dem schwachen Symmetriepostulat genügt.

$$[\hat{S}_\mu, \hat{H}] = [\hat{L}_\mu, \hat{H}] = 0 \quad \mu = x, y, z$$

Folgende Operatoren kommutieren also mit dem Hamiltonoperator:  $\hat{L}^2, \hat{L}_z, \hat{S}^2, \hat{S}_z, \hat{P}$

Aus der Gruppentheorie erkennen wir folgende Zerlegung (erkennbar aus der Symmetrie: Sollen die Räume antisymmetrisch zusammengeführt werden, so kann er aufgeteilt werden in einen symmetrischen und einen antisymmetrischen Teil):

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{(0)} \oplus \mathcal{H}_{(1)}$$

$$\mathcal{H}_{(0)} = \underbrace{\left( \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) \overset{S}{\otimes} \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) \right)}_{\text{sym. Ortsraumwellenfkt.}} \otimes \underbrace{\left( \mathbb{C}^2 \overset{AS}{\otimes} \mathbb{C}^2 \right)}_{\text{antisym. Spinwellenfkt.}}$$

$$\mathcal{H}_{(1)} = \underbrace{\left( \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) \overset{AS}{\otimes} \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) \right)}_{\text{antisym.}} \otimes \underbrace{\left( \mathbb{C}^2 \overset{S}{\otimes} \mathbb{C}^2 \right)}_{\text{sym.}}$$

### 12.3.1 Basissätze für symmetrische bzw. antisymmetrische Spinraumwellenfunktion von N-Teilchen

Der Raum der Spinfunktionen zweier Elektronen ist vierdimensional, da alle möglichen Zustände Linearkombination der folgenden Basiszustände sind:

$$|\uparrow\rangle|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle|\downarrow\rangle, |\uparrow\rangle|\downarrow\rangle, |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle$$

Daraus konstruieren wir nun anti- bzw. symmetrischen Linearkombinationen, die Basen der entsprechenden Spinräume bilden werden.

$$\left( \mathbb{C}^2 \overset{AS}{\otimes} \mathbb{C}^2 \right) \quad \text{eindimensional}$$

Die Eigenschaften des Zustandes lauten:

**Spin-Singulett:**

$$|\chi_{00}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |\uparrow\rangle|\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle \right) \quad S = 0, M_S = 0$$

$$\hat{S}_z |\chi_{00}\rangle = (\hat{S}_z^{(1)} + \hat{S}_z^{(2)}) \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle)$$

|wirkt nur auf  $\uparrow \quad \uparrow$

$$\hat{S}_z^{(1)} |\uparrow\rangle|\downarrow\rangle = +1$$

$$\hat{S}_z^{(1)} |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle = -1$$

$$\hat{S}_z |\chi_{00}\rangle \sim \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle + |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle) + \frac{1}{\sqrt{2}} (-|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle)$$

$$= 0$$

$$\hat{S}^2 |\chi_{00}\rangle = (\hat{\vec{S}}_1 + \hat{\vec{S}}_2)^2 |\chi_{00}\rangle$$

$$= (\hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + 2 \cdot \hat{\vec{S}}_1 \cdot \hat{\vec{S}}_2) |\chi_{00}\rangle$$

$$= \left[ \hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + 2 \left( \hat{S}_z^1 \cdot \hat{S}_z^2 + \underbrace{\hat{S}_x^1 \cdot \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^1 \cdot \hat{S}_y^2}_{\hat{S}_+^1 \hat{S}_-^2 + \hat{S}_-^1 \hat{S}_+^2} \right) \right] |\chi_{00}\rangle$$

$$= \dots = 0$$

d.h.  $|\chi_{00}\rangle$  ist Eigenzustand zu  $\hat{S}^2 = (\hat{\vec{S}}_1 + \hat{\vec{S}}_2)^2$  und  $\hat{S}_z = \hat{S}_z^1 + \hat{S}_z^2$  mit Eigenwerten  $S=0, M_S=0$

$$(\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2)$$

3-dimensional

#### Triplet-Zustände:

$$|\chi_{1,1}\rangle = |\uparrow\rangle|\uparrow\rangle \quad S = 1, M_S = 1$$

$$|\chi_{1,0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle + |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle) \quad S = 1, M_S = 0$$

$$|\chi_{1,-1}\rangle = |\downarrow\rangle|\downarrow\rangle \quad S = 1, M_S = -1$$

Eine solche Aufteilung der Zustände in anti- bzw. symmetrisch ist mathematisch anschaulich: Die Zustände

$$|\uparrow\rangle|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle|\downarrow\rangle$$

sind offensichtlich symmetrisch unter Vertauschung. Beim ersten Zustand sehen wir die Eigenwerte als  $S = 1, M_S = 1$ , beim zweiten Zustand gilt  $M_S = -1$ . Aus den

Drehimpulseigenschaften wissen wir damit natürlich, dass ein Zustand existieren muss, der  $S = 1$   $M_S = 0$  erfüllt. Die Konstruktion dieses Zustandes erfolgt über Leiteroperatoren  $\hat{S}_{\pm} = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y$ . Damit sind die drei Basiszustände des symmetrischen Raumes klar. Der vierte Zustand muss dann eine Basis des antisymmetrischen Raumes bilden, da dieser nicht leer sein kann. Die Form dieses Zustandes ergibt sich leicht aus Antisymmetrieüberlegungen.

### 12.3.2 Basissätze für symmetrische bzw. antisymmetrische Ortsraumwellenfunktion von N-Teilchen

Sei  $\{\Phi_n(\vec{r})\}_{n \in \mathbb{N}}$  vollständige ONB von 1-Teilchenfunktionen. Eine simple aber auch umständliche Darstellungsmöglichkeit von antisymmetrischen Systemen ist offensichtlich:

**Antisymmetrische Wellenfunktionen:**

$$\Phi_{l_1, l_2, \dots, l_N}^{AS} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\tau \in S_N} \text{sgn}(\tau) \cdot \Phi_{(\tau,1)}(\vec{r}_1) \cdot \Phi_{(\tau,2)}(\vec{r}_2) \cdot \dots \cdot \Phi_{(\tau,N)}(\vec{r}_N)$$

mit  $S_N :=$  Permutationsgruppe der N Teilchen

$l_1, \dots, l_n$  sind Sets von Quantenzahlen

$\tau \in 1, \dots, n$

Eine andere Möglichkeit ist die folgende Darstellung. Die Forderungen des Pauli-Prinzips und der Antisymmetrie folgen direkt aus den allgemeinen Eigenschaften der Determinante.

$$\Phi_{l_1, l_2, \dots, l_N}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \cdot \begin{vmatrix} \Phi_{l_1}(\vec{r}_1) & \Phi_{l_2}(\vec{r}_1) & \dots & \Phi_{l_N}(\vec{r}_1) \\ \Phi_{l_1}(\vec{r}_2) & \Phi_{l_2}(\vec{r}_2) & \dots & \Phi_{l_N}(\vec{r}_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Phi_{l_1}(\vec{r}_N) & \Phi_{l_2}(\vec{r}_N) & \dots & \Phi_{l_N}(\vec{r}_N) \end{vmatrix}$$

wobei wir die Determinante als **Slater-Determinante** bezeichnen!

Symmetrische Wellenfunktion von N-Teilchen:

$n_1 :=$  Anzahl der Teilchen in  $\Phi_1(\vec{r})$

$n_2 :=$  Anzahl der Teilchen in  $\Phi_2(\vec{r})$

$$n_1 + n_2 + \dots + n_r = N$$

D.h. es gibt  $r \leq N$  verschiedener Zustände.

$$\Phi_{n_1, n_2, \dots, n_r}^S(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \sqrt{\frac{n_1! \cdot n_2! \cdot \dots \cdot n_r!}{N!}} \sum_{\tau \in S_N} \Phi_{(\tau,1)}(\vec{r}_1) \cdot \Phi_{(\tau,2)}(\vec{r}_2) \cdot \dots \cdot \Phi_{(\tau,N)}(\vec{r}_N)$$

Wie wir sehen, gestaltet sich die Buchhaltung der möglichen Zustände von ununterscheidbaren Teilchen mit zunehmender Teilchenzahl außerordentlich kompliziert. Die Konstruktion, die wir nun definieren, wird dem Abhilfe schaffen.

## 27. Vorlesung

# 12.4 Fockraum, Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

Betrachte die Anzahl der Teilchen im 1-Teilchenzustand

### Definition:

Sei  $\mathcal{H}$  der Hilbertraum eines Teilchens und sei  $\mathcal{H}^{(n)}$  das n-fache symmetrische (Bosonen) oder antisymmetrische (Fermionen) Tensorprodukt von  $\mathcal{H}$ , dann heißt

$$\mathcal{F}_{S,AS}(\mathcal{H}) := \mathcal{H}^{(0)} \oplus \mathcal{H}^{(1)} \oplus \mathcal{H}^{(2)} \oplus \dots = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathcal{H}^{(n)}$$

Fockraum; hierbei ist  $\mathcal{H}^{(0)}$  der Hilbertraum von null Teilchen =:  $\mathbb{C}$  := Vakuum. Der Fockraum ist somit die Zusammenführung der Hilberträume für 0-Teilchen, 1-Teilchen, 2-Teilchen,...

**Definition:** (Zustandsvektoren im Fockraum)

Zustände und Operationen mit diesen sind im Fockraum wie folgt definiert:

$$|F\rangle = \left( |f^{(0)}\rangle, |f^{(1)}\rangle, |f^{(2)}\rangle, \dots \right)$$

$$|F\rangle + |G\rangle = \left( |f^{(0)}\rangle + |g^{(0)}\rangle, |f^{(1)}\rangle + |g^{(1)}\rangle, \dots \right)$$

$$\langle F | G \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \langle f^{(n)} | g^{(n)} \rangle$$

Annahme:  $\langle F | F \rangle < \infty$

### 12.4.1 (A) Teilchenerzeuger und Vernichter: Bosonen

**Definition:** (Symmetrisierungsoperator)

$$\hat{S}_n : \underbrace{\mathcal{H} \otimes \mathcal{H} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}}_n \rightarrow \mathcal{H}_{\text{sym}}^{(n)}$$

**Beispiel:**

$$\hat{S}_n \cdot |\Phi_1\rangle \cdot |\Phi_2\rangle \cdot \dots \cdot |\Phi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \sum_{\tau \in S_N} |\Phi_{\tau(1)}\rangle \cdot |\Phi_{\tau(2)}\rangle \cdot \dots \cdot |\Phi_{\tau(n)}\rangle$$

Dabei seien OBdA alle  $|\Phi_i\rangle$  verschieden.

$$\begin{aligned} \hat{S}_n \text{ ist Projektor} \quad & \hat{S}_n \hat{S}_n = \hat{S}_n \\ \hat{S}_n \text{ ist selbstadjungiert} \quad & \hat{S}_n^\dagger = \hat{S}_n \end{aligned}$$

**Definition:**

Sei  $|f\rangle \in \mathcal{H}$ , dann heißen die Operatoren  $\hat{a}(f)$  und  $\hat{a}^\dagger(f) \in \mathcal{F}_S(\mathcal{H})$  Vernichtungsoperatoren bzw. Erzeugungsoperatoren im Zustand  $|f\rangle$ .

i)

$$\begin{aligned} \hat{a}(f) : \mathcal{H}^{(0)} &\rightarrow 0 \\ \hat{a}(f) : \mathcal{H}_S^{(n)} &\rightarrow \mathcal{H}_S^{(n-1)} \quad \text{bildet von sym. auf sym. ab!} \end{aligned}$$



ii)

$$\begin{aligned}\hat{a}(f) \cdot \hat{S}_n |\Phi_1\rangle \cdot |\Phi_2\rangle \cdot \dots \cdot |\Phi_n\rangle \\ = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{l=1}^n \langle f | \Phi_l \rangle \cdot \hat{S}_{n-1} |\Phi_1\rangle \cdot \dots \cdot |\Phi_{l-1}\rangle \cdot |\Phi_{l+1}\rangle \cdot \dots \cdot |\Phi_n\rangle\end{aligned}$$

**Bemerkung:**

$\hat{a}$  entfernt einen Ein-Teilchenzustand (sein ehemaliger Zustand skalarmultipliziert mit  $f$ ).

iii)

$$\begin{aligned}\hat{a}^\dagger(f) : \mathcal{H}_S^{(n)} &\rightarrow \mathcal{H}_S^{(n+1)} \\ \hat{a}^\dagger(f) \cdot |0\rangle &= |f\rangle \quad |0\rangle := \text{Vakuum-Zustand (kein Teilchen)}\end{aligned}$$

iv)

$$\begin{aligned}\hat{a}^\dagger(f) \cdot \hat{S}_n |\Phi_1\rangle \cdot |\Phi_2\rangle \cdot \dots \cdot |\Phi_n\rangle \\ = \sqrt{n+1} \cdot \hat{S}_{n+1} |f\rangle \cdot |\Phi_1\rangle \cdot |\Phi_2\rangle \cdot \dots \cdot |\Phi_n\rangle\end{aligned}$$

**Bemerkung:**

Das hinzugefügte Teilchen ist genau im Zustand  $|f\rangle$

**Satz:**

$\hat{a}(f), \hat{a}^\dagger(f)$  sind hermitesch adjungiert in  $\mathcal{F}_S(\mathcal{H})$ .

**Satz:**

Seien  $|f\rangle$  und  $|g\rangle$  Zustände  $\in \mathcal{H}$ , dann gilt:

$$\begin{aligned}[\hat{a}(f), \hat{a}(g)] &= [\hat{a}^\dagger(f), \hat{a}^\dagger(g)] = 0 \\ [\hat{a}(f), \hat{a}^\dagger(g)] &= \langle f | g \rangle\end{aligned}$$

**Bemerkung:**

$\hat{a}(f), \hat{a}^\dagger(g)$  vertauscht nicht:

im Vakuum vernichten,	dann	erzeugen	gibt	1 Teilchen.
im Vakuum erzeugen,	dann	vernichten	gibt	0 Teilchen.

**Beweis:**

**zz.:**  $[\hat{a}(f), \hat{a}^\dagger(g)] = \langle f | g \rangle$

•

$$\begin{aligned} & \hat{a}(f) \cdot \hat{a}^\dagger(g) \cdot \hat{S}_n |\Phi_1\rangle \cdot \dots \cdot |\Phi_n\rangle \\ &= \hat{a}(f) \cdot \sqrt{n+1} \cdot \hat{S}_{n+1} |g\rangle \cdot |\Phi_1\rangle \cdot \dots \cdot |\Phi_n\rangle \\ &= \langle f | g \rangle \cdot \hat{S}_n |\Phi_1\rangle \cdot \dots \cdot |\Phi_n\rangle \\ &+ \sum_{l=1}^n \langle f | \Phi_l \rangle \cdot \hat{S}_n |g\rangle \cdot |\Phi_1\rangle \cdot \dots \cdot |\Phi_{l-1}\rangle \cdot |\Phi_{l+1}\rangle \cdot \dots \cdot |\Phi_n\rangle \end{aligned}$$

•

$$\begin{aligned} & \hat{a}^\dagger(f) \cdot \hat{a}(g) \cdot \hat{S}_n |\Phi_1\rangle \cdot \dots \cdot |\Phi_n\rangle \\ &= \hat{a}^\dagger(g) \cdot \frac{1}{\sqrt{n}} \cdot \sum_{l=1}^n \langle f | \Phi_l \rangle \cdot \hat{S}_{n-1} |\Phi_1\rangle \cdot \dots \cdot |\Phi_{l-1}\rangle \cdot |\Phi_{l+1}\rangle \cdot \dots \cdot |\Phi_n\rangle \\ &= \sum_{l=1}^n \langle f | g \rangle \cdot \hat{S}_n |\Phi_1\rangle \cdot \dots \cdot |\Phi_{l-1}\rangle \cdot |\Phi_{l+1}\rangle \cdot \dots \cdot |\Phi_n\rangle \end{aligned}$$

$$\hat{a}(f) \cdot \hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger \cdot \hat{a}(f) = \langle f | g \rangle$$

□

speziell: betrachten  $|f\rangle, |g\rangle, \dots$  als Element einer VONB

$$\{|\Phi_l\rangle\} \in \mathcal{H} \quad l = 1, 2, \dots, \dim(\mathcal{H})$$

$$\langle \Phi_l | \Phi_k \rangle = \delta_{l,k}$$

$$\Rightarrow \hat{a}(t) \Rightarrow \hat{a}_l$$

$$[\hat{a}_l, \hat{a}_k] = [\hat{a}_l^\dagger, \hat{a}_k^\dagger] = 0$$

$$[\hat{a}_l, \hat{a}_k^\dagger] = \delta_{l,k}$$

Analog zu mehreren harmonischen Oszillatoren!

**Bemerkung:**

Bei einem Teilchen ist der symmetrische- und der antisymmetrische-Hilbertraum gleich.

Mit Hilfe der Erzeugungsoperatoren lässt sich jeder symmetrische n-Teilchenzustand aus dem Vakuum erzeugen.

**Beispiel:**

n-Teilchenzustand mit  $(n_1, n_2, \dots, n_r)$ , wobei  $n_1$  ein Zustand in  $|\Phi_1\rangle$  bzw.  $n_r$  ein Zustand in  $|\Phi_r\rangle$  ist.

$$|\Psi_S\rangle = \prod_l \frac{(\hat{a}_l^\dagger)^{n_l}}{\sqrt{n_l!}} |0\rangle$$

mit:  $n_1 + n_2 + \dots + n_r = n$

$(\hat{a}^\dagger)^0 = \mathbb{1}$

$0! = 1$

**Definition: (Teilchenzahloperator im Zustand  $|\Phi_l\rangle$ )**

$$\hat{n}_l \equiv \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l$$

Die Eigenwerte des Teilchenzahloperators sind die natürlichen Zahlen.

**12.4.2 (B) Teilchenerzeuger und Vernichter: Fermionen****Definition: (Antisymmetrisierungsoperator)**

$$\hat{A}_n : \underbrace{\mathcal{H} \otimes \mathcal{H} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}}_n \rightarrow \mathcal{H}_{AS}^{(n)}$$

**Beispiel:**

$$\hat{A}_n \cdot |\Phi_1\rangle \cdot |\Phi_2\rangle \cdot \dots \cdot |\Phi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \sum_{\tau \in S_N} \text{sgn}(\tau) |\Phi_{\tau(1)}\rangle \cdot |\Phi_{\tau(2)}\rangle \cdot \dots \cdot |\Phi_{\tau(n)}\rangle$$

Wiederum seien alle Einteilchenzustände verschieden

$$\hat{A}_n \text{ ist Projektor} \quad \hat{A}_n \hat{A}_n = \hat{A}_n$$

$$\hat{A}_n \text{ ist selbstadjungiert} \quad \hat{A}_n^\dagger = \hat{A}_n$$

**Definition:**

Sei  $|f\rangle \in \mathcal{H}$ , dann heißen die Operatoren  $\hat{c}(f)$  und  $\hat{c}^\dagger(f) \in \mathcal{F}_{AS}(\mathcal{H})$  Vernichtungsoperatoren bzw. Erzeugungsoperatoren im Zustand  $|f\rangle$ .

i)

$$\hat{c}(f) : \mathcal{H}^{(0)} \rightarrow 0$$

$$\hat{c}(f) : \mathcal{H}_{AS}^{(n)} \rightarrow \mathcal{H}_{AS}^{(n-1)} \quad \text{bildet von antisym. auf antisym. ab!}$$

ii)

$$\begin{aligned} \hat{c}(f) \cdot \hat{A}_n |\Phi_1\rangle \cdot |\Phi_2\rangle \cdot \dots \cdot |\Phi_n\rangle \\ = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{j=1}^n (-1)^{j+1} \langle f | \Phi_j \rangle \cdot \hat{A}_{n-1} |\Phi_1\rangle \cdot \dots \cdot |\Phi_{j-1}\rangle \cdot |\Phi_{j+1}\rangle \cdot \dots \cdot |\Phi_n\rangle \end{aligned}$$

iii)

$$\hat{c}^\dagger(f) : \mathcal{H}_{AS}^{(n)} \rightarrow \mathcal{H}_{AS}^{(n+1)}$$

$$\hat{c}^\dagger(f) |0\rangle = |f\rangle$$

mit:  $\mathcal{H}_{AS}^{n+1} :=$  Antisymmetrischer Hilbertraum mit n+1 Teilchen

iv)

$$\begin{aligned} \hat{c}^\dagger(f) \cdot \hat{A}_n |\Phi_1\rangle \cdot |\Phi_2\rangle \cdot \dots \cdot |\Phi_n\rangle \\ = \sqrt{n+1} \cdot \hat{A}_{n+1} |f\rangle \cdot |\Phi_1\rangle \cdot |\Phi_2\rangle \cdot \dots \cdot |\Phi_n\rangle \end{aligned}$$

**Bemerkung:**

Das hinzugefügte Teilchen ist genau im Zustand  $|f\rangle$

**Satz:**

$\hat{c}(f)$ ,  $\hat{c}^\dagger(f)$  sind hermitesch adjungiert in  $\mathcal{F}_{AS}(\mathcal{H})$ .

**Definition: (Antikommutator)**

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$$

**Satz:**

Seien  $|f\rangle$  und  $|g\rangle$  Zustände  $\in \mathcal{H}$ , dann gilt:

$$\begin{aligned}\{\hat{c}(f), \hat{c}(g)\} &= \{\hat{c}^\dagger(f), \hat{c}^\dagger(g)\} = 0 \\ \{\hat{c}(f), \hat{c}^\dagger(g)\} &= \langle f | g \rangle\end{aligned}$$

**Beweis:**

**zz.:**  $\{\hat{c}(f), \hat{c}^\dagger(g)\} \langle f | g \rangle$

$$\begin{aligned}\hat{c}^\dagger(f) \cdot \hat{c}^\dagger(g) \cdot \hat{A}_n |\Phi_1\rangle \cdot \dots \cdot |\Phi_n\rangle \\ = \hat{c}^\dagger(f) \cdot \sqrt{n+1} \hat{A}_{n+1} |g\rangle \cdot |\Phi_1\rangle \cdot \dots \cdot |\Phi_n\rangle \\ = \sqrt{(n+1) \cdot (n+2)} \hat{A}_{n+2} |f\rangle \cdot |g\rangle \cdot |\Phi_1\rangle \cdot \dots \cdot |\Phi_n\rangle\end{aligned}$$

aber:

$$\begin{aligned}\hat{c}^\dagger(g) \cdot \hat{c}^\dagger(f) \cdot \hat{A}_n |\Phi_1\rangle \cdot \dots \cdot |\Phi_n\rangle \\ = \hat{c}^\dagger(g) \cdot \sqrt{n+1} \hat{A}_n |f\rangle \cdot |\Phi_1\rangle \cdot \dots \cdot |\Phi_n\rangle \\ = \sqrt{(n+1) \cdot (n+2)} \hat{A}_{n+2} |g\rangle \cdot |f\rangle \cdot |\Phi_1\rangle \cdot \dots \cdot |\Phi_n\rangle\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \hat{c}^\dagger(f) \cdot \hat{c}^\dagger + \hat{c}^\dagger(g) \cdot \hat{c}^\dagger = 0$$

□

**Pauli-Prinzip:**

$$\begin{aligned}\{\hat{c}^\dagger(f), \hat{c}^\dagger\} &= 0 \\ 2 \cdot \left(\hat{c}^\dagger(f)\right)^2 &= 0 \\ \Rightarrow \left(\hat{c}^\dagger(f)\right)^2 &= 0\end{aligned}$$

**Fazit:**

Es ist unmöglich zwei Teilchen im selben Zustand zu erzeugen; ebenso zu vernichten, da es keine zwei Teilchen im selben Zustand geben kann. In der Antikommutativität der Erzeuger- und Vernichterooperatoren für Fermionen spiegelt sich also direkt das

Pauli-Prinzip wieder.

### Teilchenzahloperator:

Anzahl der Teilchen im Zustand  $|l\rangle$ :

$$\hat{n}_l := \hat{c}_l^\dagger \cdot \hat{c}_l$$

Die möglichen Eigenwerte sind nach Pauli offensichtlich 0 und 1.

Nach Pauli in jedem Zustand max 1 Teilchen wähle speziell  $|f\rangle$ ,  $|g\rangle$  aus VONB  $\{|\Phi_l\rangle\}$

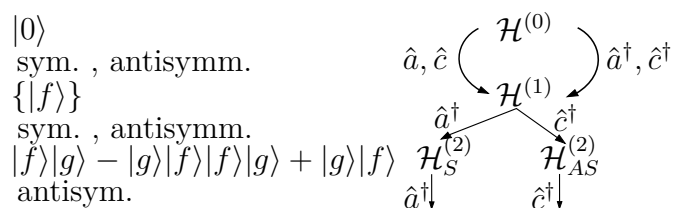
$$\hat{c}(f) \Rightarrow \hat{c}_i$$

$$\{\hat{c}_l, \hat{c}_k\} = \{\hat{c}_l^\dagger, \hat{c}_k^\dagger\} = 0$$

$$\{\hat{c}_l, \hat{c}_k^\dagger\} = \delta_{l,k}$$

$n$ -Teilchenzustand mit  $(n_1, n_2, \dots, n_r)$ , wobei hier  $n_i \in \{0, 1\}$  (Pauli-Prinzip)

$$|\Phi_{AS}\rangle = (\hat{c}_1^\dagger)^{n_1} \cdot (\hat{c}_2^\dagger)^{n_2} \cdot \dots \cdot (\hat{c}_r^\dagger)^{n_r} |0\rangle$$



### 12.4.3 (C) Darstellung von Operatoren im Fockraum

- Einteilchen-Observable:

$$\hat{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$$

$$\{|\Phi_l\rangle\} \text{ ONB in } \mathcal{H}$$

$$\hat{A}|\Phi_l\rangle = \sum_k \langle \Phi_k | \hat{A} | \Phi_l \rangle \cdot |\Phi_k\rangle = \sum_l A_{kl} |\Phi_k\rangle$$

**Bemerkung:**

" $\cong$ " Vernichtung eines Teilchens in  $|\Phi_l\rangle$  und Erzeugung eines Teilchens in  $|\Phi_k\rangle$  mit Vorfaktor  $A_{kl}$  (= Amplitude).

$$\hat{A} = \sum_{kl} A_{kl} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l = \sum_{kl} \hat{a}_k^\dagger A_{kl} \hat{a}_l$$

- Zweiteilchenoperatoren:

$$\hat{v} = \mathcal{H}_{S,AS}^{(2)} \rightarrow \mathcal{H}_{S,AS}^{(2)}$$

$$\hat{v} = \sum_{k,l,m,n} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l^\dagger v_{k,lm,n} \hat{a}_m \hat{a}_n$$

$$\hat{v} |\Phi_m\rangle |\Phi_n\rangle = \sum_{k,l} \underbrace{\langle \Phi_n | \langle \Phi_l | \hat{v} | \Phi_m \rangle | \Phi_n \rangle}_{=v_{k,lm,n}} |\Phi_k\rangle |\Phi_l\rangle$$

Feldoperatoren:

A) Bosonen:

$$\hat{\Phi}(\vec{r}) = \sum_{l=1}^{\infty} \Phi_l(\vec{r}) \cdot \hat{a}_l$$

**B) Fermionen:**

$$\hat{\Psi}(\vec{r}) = \sum_{l=1}^{\infty} \Phi_l(\vec{r}) \cdot \hat{c}_l$$

mit:  $\Phi_l(\vec{r})$ -1-Teilchenwellenfunktion

$$\int d^3r \Phi_l^*(\vec{r}) \Phi_m(\vec{r}) = \delta_{l,m}$$

$$\Rightarrow [\hat{\Phi}(\vec{r}), \hat{\Phi}(\vec{r}')] = [\hat{\Phi}^\dagger(\vec{r}), \hat{\Phi}^\dagger(\vec{r}')] = 0$$

$$[\hat{\Phi}(\vec{r}), \hat{\Phi}^\dagger(\vec{r}')] = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

$$\Rightarrow [\hat{\Psi}(\vec{r}), \hat{\Psi}(\vec{r}')] = [\hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}), \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}')] = 0$$

$$[\hat{\Psi}(\vec{r}), \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}')] = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$



# 13 Zusammenfassungen der ersten Kapitel

## 13.1 Schrödinger

### 13.1.1 Schrödingergleichung

- zentrale Bewegungsgleichung der Quantenmechanik:

stationäre Schrödinger-Gleichung im Ortsraum:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (67)$$

- entspricht Eigenwertgleichung des Hamilton-Operators

$$\hat{H} \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad ; \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{r}} + V(\vec{r}) \quad (68)$$

zeitabhängige Schrödinger-Gleichung:

$$\hat{H} \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{d}{dt} \psi(\vec{r}, t) \quad (69)$$

- partielle DGL, linear, 1. Ordnung
- Superpositionsprinzip: Interferenzen möglich

### 13.1.2 Materiewellen (De-Broglie)

$$\begin{aligned}\vec{p} &= \hbar \vec{k} & |\vec{p}| &= m v & |\vec{k}| &= \frac{2\pi}{\lambda} \\ \lambda &= \frac{h}{p}\end{aligned}$$

- Elektronen sind beides: Welle und Teilchen  
(Hat Eigenschaften von beidem, ist etwas neues! )

### 13.1.3 Die Wellenfunktion $\psi(\vec{r}, t)$

- Kann einem Teilchen eine solche Wellenfunktion zuordnen
- keine messbare Größe wie  $\vec{E}$  oder  $\vec{B}$
- $|\psi(\vec{r}, t)|^2$  ist die Wahrscheinlichkeitsdichte, das Teilchen am Ort  $\vec{r}$  zu finden.

$$\rho(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2 \quad (70)$$

- irgendwo muss das Teilchen am Ende sein:

$$\Rightarrow \text{Normierung der Wellenfunktion } \int_{V_\infty} d^3\vec{r} |\psi(\vec{r}, t)|^2 \stackrel{!}{=} 1 \quad (71)$$

### 13.1.4 Wahrscheinlichkeitsstromdichte

Beispiel:

- Ein guter Bogenschütze trifft mit einem Teilchen (Pfeil) die Zielscheibe mit  $p = 1$  (= 100%).
- Nach einem Glas Wein ist  $p = 0,8$  (= 80%), das heißt es gab einen Wahrscheinlichkeitsstrom zu „Scheibe nicht getroffen“.
- Diese Wahrscheinlichkeit muss 20% betragen, da die Wahrscheinlichkeit, dass der Pfeil „irgendwo“ landet nach wie vor 1 (100%) ist.

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi_{(\vec{r}, t)}^* \nabla \psi_{(\vec{r}, t)} - \psi_{(\vec{r}, t)} \nabla \psi_{(\vec{r}, t)}^* \right) \quad (72)$$

**Kontinuitätsgleichung:**

$$\frac{d}{dt} \rho_{(\vec{r}, t)} + \nabla \cdot \vec{j}_{(\vec{r}, t)} = 0 \quad (73)$$

- Die zeitliche Änderung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit in einem bestimmten Volumen ist gleich dem Wahrscheinlichkeitsstrom durch dessen Oberfläche (wie in E-Dyn).

**Postulat 1:**

Der **Zustand** eines physikalischen Systems wird bis auf einen komplexen Vorfaktor vom Betrag 1 durch einen normierten **Vektor**  $|\psi\rangle$  in einem Hilbertraum beschrieben.

- $|\psi\rangle$  hat keine reale Bedeutung im Sinne von Messbarkeit: zusammen mit Operatoren beschreibt er experimentelle Abläufe.
- $|\psi\rangle \xrightarrow{\text{Übergang}} \alpha \cdot |\psi\rangle$  mit  $\alpha \in \mathbb{C}$  beeinflusst Messergebnis nicht  $\longrightarrow |\psi\rangle$  und  $\alpha \cdot |\psi\rangle$  repräsentieren denselben Zustand.

### 13.1.5 linearer Operator

$\hat{A}$  heißt linearer Operator in  $\mathcal{H}$ , falls

$$\hat{A}(\alpha |f\rangle + \beta |g\rangle) = \alpha \cdot \hat{A} |f\rangle + \beta \cdot \hat{A} |g\rangle \quad \forall \alpha, \beta \in \mathbb{C}; |f\rangle, |g\rangle \in H \quad (74)$$

**Norm von  $\hat{A}$ :**

$$\|\hat{A}\| = \sup_{|f\rangle \neq |0\rangle} \frac{\|\hat{A} |f\rangle\|}{\| |f\rangle \|} \quad (75)$$

falls  $\|\hat{A}\| < \infty$  heißt  $\hat{A}$  **beschränkt**

### 13.1.6 zu $\hat{A}$ konjugierter (Hermitesch konjugierter) Operator $\hat{A}^\dagger$

$$\begin{aligned}\langle f | \hat{A} g \rangle &= \langle \hat{A}^\dagger f | g \rangle & \hat{A} : D_A &\rightarrow W_A \\ \hat{A}^\dagger : D_{A^\dagger} &\rightarrow W_{A^\dagger}\end{aligned}$$

**Hermitesch:**  $\hat{A}$  heißt hermitesch, falls  $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$  auf  $D_A \cap D_{A^\dagger}$

**selbstadjungiert:**  $\hat{A}$  heißt selbstadjungiert, falls:

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A} \qquad D_A = D_{A^\dagger} = H \qquad (76)$$

### 13.1.7 Eigenschaften selbstadjungierter Operatoren

$\hat{A}$  sei selbstadjungiert  $\Rightarrow$

- i)  $\langle f | \hat{A} f \rangle$  ist reell.
- ii) Die Eigenwerte von  $\hat{A}$  sind reell.
- iii) Eigenvektoren zu verschiedenen EW sind orthogonal.
- iv) Aus den Eigenvektoren von  $\hat{A}$  kann ein vollständiger Satz von normierten, orthogonalen Basisvektoren konstruiert werden.

## 13.2 Spektralzerlegung von $f(\hat{A})$

$f(\hat{A})$  ist zu behandeln wie eine Funktion  $f(x)$ . Statt  $x^n \rightarrow \hat{A}^n = \underbrace{\hat{A} \cdot \dots \cdot \hat{A}}_n$ .

Man kann selbstadjungierte Operatoren durch die Eigenwerte  $a_n$  darstellen:

$$f(\hat{A}) = \sum_n f(a_n) \hat{P}_n \qquad (77)$$

$\hat{P}_n$  ist orthogonaler Projektor auf den Eigenvektor  $|a_n\rangle$

### 13.2.1 Projektionsoperator $\hat{P}_n$

$$\hat{P}_n = |\alpha_n\rangle \langle \alpha_n| \quad (78)$$

Anschaulich projiziert  $\hat{P}_n$  einen beliebigen Zustandsvektor  $|\psi\rangle$  auf die Richtung von  $|\alpha_n\rangle$ .

$$\hat{P}_n |\psi\rangle = \underbrace{\langle \alpha_n | \psi \rangle}_{\text{Skalar}} \underbrace{|\alpha_n\rangle}_{\text{Richtung}} \quad (79)$$

## 13.3 Unitärer Operator $\hat{U}$

experimentell überprüfbar in der Quantenmechanik sind:

$$\text{Eigenwerte } a_i : \hat{A} |a_i\rangle = a_i |a_i\rangle \quad (80)$$

$$\text{Skalarprodukte} : \langle \phi | \psi \rangle \quad (81)$$

$$\text{Erwartungswerte} : \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \quad (82)$$

Auf die Zustandsvektoren  $|\psi\rangle$  kommt es eigentlich gar nicht an.

—→ können diese fast beliebig verändern (transformieren), solange obige Größen unverändert bleiben:

$$\hat{U} \text{ unitär} \iff \hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{U} \hat{U}^\dagger = 1 \iff \hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1} \quad (83)$$

### 13.3.1 Unitäre Transformation

$|\tilde{\psi}\rangle$ : Transformierter Zustand

$$\text{für Zustände} : |\tilde{\psi}\rangle = \hat{U} |\psi\rangle \quad (84)$$

$$\text{für Operatoren} : \tilde{\hat{A}} = \hat{U} \hat{A} \hat{U}^\dagger \quad (85)$$

Eine unitäre Transformation ändert die Physik (also Eigenwerte, Skalarprodukte, Erwartungswerte) nicht!

## 13.4 Kommutator

"Maß dafür, wie gut zwei Operatoren vertauschen"

- $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$
- $\hat{A}\hat{B}$  kommutieren falls  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$
- Der Kommutator ist als Kombination von Operatoren ebenfalls ein Operator
- Man kann zwei Observablen  $a$  und  $b$  genau dann gleichzeitig beliebig scharf messen, wenn die zugehörigen Observablen  $\hat{A}$  und  $\hat{B}$  vertauschen.

## 13.5 Korrespondenzprinzip

"Die QM sieht ein bisschen aus wie die klassische Mechanik"

→ Der Hamiltonoperator  $\hat{H}$  setzt sich aus  $\hat{x}, \hat{p}$  zusammen, genau wie sich die Hamiltonfunktion aus  $q$  und  $p$  zusammensetzt.

### 13.5.1 Ortsdarstellung von $\psi$ (diskret)

$$\begin{array}{ccc} & \text{EW, also Messwert} & \\ & \downarrow & \\ \hat{x} |x\rangle & = & \hat{x} |x\rangle \\ \uparrow & & \\ \text{Ortsoperator} & & \end{array} \quad \langle x_n | x_m \rangle = \delta_{nm} \quad (86)$$

Ort sei diskret:  $x_n$ ;  $|x_n\rangle$ , Dann gilt:

$$|\psi\rangle = \sum_n \underbrace{\langle x_n | \psi \rangle}_{\psi_n} |x_n\rangle \quad (87)$$

Die Zahl  $\psi_n$  heißt Ortsdarstellung von  $|\psi\rangle$

### 13.5.2 Ortsdarstellung von $\psi$ (kontinuierlich)

$$|\psi\rangle = \int dx \langle x | \psi \rangle |x\rangle \qquad \langle x | y \rangle = \delta(x - y)$$

$$\boxed{\psi(x) = \langle x | \psi \rangle}$$

Die komplexwertige Funktion (Funktionswerte  $\in \mathbb{C}$ ) der Variable  $x$  heißt Ortsdarstellung von  $|\psi\rangle$

### 13.5.3 Äquivalenz

(physikalischer Sachverhalt ändert sich nicht durch Betrachtung im anderen Raum)

Ortsdarstellung	Impulsdarstellung
$\hat{x} x\rangle = x x\rangle$	$\hat{p} p\rangle = p p\rangle = \hbar k p\rangle$
$\mathcal{H} \leftrightarrow \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$	$\mathcal{H} \leftrightarrow \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$
$ \psi\rangle \leftrightarrow \psi(x)$	$ \psi\rangle \leftrightarrow \tilde{\psi}(k)$
$\langle \phi   \psi \rangle \leftrightarrow \int dx \phi^*(x) \psi(x)$	$\langle \phi   \psi \rangle \leftrightarrow \int dk \tilde{\phi}^*(k) \tilde{\psi}(k)$
$\hat{p} \psi\rangle \leftrightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x)$	$\hat{p} \psi\rangle \leftrightarrow p \tilde{\psi}(k) = \hbar k \tilde{\psi}(k)$
$\hat{x} \psi\rangle \leftrightarrow x \psi(x)$	$\hat{x} \psi\rangle \leftrightarrow i \frac{\partial}{\partial k} \tilde{\psi}(k)$

„**Ortsoperator anwenden**“ bedeutet im Ortsraum lediglich die Multiplikation mit  $X$ .

Analog bedeutet „**Impulsoperator anwenden**“ Im Impulsraum die Multiplikation mit  $p = \hbar k$ .

## 13.6 Messung in der Quantenmechanik

Die möglichen Messwerte einer quantenmechanischen Messung sind die Eigenwerte des jeweiligen hermiteschen Operators  $A$ .

$$\text{Eigenwertgleichung: } \hat{A}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \quad (88)$$

Das **Spektrum** eines Operators beschreibt, welche Eigenwerte er hat:

i) **Diskretes Spektrum:**

$\lambda_n$ ;  $n = 1, 2, 3$  ;  $\lambda_n$  diskret

ii) **kontinuierliches Spektrum:**

$\lambda \in \mathbb{R}$  oder Intervall;  $\lambda$  kontinuierlich.

### 13.6.1 Entartung

Entartung bedeutet, dass es **mehrere Eigenzustände zu einem Eigenwert** gibt.

$$\left. \begin{array}{l} \hat{A}|\psi_1\rangle = \lambda|\psi_1\rangle \\ \hat{A}|\psi_2\rangle = \lambda|\psi_2\rangle \\ \vdots \\ \hat{A}|\psi_n\rangle = \lambda|\psi_n\rangle \end{array} \right\} \text{n-fache Entartung} \quad (89)$$

### 13.6.2 Postulat 3a

Die Messung einer Observablen  $\hat{A}$  mit nicht-entartetem, diskretem Spektrum in einem Zustand  $|\psi\rangle$  liefert als Messergebnis einen Eigenwert  $a_n$  mit der Wahrscheinlichkeit

$$P(a_n) = |\langle a_n | \psi \rangle|^2 \quad (90)$$

wobei  $|a_n\rangle$  der Eigenvektor zum Eigenwert  $a_n$  ist. Der Zustand  $|\psi\rangle$  geht über in den Eigenzustand  $|a_n\rangle$

Postulat 3a besagt, dass durch Messung der Zustand des Systems verändert wird!

$$|\psi\rangle \xrightarrow[\downarrow a_n]{\hat{A}} |a_n\rangle \quad P(a_n) = |\langle a_n | \psi \rangle|^2 \quad (91)$$

**Beispiel:**



bei der Messung der Observablen  $A$  (z.B. Ortsmessung), welcher der Operator  $\hat{A}$  zugeordnet ist, kommt mit einer Wahrscheinlichkeit von:  $P(5)$  der Messwert  $a_n = 5$  (Meter) heraus

### 13.6.3 Erwartungswert

Der **Erwartungswert**  $\langle \hat{A} \rangle$  der Messung einer Observablen  $\hat{A}$  an einem Zustand  $|\psi\rangle$  ist der Durchschnittswert, den man erhalten würde, wenn man die Messung sehr oft am gleichen Zustand durchführen würde.

Das heißt an vielen Quantenobjekten im gleichen Zustand, denn wie wir bereits wissen beeinflusst eine Messung den Zustand, ich kann also nicht die Messung einfach am selben Quantenobjekt wiederholen.

#### Definition

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \quad (92)$$

Aus Schule bekannt: Der Erwartungswert ist die Summe der Einzelwerte, gewichtet mit der jeweiligen Wahrscheinlichkeit:

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_n P(a_n) a_n \quad (93)$$

## 13.7 Schwankungsquadrat

$$\langle \Delta \hat{A}^2 \rangle = \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2 \quad (94)$$

## 13.8 Varianz

$$\Delta \hat{A} = \sqrt{\langle \Delta \hat{A}^2 \rangle} \quad (95)$$

Diese Größen geben an, wie stark Messwerte um den Erwartungswert schwanken. Bei sehr kleiner Schwankung muss man nur wenige male messen und hat schon ein recht gutes Ergebnis.

## 13.9 Messung zweier Observablen $\hat{A}, \hat{B}$

**Anmerkung:** Diese Überschrift liest sich so, als wären  $\hat{A}, \hat{B}$  Observablen. Sie sind jedoch die Operatoren, die den entsprechenden Observablen  $a$  und  $b$  zugeordnet sind.

- **Observable:** beobachtbare physikalische Größe
- **Operator:** beschreibt die Messung der Observablen

Messwahrscheinlichkeiten und Zustände nach der Messung hängen von der Reihenfolge der Messung ab!

### Definition

$P(b_m, a_n)$  ist die Wahrscheinlichkeit erst  $a_n$ , dann  $b_m$  zu messen.

$$\begin{aligned}\hat{A} |a_n\rangle &= a_n |a_n\rangle \\ \hat{B} |b_m\rangle &= b_m |b_m\rangle\end{aligned}$$

Es gibt 2 Möglichkeiten für die Reihenfolge der Messung:

i)

$$\begin{array}{cc} |\psi\rangle \xrightarrow{\hat{A}} |a_n\rangle & \xrightarrow{\hat{B}} |b_m\rangle \\ \downarrow a_n & \downarrow b_m \\ P_1 = |\langle a_n | \psi \rangle|^2 & P_2 = |\langle b_m | a_n \rangle|^2 \end{array}$$

ii)

$$\begin{array}{cc} |\psi\rangle \xrightarrow{\hat{B}} |b_m\rangle & \xrightarrow{\hat{A}} |a_n\rangle \\ \downarrow b_m & \downarrow a_n \\ P_3 = |\langle b_m | \psi \rangle|^2 & P_4 = |\langle a_n | b_m \rangle|^2 \end{array}$$

## 13.10 Dynamik in der Quantenmechanik

### 13.10.1 Zeitentwicklung der Zustände

Zur Zeit  $t = t_0$  sei der Zustand  $|\psi(t_0)\rangle$  bekannt. Wir wollen nun wissen, wie sich der Zustand  $\psi$  später (also  $t > t_0$ ) verhält.

**Ansatz:**

$$\begin{array}{ccc}
 |\psi(t)\rangle & = & \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \\
 \uparrow & & \uparrow \\
 \text{Zustand} & & \text{Zustand} \\
 \text{zur Zeit } t & & \text{zur Zeit } t_0
 \end{array} \tag{96}$$

$\hat{U}(t, t_0)$  ist der **Zeitentwicklungsoperator**

### 13.10.2 Eigenschaften von $\hat{U}$

- i) Norm muss wegen der Wahrscheinlichkeitsinterpretation von  $\psi$  erhalten bleiben:

$$\begin{aligned}
 \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle &\stackrel{!}{=} \langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle \\
 \Rightarrow \hat{U} \text{ unitär} &\iff \hat{U}^\dagger(t, t_0) = \hat{U}^{-1}(t, t_0)
 \end{aligned}$$

- ii)  $\hat{U}(t_0, t_0) = \mathbb{1}$   
 (Das ist klar, da sich nichts ändert wird, wenn „die Zeit stillsteht“.)

- iii)  $\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}^{-1}(t_0, t)$

All das wird erfüllt von:  $\hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)}$

$$\text{bzw. } \hat{U}(t, t_0) = e^{-ik(t-t_0)} \quad \text{mit} \quad \hat{k} = \frac{1}{\hbar} \hat{H}$$

## 13.11 Zeitabhängige Schrödingergleichung

Mit dem Ansatz  $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$  können wir diese herleiten:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle &= \frac{d}{dt}\hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \\
&= \frac{d}{dt}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)} \\
&= -\frac{i}{\hbar}\hat{H} \cdot \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)} |\psi(t_0)\rangle}_{|\psi(t)\rangle}
\end{aligned}$$

zeitabhängige Schrödinger Gleichung:

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle$$

## 13.12 Stationäre Schrödingergleichung

Stationär bedeutet hier, dass physikalische Größen zeitunabhängig sind, d.h:

$$\langle \hat{A} \rangle_t = \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle \stackrel{!}{=} \langle \hat{A} \rangle_{t_0}$$

Der Erwartungswert soll konstant bleiben.

stationäre Schrödinger Gleichung

$$\hat{H} |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle \quad (97)$$

Die Kenntnis aller Eigenvektoren  $|\phi_n\rangle$  und Eigenwerte  $E_n$  erlaubt eine allgemeine Lösung der Schrödingergleichung. Man kann aus der Lösung der **stationären** Schrödinger Gleichung **dynamische** Probleme lösen:

Die Eigenvektoren bilden ein vollständiges Orthonormalsystem (bzw. können mit dem **Gram-Schmidt-Verfahren** dazu gemacht werden):  $\{|\phi_n\rangle\}$  CNS.

$$\text{Es gilt: } |\psi_n(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)} |\phi_n\rangle \quad (98)$$

Dies entspricht genau dem Ansatz für dynamische Probleme, den wir bei der Ein-

führung des Zeitentwicklungsoperators  $\hat{U}$  gemacht hatten:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$$

Wegen der Vollständigkeit gilt das für **jeden Zustand**:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \alpha_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n (t-t_0)} |\phi_n\rangle \quad (99)$$

mit  $\alpha_n = \langle \phi_n | \psi_0 \rangle$ , also ist  $\alpha_n$  die Projektion des Eigenvektors  $\langle \phi_n |$  auf den Anfangszustand  $|\psi_0\rangle$ .

### 13.13 Erhaltungsgrößen in der Quantenmechanik

$\hat{A}$  ist eine Erhaltungsgröße, wenn sie mit dem Hamiltonoperator  $\hat{H}$  kommutiert:

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle = \text{const}_t \Leftrightarrow [\hat{H}, \hat{A}] = 0$$

Das gilt auch für Funktionen des Operators  $\hat{A}$ :

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{A}] = 0 &\Rightarrow \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = 0 \\ \text{und} \quad \frac{d}{dt} \langle f(\hat{A}) \rangle &= 0 \end{aligned}$$

Beispielsweise ist bei einem freien Teilchen der Impuls konstant:

$$[\vec{p}, \hat{H}] = \left[ \vec{p}, \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} \right] = 0 \quad (100)$$

### 13.14 Einteilchenmechanik in einer räumlichen Dimension

$$\text{klassische Hamilton-Funktion:} \quad H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \quad (101)$$

### 13.14.1 Schrödingergleichung

**Ortsraum:**

$$|\psi\rangle \longrightarrow \psi(\vec{r}, t) = \langle \vec{r} | \psi \rangle, \quad \hat{\vec{r}} \rightarrow \vec{r}; \quad \hat{\vec{p}} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla_{\vec{r}} \quad (102)$$

**Impulsraum:**

$$|\psi\rangle \longrightarrow \tilde{\psi}(\vec{k}, t) = \langle \vec{k} | \psi \rangle \quad \hat{\vec{p}} \rightarrow \hbar \vec{k}; \quad \hat{\vec{r}} \rightarrow i \nabla_{\vec{k}} \quad (103)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \tilde{\psi}(\vec{k}, t) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tilde{\psi}(\vec{k}, t) + V(i \nabla_{\vec{k}}) \tilde{\psi}(\vec{k}, t) \quad (104)$$

↑  
Gradient im k-Raum

Orts- und Impulsdarstellung sind über die Fouriertransformation miteinander verknüpft.

**Fouriertransformation:**

$$\tilde{\psi}(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \, e^{-ikx} \psi(x, t) \quad (105)$$

$$\psi(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \, e^{ikx} \tilde{\psi}(k, t) \quad (106)$$

Der Faktor  $\frac{1}{2\pi}$  kann verschieden verteilt werden.

## 13.15 Propagatoren; $G$

Propagatoren sind spezielle Greensche Funktionen (also Lösungen einer DGL.). Dazu gehören auch bestimmte Zeitentwicklungsoperatoren:

**SG im Impulsraum:** 
$$i\hbar \frac{d}{dt} \tilde{\psi}(k, t) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tilde{\psi}(k, t)$$

**Lösung:** 
$$\tilde{\psi}(k, t) = \tilde{\psi}(k, t_0) e^{-\frac{i\hbar k^2 (t-t_0)}{2m}}$$

Im Ortsraum (Rücktransformation):

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \, \tilde{\psi}(k, t_0) e^{ikx} e^{-\frac{i\hbar k^2(t-t_0)}{2m}} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \int_{-\infty}^{\infty} dy \, \psi(x, t_0) e^{-iky} e^{ikx} e^{-\frac{i\hbar k^2(t-t_0)}{2m}}\end{aligned}\quad (107)$$

Ziel ist es, den Zustand für alle Zeiten bei gegebenen Anfangsbedingungen zu ermitteln:

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dy \underbrace{G(x, y, t, t_0)}_{\text{Propagator}} \underbrace{\psi(y, t_0)}_{\text{Anfangsbed.}}$$

Eine Gleichung dieser Form liegt mit (107) bereits vor. wir erhalten somit den Propagator eines freien Teilchens:

$$G(x, y, t, t_0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \, e^{ik(x-y)} e^{-\frac{i\hbar k^2(t-t_0)}{2m}} \quad (108)$$

## 13.16 Zerfließen von Wellenpaketen

Es gilt:

$$\Delta x^2(t) = \Delta x^2(0) + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 \Delta x^2(0)} \quad (109)$$

Die Breite eines Wellenpaketes im Ortsraum (Genauigkeit der Position) wird mit  $t^2$  größer. Das Teilchen ist dabei nicht selbst „unscharf“ oder gar „ausgeschmiert“, sondern die Kenntnis über seinen möglichen Ort!

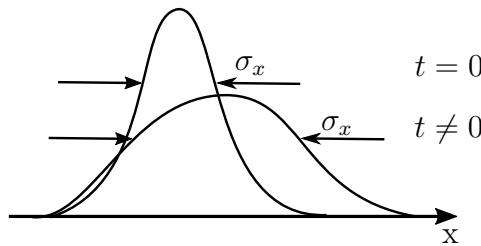
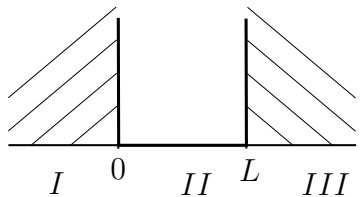


Abbildung 13.1: Auseinanderlaufen des Wellenpakets

## 13.17 das unendlich hohe Kastenpotential

unendlicher Potentialtopf:



$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x \leq L \\ \infty & \text{sonst} \end{cases} \quad (110)$$

Schrödingergleichung:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi_E(x) + V(x) \phi_E(x) = E \phi_E(x) \quad (111)$$

Wir betrachten die Bereiche unterschiedlichen Potentials:  $I, III$  und  $II$  getrennt:

Bereich I, III:

$$V(x) = \infty \quad (112)$$

$$\phi_{I,III} := 0 \quad (113)$$

Das Teilchen kann in die Potentialbarriere nicht eindringen. Das Betragsquadrat von  $\phi$  ist dort 0 (Wahrscheinlichkeitsdichte) und damit auch  $\phi$ .

Bereich II:

Die **Schrödingergleichung** umstellen liefert:

$$\phi_{II}^{\text{tt}}(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2} \phi_{II}(x) \quad (114)$$

$E < 0$ : Die allgemeine Lösung ist:

$$\phi_{II}(x) = A e^{\sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} x} + B e^{-\sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} x} \quad (115)$$

Es stellt sich heraus, dass diese Lösung nicht mit den Randbedingungen verträglich ist:

$$\text{RB: } \phi_{II}(0) = \phi_{II}(L) = 0$$

$$0 = \phi_{II}(0) = A + B \Rightarrow A = -B$$

$$0 = \phi_{II}(L) = A e^{\sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} L} - A e^{-\sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} L} \neq 0 \quad \textbf{Widerspruch!}$$

Somit existiert keine Lösung der SG mit  $E < (\text{Minimum von } V(x))$



$E > 0$ :

Damit beim zweifachen Ableiten ein „–“ dazukommt, erhält die  $e - Fkt$  ein „ $i$ “

$$\phi_{II}(x) \propto \exp \left\{ \pm i \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x \right\}$$

Allgemeine Lösung:

$$\phi_{II}(x) = A \cos \left( \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x \right) + B \sin \left( \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x \right) \quad (116)$$

Randbedingungen:

$0 = \phi_{II}(0) \Rightarrow A = 0 \rightarrow$  der erste Term muss weg, da er bei  $x = 0$  nicht 0 wird

$$\begin{aligned} 0 &= \phi_{II}(L) = B \sin \left( \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} L \right) \\ \Rightarrow \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} L &= n \pi \quad n = 1, 2, 3, \dots \end{aligned} \quad (117)$$

Der sin-Term wird alle ganzzahlige  $\pi$  zu 0. Die Randbedingungen führen somit zu einer Quantisierung der mögliche Energien!

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \text{ Energieeigenwerte} \quad (118)$$

(Einfach Gleichung (117) nach  $E$  umstellen )

$$\phi_n(x) = B \sin \left( \frac{n\pi x}{L} \right) \text{ Eigenfunktionen} \quad (119)$$

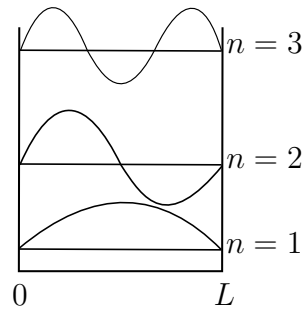


Abbildung 13.2: Zustände im Potentialtopf

Die Konstante  $B$  kann über die bisher noch nicht verwendete Normierungsbedingung bestimmt werden:

$$\int_0^L dx |\phi_n(x)|^2 = 1 \Rightarrow \dots \Rightarrow B = \sqrt{\frac{2}{L}} \quad (120)$$

**Erinnerung:** Die Normierung bedeutet, dass die Wahrscheinlichkeit, dass Teilchen irgendwo im Topf anzutreffen 1 sein muss.

## 13.18 Inversion (Paritätsoperator)

Die beim Teilchen im unendlich hohen Kastenpotential gefundenen Wellenfunktionen waren bei steigendem  $n$  abwechselnd symmetrisch und antisymmetrisch:

$n = 2m + 1$  : symmetrisch:  $\phi_n(-x) = \phi_n(x)$  (Siehe Abb. 13.2  $n = 1 ; n = 3$ )

$n = 2m$  : anti-symmetrisch:  $\phi_n(-x) = -\phi_n(x)$  (Siehe Abb. 13.2  $n=2$  )

Symmetrische Funktionen lassen sich an der  $y$ -Achse spiegeln. Der zugehörige Operator, der diese „inverse“ Funktion liefert, heißt **Paritätsoperator**  $\hat{\Pi}$

$$\boxed{\hat{\Pi} \phi(x) := \phi(-x)} \quad (121)$$

**Eigenschaften:**

$$\begin{aligned}
\hat{\Pi}^2 &= \mathbb{1} \\
\hat{\Pi}^\dagger &= \hat{\Pi} = \hat{\Pi}^{-1} \\
\left[ \hat{\Pi}, \frac{\hat{p}^2}{2m} \right] &= 0 \\
\left[ \hat{\Pi}, V(x) \right] &= 0 \quad \text{falls } V(-x) \stackrel{!}{=} V(x)
\end{aligned}$$

Die Eigenwerte von  $\hat{\Pi}$  sind  $\lambda_{\pm} = \pm 1$ .

Der Paritätsoperator bewirkt auf symmetrische und antisymmetrische Fkt. folgendes:

$$\phi_+(-x) = \hat{\Pi} \phi_+(x) = +\phi_+(x) \quad \text{symmetrische Wellenfunktion} \quad (122)$$

$$\phi_-(-x) = \hat{\Pi} \phi_-(x) = -\phi_-(x) \quad \text{antisymmetrische Wellenfunktion} \quad (123)$$

## 13.19 Allg. Eigenschaften gebundener Zustände in 1D

- i) diskrete Eigenfunktionen von  $\hat{H}$  (Hamiltonoperator) können reell gewählt werden.

Damit sind die  $\phi_n(x)$  in  $\hat{H}\phi_n(x) = E_n\phi_n(x)$  gemeint. Dass diese reell sind, ist auch im Beweis der folgenden Eigenschaften ii) nötig, da  $\phi_n(x) > 0$  vorkommt und  $\mathbb{C}$  ja kein geordneter Körper ist.

- ii) Es gilt der **Knotensatz**

Es sei  $E_m > E_n$ , dann hat  $\phi_m(x)$  mindestens eine Nullstelle zwischen zwei Nullstellen (Knoten) von  $\phi_n(x)$ .

„**Beweis durch Beispiel**“: Hier soll uns ein „Beweis durch Beispiel“ genügen:

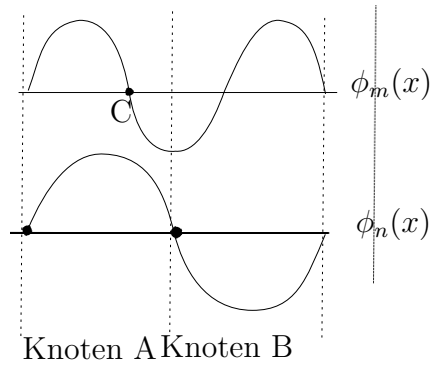


Abbildung 13.3: Beispiel

Offensichtlich hat  $\phi_m(x)$  den Knoten  $C$  zwischen den Knoten  $A$  und  $B$  von  $\phi_n(x)$ , Anschaulich ist auch  $E_m > E_n$  nachvollziehbar da bei  $\phi_m$  die Frequenz höher ist.

## 13.20 Der endliche Potentialtopf

$$V(x) \begin{cases} -V_0; & -\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2} \\ 0; & \text{sonst} \end{cases} \quad (124)$$

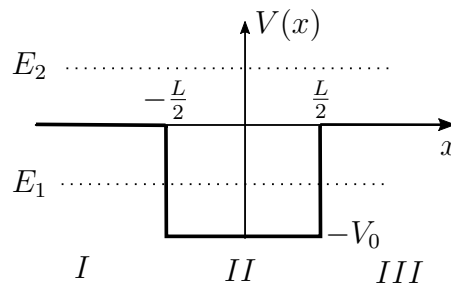


Abbildung 13.4: endliches Kastenpotential

Auch beim endlichen Kastenpotential haben wir 3 Bedingungen:

i) **Schrödingergleichung:**

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\phi_E''(x) + V(x)\phi_E(x) = E\phi_E(x)$$

ii) **Normierung:**

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$$

iii) **Stetigkeit:**

$\psi$  stetig ;  $\psi'$  stetig (insbesondere an den Kanten  $-\frac{L}{2}$  und  $\frac{L}{2}$ )

### 13.20.1 gebundene Zustände im endlichen Potentialtopf

Wir betrachten die Gebiete gesondert:

Sei  $E < 0$ . (klar, sonst hüpfte das „Teilchen“ aus dem Topf)

DGL:  $I, III$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\phi_{I,III}''(x) = E\phi_{I,III}(x) \quad \text{mit } \kappa^2 := -\frac{2m}{\hbar^2}E > 0 : \psi'' = \kappa^2\psi$$

DGL:  $II$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\phi_{II}''(x) - V_0\phi_{II}(x) = E\phi_{II}(x) \quad \text{mit } \kappa^2 := \frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0) : \psi'' = -\kappa^2\psi$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\phi_{II}''(x) = (E + V_0)\phi_{II}(x) \quad \text{Hinweis: } \psi = \phi \text{ (reine Notation)}$$

Wir wissen:  $E < 0$  ; aber **kann**  $E < -V_0$  **sein** ?

Dann wäre nach obiger Definition  $k^2 = 0$ . An Stellen mit  $\psi(x) > 0$  wäre nach  $\psi'' = -k^2\psi$  die zweite Ableitung positiv ( $\psi''(x) > 0$ ) , d.h.  $\psi$  wäre nach links gekrümmt.

Ist die Funktion also einmal positiv, steigt sie immer stärker und ist nicht mehr normierbar !

$\Rightarrow$  **gebundene Zustände gibt es nur für**  $-V_0 < E < 0$ .

Namentliche Erwähnungen:

**L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X** und Zusammenfassungen von:

Jan Herbst .....

Markus Exner .....

Christopher Weiß .....

Simon Ohler .....

Matthias Rüb .....

**Weiterhin haben bei der Korrektur einiger der geT<sub>E</sub>Xten Vorlesungen geholfen:**

Thomas Utz .....

Stefan Rath .....



Fakultät Physik  
TU Kaiserslautern  
20. Juni 2017

# Literaturverzeichnis

[Münster, 2010] Münster, G. (2010). Quantentheorie. De Gryter, 2 edition.

[Nolting, 2015] Nolting, W. (2015). Grundkurs Theoretische Physik 5/2. Springer Verlag, 8 edition.