

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DRESDEN

Skript:

# Quantentheorie I

Verfasser

Franziska Kühn

Daten

Prof. Dr. Roland Ketzmerick  
Sommersemester 2011  
Hauptstudium

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Wellen und Teilchen</b>	<b>4</b>
1.1	Elektromagnetische Wellen und Photonen . . . . .	4
1.2	Massebehaftete Teilchen und Materiewellen . . . . .	6
1.3	Kontinuitätsgleichung . . . . .	7
1.4	Wellenpakete für freies Teilchen . . . . .	8
1.5	Impulsmessung, Heisenbergsche Unschärferelation . . . . .	8
1.6	Teilchen in zeitunabhängigen Potentialen . . . . .	9
<b>2</b>	<b>Mathematische Grundlagen der Quantentheorie</b>	<b>15</b>
2.1	Wellenfunktionsraum . . . . .	15
2.2	Zustandsraum, Dirac'sche Notation . . . . .	17
2.3	Darstellungen . . . . .	20
2.4	Eigenwertgleichung für lineare Operatoren . . . . .	21
2.5	Kommutierende Observablen . . . . .	22
2.6	Orts- und Impulsdarstellung . . . . .	23
2.7	Orts- und Impulsoperator . . . . .	24
2.8	Funktionen und Ableitungen von Operatoren . . . . .	26
<b>3</b>	<b>Postulate der Quantenmechanik</b>	<b>27</b>
3.1	Klassische Mechanik . . . . .	27
3.2	Quantentheorie . . . . .	27
3.3	Folgerungen . . . . .	30
<b>4</b>	<b>Harmonischer Oszillator</b>	<b>36</b>
4.1	Algebraische Methode . . . . .	36
4.2	Kohärente Zustände . . . . .	41
4.3	3D harmonischer Oszillator . . . . .	43
<b>5</b>	<b>Dreidimensionale Probleme</b>	<b>45</b>
5.1	Drehimpuls . . . . .	45
5.2	Wasserstoffatom . . . . .	53
5.3	Spin . . . . .	58
5.4	Addition von Drehimpulsen . . . . .	62
<b>6</b>	<b>Bilder der Quantentheorie</b>	<b>66</b>
6.1	Zeitentwicklungsoperator . . . . .	66
6.2	Schrödinger-Bild . . . . .	67
6.3	Heisenberg-Bild . . . . .	67
6.4	Wechselwirkungs-Bild/Dirac-Bild . . . . .	68
<b>7</b>	<b>Quantenmechanische Näherungsverfahren</b>	<b>70</b>
7.1	Variationsprinzip . . . . .	70
7.2	Zeitunabhängige Störungstheorie . . . . .	71
7.3	Zeitabhängige Störungstheorie . . . . .	73
7.4	WKB-Näherung . . . . .	76

<b>8</b>	<b>Verschränkung, Indeterminismus, Nichtlokalität</b>	<b>79</b>
8.1	Verschränkung . . . . .	79
8.2	Indeterminismus, Nichtlokalität . . . . .	79

# 1

## Wellen und Teilchen

- Mechanik: Teilchen, Elektrodynamik: Wellen. Ab 1900 Revolution der Physik:
  - Quantentheorie (Planck, Einstein) → klassische Mechanik für große Abmessungen
  - Relativitätstheorie  $v \ll c$  → klassische Mechanik
- hier: nicht-relativistische Quantentheorie

### 1.1 Elektromagnetische Wellen und Photonen

- Newton: Licht ist Strahl von Teilchen.
- Huygens, Fresnel: Interferenz, Beugung ⇒ Licht ist Welle.
- 1900: Hohlraumstrahlung, Photoeffekt, Compton-Effekt ⇒ Licht ist Strahl von Teilchen.
  - (i). 1900, Planck: Hohlraumstrahlung  
klassische Argumentation:
    - Energie  $\frac{kT}{2}$  pro Freiheitsgrad (Resonanzmode)
    - unendlich viele Moden im Hohlraum ⇒ ∞-viel Energie
    - Energiedichte in einem Frequenzintervall:  $u(\nu) \propto \nu^2$  (Rayleigh-Jeans) passt nicht zu experimentellen BeobachtungenHypothese:
    - Quantisierung der Energie von elektromagnetischen Welle ist Vielfaches von  $h\nu = \hbar\omega$  ( $h$ : Plancksches Wirkungsquantum,  $\hbar = \frac{h}{2\pi} \approx 10^{-34} \text{Nm s}$ , Einheit: Energie · Zeit = Impuls · Weg)
    - Anregung von Moden mit  $\hbar\omega \gg k_0T$  exponentiell klein (statistische Physik)⇒ experimentelle Energiedichte der Hohlraumstrahlung
  - (ii). 1905, Einstein: Erklärung des Photoeffekts (Hertz, 1887)
    - Experiment: Licht schlägt nur dann ein Elektron aus einer Metalloberfläche, wenn  $\nu \geq \nu_{\min}$  (erwartet: Mindestintensität nach klassischer Elektrodynamik)
    - Austrittsarbeit  $\Phi$ , Mindestfrequenz  $h \cdot \nu_{\min} = \Phi$ , Vorhersage für kinetische Energie der Elektronen:
$$\frac{1}{2}m_e \cdot v^2 = h \cdot \nu - \Phi$$
    - Schlussfolgerung: Licht besteht aus Strahl von Teilchen (Photonen) mit Energie  $h\nu = \hbar\omega$
  - (iii). 1924, Compton-Effekt: Streuung eines Photons an einem Elektron  
Experiment nur erklärbar mit Energieerhaltung + Photonen-Energie  $E = \hbar\omega$  und Impulserhaltung + Photonen-Impuls  $\vec{p} = \hbar \cdot \vec{k}$ , siehe Übung 2.1 ( $\vec{k}$ : Wellenvektor der elektromagnetischen Welle)
- Was also: Welle oder Teilchen? Quantentheorie: Licht ist weder Teilchen noch Welle (ebenso für  $m \neq 0$ )!

### 1.1.1 Doppelspalt

- nur 1 offen  $\Rightarrow I_1(x)$ ; nur 2 offen  $\Rightarrow I_2(x)$ ; 1 und 2 offen  $\Rightarrow$  nicht  $(I_1 + I_2)(x)$ , sondern Interferenzbild
- Erklärungsversuch im Wellenbild (Maxwell-Gleichungen):
  - nur 1 offen: elektrisches Feld  $E_1(x) \Rightarrow$  Intensität  $I_1(x) \propto |E_1(x)|^2$
  - 1 und 2 offen:  $(E_1 + E_2)(x) \Rightarrow I(x) \sim |E_1(x) + E_2(x)|^2 = |E_1(x)|^2 + |E_2(x)|^2 + 2 \operatorname{Re}(E_1(x) \cdot \bar{E}_2(x)) \neq I_1(x) + I_2(x)$
  - Vorhersage für sinkende Intensität der Quelle? Interferenzmuster mit reduzierter Intensität
- Erklärungsversuch im Teilchenbild:
  - nur 1 offen:  $I_1(x)$  durch Photonenstöße an Ecken erklären (?)
  - 1 und 2 offen: Interferenz aus Photonen, die durch 1 gehen mit denen, die durch 2 gehen (?)
  - Vorhersage bei sinkender Intensität? kein Interferenzbild
- Experiment: Sei Quelle so schwach, dass die Photonen einzeln kommen. Aufnahme mit photographischer Platte. Beide Vorhersagen falsch!
  - (i). lange Aufnahmezeit: Interferenzbild  $\Rightarrow$  Teilchenbild falsch
  - (ii). kurze Aufnahmezeit: einzelne Schwärzungen, kein Interferenzbild  $\Rightarrow$  Wellenbild falsch
- Beobachtung: Die Photonen werden als Teilchen nachgewiesen. Die Wahrscheinlichkeit, an einem bestimmten Ort  $x$  einzutreffen, ist wie die Intensität einer Welle verteilt.
- Es gibt eine Wahrscheinlichkeitsamplitude (Welle), deren Betragsquadrat die Wahrscheinlichkeitsdichte für den Nachweis von Teilchen ist.
- Es ist keine Messanordnung bekannt, die den Pfad feststellt, ohne das Interferenzbild zu zerstören.
- Klassische Trajektorie ist falsches Bild. Messung an mikroskopischen Systemen stören das System stark.

### 1.1.2 Polarisation

- Ebene Welle, monochromatisch, Propagation in  $z$ -Richtung, Polarisation in Richtung  $\vec{e}_p$ ,

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = E_0 \cdot \vec{e}_p \cdot e^{i(kz - \omega t)}$$

Es gilt  $I \propto |E_0|^2$ .

- Sei  $A$  ein Analysator in  $x$ -Richtung. Klassische Beschreibung für Welle hinter  $A$ :

$$\vec{E}'(\vec{r}, t) = E'_0 \cdot \vec{e}_x \cdot e^{i(kz - \omega t)}$$

mit  $I' \propto |E'_0|^2$ ,  $I' = I \cdot \cos^2(\theta)$ .

- Intensität sei so schwach, dass die Photonen einzeln kommen:
  - Photodetektor hinter  $A$  misst ganze Photonen  $\Rightarrow$  Entweder von  $A$  reflektiert oder durchgelassen
  - keine Vorhersage für einzelnes Photon möglich (Ausnahme siehe unten)
  - viele Photonen: Wahrscheinlichkeit für Durchqueren von  $A$  ist  $\cos^2 \theta$
- Verallgemeinerung:

- (i). Messgerät (aus Analysator A und Photodetektor  $\hat{=}$  Operator A) erlaubt nur bestimmte quantisierte Messergebnisse (Eigenwerte von A): 0 reflektiert, 1 durchgelassen
- (ii). Zu jedem Messergebnis (Eigenwert von A) gibt es einen Zustand (Eigenzustand von A), der immer nur zu diesem Messergebnis führt:  $0 : \vec{e}_p = \vec{e}_y, 1 : \vec{e}_p = \vec{e}_x$
- (iii). Beliebiger Zustand vor Messung ist Linearkombination von Eigenzuständen

$$\vec{e}_p = \cos \theta \cdot \vec{e}_x + \sin \theta \cdot \vec{e}_y$$

Die Wahrscheinlichkeit für einen Eigenwert ist proportional zum Betragsquadrat des Vorfaktors des zugehörigen Eigenzustandes: Wahrscheinlichkeit für 0 ist  $\sin^2 \theta$ , für 1  $\cos^2 \theta$

- (iv). Hinter Analysator A: Licht ist in  $x$ -Richtung polarisiert  $\Rightarrow$  Zustand hinter A ist Eigenzustand  $\vec{e}_x$  von A (vorher  $\vec{e}_p$ ). Messung mit A stört System stark.

## 1.2 Massebehaftete Teilchen und Materiewellen

- 1923, de Broglie: Teilchen mit Ruhemasse  $m \neq 0$  (z.B. Elektron) haben Welleneigenschaften (wie Photonen)  $\Rightarrow$  Übertragung der Konzepte von Photonen auf Teilchen mit  $m \neq 0$
- Experiment: Doppelspaltversuch für  $e^-$ , Atome,  $C_{60}$ -Moleküle ergibt Interferenz
  - (i). keine Trajektorien, sondern Zustand durch Wellenfunktion  $\psi(\vec{r}, t)$  beschreiben
  - (ii).  $\psi(\vec{r}, t)$  ist die Wahrscheinlichkeitsamplitude für Teilchen.  $|\psi(\vec{r}, t)|^2$  ist die Wahrscheinlichkeit, d.h. die Wahrscheinlichkeit das Teilchen im Volumenelement  $d^3r = dx dy dz$  bei  $\vec{r}$  zu finden ist  $C \cdot |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r$  ( $C$ : Normierungsfaktor, damit  $\int C \cdot |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r = 1$ ).
  - (iii). Zeitentwicklung von  $\psi(\vec{r}, t)$ : (anstatt Maxwell-Gleichungen für  $m = 0$ )

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

(Schrödinger-Gleichung)

Bemerkungen:

- Schrödinger-Gleichung ist Hypothese (Postulat).
- Schrödinger-Gleichung ist
  - (i). linear und homogen ( $\Rightarrow$  Superpositionsprinzip)
  - (ii). Differentialgleichung 1. Ordnung in  $t \Rightarrow \psi(\vec{r}, t_0)$  reicht als Anfangsbedingung für Vorhersage für alle Zeiten.
- mögliche „Herleitung“: Maxwell-Gleichungen ohne Ladung und ohne Ströme führt zur Wellengleichung

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

relativistisches Teilchen mit  $m = 0$ :  $E = c \cdot |\vec{p}|$ , also

$$-\vec{p}^2 + \frac{1}{c^2} \cdot E^2 = 0$$

Vergleich  $\Rightarrow$  Ersetzungsregeln:  $E \rightarrow i \hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t}, p_x \rightarrow -i \hbar \cdot \frac{\partial}{\partial x}$ . Anwenden auf nicht-relativistisches Teilchen mit  $m \neq 0$ ,

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}, t)$$

- Wahrscheinlichkeitsdichte bedeutet nicht, dass das Teilchen „ausgeschmiert“ ist.

- $\psi(\vec{r}, t)$  kann nicht gemessen werden, sondern nur  $|\psi(\vec{r}, t)|^2$
- klassischer Zustand zur Zeit  $t$ :  $(x, y, z, p_x, p_y, p_z)$  (6 Größen), quantenmechanischer Zustand zur Zeit  $t$ :  $\psi(\vec{r}, t)$  ( $\infty$ -viele Größen)
- Messprozess:
  - Messung der Größe A hat nur bestimmte erlaubte Messergebnisse aus einer Menge  $\{a\}$  (Eigenwerte von A)
  - Zu jedem Messwert  $a$  gibt es einen Eigenzustand  $\psi_a(\vec{r})$ .
  - Sei  $\psi(\vec{r}, t_0^-) = \psi_a(\vec{r})$ , dann Messergebnis  $a$  mit Wahrscheinlichkeit 1.
  - Beliebiges  $\psi(\vec{r}, t_0^-)$  darstellbar als

$$\psi(\vec{r}, t_0^-) = \sum_a c_a \cdot \psi_a(\vec{r})$$

(Spektralzerlegung bzgl. Messung A). Wahrscheinlichkeit für a:

$$P_a = \frac{|c_a|^2}{\sum_a |c_a|^2}$$

- Nach Messung mit Ergebnis a:  $\psi(\vec{r}, t_0^+) = \psi_a(\vec{r})$ .

Zusammenfassung:

- Teilchen- und Wellenaspekt sind untrennbar ( $m = 0, m > 0$ )
- Wahrscheinlichkeitsamplitude  $\psi(\vec{r}, t)$  folgt Schrödinger-Gleichung (Wellenaspekt)  $\Rightarrow$  deterministisch
- Wahrscheinlichkeitsdichte  $|\psi(\vec{r}, t)|^2$  für Nachweis (Teilchen)  $\Rightarrow$  probabilistisch
- Diese nicht-intuitive Quantentheorie beschreibt das Experiment.

### 1.3 Kontinuitätsgleichung

Hängt die ortsabhängige Wahrscheinlichkeitsdichte  $|\psi(\vec{r}, t)|^2 = \varrho(\vec{r}, t)$  mit einer Stromdichte  $j(\vec{r}, t)$  zusammen?

$$\frac{\partial}{\partial t} \varrho(\vec{r}, t) = \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\psi} \cdot \psi) = \bar{\psi} \cdot \frac{\partial}{\partial t} \psi + \psi \cdot \frac{\partial}{\partial t} \bar{\psi}$$

Nutze Schrödinger-Gleichung:

$$\begin{aligned} i\hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) &= \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}, t) \right) \psi(\vec{r}, t) \\ \Rightarrow -i\hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t} \bar{\psi}(\vec{r}, t) &= \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \bar{V}(\vec{r}, t) \right) \bar{\psi}(\vec{r}, t) \end{aligned}$$

Sei nun das Potential reell, d.h.  $V = \bar{V}$ . Damit:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \varrho(\vec{r}, t) &= \bar{\psi} \cdot \frac{1}{i\hbar} \cdot \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}, t) \right) \psi(\vec{r}, t) - \psi \cdot \frac{1}{i\hbar} \cdot \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}, t) \right) \bar{\psi}(\vec{r}, t) \\ &= -\frac{\hbar}{2m i} \cdot (\bar{\psi} \cdot \Delta \psi - \psi \cdot \Delta \bar{\psi}) \\ &= -\vec{\nabla} \cdot \left( \frac{\hbar}{2m i} \cdot (\bar{\psi} \cdot \vec{\nabla} \psi - \psi \cdot \vec{\nabla} \bar{\psi}) \right) \end{aligned}$$

Definiere Wahrscheinlichkeitsstromdichte

$$\begin{aligned}\vec{j}(\vec{r}, t) &:= \frac{\hbar}{2m\iota} \cdot (\bar{\psi} \cdot \vec{\nabla} \psi - \psi \cdot \vec{\nabla} \bar{\psi}) \\ &= \frac{1}{m} \cdot \text{Re} \left( \bar{\psi} \cdot \underbrace{\frac{\hbar}{\iota} \vec{\nabla}}_{\vec{p}} \psi \right)\end{aligned}$$

Damit

$$\frac{\partial}{\partial t} \varrho(\vec{r}, t) + \text{div} \vec{j}(\vec{r}, t) = 0$$

(Kontinuitätsgleichung) Erhaltung der Norm:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \int_V \varrho(\vec{r}, t) d^3r &= \int_V \dot{\varrho} d^3r = - \int_V \text{div} \vec{j} d^3r \\ &\stackrel{\text{Gau\ss}}{=} - \int_{\partial V} \vec{j} \cdot d\vec{A} = 0\end{aligned}$$

falls  $\vec{j}$  bei  $\infty$  klein genug.

#### 1.4 Wellenpakete für freies Teilchen

Beschränkung auf freies Teilchen, d.h.  $V = 0$ . Schrödinger-Gleichung:

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

Man erhält als Lösung

$$\psi(\vec{r}, t) = A \cdot e^{\iota(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$$

mit  $\hbar \omega = \frac{\hbar^2 |k|^2}{2m}$  (andere Dispersionsrelation als in der Elektrodynamik). Offenbar ist

$$|\psi(\vec{r}, t)|^2 = |A|^2$$

zeitlich und räumlich konstant, also nicht normierbar, physikalisch nicht realisierbar. Nutze Superpositionsprinzip, um allgemeine Lösung (Wellenpaket) zu erhalten:

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \cdot \int g(\vec{k}) \cdot e^{\iota(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} d^3k$$

(Ist im Allgemeinen normierbar.)

(i). 1D,  $t = 0$ :

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \int_{\mathbb{R}} g(k) \cdot e^{\iota kx} dk$$

d.h.  $\psi(x, 0)$  ist Fourier-Transformation von  $g(k)$ . Inversion (für  $g \in \mathcal{S}$ ):

$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \psi(x, 0) \cdot e^{-\iota kx} dx$$

Eigenschaft der Fourier-Transformation: Breite  $\Delta j$  von  $g(k) \leftrightarrow$  Breite  $\Delta x$  von  $\psi(x, 0)$ .

#### 1.5 Impulsmessung, Heisenbergsche Unschärferelation

- Ebene Welle  $\psi(x) = e^{\iota k \cdot x}$  hat Impuls  $p = \hbar \cdot k$  mit Wahrscheinlichkeit 1.  $e^{\iota k \cdot x}$  ist Eigenzustand zu Impulsmessung.



- Wellenpaket:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \int g(k) \cdot e^{i k \cdot x} dk$$

Dies ist die Spektralzerlegung für die Impulsmessung.  $|g(k)|^2 \propto$  Wahrscheinlichkeitsdichte für Impulsmessung. Genauer: Definiere  $\psi^*(p)$  statt  $g(k)$ , dann

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \int \psi^*(p) \cdot e^{i \frac{p}{\hbar} \cdot x} dp$$

bzw.

$$\psi^*(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi \cdot \hbar}} \cdot \int \psi(x) \cdot e^{-i \frac{p \cdot x}{\hbar}} dx$$

Parseval-Theorem der Fourier-Transformation:

$$1 = \int |\psi(x)|^2 dx = \int |\psi^*(p)|^2 dp$$

also  $\psi^*(p)$  Wahrscheinlichkeitsdichte für Impulsmessung. Aus  $\Delta k \cdot \Delta x \gtrsim 1$  (Fourier-Transformation) folgt  $\Delta x \cdot \Delta p \gtrsim \hbar$  (Heisenbergsche Unschärferelation). Es ist also unmöglich Ort und Impuls gleichzeitig beliebig genau zu messen.

## 1.6 Teilchen in zeitunabhängigen Potentialen

$$V(\vec{r}, t) = V(\vec{r}) \in \mathbb{R}$$

### 1.6.1 Stationäre Zustände

- Schrödinger-Gleichung:

$$i \hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = H \psi(\vec{r}, t)$$

mit Hamilton-Operator  $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r})$  (Hamilton-Funktion:

$$H(\vec{q}, \vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{q})$$

Ansatz:  $\psi(\vec{r}, t) = f(t) \cdot \varphi(\vec{r})$ . Einsetzen:

$$i \hbar \cdot \dot{f}(t) \cdot \varphi(\vec{r}) = f(t) \cdot H \varphi(\vec{r})$$

Ziel: Variablenseparation. Dividiere durch  $f(t)$ :

$$i \hbar \frac{\dot{f}(t)}{f(t)} \cdot \varphi(\vec{r}) = H \varphi(\vec{r}) \quad (*)$$

(Frage: Kann  $f(t) = 0$  sein? Nein! Beweis mit Norm:

$$1 = \int |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3 r = |f(t)|^2 \cdot \int |\varphi(\vec{r})|^2 d^3 r$$

also  $|f(t)|^2$  zeitunabhängig, o.B.d.A.  $|f(t)|^2 = 1$ .)

Division durch  $\varphi(\vec{r})$  nicht möglich, da  $\varphi(\vec{r}_0) = 0$  sein kann. Lösung: Multipliziere mit  $\bar{\varphi}(\vec{r})$  und integriere  $\int d^3 r$ :

$$i \hbar \cdot \frac{\dot{f}(t)}{f(t)} \cdot \underbrace{\int |\varphi(\vec{r})|^2 d^3 r}_1 = \underbrace{\int \bar{\varphi}(\vec{r}) \cdot H \varphi(\vec{r}) d^3 r}_{\text{zeitunabhängig}} =: E$$

Lösung der Differentialgleichung für  $f(t)$ :

$$f(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \cdot E \cdot t\right)$$

Normierung:

$$\forall t : |f(t)|^2 = \exp\left(-\frac{\imath}{\hbar} \cdot (E - \bar{E}) \cdot t\right) \stackrel{!}{=} 1$$

also  $E = \bar{E}$ , d.h.  $E$  ist reell. Einsetzen von  $f(t)$  in (\*):

$$H\varphi(\vec{r}) = E \cdot \varphi(\vec{r})$$

(zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung), Eigenwertgleichung des Operators  $H$ .  $E$  ist Eigenwert (Energiequantisierung),  $\varphi(\vec{r})$  Eigenwertfunktion.

- Damit:

$$\psi(\vec{r}, t) = e^{-\frac{\imath}{\hbar} \cdot E t} \cdot \varphi(\vec{r})$$

ist eine Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung, stationäre Lösung, da Wahrscheinlichkeitsdichte  $|\psi(\vec{r}, t)|^2 = |\varphi(\vec{r})|^2$  zeitunabhängig. Allgemeine Lösung der Schrödinger-Gleichung (nutze Superpositionsprinzip):

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_k c_k \cdot \exp\left(-\frac{\imath}{\hbar} \cdot E_k t\right) \cdot \varphi_k(\vec{r})$$

Bemerkungen:

- Bei kontinuierlichen Spektren:  $\sum_k \rightarrow \int dE$
- allgemeine Lösung nicht stationär.

### 1.6.2 Eindimensionale Potentiale

- Einfacher, zeigt Prinzipien, viele Probleme (3D) sind effektiv 1D.

$$\begin{aligned} H &= -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) & H\varphi(x) &= E\varphi(x) \\ \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi(x) &= (E - V(x)) \cdot \varphi(x) & & (**) \end{aligned}$$

Beschränkung auf Bereich konstanten Potentials  $V(x) = V_0$  (analytisch lösbar).

- (i).  $E > V_0$ :

$$\varphi(x) = A \cdot e^{\imath k \cdot x} + A' \cdot e^{-\imath k \cdot x}$$

(nach links bzw. nach rechts laufende Welle) mit  $\frac{\hbar^2 \cdot k^2}{2m} = E - V_0$ ,  $A, A' \in \mathbb{C}$ ,  $k > 0$ .

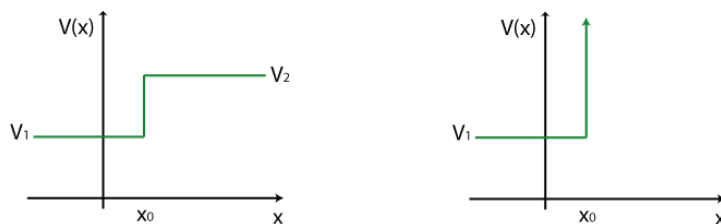
- (ii).  $E < V_0$ :

$$\varphi(x) = B \cdot e^{\varrho \cdot x} + B' \cdot e^{-\varrho \cdot x}$$

(einlaufende/auslaufende Welle) mit  $\frac{\hbar^2 \cdot \varrho^2}{2m} = V_0 - E$ ,  $\varrho > 0$ ,  $B, B' \in \mathbb{C}$ . Problem: Divergenz für  $|\varphi(x)|^2$  bei  $x \rightarrow \infty$ , also  $E \notin V_0$  Exponentiell anwachsende Lösungen sind nur in einem endlichen Bereich physikalisch sinnvoll.

- (iii).  $E = V_0$ :  $\varphi(x) = c + c' \cdot x$  mit  $c, c' \in \mathbb{C}$

### 1.6.3 Verhalten von $\varphi(x)$ an Unstetigkeitsstellen des Potentials



- (i). endlicher Potentialsprung: Ergebnis:  $\varphi, \varphi'$  stetig,  $\varphi''$  unstetig.

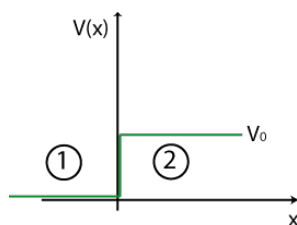
Beweis: Ersetze  $V(x)$  durch stetiges  $V_\varepsilon(x)$  mit  $V_1 \leq V_\varepsilon(x) \leq V_2$ . Dann

$$\begin{aligned} \int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi(x) dx &= -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot (\varphi'(x_0+\varepsilon) - \varphi'(x_0-\varepsilon)) \\ &= \int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} \underbrace{(E - V_\varepsilon(x))}_{\text{beschränkt}} \cdot \underbrace{\varphi_\varepsilon(x)}_{\leq \frac{1}{\sqrt{2\varepsilon}}} dx \leq \sqrt{\varepsilon} \cdot c' \end{aligned}$$

Für  $\varepsilon \rightarrow 0$ :  $\varphi'(x_0^+) = \varphi'(x_0^-) = 0$ , also  $\varphi'$  stetig. Aus (\*\*\*) folgt Unstetigkeit von  $\varphi''$ , da  $V$  unstetig.

- (ii). unendlicher Potentialsprung: Ergebnis:  $\varphi(x)$  stetig mit  $\varphi(x_0) = 0$ ,  $\varphi'$  unstetig.  
 (iii). Delta-Funktion ( $V(x) = \alpha \cdot \delta(x)$ ): Ergebnis:  $\varphi(x)$  stetig,  $\varphi'$  unstetig mit  $\varphi'(x_0^+) - \varphi'(x_0^-) = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \cdot \varphi(x_0)$  (Übung).

#### 1.6.4 Potentialstufe



- (i).  $E > V_0$ :

- ①  $\varphi_1(x) = A_1 \cdot e^{i k_1 x} + A_1' \cdot e^{-i k_1 x}$  mit  $\frac{\hbar^2 \cdot k_1^2}{2m} = E$
- ②  $\varphi_2(x) = A_2 \cdot e^{i k_2 x} + A_2' \cdot e^{-i k_2 x}$  mit  $\frac{\hbar^2 \cdot k_2^2}{2m} = E - V_0$

also 4 Unbekannte. Stetigkeitsbedingungen:  $\varphi_1(0) = \varphi_2(0)$ ,  $\varphi_1'(0) = \varphi_2'(0)$ . Damit

$$A_1 + A_1' = A_2 + A_2' \quad k_1 \cdot (A_1 - A_1') = k_2 \cdot (A_2 - A_2')$$

also 2 Gleichungen. Wähle  $A_2' = 0$ , d.h. in ② nur Wellen nach rechts. Damit noch drei Unbekannte. Sei  $A_1$  eine vorgegebene beliebige Amplitude, dann

$$1 + \frac{A_1'}{A_1} = \frac{A_2}{A_1} \tag{I}$$

$$k_1 \cdot \left(1 - \frac{A_1'}{A_1}\right) = k_2 \cdot \frac{A_2}{A_1} \tag{II}$$

$$\xrightarrow{k_2 \cdot \text{I} - \text{II}} \frac{A_1'}{A_1} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \quad \frac{A_2}{A_1} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}$$

Wahrscheinlichkeitsstromdichte:

$$j = \frac{1}{m} \cdot \text{Re} \left( \bar{\varphi} \cdot \frac{\hbar}{i} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \varphi \right)$$

Damit:

$$\begin{aligned} j_2 &= \frac{1}{m} \cdot \text{Re} \left( \bar{A}_2 \cdot e^{-i k_2 x} \cdot \frac{\hbar}{i} \cdot A_2 \cdot (i k_2) \cdot e^{i k_2 x} \right) \\ &= \frac{\hbar \cdot k_2}{m} \cdot \text{Re}(\bar{A}_2 \cdot A_2) = \frac{\hbar \cdot k_2}{m} \cdot |A_2|^2 \end{aligned}$$

$$j_1 = \dots = \frac{\hbar \cdot k_1}{m} \cdot \left( \underbrace{|A_1|^2}_{\text{einlaufend}} - \underbrace{|A_1'|^2}_{\text{reflektiert}} \right)$$

Reflexionskoeffizient  $R$ :

$$R = \frac{j_{1,\text{reflektiert}}}{j_{1,\text{einlaufend}}} = \frac{|A_1'|^2}{|A_1|^2} = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2}$$

Transmissionskoeffizient  $T$ :

$$T = \frac{j_2}{j_{1,\text{einlaufend}}} = \frac{k_2}{k_1} \cdot \frac{|A_2|^2}{|A_1|^2} = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

Bemerkungen:

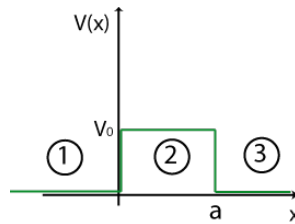
- $R + T = 1$
- Energie kontinuierlich
- $E \gg V_0$ : Dann  $k_1 \approx k_2$ , also  $R \approx 0$ ,  $T \approx 1$  (entspricht klassischer Erwartung,  $R = 0$ ,  $T = 1$ )
- konjugiert komplexe Lösung

$$\bar{\varphi}_1(x) = \bar{A}_1 \cdot e^{-i k_1 x} + \bar{A}_1' \cdot e^{i k_1 x}$$

$$\bar{\varphi}_2(x) = \bar{A}_2 \cdot e^{-i k_2 x} + \bar{A}_2' \cdot e^{i k_2 x}$$

Löst auch die Schrödinger-Gleichung ( $H\varphi = E\varphi \Rightarrow H\bar{\varphi} = E\bar{\varphi}$ ), linear unabhängig. Zweifache Entartung (zwei Lösungen zur gleichen Energie). Superposition liefert alle Lösungen.

### 1.6.5 Potentialbarriere, Tunneleffekt



(i).  $0 < E < V_0$ :

$$\textcircled{1} \quad A_1 \cdot e^{i k_1 x} + A_1' \cdot e^{-i k_1 x}$$

$$\textcircled{2} \quad A_2 \cdot e^{\varrho_2 x} + A_2' \cdot e^{-\varrho_2 x}$$

$$\textcircled{3} \quad A_3 \cdot e^{i k_3 x} + A_3' \cdot e^{-i k_3 x}$$

Es gilt  $k_1 = k_3$ . Wähle  $A_3' = 0$ . Stetigkeitsbedingung an  $\varphi(0), \varphi(a), \varphi'(0), \varphi'(a)$ . Ergebnis:

$$T(E) = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E \cdot (V_0 - E)} \cdot \sinh^2(\varrho_2 \cdot a)}$$

mit  $\frac{\hbar^2 \cdot \varrho_2^2}{2m} = V_0 - E$ . Für  $\varrho_2 \cdot a \gg 1$ :

$$T(E) \rightarrow \frac{16E \cdot (V_0 - E)}{V_0^2} \cdot \underbrace{\exp\left(-\frac{2}{\hbar} \cdot \sqrt{2m \cdot (V_0 - E)} \cdot a\right)}_{e^{-2\varrho_2 \cdot a}}$$

Bemerkungen:

- klassisch  $T = 0$ , quantenmechanisch  $T > 0$
- $T$  wird exponentiell klein für wachsende Breite  $a$ , wachsende Höhe  $V_0$
- allgemeine Potentialbarriere ( $\rightarrow$  WKB-Näherung):

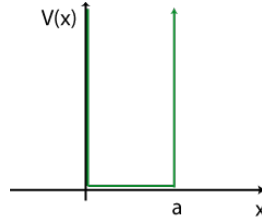
$$T \sim \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \cdot \int_0^a |p(x)| dx\right)$$

(ii).  $E > V_0$ :

$$T(E) = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E \cdot (E - V_0)} \cdot \sin^2(k_2 \cdot a)}$$

mit  $\frac{\hbar^2 \cdot k_2^2}{2m} = E - V_0$ . Resonanzen ( $T = 1$ ) für  $k_2 \cdot a = n \cdot \pi$  ( $n \in \mathbb{N}$ ).

### 1.6.6 Potentialtopf mit unendlich hoher Wand



Randbedingungen:  $\varphi(0) = 0, \varphi(a) = 0$ .

(i).  $E < 0$ : Ansatz

$$\varphi(x) = B \cdot e^{\varrho \cdot x} + B' \cdot e^{-\varrho \cdot x}$$

mit  $\frac{\hbar^2 \cdot \varrho^2}{2m} = V_0 - E = -E$ . Unvereinbar mit Randbedingungen:

$$x = 0 : B + B' \stackrel{!}{=} 0 \Rightarrow B' = -B$$

$$x = a : B \cdot e^{\varrho \cdot a} + B' \cdot e^{-\varrho \cdot a} = 0 \Rightarrow e^{\varrho \cdot a} - e^{-\varrho \cdot a} = 0$$

also  $\varrho = 0$ . Widerspruch!

(ii).  $E > 0$ :

$$\varphi(x) = A \cdot e^{i k \cdot x} + A' \cdot e^{-i k \cdot x}$$

mit  $\frac{\hbar^2 \cdot k^2}{2m} = E$ . Randbedingungen:

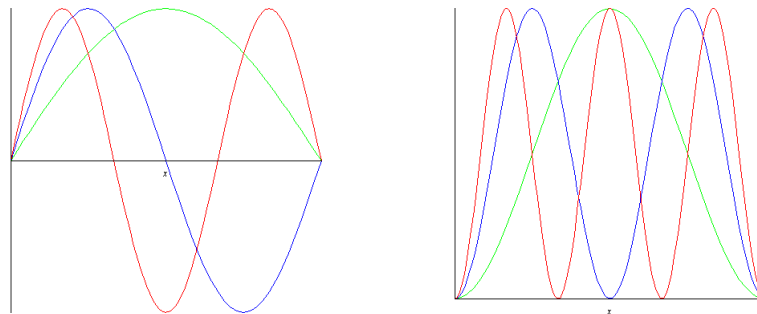
$$x = 0 : A + A' = 0 \Rightarrow \varphi(x) = A \cdot (e^{i k \cdot x} - e^{-i k \cdot x}) = i 2A \cdot \sin(x \cdot k)$$

$$x = a : \varphi(a) = 0 \Rightarrow \sin(k \cdot a) = 0 \Rightarrow k \cdot a = n \cdot \pi (n \in \mathbb{N})$$

Damit  $k_n := \frac{n \cdot \pi}{a}$ ,  $E_n = \frac{\hbar^2 \cdot \pi^2}{2m \cdot a^2} \cdot n^2$ , d.h. nur diskrete Energiewerte möglich. Bemerkung: Klassische Periodendauer  $T = \frac{2a}{v}$  steckt in Quantenmechanik als  $T = \frac{h}{\Delta E}$ . Eigenfunktionen:

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sin\left(\frac{\pi \cdot n}{a} \cdot x\right)$$

Plot der Eigenfunktionen für  $n = 1$  (grün),  $n = 2$  (blau),  $n = 3$  (rot). Links:  $\varphi_n(x)$ , rechts:  $|\varphi_n(x)|^2$ .



Bemerkungen:

- Symmetrie
- Anzahl der Knoten (d.h.  $|\{x \in (0, a); \varphi_j(x) = 0\}|$ ) ist  $n - 1$ . Allgemeine Knotenregel für „beliebige“ 1D-Potentiale: Die  $n$ -te Eigenfunktion hat  $(n - 1)$  Knoten.
- Allgemein: Der energetisch tiefste Zustand (Grundzustand) hat  $E > \min(V)$ .

### 1.6.7 Zweidimensionale Potentiale

- Sei das Potential separierbar, d.h.  $V(x, y) = V_1(x) + V_2(y)$ . Schrödinger-Gleichung:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left( \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) + V_1(x) + V_2(y) \right) \varphi(x, y) = E \varphi(x, y)$$

Ansatz:  $\varphi(x, y) = \varphi_1(x) \cdot \varphi_2(y)$ .

$$\begin{aligned} E \varphi_1(x) \varphi_2(y) &= \underbrace{\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_1(x) \right)}_{=: H_1(x)} \varphi_1(x) \varphi_2(y) + \underbrace{\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + V_2(y) \right)}_{=: H_2(y)} \varphi_1(x) \varphi_2(y) \\ &\Rightarrow E \varphi_2(y) = E_1 \cdot \varphi_2(y) + H_2 \varphi_2(y) \\ &\Rightarrow E = E_1 + E_2 \end{aligned}$$

wobei

$$\int \overline{\varphi_1(x)} \cdot H_1 \varphi_1(x) dx =: E_1 \quad \int \overline{\varphi_2(y)} \cdot H_2 \varphi_2(y) dy =: E_2$$

(Multipliziere dazu erste Gleichung mit  $\overline{\varphi_1(x)}$  und integriere  $\int dx$ .) Analog erhält man:

$$H_1 \varphi_1(x) = E_1 \varphi_1(x) \quad H_2 \varphi_2(y) = E_2 \varphi_2(y)$$

also zwei 1D-Probleme.

- Beispiele:

- $V(x, y) = V_1(x) \Rightarrow \varphi(x, y) = \varphi_1(x) \cdot e^{i k_y \cdot y}$
- 2D-rechteckiger Potentialtopf mit unendlicher hoher Wand, dann

$$\begin{aligned} \varphi_{k,\ell}(x, y) &= \sin\left(\frac{k\pi \cdot x}{a}\right) \cdot \sin\left(\frac{\ell\pi \cdot y}{b}\right) \\ E_{k,\ell} &= E_k + E_\ell = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \cdot \left( \frac{k^2}{a^2} + \frac{\ell^2}{b^2} \right) \end{aligned}$$

- 2D-beliebig geformter Potentialtopf (Billard):  $V(x, y)$  nicht separierbar.

# 2

## Mathematische Grundlagen der Quantentheorie

### 2.1 Wellenfunktionsraum

- Wellenfunktion  $\psi(\vec{r}, t)$  ist Wahrscheinlichkeits-Amplitude.  $|\psi(\vec{r}, t)|^2$  ist Wahrscheinlichkeitsdichte mit

$$\int |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r = 1$$

Menge der quadratintegriblen Funktionen  $L^2$  ist also wichtig. Hat Struktur eines Hilbertraumes.

#### 2.1.1 Struktur von $L^2$

$L^2$  hat Struktur eines Hilbertraumes, d.h. ist ein linearer unitärer vollständiger Raum:

- linearer Raum (Vektorraum) über dem Körper der komplexen Zahlen, z.B.  $\psi_1, \psi_2 \in L^2 \Rightarrow \lambda_1 \cdot \psi_1 + \lambda_2 \cdot \psi_2 \in L^2$  ( $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$ ). Bis auf Komplexität gleiche Struktur wie für Vektorrechnung in  $\mathbb{R}^3$ .
- unitärer Vektorraum: Definition eines Skalarproduktes, indem jedem Paar  $\varphi(\vec{r}), \psi(\vec{r})$  eine komplexe Zahl

$$(\varphi, \psi) := \int_{\mathbb{R}^3} \overline{\varphi(\vec{r})} \cdot \psi(\vec{r}) d^3r$$

Integral existiert nach Cauchy-Schwarz-Ungleichung. Eigenschaften:

- hermitesch:  $\overline{(\varphi, \psi)} = (\psi, \varphi)$
- linear im 2. Argument:  $(\varphi, \lambda_1 \cdot \psi_1 + \lambda_2 \cdot \psi_2) = \lambda_1 \cdot (\varphi, \psi_1) + \lambda_2 \cdot (\varphi, \psi_2)$
- antilinear im 1. Argument:  $(\lambda_1 \cdot \varphi_1 + \lambda_2 \cdot \varphi_2, \psi) = \bar{\lambda}_1 \cdot (\varphi_1, \psi) + \bar{\lambda}_2 \cdot (\varphi_2, \psi)$
- positiv definit:  $(\psi, \psi) \geq 0$
- $(\psi, \psi) = 0 \Leftrightarrow \psi = 0$

Definiere Norm  $\|\psi\| := \sqrt{(\psi, \psi)}$ . Dann  $\|\cdot\|$  Norm auf  $L^2$ . Definition der Orthogonalität:  $\psi, \varphi$  orthogonal  $\Leftrightarrow (\psi, \varphi) = 0$ .

- $L^2$  vollständig: Jede  $L^2$ -Cauchy-Folge besitzt  $L^2$ -Grenzwert.

#### 2.1.2 Lineare Operatoren

- Definition: Ein linearer Operator  $A$  ordnet einer Funktion  $\psi \in L^2$  eine andere Funktion  $\psi'(\vec{r}) = A\psi(\vec{r})$  zu, dabei gilt Linearität:

$$\forall \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C} \forall \psi_1, \psi_2 \in L^2 : A(\lambda_1 \cdot \psi_1(\vec{r}) + \lambda_2 \cdot \psi_2(\vec{r})) = \lambda_1 \cdot A\psi_1(\vec{r}) + \lambda_2 \cdot A\psi_2(\vec{r})$$

Bemerkung: Im Folgenden macht sich niemand Gedanken über Definitionsbereiche, also insbesondere keine Unterscheidung zwischen beschränkten und unbeschränkten Operatoren möglich.

- Beispiele:

- (i). Paritätsoperator:  $\Pi\psi(x, y, z) := \psi(-x, -y, -z)$
- (ii). Ortsoperator:  $X\psi(x, y, z) := x \cdot \psi(x, y, z)$ ; manchmal auch als  $\hat{X}, \hat{x}, x$
- (iii). Ableitungsoperator:  $D_x\psi(x, y, z) := \frac{\partial}{\partial x}\psi(x, y, z)$

- Produkte von Operatoren:

$$(AB)\psi(\vec{r}) := (A \circ B)\psi(\vec{r}) = A(B(\psi(\vec{r})))$$

Meist  $AB \neq BA$ .

- Kommutator:

$$[A, B] := AB - BA$$

Beispiel:

$$\begin{aligned} (XD_x)\psi(\vec{r}) &= x \cdot \frac{\partial}{\partial x}\psi(\vec{r}) \\ (D_xX)\psi(\vec{r}) &= \frac{\partial}{\partial x}(x \cdot \psi(\vec{r})) = \psi(\vec{r}) + x \cdot \frac{\partial}{\partial x}\psi(\vec{r}) \\ \Rightarrow [X, D_x] &= -\text{id} \quad [D_x, X] = \text{id} \end{aligned}$$

### 2.1.3 Diskrete orthonormale Basis

- Motivation:  $\mathbb{R}^3$  mit Basisvektoren  $\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z$
- Definition: Seien  $u_i(\vec{r}) \in L^2$  für  $i \in I$  abzählbar und orthonormiert, d.h.

$$\forall i, j \in I : (u_i, u_j) = \delta_{ij}$$

Dies ist eine Basis  $(u_i)_{i \in I}$ , falls jedes  $\psi(\vec{r}) \in L^2$  eindeutig darstellbar als

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{i \in I} c_i \cdot u_i(\vec{r}) \quad (c_i \in \mathbb{C})$$

Es gilt

$$(u_j, \psi) = \left( u_j, \sum_{i \in I} c_i \cdot u_i \right) = \sum_{i \in I} c_i \cdot (u_j, u_i) = c_j$$

(Entwicklungskoeffizient in Basis  $(u_i)_{i \in I}$ ) Damit  $\psi(\vec{r})$  also eindeutig bestimmt durch die Angabe der Koeffizienten  $c_i$  und der Basis  $(u_i)_{i \in I}$ .  $(c_i)_{i \in I}$  heißt Darstellung von  $\psi(\vec{r})$  in Basis  $(u_i)_{i \in I}$ .

- Analogie zu  $\mathbb{R}^3$ : Offenbar  $\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z$  Orthonormalbasis des  $\mathbb{R}^3$ .
- Skalarprodukt in Basis:

$$(\varphi, \psi) = \left( \sum_{i \in I} b_i \cdot u_i, \sum_{j \in I} c_j \cdot u_j \right) = \sum_{i \in I} \sum_{j \in I} \bar{b}_i \cdot c_j \cdot \underbrace{(u_i, u_j)}_{\delta_{ij}} = \sum_{i \in I} \bar{b}_i \cdot c_i$$

insbesondere  $(\psi, \psi) = \sum_{i \in I} |c_i|^2$ .

- Orthonormierung einer Basis: Schmidtsches Orthonormierungsverfahren
- Vollständigkeitsrelation: Sei  $(u_i)_{i \in I}$  eine Basis. Dann für  $\psi(\vec{r}) = \sum_{i \in I} c_i \cdot u_i(\vec{r})$  mit obiger Formel:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}) &= \sum_{i \in I} (u_i, \psi) \cdot u_i(\vec{r}) = \sum_{i \in I} \int \overline{u_i(\vec{r}')} \cdot \psi(\vec{r}') d^3 r' u_i(\vec{r}) \\ &= \int \psi(\vec{r}') \cdot \left( \sum_{i \in I} u_i(\vec{r}) \cdot \overline{u_i(\vec{r}')} \right) d^3 r' \\ \Rightarrow \sum_{i \in I} u_i(\vec{r}) \cdot \overline{u_i(\vec{r}')} &= \delta(\vec{r} - \vec{r}') \end{aligned}$$

- Bemerkung: Orthonormierte Vektoren + Vollständigkeitsrelation  $\Rightarrow$  Basis (in der schwachen Operatortopologie)



### 2.1.4 Kontinuierliche orthonormale Basis - Beispiele

(i). Ebene Wellen:

$$v_p(x) := \frac{1}{\sqrt{2\pi \cdot \hbar}} \cdot \exp\left(i \cdot \frac{p \cdot x}{\hbar}\right) \quad (p \in \mathbb{R})$$

( $v_p \notin L^2!$ ) ist kontinuierlich. Entwicklung von  $\psi(x)$  in Basis:

$$\psi(x) = \int_{\mathbb{R}} \tilde{\psi}(p) \cdot v_p(x) dx$$

Bestimmung der Entwicklungskoeffizienten:

$$\tilde{\psi}(p) = (v_p, \psi) = \int_{\mathbb{R}} \psi(x) \cdot \overline{v_p(x)} dx$$

Vollständigkeitsrelation:

$$\int_{\mathbb{R}} v_p(x) \cdot \overline{v_p(x')} dp = \int \frac{1}{2\pi \cdot \hbar} \cdot \exp\left(\frac{i}{\hbar} \cdot (x - x') \cdot p\right) dp = \delta(x - x')$$

Orthonormierung:

$$(v_p, v_{p'}) = \int \frac{1}{2\pi \cdot \hbar} \cdot \exp\left(\frac{i}{\hbar} \cdot (p' - p) \cdot x\right) dx = \delta(p - p')$$

(ii). Deltafunktion an Ort  $x_0$ :  $\xi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0)$  für  $x_0 \in \mathbb{R}$ .

$$\psi(x) = \int \psi(x_0) \cdot \xi_{x_0}(x) dx_0$$

$$\psi(x_0) = (\xi_{x_0}, \psi) = \int \psi(x) \cdot \delta(x - x_0) dx$$

$$\int_{\mathbb{R}} \xi_{x_0}(x) \cdot \overline{\xi_{x_0}(x')} dx_0 = \delta(x - x')$$

$$(\xi_{x_0}, \xi_{x'_0}) = \delta(x_0 - x'_0)$$

## 2.2 Zustandsraum, Dirac'sche Notation

- Bemerkungen:

- Darstellung von  $\psi(\vec{r})$  in beliebiger Orthonormalbasis möglich, z.B.  $c_i$  in Basis  $(u_i)_{i \in I}$  bzw.  $\tilde{\psi}(p)$  in Impulsbasis bzw.  $\psi(\vec{r})$  in Ortsbasis. Alle Darstellungen sind gleichwertig.
- Ziel: Darstellungsunabhängige Beschreibung (analog zu Vektor  $\vec{a}$  in  $\mathbb{R}^3$ , der unabhängig vom Koordinatensystem existiert).

- Zustand: Beschreibung durch Zustandsvektor  $|\psi\rangle$  im Zustandsraum  $\mathcal{H}$  (Hilbertraum) .

- Bemerkungen:

- Ortsdarstellung  $\psi(\vec{r})$  ist eine von vielen Möglichkeiten der Darstellung von  $|\psi\rangle$ .
- $|\psi\rangle$  wird „ket“ genannt.
- In vielen Fällen, z.B. Spin-Systeme, gibt es nur ket  $|\psi\rangle$  und nichts analoges im Ortsraum.
- $|\psi(\vec{r})\rangle$  ist vollkommen sinnlos bzgl. Notation.
- Hier nur „reine“ Zustände, „gemischte“ Zustände in Thermodynamik und Statistischer Physik.

- Skalarprodukt (Übersetzung des Skalarproduktes in Dirac'sche Notation):

$$(\psi, \varphi) \mapsto \langle \psi | \varphi \rangle = \underbrace{\langle \psi |}_{\in \mathcal{H}'} \cdot \underbrace{|\varphi\rangle}_{\in \mathcal{H}}$$

• Bemerkungen:

- $\langle \psi |$  wird „bra“ genannt, wegen Verwandtschaft mit Klammer.
- Der bra-Vektor  $\langle \psi |$  ist Kurzform für das lineare Funktional  $\chi(\varphi) = \langle \psi | \varphi \rangle$ , das jedem ket  $|\varphi\rangle \in \mathcal{H}$  die komplexe Zahl  $\langle \psi | \varphi \rangle$  zuordnet.
- Die bra-Vektoren  $\langle \psi |$  bilden einen linearen Vektorraum  $\mathcal{H}'$  dual zu  $\mathcal{H}$ .

• Eigenschaften des Skalarprodukts in Dirac-Notation:

$$\begin{aligned} \langle \varphi | \lambda_1 \cdot \psi_1 + \lambda_2 \cdot \psi_2 \rangle &= \lambda_1 \cdot \langle \varphi | \psi_1 \rangle + \lambda_2 \cdot \langle \varphi | \psi_2 \rangle \\ \langle \lambda_1 \cdot \varphi_1 + \lambda_2 \cdot \varphi_2 | \psi \rangle &= \bar{\lambda}_1 \cdot \langle \varphi_1 | \psi \rangle + \bar{\lambda}_2 \cdot \langle \varphi_2 | \psi \rangle \end{aligned}$$

Insbesondere:

$$|\lambda \cdot \psi\rangle = \lambda \cdot |\psi\rangle \quad \langle \lambda \cdot \psi | = \bar{\lambda} \cdot \langle \psi |$$

Außerdem:

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \overline{\langle \psi | \varphi \rangle} \quad \langle \psi | \psi \rangle \geq 0$$

und  $\langle \psi | \psi \rangle = 0 \Leftrightarrow |\psi\rangle = 0$ .

• Lineare Operatoren in Dirac-Notation:  $|\psi'\rangle := A|\psi\rangle$  wobei Linearität gilt:

$$A \cdot (\lambda_1 \cdot |\psi_1\rangle + \lambda_2 \cdot |\psi_2\rangle) = \lambda_1 \cdot A|\psi_1\rangle + \lambda_2 \cdot A|\psi_2\rangle$$

Produkt von Operatoren:

$$(AB)|\psi\rangle = A(B|\psi\rangle) = AB|\psi\rangle \neq BA|\psi\rangle$$

• Bemerkungen:

- Die Reihenfolge von bra und ket sind wichtig! Beispiel:  $\langle \varphi | \psi \rangle$  ist eine komplexe Zahl, aber  $|\psi\rangle \langle \varphi |$  ist ein Operator:

$$(|\psi\rangle \langle \varphi |) |\chi\rangle = |\psi\rangle \underbrace{\langle \varphi | \chi \rangle}_{\in \mathbb{C}} = \langle \varphi | \chi \rangle |\psi\rangle$$

- Komplexe Zahlen können beliebig umsortiert werden:

$$|\psi\rangle \lambda = \lambda |\psi\rangle \quad \langle \psi | \lambda = \lambda \langle \psi |$$

aber:

$$\begin{aligned} \langle \lambda \cdot \psi | &= \langle \psi \cdot \lambda | = \bar{\lambda} \cdot \langle \psi | \\ A\lambda |\psi\rangle &= \lambda \cdot A|\psi\rangle \\ \langle \varphi | \lambda |\psi\rangle &= \lambda \cdot \langle \varphi | \psi \rangle = \langle \varphi | \psi \rangle \lambda \end{aligned}$$

• Wirkung eines Operators auf bra: Definition:

$$(\langle \varphi | A) |\psi\rangle := \langle \varphi | (A|\psi\rangle) = \langle \varphi | A |\psi\rangle$$

• Bemerkungen:

- $\langle \varphi | A$  ist bra, d.h.  $\in \mathcal{H}'$ , da  $\langle \varphi | A |\psi\rangle$  Zahl (Matrixelement)
- $A \langle \varphi |$  hat keine Bedeutung (Anwendung auf  $|\psi\rangle$ :  $A \langle \varphi | \psi \rangle$  ist Vielfaches des Operators, d.h.  $A \langle \varphi |$  macht aus  $|\psi\rangle$  einen Operator.)
- Linearität:

$$(\lambda_1 \cdot \langle \varphi_1 | + \lambda_2 \cdot \langle \varphi_2 |) A = \lambda_1 \cdot \langle \varphi_1 | A + \lambda_2 \cdot \langle \varphi_2 | A$$

- Operator wirkt nach rechts auf ket  $|\psi\rangle$  und nach links auf bra  $\langle \varphi |$ .

- adjungierter Operator  $A^+$ : Sei  $|\psi'\rangle = A|\psi\rangle$  und  $A$  beschränkt. Welcher Operator erzeugt duales  $\langle\psi'|$  aus  $\langle\psi|$ ?

$$\langle\psi'| = \langle\psi|A^+$$

- Bemerkungen:

- Für  $A$  unbeschränkt definiere  $A^+ := (-A^{-1})^\perp$ .
- $A^+$  ist linearer Operator, genau dann wenn  $A$  dicht definiert ist. Wichtige Eigenschaft von  $A^+$ :

$$\langle\psi'|\varphi\rangle = \overline{\langle\varphi|\psi'\rangle} \Rightarrow \langle\psi|A^+|\varphi\rangle = \overline{\langle\varphi|A|\psi\rangle} \quad (*)$$

- Aufpassen mit Notation:

$$|\psi'\rangle = A|\psi\rangle = |A\psi\rangle \quad \langle\psi'| = \langle A\psi| = \langle\psi|A^+$$

(Ähnlich wie  $\langle\lambda \cdot \psi| = \bar{\lambda} \cdot \langle\psi|$ )

- $(A^+)^+ = A$ :

$$\begin{aligned} \langle\psi|(A^+)^+|\varphi\rangle &\stackrel{*}{=} \overline{\langle\varphi|A^+|\psi\rangle} = \overline{\overline{\langle\psi|A|\varphi\rangle}} \\ &= \langle\psi|A|\varphi\rangle \end{aligned}$$

Außerdem:

$$(\lambda \cdot A)^+ = \bar{\lambda} A^+ \quad (A + B)^+ \stackrel{**}{=} A^+ + B^+$$

- $(AB)^+ \stackrel{**}{=} B^+ A^+$ :

$$\begin{aligned} \langle\psi|(AB)^+|\varphi\rangle &= \overline{\langle\varphi|AB|\psi\rangle} = \overline{\langle\varphi|A|B\psi\rangle} \\ &= \langle B\psi|A^+|\varphi\rangle = \langle\psi|B^+ A^+|\varphi\rangle \end{aligned}$$

(\*\*) gilt nur für beschränkte Operatoren, ansonsten gilt nur  $\subseteq$ .

- Adjunktion (oder hermitesche Konjugation):

$$\begin{aligned} (|\psi\rangle)^+ &= \langle\psi| & (A)^+ &= A^+ \\ (A|\psi\rangle)^+ &= \langle A\psi| = \langle\psi|A^+ & (|u\rangle\langle v|)^+ &\stackrel{*}{=} |v\rangle\langle u| \\ (\langle\psi|\varphi\rangle)^+ &= \overline{\langle\psi|\varphi\rangle} = \langle\varphi|\psi\rangle & \lambda^+ &= \bar{\lambda} \end{aligned}$$

Beweis zu (\*):

$$\begin{aligned} \langle\psi|(|u\rangle\langle v|)^+|\varphi\rangle &= \overline{\langle\varphi|u\rangle\langle v|\psi\rangle} = \langle\psi|v\rangle\langle u|\varphi\rangle \\ &= \langle\psi|(|v\rangle\langle u|)|\varphi\rangle \end{aligned}$$

- Regeln für hermitesche Konjugation:

- Konstante  $\rightarrow$  komplex konjugiert, ket  $\rightarrow$  bra, bra  $\rightarrow$  ket, Operator  $\rightarrow$  adjungierter Operator
- Vertausche Reihenfolge (Konstanten an beliebige Stelle).

Beispiel:

$$\underbrace{(\lambda \cdot \langle u|A|v\rangle)}_{\in\mathbb{C}} |w\rangle \langle\psi|^+ = \bar{\lambda} \cdot \langle v|A^+|u\rangle |\psi\rangle \langle w|$$

- Selbstadjungierte/hermitesche Operatoren:  $A = A^+$ . Folgerungen:

$$\langle A\psi|\varphi\rangle = \overline{\langle\varphi|A|\psi\rangle} \quad \langle A\varphi|\psi\rangle = \langle\varphi|A|\psi\rangle$$

Bemerkung: Observablen, d.h. Messgrößen, werden durch hermitesche Operatoren beschrieben.

- Projektionsoperatoren (Projektoren): Sei  $\langle \psi | \psi \rangle = 1$  ein normierter Zustand. Dann ist  $P_\psi := |\psi\rangle \langle \psi|$  ein Projektionsoperator auf dem Zustand  $|\psi\rangle$ . Anwendung auf beliebiges  $|\varphi\rangle$ :

$$\begin{aligned}
 P_\psi |\varphi\rangle &= |\psi\rangle \langle \psi | \varphi \rangle = \langle \psi | \varphi \rangle |\psi\rangle = \text{Vielfaches von } |\psi\rangle \\
 P_\psi^2 &= |\psi\rangle \underbrace{\langle \psi | \psi \rangle}_{1} \langle \psi | = |\psi\rangle \langle \psi | = P_\psi \\
 P_\psi^+ &= (|\psi\rangle \langle \psi |)^+ = |\psi\rangle \langle \psi | = P_\psi
 \end{aligned}$$

### 2.3 Darstellungen

Wähle orthonormale Basis  $(|u_i\rangle)_{i \in I}$ , d.h.  $\langle u_j | u_i \rangle = \delta_{ij}$ . Beliebiges  $|\psi\rangle$  eindeutig darstellbar als

$$|\psi\rangle = \sum_{i \in I} c_i \cdot |u_i\rangle$$

Dann

$$\begin{aligned}
 \langle u_j | \psi \rangle &= \sum_{i \in I} c_i \cdot \underbrace{\langle u_j | u_i \rangle}_{\delta_{ij}} = c_j \\
 \Rightarrow |\psi\rangle &= \sum_{i \in I} \langle u_i | \psi \rangle \cdot |u_i\rangle = \sum_{i \in I} |u_i\rangle \cdot \langle u_i | \psi \rangle \\
 &= \left( \sum_{i \in I} |u_i\rangle \langle u_i| \right) \cdot |\psi\rangle \\
 \Rightarrow \left( \sum_{i \in I} |u_i\rangle \langle u_i| \right) &= \text{id} =: \mathbb{1}
 \end{aligned}$$

*Letzte Zeile gilt nur in der starken Operator-Topologie.* (Vollständigkeitsrelation) Bemerkung: Dies ist eine Projektion auf alle Basisvektoren.

	diskrete Basis	kontinuierliche Basis
Orthonormierung	$\langle u_i   u_j \rangle = \delta_{ij}$	$\langle w_\alpha   w_{\alpha'} \rangle = \delta(\alpha - \alpha')$
Vollständigkeit	$\sum_i  u_i\rangle \langle u_i  = \mathbb{1}$	$\int  w_\alpha\rangle \langle w_\alpha  d\alpha = \mathbb{1}$
Entwicklung in Basis	$ \psi\rangle = \sum_i c_i \cdot  u_i\rangle$	$ \psi\rangle = \int c(\alpha) \cdot  w_\alpha\rangle d\alpha$
Entwicklungskoeffizient	$c_i = \langle u_i   \psi \rangle$	$c(\alpha) = \langle w_\alpha   \psi \rangle$

#### 2.3.1 Vektor- und Matrixdarstellungen

- Spaltenvektor für kets:

$$|\psi\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} \langle u_1 | \psi \rangle \\ \vdots \\ \langle u_i | \psi \rangle \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Frage:  $\langle \psi | \rightarrow ?$ . Skalarprodukt:

$$\begin{aligned}
 \langle \psi | \varphi \rangle &= \langle \psi | \mathbb{1} | \varphi \rangle = \left\langle \psi \left| \sum_i |u_i\rangle \langle u_i| \right| \varphi \right\rangle \\
 &= \sum_i \langle \psi | u_i \rangle \cdot \langle u_i | \varphi \rangle
 \end{aligned}$$

Damit

$$\langle \psi | \rightarrow (\langle \psi | u_1 \rangle \quad \dots \quad \langle \psi | u_i \rangle \quad \dots)$$

Zeilenvektor für bras.

- Operator  $A$ : Matricelement  $A_{ij} := \langle u_i | A | u_j \rangle$ , damit

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots \\ \vdots & \ddots & \end{pmatrix}$$

Matrix für Operator.

- Operatorprodukt:

$$\begin{aligned} \langle u_i | AB | u_j \rangle &= \langle u_i | A \mathbb{1} B | u_j \rangle = \sum_{k \in I} \underbrace{\langle u_i | A | u_k \rangle}_{A_{ik}} \cdot \underbrace{\langle u_k | B | u_j \rangle}_{B_{kj}} \\ &= \sum_{k \in I} A_{ik} \cdot B_{kj} \end{aligned}$$

Außerdem:

$$\langle u_i | A | \psi \rangle = \langle u_i | A \mathbb{1} | \psi \rangle = \sum_j \underbrace{\langle u_i | A | u_j \rangle}_{A_{ij}} \cdot \underbrace{\langle u_j | \psi \rangle}_{c_j} = \sum_j A_{ij} \cdot c_j$$

- Projektor  $|\psi\rangle\langle\psi|$ :

$$\langle u_i | \psi \rangle \langle \psi | u_j \rangle = c_i \cdot \bar{c}_j \rightarrow \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \cdot (\bar{c}_1 \quad \bar{c}_2 \quad \dots)$$

(dyadisches Produkt ist Matrix des Projektors)

- Adjunktion (hermitesche Konjugation):

$$(A^+)_{ij} = \langle u_i | A^+ | u_j \rangle = \overline{\langle u_j | A | u_i \rangle} = \overline{A_{ji}}$$

(entspricht Transposition + Konjugation)

- Selbstdadjungierte Operator ( $A = A^+$ ), dann  $A_{ij} = \overline{A_{ji}}$  (Spiegelung bzgl. Hauptdiagonale bringt komplex konjugiertes Element). Insbesondere  $A_{ii} = \overline{A_{ii}} \in \mathbb{R}$ .

- Darstellungswechsel von einer Basis  $(|u_i\rangle)_i$  zu  $(|w_i\rangle)_i$ : Sei dazu  $s_{ij} = \langle w_i | u_j \rangle$ . Dann

$$\begin{aligned} \langle w_i | \psi \rangle &= \langle w_i | \mathbb{1} | \psi \rangle = \sum_j \langle w_i | u_j \rangle \cdot \underbrace{\langle u_j | \psi \rangle}_{=: c_j} = \sum_j s_{ij} \cdot c_j \\ \Rightarrow A_{ij}^{(w)} &= \sum_{k,l} s_{ik} \cdot A_{kl}^{(u)} \cdot \overline{s_{lj}} \end{aligned}$$

## 2.4 Eigenwertgleichung für lineare Operatoren

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

- $|\psi\rangle$  heißt dann Eigenvektor-/ket,  $\lambda \in \mathbb{C}$  Eigenwert
- Spektrum eines Operators  $A$ : Menge der Eigenwerte (diskret und kontinuierlich)
- Bemerkungen:
  - $\alpha |\psi\rangle$  mit  $\alpha \in \mathbb{C}$ ,  $|\psi\rangle$  Eigenvektor  $\Rightarrow \alpha \cdot |\psi\rangle$  Eigenvektor mit gleichem Eigenwert. Normiere  $\langle \psi | \psi \rangle = 1$
  - Phasenfaktor:  $e^{i\theta} |\psi\rangle$  ist Eigenvektor mit gleicher Norm:

$$\langle e^{i\theta} \psi | e^{i\theta} \psi \rangle = e^{-i\theta} \cdot e^{i\theta} \cdot \langle \psi | \psi \rangle = 1$$

Es wird sich zeigen:  $|\psi\rangle$  und  $e^{i\theta} \cdot |\psi\rangle$  führen zur gleichen physikalischen Messung.

- Bestimmung der Eigenwerte:

$$\begin{aligned}
 A|\psi\rangle &= \lambda \cdot |\psi\rangle \Rightarrow \langle u_i | A \mathbb{1} | \psi \rangle = \lambda \cdot \langle u_i | \psi \rangle \\
 &\Rightarrow \sum_j \underbrace{\langle u_i | A | u_j \rangle}_{A_{ij}} \cdot \underbrace{\langle u_j | \psi \rangle}_{c_j} = \lambda \cdot \langle u_i | \psi \rangle \\
 &\Rightarrow \sum_j A_{ij} \cdot c_j = \lambda \cdot c_i
 \end{aligned}$$

Charakteristische Gleichung:  $\det(A - \lambda \cdot E) = 0 \Rightarrow$  Eigenwerte  $\lambda_i \in \mathbb{C}$  (unabhängig von gewählter Basis  $(|u_i\rangle)_i$ ).

- Hermitesche Operatoren ( $A = A^+$ ):

(i). Eigenwerte sind reell:

$$\begin{aligned}
 A|\psi\rangle &= \lambda \cdot |\psi\rangle \Rightarrow \langle \psi | A | \psi \rangle = \langle \psi | \lambda | \psi \rangle, \overline{\langle \psi | \underbrace{A^+}_{A} | \psi \rangle} = \langle \psi | \lambda | \psi \rangle \\
 &\Rightarrow \lambda \cdot \underbrace{\langle \psi | \psi \rangle}_{=1 \in \mathbb{R}} \in \mathbb{R} \Rightarrow \lambda \in \mathbb{R}
 \end{aligned}$$

(ii). Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal.

Beweis: Seien  $A|\psi\rangle = \lambda \cdot |\psi\rangle$  und  $A|\varphi\rangle = \mu \cdot |\varphi\rangle$  mit  $\mu \neq \lambda$ . Dann:

$$\begin{aligned}
 \langle \varphi | A | \psi \rangle &= \lambda \cdot \langle \varphi | \psi \rangle & \langle \varphi | \underbrace{A^+}_{A} | \psi \rangle &= \underbrace{\bar{\mu}}_{\mu} \langle \varphi | \psi \rangle \\
 & & \langle \varphi | A | \psi \rangle &= \mu \cdot \langle \varphi | \psi \rangle
 \end{aligned}$$

also  $0 = (\mu - \lambda) \cdot \langle \varphi | \psi \rangle$  und wegen  $\lambda \neq \mu$  folgt  $\langle \varphi | \psi \rangle = 0$ .

(iii).  $g$ -fache Entartung: Es gibt  $g$  linear unabhängige Eigenvektoren  $|\psi^i\rangle$  mit  $A|\psi^i\rangle = \lambda \cdot |\psi^i\rangle$ , die einen  $g$ -dimensionalen Unterraum aufspannen. Damit beliebiges

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^g c_i \cdot |\psi^i\rangle$$

auch Eigenvektor von  $A$  zum Eigenwert  $\lambda$ .

- Definition: Eine Observable ist ein hermitescher Operator, dessen Eigenvektoren  $|\psi_i\rangle$  eine Basis bilden, d.h.

$$\sum_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| = \mathbb{1}$$

Hier: Observable  $\hat{=}$  hermitescher Operator  $\hat{=}$  Messgröße.

## 2.5 Kommutierende Observablen

- Theorem 1: Sei  $[A, B] = 0$  und  $A|\psi\rangle = a|\psi\rangle$ . Dann ist ket  $B|\psi\rangle$  auch Eigenvektor von  $A$  mit Eigenwert  $a$ .

Beweis:

$$AB|\psi\rangle = BA|\psi\rangle = B(a|\psi\rangle) = a \cdot B|\psi\rangle$$

- Theorem 2: Sei  $[A, B] = 0$  und  $A|\psi_1\rangle = a_1|\psi_1\rangle$ ,  $A|\psi_2\rangle = a_2|\psi_2\rangle$  mit  $a_1 \neq a_2$ . Dann ist  $\langle \psi_1 | B | \psi_2 \rangle = 0$ .

Beweis: Nach Theorem 1 gilt  $AB|\psi_2\rangle = a_2B|\psi_2\rangle$ . Wegen  $a_1 \neq a_2$ :  $|\psi_1\rangle$  orthogonal zu  $B|\psi_2\rangle$ .

- Theorem 3:  $[A, B] = 0 \Leftrightarrow$  Es gibt orthonormale Basis aus gemeinsamen Eigenvektoren von  $A$  und  $B$ .

Beweis:

- „ $\Rightarrow$ “: Probiere Basis  $(|\psi_n\rangle)_n$  aus Eigenvektoren von Observable  $A$ :

$$A|\psi_n\rangle = a_n \cdot |\psi_n\rangle$$

Sind dies auch Eigenvektoren von  $B$ ?

- (i). keine Entartung, d.h.  $a_i \neq a_j$  für  $i \neq j$ .

$$B|\psi_n\rangle = \sum_m \underbrace{c_m}_{\langle \psi_m | B | \psi_n \rangle} |\psi_m\rangle = b_n \cdot |\psi_n\rangle$$

wegen

$$\langle \psi_m | B | \psi_n \rangle = \begin{cases} 0 & m \neq n \\ b_n & n = m \end{cases}$$

nach Theorem 2. Also  $|\psi_n\rangle$  Eigenvektor zu  $A$  und  $B$ .

- (ii). mit Entartung:  $g$ -dimensionaler Unterraum zum Eigenwert  $a_n$  werde durch  $|\psi_n^i\rangle$  ( $i = 1, \dots, g$ ) aufgespannt. Jede Linearkombination ist auch Eigenvektor zu  $A$ . ( $|\psi_n^i\rangle$  sind im Allgemeinen keine Eigenvektoren zu  $B$ .)  $B$  in diesem Unterraum wird beschrieben durch Matrix

$$\beta_{ij} = \langle \psi_n^i | B | \psi_n^j \rangle \quad (i, j = 1, \dots, g)$$

(hermitesch). Also  $g$  orthonormale Eigenvektoren, sind dann Eigenvektoren von  $A$  und  $B$ .

- „ $\Leftarrow$ “: Übung

- Verallgemeinerung:  $A, B, C$  die paarweise vertauschen  $\Leftrightarrow$  Es gibt orthonormale Basis aus gemeinsamen Eigenvektoren von  $A, B, C$ .
- Definition: Vollständiger Satz kommutierender Observablen
  - (i). Observablen kommutieren paarweise
  - (ii). Spezifikation aller Eigenwerte (Messergebnisse) gibt eindeutig einen Eigenvektor (Zustand) an.
- Bemerkung:
  - minimaler Satz an Observablen
  - *Äquivalent: Es existiert eine orthonormale Basis von  $\mathcal{H}$  aus gemeinsamen Eigenvektoren und diese ist bis auf einen Faktor eindeutig bestimmt.*
  - Schreibweise für Eigenvektoren:  $|a_n, b_p, c_r\rangle$
  - Es gibt meistens unterschiedliche vollständige Sätze kommutierender Observablen.

## 2.6 Orts- und Impulsdarstellung

	Ortsbasis	Impulsbasis
Wellenfunktion	$\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) = \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) \rightarrow \text{kets }  r_0\rangle$	$v_p(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \cdot e^{i \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar}} \rightarrow \text{kets }  \vec{p}\rangle$
Orthonormierung	$\langle \vec{r}'_0   \vec{r}_0 \rangle = \int \xi_{\vec{r}'_0}(\vec{r}) \cdot \xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) d^3r = \delta(\vec{r}_0 - \vec{r}'_0)$	$\langle \vec{p}'   \vec{p} \rangle = \delta(\vec{p} - \vec{p}')$
Vollständigkeit	$\int  \vec{r}_0\rangle \langle \vec{r}_0  d^3\vec{r}_0 = \mathbb{1}$	$\int  \vec{p}\rangle \langle \vec{p}  d^3p = \mathbb{1}$
Entwicklung in Basis	$ \psi\rangle = \mathbb{1}  \psi\rangle = \int \langle \vec{r}_0   \psi \rangle  \vec{r}_0\rangle d^3\vec{r}_0$	$ \psi\rangle = \mathbb{1}  \psi\rangle = \int \langle \vec{p}   \psi \rangle  \vec{p}\rangle d^3p$
Entw.-koeffizient	$\langle \vec{r}_0   \psi \rangle = \int \xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) \cdot \psi(\vec{r}) d^3r = \psi(\vec{r}_0)$	$\langle \vec{p}   \psi \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int e^{-i \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar}} \psi(\vec{r}) d^3r = \tilde{\psi}(\vec{p})$

Insbesondere:

$$\psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \psi \rangle \quad \tilde{\psi}(\vec{p}) = \langle \vec{p} | \psi \rangle$$

Skalarprodukt:

$$\begin{aligned} \langle \varphi | \psi \rangle &= \langle \varphi | \mathbb{1} | \psi \rangle = \int \underbrace{\langle \varphi | \vec{r} \rangle}_{\varphi(\vec{r})} \cdot \underbrace{\langle \vec{r} | \psi \rangle}_{\psi(\vec{r})} d^3 r = \int \psi(\vec{r}) \cdot \overline{\varphi(\vec{r})} d^3 r \\ &= \langle \varphi | \mathbb{1} | \psi \rangle = \int \langle \varphi | \vec{p} \rangle \cdot \langle \vec{p} | \psi \rangle d^3 p = \int \tilde{\psi}(\vec{p}) \cdot \overline{\tilde{\varphi}(\vec{p})} d^3 p \end{aligned}$$

Beachte:  $\mathbb{1} = \int |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}| d^3 \vec{r}$  ist Bochner-Integral, äußeres Integral Lebesgue-Integral. Vertauschen der Integrale ist nicht-trivial! Benutze Stetigkeit der Skalarprodukte. Darstellungswechsel:

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}(\vec{p}) &= \langle \vec{p} | \psi \rangle = \langle \vec{p} | \mathbb{1} | \psi \rangle = \int \langle \vec{p} | \vec{r} \rangle \cdot \underbrace{\langle \vec{r} | \psi \rangle}_{\psi(\vec{r})} d^3 r \\ &= \int \psi(\vec{r}) \cdot \underbrace{\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle}_{v_p(\vec{r})} d^3 r = \frac{1}{(2\pi \cdot \hbar)^{\frac{3}{2}}} \cdot \int \psi(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} d^3 r \end{aligned}$$

## 2.7 Orts- und Impulsoperator

- Notationen für Ortsoperator:  $X, \hat{x}, x$ . Wirkung im Ortsraum:

$$\psi(\vec{r}) \xrightarrow{X} x \cdot \psi(\vec{r})$$

Wie schreibt man das im Zustandsraum? Die Darstellung  $X|\psi\rangle = x|\psi\rangle$  ist Quatsch! Wirkung von  $X$  im Zustandsraum nur bzgl. Ortsraum definierbar:

$$\langle \vec{r} | X | \psi \rangle := x \cdot \langle \vec{r} | \psi \rangle$$

- Bemerkungen:
  - Analog für  $Y$  und  $Z$
  - Ortsoperator  $\vec{R}$  ist Vektoroperator mit Komponenten  $X, Y, Z$ :

$$\langle \vec{r} | \vec{R} | \psi \rangle = \vec{r} \cdot \langle \vec{r} | \psi \rangle$$

- Impulsoperator:  $P_x, \hat{p}_x, p_x$ . Wirkung im Impulsraum:

$$\tilde{\psi}(\vec{p}) \xrightarrow{P_x} p_x \cdot \tilde{\psi}(\vec{p})$$

Deshalb:

$$\langle \vec{p} | P_x | \psi \rangle := p_x \cdot \langle \vec{p} | \psi \rangle$$

Analog für  $P_y, P_z$ . Impulsoperator  $\vec{P}$ :

$$\langle \vec{p} | \vec{P} | \psi \rangle = \vec{p} \cdot \langle \vec{p} | \psi \rangle$$

- Wirkung des Impulsoperators im Ortsraum:

$$\begin{aligned} \langle \vec{r} | P_x | \psi \rangle &= \langle \vec{r} | \mathbb{1} | P_x | \psi \rangle = \int \underbrace{\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle}_{v_p(\vec{r})} \cdot \underbrace{\langle \vec{p} | P_x | \psi \rangle}_{p_x \cdot \tilde{\psi}(\vec{p})} d^3 p \\ &= \frac{1}{(2\pi \cdot \hbar)^{\frac{3}{2}}} \cdot \int e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} \cdot p_x \cdot \tilde{\psi}(\vec{p}) d^3 p \\ &= \frac{\hbar}{i} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \underbrace{\frac{1}{(2\pi \cdot \hbar)^{\frac{3}{2}}} \cdot \int e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} \cdot \tilde{\psi}(\vec{p}) d^3 p}_{\psi(\vec{r})} = \frac{\hbar}{i} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi(\vec{r}) \\ \Rightarrow \langle \vec{r} | P_x | \psi \rangle &= \frac{\hbar}{i} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \langle \vec{r} | \psi \rangle \\ \Rightarrow \langle \vec{r} | \vec{P} | \psi \rangle &= \frac{\hbar}{i} \cdot \nabla \langle \vec{r} | \psi \rangle \end{aligned}$$



- Kommutator  $[X, P_x]$ :

$$\begin{aligned}
 \langle \vec{r} | [X, P_x], \psi \rangle &= \langle \vec{r} | X P_x - P_x X | \psi \rangle = x \cdot \langle \vec{r} | P_x | \psi \rangle - \frac{\hbar}{i} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \langle \vec{r} | X | \psi \rangle \\
 &= x \cdot \frac{\hbar}{i} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \langle \vec{r} | \psi \rangle - \frac{\hbar}{i} \cdot \frac{\partial}{\partial x} (x \cdot \langle \vec{r} | \psi \rangle) \\
 &= \frac{\hbar}{i} \cdot \left( x \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} x \right) \langle \vec{r} | \psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \cdot \underbrace{[X, D_x]}_{-\text{id}} \langle \vec{r} | \psi \rangle \\
 &= -\frac{\hbar}{i} \langle \vec{r} | \psi \rangle = i \hbar \cdot \langle \vec{r} | \psi \rangle
 \end{aligned}$$

also  $[X, P_x] = i\hbar$ .

- Kanonische Vertauschungsrelation:

$$\forall i, j \in \{1, 2, 3\} : [R_i, R_j] = 0 \quad [P_i, P_j] = 0 \quad [R_i, P_j] = i\hbar \cdot \delta_{ij}$$

- Hermitizität von  $\vec{R}, \vec{P}$ :

$$\begin{aligned}
 \langle \varphi | X | \psi \rangle &= \langle \varphi | \mathbb{1} | X | \psi \rangle = \int \langle \varphi | \vec{r} \rangle \cdot \underbrace{\langle \vec{r} | X | \psi \rangle}_{x \cdot \langle \vec{r} | \psi \rangle} d^3 r \\
 &= \int \langle \psi | \vec{r} \rangle \cdot \underbrace{x \cdot \langle \vec{r} | \varphi \rangle}_{\langle \vec{r} | X | \varphi \rangle} d^3 r \\
 &= \langle \psi | \mathbb{1} | X | \varphi \rangle = \langle \varphi | X^+ | \psi \rangle
 \end{aligned}$$

für alle  $\langle \varphi |, | \psi \rangle$ . *Offensichtlich ist  $C_c^\infty \subseteq D(X)$ , d.h.  $X$  ist dicht definiert und daher ist die Adjungierte ein Operator, somit ist  $X$  symmetrisch. Weiterhin ist das Spektrum reell. Damit ist  $X$  selbstadjungiert.*

- Bemerkungen:

- Analog für  $\vec{R}, \vec{P}$ .
- Hamilton-Operator  $H = \frac{1}{2m} P_x^2$  ist hermitesch:

$$H^+ = \frac{1}{2m} \cdot (P_x P_x)^+ = \frac{1}{2m} (P_x^+ P_x^+) = \frac{1}{2m} P_x P_x = H$$

- Eigenvektoren und Eigenwerte von  $\vec{R}$  und  $\vec{P}$ :

$$\begin{aligned}
 \langle \vec{r}' | X | \vec{r} \rangle &= x' \cdot \langle \vec{r}' | \vec{r} \rangle = x' \cdot \delta(\vec{r} - \vec{r}') = x \cdot \delta(\vec{r} - \vec{r}') \\
 &= x \cdot \langle \vec{r}' | \vec{r} \rangle = \langle \vec{r}' | x | \vec{r} \rangle \\
 \Rightarrow X | \vec{r} \rangle &= x | \vec{r} \rangle
 \end{aligned}$$

Eigenvektor  $|\vec{r}\rangle$  zum Eigenwert  $x$ . Analog für  $Y, Z$ . Impulsoperator:

$$P_x |\vec{p}\rangle = p_x \cdot |\vec{p}\rangle$$

- Vollständiger Satz kommutierender Observablen: Eigenwerte  $x, y, z$  von  $X, Y, Z$  spezifizieren gemeinsamen Eigenvektor  $|\vec{r}\rangle \Rightarrow X, Y, Z$  ist vollständiger Satz kommutierender Observablen. Ebenso  $P_x, P_y, P_z$  oder  $P_x, Y, Z$ , aber nicht  $X, P_x, Z$ .

## 2.8 Funktionen und Ableitungen von Operatoren

- Funktionen: Sei  $F(z) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n \cdot z^n$  mit  $z \in \mathbb{C}$ . Definition:

$$F(A) := \sum_{n=0}^{\infty} f_n \cdot A^n$$

Beispiel:

$$e^A = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{A^n}{n!} = \mathbb{1} + A + \frac{A^2}{2!} + \dots$$

- Anwendung auf Eigenvektoren von  $A$ : Sei  $A|\varphi_a\rangle = a \cdot |\varphi_a\rangle$ , dann

$$\begin{aligned} A^n |\varphi_a\rangle &= a^n \cdot |\varphi_a\rangle \\ \Rightarrow F(A) |\varphi_a\rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} f_n \cdot A^n |\varphi_a\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} f_n \cdot a^n \cdot |\varphi_a\rangle \\ &= F(a) \cdot |\varphi_a\rangle \end{aligned}$$

- Wichtige Formeln:

(i). Es gilt

$$e^A \cdot e^B = \left( \sum_p \frac{A^p}{p!} \right) \cdot \left( \sum_q \frac{B^q}{q!} \right) = \sum_{p,q} \frac{A^p B^q}{p! \cdot q!} \neq e^B \cdot e^A \neq e^{A+B}$$

Gleichheit für  $[A, B] = 0$ . Glauber-Formel:

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

falls  $[A, [A, B]] = 0 = [B, [A, B]]$ .

- (ii).  $[A, F(A)] = 0$
- (iii).  $[B, A] = 0 \Rightarrow [B, F(A)] = 0$
- (iv).  $[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0 \Rightarrow [A, F(B)] = [A, B] \cdot F'(B)$  mit  $F'(z) = \frac{d}{dz} F(z)$ .

Beispiel:

$$\begin{aligned} H &= \frac{P^2}{2m} + V(X) \\ \Rightarrow [X, H] &= \left[ X, \frac{P^2}{2m} \right] = \underbrace{[X, P]}_{i\hbar} \cdot \frac{P}{m} \neq 0 \\ [P, H] &= [P, V(X)] = -i\hbar \cdot V'(X) \end{aligned}$$

- Ableitung eines Operators:

$$B = \frac{dA(t)}{dt} \Leftrightarrow \|A(t') - A(t) - (t' - t) \cdot B\| \rightarrow 0 \quad (t' \rightarrow t)$$

Dann

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(F + G) &= \frac{d}{dt} F + \frac{d}{dt} G \\ \frac{d}{dt}(F \cdot G) &= \frac{dF}{dt} G + F \frac{dG}{dt} \end{aligned}$$

(Reihenfolge bei Produktregel wichtig.)

# 3

## Postulate der Quantenmechanik

### 3.1 Klassische Mechanik

#### 3.1.1 Zustand

Zur Zeit  $t_0$  wird Zustand des Systems beschrieben durch  $N$  (=Anzahl der Freiheitsgrade) generalisierte Koordinaten  $q_i(t_0)$  und die konjugierten Impulse  $p_i(t_0)$ .

#### 3.1.2 Messung

Alle Messergebnisse zur Zeit  $t_0$  sind determiniert durch Zustand zur Zeit  $t_0$ .

#### 3.1.3 Zeitentwicklung

Hamiltonsche Bewegungsgleichung:

$$\dot{q}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i}$$

mit Gesamtenergie  $\mathcal{H}(q_i, p_i, t)$ .

### 3.2 Quantentheorie

#### 3.2.1 Zustand

(P1) 1. Postulat: Zustand des Systems zur Zeit  $t_0$ : ket  $|\psi(t_0)\rangle$  aus Zustandsraum.

#### 3.2.2 Messung

(P2) 2. Postulat: Jeder Messgröße  $\mathcal{A}$  entspricht eine Observable, die im Zustandsraum wirkt.

(P3) 3. Postulat: Die möglichen Messergebnisse einer Messgröße  $\mathcal{A}$  sind die Eigenwerte der korrespondierenden Observablen  $A$ .

Bemerkungen:

- $A$  hermitesch  $\Rightarrow$  Messung von  $\mathcal{A}$  ergibt reelle Werte.
- Falls Spektrum von  $A$  diskret, dann sind Messergebnisse quantisiert.
- Eigenvektoren  $|u_k\rangle$  von  $A$  (d.h.  $A|u_k\rangle = a_k|u_k\rangle$ ) bilden Basis, d.h. beliebiger Zustand  $|\psi\rangle$  darstellbar als

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n \cdot |u_n\rangle$$

mit  $c_n = \langle u_n | \psi \rangle$ .

(P4) 4. Postulat: Die Messung der Messgröße  $\mathcal{A}$  an einem System im normierten Zustand  $|\psi\rangle$  ergibt mit Wahrscheinlichkeit

- diskret, nicht entartet:

$$\mathbb{P}(a_n) = |\langle u_n | \psi \rangle|^2 = |c_n|^2$$

den nicht-entarteten Eigenwert  $a_n$  zum Eigenvektor  $|u_n\rangle$  von  $A$  zu messen.

- diskret, entartet:

$$\mathbb{P}(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^i | \psi \rangle|^2$$

den  $g_n$ -fach entarteten Eigenwert  $a_n$  zu messen. Die  $(|u_n^i\rangle)_i$  spannen den Unterraum zu  $a_n$  auf.

- kontinuierlich, nicht-entartet:

$$d\mathbb{P}(\alpha) = |\langle \nu_\alpha | \psi \rangle|^2 d\alpha$$

ein Ergebnis aus  $[\alpha, \alpha + d\alpha]$  mit  $A|\nu_\alpha\rangle = \alpha|\nu_\alpha\rangle$

Bemerkungen:

- Summe aller Wahrscheinlichkeiten ist 1:

$$\begin{aligned} \sum_n \mathbb{P}(a_n) &= \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} \underbrace{|\langle u_n^i | \psi \rangle|^2}_{\langle \psi | u_n^i \rangle \langle u_n^i | \psi \rangle} = \left\langle \psi \left| \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} |u_n^i\rangle \langle u_n^i| \right| \psi \right\rangle \\ &= \langle \psi | \mathbb{1} | \psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle = 1 \end{aligned}$$

Analog für kontinuierlichen Fall.

- Es gilt

$$\mathbb{P}(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^i | \psi \rangle|^2 = \left\langle \psi \left| \underbrace{\sum_{i=1}^{g_n} |u_n^i\rangle \langle u_n^i|}_{=: P_n} \right| \psi \right\rangle = \langle \psi | P_n | \psi \rangle$$

mit  $P_n$  Projektor auf Unterraum zum Eigenwert  $a_n$ .  $\mathbb{P}(a_n)$  ist unabhängig von konkreter Basis  $(|u_n^i\rangle)_i$  im Unterraum.

- Sei  $|\psi\rangle = |u_m\rangle$  ein Eigenvektor. Dann

$$\mathbb{P}(a_n) = |\langle u_n | u_m \rangle|^2 = \delta_{nm}$$

d.h. für Eigenvektoren von  $A$  (und nur für diese) ist Messergebnis mit Sicherheit vorhersagbar.

- Phasenfaktoren: Zustände  $|\psi\rangle$  und  $|\psi'\rangle := e^{i\theta} \cdot |\psi\rangle$ . Wahrscheinlichkeit:

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(a_n) &= |\langle u_n | \psi \rangle|^2 \\ |\langle u_n | \psi' \rangle|^2 &= |e^{i\theta} \cdot \langle u_n | \psi \rangle|^2 = |\langle u_n | \psi \rangle|^2 = \mathbb{P}(a_n) \end{aligned}$$

d.h. Messungen zeigen keinen Unterschied. Globale Phasenfaktoren ändern nicht den physikalischen Zustand.

Vorsicht:

$$|\psi\rangle = \lambda_1 \cdot |\psi_1\rangle + \lambda_2 \cdot |\psi_2\rangle \quad |\psi'\rangle = \lambda_1 \cdot e^{i\theta_1} \cdot |\psi_1\rangle + \lambda_2 \cdot e^{i\theta_2} \cdot |\psi_2\rangle$$

beschreiben im Allgemeinen nicht den gleichen physikalischen Zustand (außer  $\theta_1 = \theta_2 \pmod{2\pi}$ , globale Phase). Also relative Phase wichtig.

(P5) 5. Postulat: Der Zustand des Systems direkt nach einer Messung der Messgröße  $\mathcal{A}$  mit dem Messergebnis  $a_n$  ist

- $|u_n\rangle$ , falls  $a_n$  nicht entartet ist.
- $\frac{P_n|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|P_n|\psi\rangle}}$  mit  $P_n = \sum_{i=1}^{g_n} |u_n^i\rangle\langle u_n^i|$  Projektion auf Unterraum zum entarten Eigenwert  $a_n$  mit Ausgangszustand  $|\psi\rangle$ .

Bemerkungen:

- Falls  $g_n = 1$ :  $P_n = |u_n\rangle\langle u_n|$ , also

$$\frac{P_n|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|P_n|\psi\rangle}} = \frac{c_n|u_n\rangle}{\sqrt{|c_n|^2}} = \frac{c_n}{|c_n|}|u_n\rangle = e^{i\varphi}|u_n\rangle$$

- Wiederholte (sofortige) Messungen von  $\mathcal{A}$  ergeben gleiches Resultat  $a_n$ .
- Nicht-intuitiv! „Wellenfunktionskollaps“
- Unterschied zu klassischer Mechanik: Messung hat prinzipiell massiven Einfluss auf das System.

### 3.2.3 Zeitentwicklung

(P6) 6. Postulat: Die Zeitentwicklung des Zustandsvektors  $|\psi(t)\rangle$  durch Schrödinger-Gleichung gegeben:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = H(t)|\psi(t)\rangle$$

wobei  $H(t)$  die Observable zur Messgröße Gesamtenergie  $\mathcal{H}(t)$  ist.

Bemerkungen:

- Zeitentwicklung ist deterministisch (DGL 1. Ordnung), nur Messergebnis probabilistisch.
- Stationäre Lösungen, falls  $H$  zeitunabhängig:  
Ansatz:  $|\psi(t)\rangle = f(t)|\varphi\rangle$  mit  $\langle\varphi|\varphi\rangle = 1$ .

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{f}(t)|\varphi\rangle &= H(t)(f(t)|\varphi\rangle) \stackrel{(*)}{=} f(t)H(t)|\varphi\rangle \\ \Rightarrow i\hbar\dot{f}(t)\underbrace{\langle\varphi|\varphi\rangle}_1 &= f(t)\cdot\underbrace{\langle\varphi|H(t)|\varphi\rangle}_{=:E(t)} \end{aligned}$$

((\*) geht, falls  $H$  keine Zeitoperationen enthält, wie z.B.  $\frac{\partial}{\partial t}$ ) Sei  $H$  zeitunabhängig, dann  $E$  Konstante, also

$$f(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

Damit  $E|\varphi\rangle = H|\varphi\rangle$  zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung. Stationärer Zustand:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \cdot |\varphi_n\rangle$$

(Bleibt physikalisch gleich für alle  $t$ .) Allgemeiner Zustand:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \cdot |\varphi_n\rangle$$

ändert sich wegen relativer Phasen. Aus

$$|\psi(0)\rangle = \sum_n c_n \cdot |\varphi_n\rangle$$

folgt  $c_m = \langle\varphi_m|\psi(0)\rangle$ .

### 3.2.4 Quantisierungsregeln

- Ersetze klassisch  $\vec{q}, \vec{p}$  durch quantenmechanische Observablen  $\vec{R}, \vec{P}$ .
- Beispiele:
  - (i). Hamilton-Operator  $H$  für Teilchen mit Masse  $m$ , Ladung  $q$  in Vektorpotential  $\vec{A}(\vec{r}, t)$  und Skalarpotential  $U(\vec{r}, t)$ :
    - klassisch:

$$\mathcal{H}(\vec{r}, \vec{p}, t) = \frac{1}{2m} \cdot (\vec{p} - q \cdot \vec{A}(\vec{r}, t))^2 + U(\vec{r}, t)$$

- quanten-mechanisch:

$$H(t) = \frac{1}{2m} \cdot (\vec{P} - q \cdot \vec{A}(\vec{R}, t))^2 + U(\vec{R}, t)$$

- (ii). Bahndrehimpuls:

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \qquad \vec{L} = \vec{R} \times \vec{P}$$

mit Komponenten  $L_x = YP_z - ZP_y, \dots$

- Vorsicht: Term  $xp_x \rightarrow XP_x$ ? Teste Hermitizität:

$$(XP_x)^+ = P_x^+ X^+ = P_x X \neq XP_x$$

Symmetrisierung:

$$\frac{1}{2} \cdot (XP_x + P_x X)$$

## 3.3 Folgerungen

### 3.3.1 Erwartungswert, Unschärfe

- Definition: Der Erwartungswert ist der Mittelwert des Messergebnisses einer Observablen  $A$  bei wiederholter Messung an identisch präparierten Systemen im gleichen Zustand  $|\psi\rangle$ :

$$\langle A \rangle_\psi := \langle \psi | A | \psi \rangle$$

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

- Zusammenhang von Text und Formel für diskrete Spektren:

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_\psi &= \langle \psi | A | \psi \rangle = \left\langle \psi \left| A \left( \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} |u_n^i\rangle \langle u_n^i| \right) \right| \psi \right\rangle &= \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} \underbrace{\langle \psi | A | u_n^i \rangle}_{a_n \langle \psi | u_n^i \rangle} \cdot \langle u_n^i | \psi \rangle \\ &= \sum_n a_n \underbrace{\sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^i | \psi \rangle|^2}_{\mathbb{P}(a_n)} = \sum_n a_n \cdot \mathbb{P}(a_n) \end{aligned}$$

wobei  $|u_n^i\rangle$  Eigenzustand von  $A$ .

- Zusammenhang für kontinuierliches Spektrum:

$$\langle A \rangle_\psi = \int \alpha \cdot \mathbb{P}(\alpha) d\alpha$$

- Bemerkungen:

- $\langle A \rangle_\psi$  ist kein Zeitmittel.
- $\langle A \rangle_\psi$  ergibt sich nicht durch wiederholte Messung am gleichen System.

- Erwartungswert ist i.A. kein mögliches Messergebnis (dies sind Eigenwerte).
- $\langle A \rangle_\psi$  ist reell. Beweis:

$$\overline{\langle \psi | A | \psi \rangle} = \langle \psi | \underbrace{A^\dagger}_A | \psi \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle$$

- Beispiel: Ortsoperator

$$\begin{aligned} \langle X \rangle_\psi &= \langle \psi | X | \psi \rangle = \int \langle \psi | \vec{r} \rangle \cdot \langle \vec{r} | X | \psi \rangle d^3r \\ &= \int \overline{\psi(\vec{r})} \cdot x \cdot \psi(\vec{r}) d^3r = \int x \cdot |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r \end{aligned}$$

Mittelwert von x bei Wahrscheinlichkeitsdichte  $|\psi(\vec{r}, t)|^2$ .

- Wie charakterisiert man die Stärke der Abweichung der Messergebnisse vom Erwartungswert?  
Erwartungswert der Abweichung vom Erwartungswert:

$$\langle A - \langle A \rangle \rangle = \langle \psi | A - \langle A \rangle | \psi \rangle = \underbrace{\langle \psi | A | \psi \rangle}_{\langle A \rangle} - \langle A \rangle \langle \psi | \psi \rangle = 0$$

Erwartungswert der quadrierten Abweichung vom Erwartungswert (Varianz):

$$(\Delta A)^2 := \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 - 2A \langle A \rangle + \langle A \rangle^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$$

- Unschärfe (mittlere Schwankung):

$$\Delta A = \sqrt{(\Delta A)^2}$$

$\Delta A = 0$  nur möglich, falls  $|\psi\rangle$  Eigenzustand von A.

### 3.3.2 Heisenbergsche Unschärferelation

- Frage: Gibt es Zustände  $|\psi\rangle$ , für die  $\Delta A = 0$  und  $\Delta B = 0$  gilt?
- Definition:

$$\begin{aligned} A' &:= A - \langle A \rangle_\psi & B' &:= B - \langle B \rangle_\psi \\ |\alpha\rangle &:= A' |\psi\rangle & |\beta\rangle &:= B' |\psi\rangle \end{aligned}$$

Dann  $A', B'$  hermitesch und es gilt

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \alpha \rangle &= \langle \psi | A'^2 | \psi \rangle = \langle A'^2 \rangle = (\Delta A)^2 \\ \langle \beta | \beta \rangle &= \langle \psi | B'^2 | \psi \rangle = \langle B'^2 \rangle = (\Delta B)^2 \\ \langle \alpha | \beta \rangle &= \langle \psi | A' B' | \psi \rangle = \langle A' B' \rangle \end{aligned}$$

Höldersche Ungleichung:

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \alpha \rangle \cdot \langle \beta | \beta \rangle &\geq |\langle \alpha | \beta \rangle|^2 \\ \Leftrightarrow (\Delta A)^2 \cdot (\Delta B)^2 &\geq |\langle A' B' \rangle|^2 \\ \Leftrightarrow \Delta A \cdot \Delta B &\geq |\langle A' B' \rangle| \geq |\operatorname{Im} \langle A' B' \rangle| = |\operatorname{Im}(\langle AB \rangle - \underbrace{\langle A \rangle \cdot \langle B \rangle}_{\in \mathbb{R}})| \\ &= |\operatorname{Im} \langle AB \rangle| = \left| \frac{1}{2i} \left( \langle AB \rangle - \underbrace{\overline{\langle AB \rangle}}_{\langle \psi | B^\dagger A^\dagger | \psi \rangle = \langle BA \rangle} \right) \right| = \left| \frac{1}{2i} \langle AB - BA \rangle \right| \\ &= \frac{1}{2} \cdot |\langle [A, B] \rangle| \\ \Rightarrow \Delta A \cdot \Delta B &\geq \frac{1}{2} \cdot |\langle [A, B] \rangle| \end{aligned}$$

für beliebige Zustände  $|\psi\rangle$ .

- (i). nicht vertauschbare Observablen  $[A, B] \neq 0$ :
- angegebener Zustand  $|\psi\rangle$  kann nicht durch A und B beliebig genau gemessen werden.
  - Annahme: Es könnte Zustände geben, für die  $\langle [A, B] \rangle = 0$ , obwohl  $[A, B] \neq 0$ . Dann ist  $\Delta A = \Delta B = 0$  möglich. Dies sind einzelne gemeinsame Eigenzustände von A und B.
- (ii). vertauschbare Observablen  $[A, B] = 0$ : ( $\Delta A \cdot \Delta B \geq 0$ )  
 Es gibt Zustände, bei denen  $\Delta A = \Delta B = 0$  ist. Dies sind die gemeinsamen Eigenzustände.
- Spezialfall:  $A = X, B = P_x$ , dann folgt mit  $[X, P_x] = i\hbar$ :

$$\Delta X \cdot \Delta P_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

Es gibt keinen Zustand, dessen Ort und Impuls genau gegeben ist. Extremfall eines Impuls-Eigenzustandes  $e^{ik \cdot x}$  (ebene Welle):  $\Delta P_x = 0, \Delta X = \infty$ . Extremfall eines Orts-Eigenzustandes  $\delta(x - x_0)$ :  $\Delta X = 0, \Delta P_x = \infty$ .

### 3.3.3 Kompatibilität von Observablen

Ist die Reihenfolge von Messungen wichtig?

- (i).  $[A, B] = 0$ :
- Es existiert Basis aus gemeinsamen Eigenvektoren  $|a_n\rangle, |b_p\rangle$ , d.h.
- $$A|a_n, b_p\rangle = a_n|a_n, b_p\rangle \quad B|a_n, b_p\rangle = b_p|a_n, b_p\rangle$$
- Zustand sei  $|a_n, b_p\rangle$ : Messung von A ergibt  $a_n$ , Messung von B ergibt  $b_p$  (Reihenfolge beliebig).
  - Allgemeiner Zustand  $\sum_{n,p} c_{np} |a_n, b_p\rangle$ : Wahrscheinlichkeit für Messergebnisse unabhängig von Reihenfolge (siehe unten).
  - Fazit: A und B sind kompatibel (gleichzeitig messbar).
- (ii).  $[A, B] \neq 0$ :
- Es existiert keine Basis aus gemeinsamen Eigenvektoren.
  - Messreihenfolge erst A, dann B endet mit Eigenzustand von B.
  - Messreihenfolge erst B, dann A endet mit Eigenzustand von A, diese sind i.A. verschieden, ebenso Wahrscheinlichkeit für Messergebnisse (siehe unten).
  - Fazit: A, B sind nicht kompatibel (nicht gleichzeitig messbar).

Veranschaulichung im  $\mathbb{R}^2$ :

- Betragsquadrat der Projektion: Wahrscheinlichkeit
- Projektion auf  $|b_1\rangle$ : Betragsquadrat gibt Wahrscheinlichkeit an erst  $a_1$ , dann  $b_1$  zu messen.

Falls  $[A, B] = 0$ :  $|a_1\rangle = |b_1\rangle, |a_2\rangle = |b_2\rangle$ , also Wahrscheinlichkeiten unabhängig von Reihenfolge.

### 3.3.4 Zeitentwicklung von Erwartungswerten

- Zeitentwicklung des Skalarprodukts:

$$\frac{d}{dt} \langle \varphi(t) | \psi(t) \rangle = \underbrace{\left( \frac{d}{dt} \langle \varphi(t) | \right)}_{-\frac{1}{i\hbar} \langle \varphi(t) | H^+(t)} |\psi(t)\rangle + \langle \varphi(t) | \underbrace{\left( \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle \right)}_{\frac{1}{i\hbar} H(t) |\psi(t)\rangle} \stackrel{H^+ = H}{=} 0$$

d.h. Skalarprodukt ist zeitunabhängig.



Zustand	Messung	mögl. Messwert	Wahrscheinlichkeit	Zustand	Messung	mögl. Messwert	Wahrscheinlichkeit	Gesamt-WS	Endzustand
$ \psi\rangle$	A	$a_1$	$ \langle a_1 \psi\rangle ^2$	$ a_1\rangle$	B	$b_1$	$ \langle b_1 a_1\rangle ^2$	$ \langle a_1 \psi\rangle ^2 \cdot  \langle b_1 a_1\rangle ^2$	$ b_1\rangle$
$ \psi\rangle$	B	$b_1$	$ \langle b_1 \psi\rangle ^2$	$ b_1\rangle$	A	$a_1$	$ \langle a_1 b_1\rangle ^2$	$ \langle b_1 \psi\rangle ^2 \cdot  \langle a_1 b_1\rangle ^2$	$ a_1\rangle$

- Zeitentwicklung der Norm:

$$\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = 0$$

also ist Wahrscheinlichkeitsdichte über Raum integriert konstant.

- Zeitentwicklung des Erwartungswerts:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | A(t) | \psi(t) \rangle &= \underbrace{\left( \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \right)}_{-\frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | H(t)} A(t) | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | A(t) \underbrace{\left( \frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle \right)}_{\frac{1}{i\hbar} H(t) | \psi(t)} \rangle + \left\langle \psi(t) \left| \frac{dA}{dt} \right| \psi(t) \right\rangle \\ \Rightarrow \frac{d}{dt} \langle A \rangle_\psi &= \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle_\psi + \left\langle \frac{dA}{dt} \right\rangle_\psi \end{aligned}$$

- Definition: Eine Observable heißt Erhaltungsgröße, falls  $\frac{d}{dt} \langle A \rangle = 0$ . Gilt insbesondere, falls  $\frac{d}{dt} A = 0$  und  $[A, H] = 0$ . Dann gilt

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle_\psi = 0$$

unabhängig vom Zustand  $|\psi\rangle$  nach obiger Rechnung.

### 3.3.5 Ehrenfest-Theorem

- Anwendung auf  $\vec{R}$  und  $\vec{P}$  für  $H = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(\vec{R})$ :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \vec{R} \rangle &= \frac{1}{i\hbar} \cdot \langle [\vec{R}, H] \rangle = \frac{1}{i\hbar \cdot 2m} \cdot \underbrace{\langle [\vec{R}, \vec{P}^2] \rangle}_{i\hbar 2\vec{P}} = \frac{1}{m} \cdot \langle \vec{P} \rangle \\ \frac{d}{dt} \langle \vec{P} \rangle &= \frac{1}{i\hbar} \cdot \langle [\vec{P}, H] \rangle = \frac{1}{i\hbar} \cdot \underbrace{\langle [\vec{P}, V(\vec{R})] \rangle}_{-i\hbar \cdot \nabla V(\vec{R})} = -\langle \nabla V(\vec{R}) \rangle \\ \Rightarrow \frac{d}{dt} \langle \vec{R} \rangle &= \frac{1}{m} \langle \vec{P} \rangle \quad \frac{d}{dt} \langle \vec{P} \rangle = -\langle \nabla V(\vec{R}) \rangle \end{aligned}$$

Vergleiche mit klassischer Mechanik:

$$\frac{d}{dt} \vec{r} = \frac{1}{m} \cdot \vec{p} \quad \frac{d}{dt} \vec{p} = -\nabla V(\vec{R})$$

- Bemerkung: Für ein Wellenpaket ist  $\langle \vec{R} \rangle_\psi$  der Ortserwartungswert, d.h. der Schwerpunkt des Wellenpakets.

$$\begin{aligned} \langle \vec{R} \rangle_\psi &= \langle \psi | \vec{R} | \psi \rangle = \int \langle \psi | \vec{r} \rangle \cdot \langle \vec{r} | \psi \rangle d^3r \\ &= \int \vec{r} \cdot |\psi(\vec{r})|^2 d^3r \end{aligned}$$

- Frage: Ist die Bewegung des Schwerpunkts des quanten-mechanischen Wellenpakets identisch mit klassischer Trajektorie?

– klassisch:

$$\frac{d^2}{dt^2} \vec{r} = -\frac{1}{m} \cdot \nabla V(\vec{r})$$

(Gradient am Ort des Teilchens)

– quanten-mechanisch:

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle \vec{R} \rangle = -\frac{1}{m} \cdot \langle \nabla V(\vec{R}) \rangle$$

(Gradient gemittelt über gesamtes Wellenpaket)

Antwort: i.A. Nein!

- Ja, falls  $V(\vec{r}) = \lambda \cdot |\vec{r}|^n$  für  $n = 0, 1, 2$
- Approximativ, falls Ausdehnung des Wellenpakets klein gegen Skala auf der  $\nabla V(\vec{r})$  variiert  $\Rightarrow$  semiklassischer Limes makroskopischer Objekte: de Broglie-Wellenlänge (Ausdehnung des Wellenpakets):

$$\lambda = \frac{\hbar}{m \cdot v} \ll \circ A$$

### 3.3.6 Energie-Zeit-Unschärfe

- Es gilt

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle|$$

mit  $H = B$ ,  $A = A^\dagger$  beliebig mit  $\frac{dA}{dt} = 0$ . Dann:

$$\Delta A \cdot \Delta E \geq \frac{1}{2} \left| \underbrace{\langle [A, H] \rangle}_{i\hbar \cdot \frac{d}{dt} \langle A \rangle - i\hbar \cdot \langle \frac{dA}{dt} \rangle} \right| = \frac{\hbar}{2} \cdot \left| \frac{d}{dt} \langle A \rangle \right|$$

Mögliche Definition von  $\Delta t$ :

$$\left| \frac{d}{dt} \langle A \rangle \right| = \frac{\Delta \tilde{A}}{\Delta t}$$

mit  $\Delta \tilde{A} = |\langle A(t + \Delta t) \rangle - \langle A(t) \rangle|$  statt  $\Delta A = \sqrt{\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle}$ . Sei  $\Delta \tilde{A} = \Delta A$ , dann

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

# 4

## Harmonischer Oszillator

(i). klassisch:

$$\begin{aligned} H(x, p) &= \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \cdot x^2 \\ \Rightarrow \dot{x} &= \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m} & \dot{p} &= -\frac{\partial H}{\partial x} = -m\omega^2 \cdot x \\ \Rightarrow x(t) &= x_m \cdot \cos(\omega t + \varphi) \\ p(t) &= -m\omega \cdot x_m \cdot \sin(\omega t + \varphi) \\ \Rightarrow E &= \frac{1}{2}m\omega^2 \cdot x_m^2 \cdot (\sin^2(\omega t + \varphi) + \cos^2(\omega t + \varphi)) \\ &= \frac{1}{2}m\omega^2 \cdot x_m^2 \end{aligned} \quad (*)$$

Ein beliebiges Potentialminimum ist approximativ ein harmonischer Oszillator, z.B.

- Vibration eines Atoms im Molekül um Gleichgewichtsposition
- Normalschwingungen von Atomen in Kristallgittern (Phononen)
- Amplitude elektro-magnetischer Moden → Quantisierung zur Erklärung der Hohlraumstrahlung (Planck, 1900) →  $\hbar$

(ii). quanten-mechanisch:

$$H = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega \cdot X^2$$

Es gilt  $X^+ = X$ ,  $P_x^+ = P_x$ ,  $[X, P_x] = i\hbar$ . Ziel: Lösung des Eigenwertproblems

$$H|n\rangle = E_n \cdot |n\rangle$$

### 4.1 Algebraische Methode

- Definiere

$$\begin{aligned} a &:= \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \left( \frac{1}{x_0} \cdot X + i \frac{x_0}{\hbar} \cdot P_x \right) \\ a^+ &:= \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \left( \frac{1}{x_0} \cdot X - i \frac{x_0}{\hbar} \cdot P_x \right) \end{aligned}$$

mit  $x_0 := \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$  (Längenskala). In (\*):

$$E = \frac{1}{2}m\omega^2 \cdot x_0^2 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

(Grundzustandsenergie) → Skala zur Energie  $\hbar\omega$ .

- Bemerkungen:

- $a, a^+$  sind Operatoren. Kleinschreibung üblich.
- $a, a^+$  sind einheitenlos.
- Es gilt:

$$X = \frac{x_0}{\sqrt{2}} \cdot (a + a^+) \qquad P_x = i \frac{\hbar}{\sqrt{2}x_0} \cdot (a^+ - a)$$

Kommutator:

$$[a, a^+] = \frac{i}{2\hbar} \cdot \left( - \underbrace{[X, P_x]}_{i\hbar} + \underbrace{[P_x, X]}_{-i\hbar} \right) = 1$$

$$[a^+, a] = -1$$

Dies ist äquivalent zu  $[X, P_x] = i\hbar$ .

- Definiere

$$N := a^+ a = \frac{1}{2} \cdot \left( \frac{X^2}{x_0^2} + \frac{x_0^2}{\hbar^2} \cdot P_x^2 + \frac{i}{\hbar} [X, P_x] \right)$$

$$= \frac{1}{2} \cdot \left( \frac{m\omega}{\hbar} \cdot X^2 + \frac{1}{m\omega\hbar} \cdot P_x^2 - 1 \right) = \frac{1}{\hbar\omega} \cdot \left( \frac{1}{2} m\omega^2 \cdot X^2 + \frac{1}{2m} \cdot P_x^2 - \frac{1}{2} \hbar\omega \right)$$

$$= \frac{H}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}$$

$$\Rightarrow H = \hbar\omega \cdot \left( N + \frac{1}{2} \right)$$

- Bemerkungen:

- $N$  ist hermitesch:  $N^+ = (a^+ a)^+ = a^+ a = N$
- Eigenwertproblem

$$N |n\rangle = n \cdot |n\rangle \Rightarrow H |n\rangle = \underbrace{\hbar\omega \cdot \left( n + \frac{1}{2} \right)}_{E_n} \cdot |n\rangle$$

Ziel: Löse  $N |n\rangle = n \cdot |n\rangle$  unter Benutzung von  $N = a^+ a$ ,  $[a, a^+] = 1$ .

- (i). Eigenwerte  $n \geq 0$ : Betrachte Norm von  $a |n\rangle$ :

$$\langle n | \underbrace{a^+ a}_N |n\rangle \geq 0 \Leftrightarrow n \cdot \langle n | n \rangle \geq 0 \Leftrightarrow n \geq 0$$

- (ii). Eigenschaften von  $a |n\rangle$  und  $a^+ |n\rangle$ :

- (1) Betrachte Norm von  $a |0\rangle$ :

$$\langle 0 | a^+ a |0\rangle = 0 \cdot \langle 0 | 0 \rangle = 0$$

$$\Rightarrow a |0\rangle = |0_{L^2}\rangle$$

(Beachte:  $|0\rangle$  ist Eigenvektor zum Eigenwert 0,  $|0_{L^2}\rangle$  ist Nullfunktion.)

- (2) Es gilt:

$$N(a |n\rangle) = a^+ a a |n\rangle = (a a^+ - 1) a |n\rangle = a \underbrace{a^+ a}_N |n\rangle - a |n\rangle$$

$$= n \cdot a |n\rangle - a |n\rangle = (n - 1) \cdot a |n\rangle$$

d.h.  $a |n\rangle$  ist Eigenzustand von  $N$  mit um 1 erniedrigtem Eigenwert im Vergleich zu  $|n\rangle$ . Also  $a |n\rangle$  Eigenzustand von  $H$  mit um  $\hbar\omega$  erniedrigtem Eigenwert im Vergleich zu  $|n\rangle$ .  $a$  ist „Vernichtungsoperator“ (vernichtet Energiequant  $\hbar\omega$ ).

Es muss gelten:

$$a|n\rangle = c \cdot |n-1\rangle$$

(da keine Entartung vorliegt! Müsste man noch zeigen.) Normierung:

$$\begin{aligned} \underbrace{\langle n|}_{N} \underbrace{a^+ a}_{1} |n\rangle &= |c|^2 \cdot \underbrace{\langle n-1|}_{1} |n-1\rangle \\ \Rightarrow n \cdot \langle n|n\rangle &= |c|^2 \end{aligned}$$

Wähle  $c > 0$  reell, dann  $c = \sqrt{n}$ . Damit:

$$a|n\rangle = \sqrt{n} \cdot |n-1\rangle$$

(3) Analog:

$$\begin{aligned} N(a^+ |n\rangle) &= a^+ a a^+ |n\rangle = (n+1) \cdot a^+ |n\rangle \\ \Rightarrow a^+ |n\rangle &= \sqrt{n+1} \cdot |n+1\rangle \end{aligned}$$

$a^+$  ist „Erzeugungsoperator“ (auch: Aufsteige-/Absteigeoperatoren).

(iii). Eigenwerte  $n$  sind natürliche Zahlen:

Annahme nicht. Dann existiert  $\nu \notin \mathbb{N}_0$ ,  $\nu > 0$  mit  $\nu$  Eigenwert. Es existiert  $m \in \mathbb{N}_0$  mit  $m < \nu < m+1$ .

$$\begin{aligned} a|\nu\rangle &= \sqrt{\nu} \cdot |\nu-1\rangle \\ a^2|\nu\rangle &= \sqrt{\nu} \cdot a|\nu-1\rangle = \sqrt{\nu} \cdot \sqrt{\nu-1} \cdot |\nu-2\rangle \\ \Rightarrow a^{m+1}|\nu\rangle &= c \cdot |\nu - (m+1)\rangle \\ \Rightarrow N|\nu - (m+1)\rangle &= \underbrace{(\nu - (m+1))}_{<0} \cdot |\nu - (m+1)\rangle \end{aligned}$$

Widerspruch!

Test:

$$\begin{aligned} a^n |n\rangle &= \sqrt{n!} \cdot |0\rangle \\ a^{n+1} |n\rangle &= \sqrt{n!} \cdot a|0\rangle = \sqrt{n!} \cdot |0_{L^2}\rangle \\ a^{n+2} |n\rangle &= a|0_{L^2}\rangle = |0_{L^2}\rangle \end{aligned}$$

(iv). Eigenzustände:

	Eigenwerte von N	Eigenwerte von H
$ 0\rangle$	0	$\frac{1}{2}\hbar\omega$
$ 1\rangle = a^+  0\rangle$	1	$\frac{3}{2}\hbar\omega$
$ 2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} a^+  1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (a^+)^2  0\rangle$	2	$\frac{5}{2}\hbar\omega$
$ n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^n  0\rangle$	n	$(n + \frac{1}{2})\hbar\omega$

Bemerkung: N ist Besetzungszahloperator,  $\langle n|n'\rangle = \delta_{nn'}$  d.h. Eigenzustände sind orthogonal.

(v). Eigenzustände in Ortsdarstellung: Grundzustand:

$$\begin{aligned}
 a|0\rangle &= |0_{L^2}\rangle \\
 \Rightarrow \langle x|a|0\rangle &= \langle x|0_{L^2}\rangle = 0 \\
 \Rightarrow \left\langle x \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \left( \frac{X}{x_0} + i \frac{x_0}{\hbar} \cdot P_x \right) \right| 0 \right\rangle &= 0 \\
 \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}x_0} \cdot \underbrace{\langle x|X|0\rangle}_{x \cdot \varphi_0(x)} + i \frac{x_0}{\sqrt{2}\hbar} \cdot \underbrace{\langle x|P_x|0\rangle}_{\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \varphi_0(x)} &= 0 \\
 \Rightarrow \left( \frac{x}{x_0^2} + \frac{\partial}{\partial x} \right) \varphi_0(x) &= 0
 \end{aligned}$$

Trennung der Variablen:

$$\begin{aligned}
 \frac{\varphi_0'(x)}{\varphi_0(x)} &= -\frac{x}{x_0^2} \\
 \Rightarrow \ln|\varphi_0(x)| &= -\frac{x^2}{2x_0^2} + c \\
 \Rightarrow |\varphi_0(x)| &= c' \cdot \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right)
 \end{aligned}$$

Damit folgt (aus der notwendigen Stetigkeit und Normierung von  $\varphi$ ):

$$\varphi_0(x) = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}} \cdot \sqrt{x_0}} \cdot \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right)$$

Bemerkung: Grundzustand ist nicht entartet  $\Rightarrow$  kein Zustand entartet.

angeregte Zustände:

$$\begin{aligned}
 \varphi_n(x) &:= \langle x|n\rangle = \left\langle x \left| \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^n \right| 0 \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \cdot \left\langle x \left| \left( \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \left( \frac{X}{x_0} - \frac{x_0}{i\hbar} \cdot P_x \right) \right)^n \right| 0 \right\rangle \\
 &= \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}} \cdot \sqrt{x_0} \cdot \sqrt{n!} \cdot \sqrt{2^n}} \cdot \underbrace{\left( y - \frac{d}{dy} \right)^n e^{-\frac{y^2}{2}}}_{=H_n(y) \cdot e^{-\frac{y^2}{2}}}
 \end{aligned}$$

mit  $y := \frac{x}{x_0}$ .  $H_n$ : Hermite-Polynom n-ten Grades, zum Beispiel:

$$H_0(y) = 1 \quad H_1(y) = 2y \quad H_2(y) = 4y^2 - 2$$

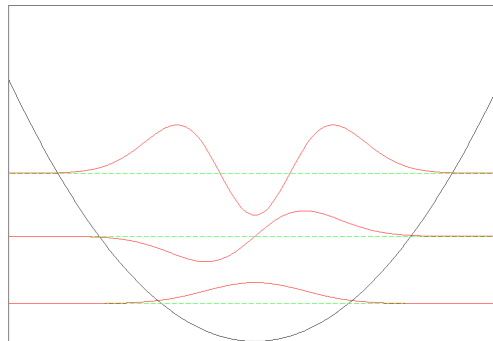
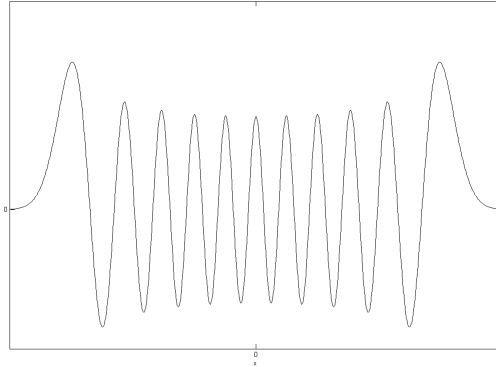


Abbildung 4.1: Eigenzustände  $\varphi_0, \varphi_1, \varphi_2$  in Ortsdarstellung

Bemerkungen:

- Zahl der Knoten von  $\varphi_n$  ist  $n$ .
- $n \geq 2$ : Wahrscheinlichkeitsdichte am Rand größer (Länge der klassischen Aufenthaltszeit).



(vi). Eigenzustände in Impulsdarstellung:

$$\begin{aligned}\langle p|n\rangle &= \left\langle p \left| \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^n \right| 0 \right\rangle = \dots \\ &= (-i)^n \cdot \frac{x_0}{\sqrt{\hbar}} \cdot \varphi_n \left( x = \frac{p \cdot x_0}{\hbar} \right)\end{aligned}$$

d.h. gleiche Funktion für Impuls- und Ortsdarstellung (bis auf Skalierung).

(vii). Es gilt  $\langle X \rangle_n = 0$ :

$$\langle X \rangle_n = \langle n|X|n\rangle = \frac{x_0}{\sqrt{2}} \cdot \langle n|a + a^+|n\rangle = \frac{x_0}{\sqrt{2}} \cdot \left( \underbrace{\langle n|n-1\rangle}_{0} \cdot \sqrt{n} + \underbrace{\langle n|n+1\rangle}_{0} \cdot \sqrt{n+1} \right) = 0$$

Analog  $\langle P_x \rangle_n = 0$ . Außerdem (Übung 9):

$$\begin{aligned}\Delta X^2 &= \langle X^2 \rangle - \underbrace{\langle X \rangle^2}_0 = \left( n + \frac{1}{2} \right) \cdot x_0^2 \quad (*) \\ \Delta P_x^2 &= \langle P_x^2 \rangle - \langle P_x \rangle^2 = \left( n + \frac{1}{2} \right) \cdot \frac{\hbar^2}{x_0^2} \\ \Rightarrow \Delta X \cdot \Delta P_x &= \left( n + \frac{1}{2} \right) \cdot \hbar \geq \frac{\hbar}{2}\end{aligned}$$

also minimale Unschärfe für Grundzustand  $n = 0$ .

(viii). Virialsatz:  $\langle T \rangle = \frac{k}{2} \cdot \langle V \rangle$  für  $V \sim x^k$  (Theoretische Mechanik). Hier  $k = 2$ , also  $\langle T \rangle = \langle V \rangle$ .  
Quantenmechanisch:

$$\begin{aligned}\langle V \rangle &= \frac{1}{2} m \omega^2 \cdot \langle X^2 \rangle \stackrel{*}{=} \left( n + \frac{1}{2} \right) \cdot x_0^2 \cdot \left( \frac{1}{2} m \omega^2 \right) \\ &= \frac{1}{2} \hbar \omega \cdot \left( n + \frac{1}{2} \right) = \frac{E_n}{2} \\ \langle T \rangle &= \frac{1}{2m} \cdot \langle P_x^2 \rangle \stackrel{*}{=} \frac{1}{2m} \cdot \left( n + \frac{1}{2} \right) \cdot \frac{\hbar^2}{x_0^2} \\ &= \frac{1}{2} \cdot \left( n + \frac{1}{2} \right) \cdot \hbar \omega = \frac{E_n}{2}\end{aligned}$$

also  $\langle T \rangle = \langle V \rangle$ .



- (ix). Ehrenfest-Theorem für harmonischen Oszillator: Zeitentwicklung von  $\langle X \rangle$  und  $\langle P_x \rangle$  folgt klassischer Dynamik für beliebiges Wellenpaket:

$$\frac{d}{dt} \langle X \rangle = \frac{\langle P_x \rangle}{m} \quad \frac{d}{dt} \langle P_x \rangle = -m\omega^2 \cdot \langle X \rangle$$

#### 4.2 Kohärente Zustände

- Motivation: Eigenzustände sind „breit“, dies passt nicht zur klassischen Dynamik eines Teilchens. Welche Zustände passen besser zur klassischen Dynamik?
- Untersuche die Eigenvektoren des Vernichtungsoperators  $a$

$$a |\alpha\rangle = \alpha |\alpha\rangle$$

dann heißt  $|\alpha\rangle$  kohärenter Zustand. Vorsicht:  $a$  ist nicht hermitesch, also z.B. Eigenvektoren i.A. nicht orthogonal.

- Entwicklung von Eigenvektoren  $|\alpha\rangle$  in der Basis  $|n\rangle$  von  $H$ :

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \underbrace{\langle n|\alpha\rangle}_{=:c_n(\alpha)} = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(\alpha) \cdot |n\rangle$$

mit  $H|n\rangle = E_n|n\rangle$ . Damit Eigenwertproblem:

$$\begin{aligned} a|\alpha\rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} c_n(\alpha) \cdot a|n\rangle &&= \sum_{n=0}^{\infty} c_n(\alpha) \cdot \sqrt{n} \cdot |n-1\rangle \\ &\stackrel{!}{=} \sum_{n=0}^{\infty} \alpha \cdot c_n(\alpha) \cdot |n\rangle \end{aligned}$$

Koeffizientenvergleich von  $|n-1\rangle$ :

$$\begin{aligned} c_n(\alpha) \cdot \sqrt{n} &= c_{n-1}(\alpha) \cdot \alpha \quad (n \geq 1) \\ \Rightarrow c_n(\alpha) &= \frac{\alpha \cdot c_{n-1}(\alpha)}{\sqrt{n}} = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \cdot c_0(\alpha) \\ \Rightarrow |\alpha\rangle &= \left( \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \cdot |n\rangle \right) \cdot c_0(\alpha) \end{aligned}$$

Aus

$$\begin{aligned} 1 \stackrel{!}{=} \langle \alpha|\alpha \rangle &= \langle \alpha|\mathbb{1}|\alpha \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \underbrace{\langle \alpha|n \rangle}_{c_n(\alpha)} \cdot \underbrace{\langle n|\alpha \rangle}_{c_n(\alpha)} = \sum_{n=0}^{\infty} |c_n(\alpha)|^2 \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} \cdot |c_0(\alpha)|^2 = |c_0(\alpha)|^2 \cdot e^{|\alpha|^2} \end{aligned}$$

also  $c_0(\alpha) = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}}$  bis auf Phase. Damit:

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

- Bemerkung: Eigenvektoren von  $a$  sind nicht orthogonal, aber normiert.

$$|\langle \alpha|\alpha' \rangle| = \exp\left(-\frac{|\alpha - \alpha'|^2}{2}\right)$$

- Bestimmung der Ortsdarstellung:

$$\begin{aligned}
 \varphi_\alpha(x) &= \langle x|\alpha \rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \cdot \underbrace{\langle x|n \rangle}_{\varphi_n(x)} \\
 &\stackrel{y:=\frac{x}{x_0}}{=} e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \cdot \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}} \cdot \sqrt{x_0}} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \cdot \frac{1}{\sqrt{n!} \cdot \sqrt{2^n}} \cdot H_n(y) \cdot e^{-\frac{y^2}{2}} \\
 &= \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}} \cdot \sqrt{x_0}} \cdot \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \cdot \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) \cdot \exp\left(\sqrt{2}\alpha \cdot y\right) \cdot \exp\left(-\frac{\alpha^2}{2}\right) \\
 &= \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}} \cdot \sqrt{x_0}} \cdot \exp\left(-\left(\alpha_R^2 - \sqrt{2}\alpha_R \cdot y + \frac{y^2}{2}\right)\right) \cdot \exp(-i\alpha_R \cdot \alpha_I) \cdot \exp\left(i\sqrt{2} \cdot \alpha_I \cdot y\right) \quad (*)
 \end{aligned}$$

mit  $\alpha = \alpha_R + i \cdot \alpha_I$ . Benutzt:

$$\sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \cdot \frac{t^n}{n!} = e^{2xt-t^2}$$

Analog erhält man:

$$\varphi_\alpha(p) = \frac{\sqrt{x_0}}{\hbar \cdot \pi^{\frac{1}{4}}} \cdot \exp\left(-\left(\alpha_I^2 - \sqrt{2}\alpha_I \cdot \frac{p \cdot x_0}{\hbar} + \frac{p^2 \cdot x_0^2}{2\hbar^2}\right)\right) \cdot \exp(i\alpha_R \cdot \alpha_I) \cdot \exp\left(-i\sqrt{2}\alpha_R \cdot \frac{p \cdot x_0}{\hbar}\right)$$

Außerdem:

$$\begin{aligned}
 \langle X \rangle_\alpha &= \langle \alpha|X|\alpha \rangle = \frac{x_0}{\sqrt{2}} \cdot \langle \alpha|a + a^\dagger|\alpha \rangle = \frac{x_0}{\sqrt{2}} \cdot (\alpha \cdot \underbrace{\langle \alpha|\alpha \rangle}_1 + \bar{\alpha} \cdot \underbrace{\langle \alpha|1 \rangle}_1) \\
 &= \frac{x_0}{\sqrt{2}} \cdot (\alpha + \bar{\alpha}) = \sqrt{2}x_0 \cdot \alpha_R \\
 \langle P_x \rangle_\alpha &= \langle \alpha|P_x|\alpha \rangle = \dots = \frac{\sqrt{2}\hbar}{x_0} \cdot \alpha_I \\
 \Rightarrow \alpha_R &= \frac{\langle X \rangle_\alpha}{\sqrt{2}x_0} \quad \alpha_I = \frac{\langle P_x \rangle_\alpha \cdot x_0}{\sqrt{2}\hbar} \\
 \Delta X_\alpha^2 &= \langle X^2 \rangle_\alpha - \langle X \rangle_\alpha^2 = \dots = \frac{1}{2}x_0^2 \\
 \Delta P_x^2 &= \langle P_x^2 \rangle_\alpha - \langle P_x \rangle_\alpha^2 = \dots = \frac{1}{2} \cdot \frac{\hbar^2}{x_0^2}
 \end{aligned}$$

also folgt

$$\Delta X_\alpha \cdot \Delta P_\alpha = \frac{\hbar}{2}$$

d.h. minimale Unschärfe.

- Einsetzen von  $\alpha_R, \alpha_I$  in (\*):

$$\begin{aligned}
 \varphi_\alpha(x) &= \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}} \cdot \sqrt{x_0}} \cdot \exp\left(-\frac{(x - \langle X \rangle_\alpha)^2}{4\Delta X_\alpha^2}\right) \cdot \exp\left(i\frac{x}{\hbar} \cdot \langle P_x \rangle_\alpha\right) \cdot \exp\left(-\frac{i}{2\hbar} \langle X \rangle_\alpha \cdot \langle P_x \rangle_\alpha\right) \\
 \Rightarrow |\varphi_\alpha(x)|^2 &\propto \exp\left(-\frac{(x - \langle X \rangle_\alpha)^2}{2\Delta X_\alpha^2}\right) \\
 \varphi_\alpha(p) &= \sqrt{\frac{x_0}{\hbar}} \cdot \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}} \cdot \exp\left(-\frac{(p - \langle P_x \rangle_\alpha)^2}{4\Delta P_\alpha^2}\right) \cdot \exp\left(-i\frac{p}{\hbar} \langle X \rangle_\alpha\right) \cdot \exp\left(\frac{i}{2\hbar} \langle X \rangle_\alpha \cdot \langle P_x \rangle_\alpha\right) \\
 \Rightarrow |\varphi_\alpha(p)|^2 &\propto \exp\left(-\frac{(p - \langle P_x \rangle_\alpha)^2}{2\Delta P_\alpha^2}\right)
 \end{aligned}$$

Gauß-Pakete in Ort und Impuls mit  $\langle X \rangle_\alpha \propto \alpha_R$ ,  $\langle P_x \rangle_\alpha \propto \alpha_I$ , d.h. komplexe Ebene  $\alpha \hat{=}$  Phasenraum  $(x, p)$ .

- Energieerwartungswert:

$$\langle H \rangle_\alpha = \left\langle \alpha \left| \hbar\omega \cdot \left( a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \right| \alpha \right\rangle = \hbar\omega \cdot \left( |\alpha|^2 + \frac{1}{2} \right)$$

$$\Delta H_\alpha = \dots = \hbar\omega \cdot |\alpha|$$

also  $\frac{\Delta H_\alpha}{\langle H \rangle_\alpha} \rightarrow 0$  ( $|\alpha| \rightarrow \infty$ ).

- Zeitentwicklung kohärenter Zustände:

$$|\psi(t=0)\rangle = |\alpha_0\rangle = e^{-\frac{|\alpha_0|^2}{2}} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha_0^n}{\sqrt{n!}} \cdot |n\rangle$$

$$\Rightarrow |\psi(t)\rangle = e^{-\frac{|\alpha_0|^2}{2}} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \left( \frac{\alpha_0^n}{\sqrt{n!}} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} E_n \cdot t} \cdot |n\rangle \right)$$

$$= e^{-\frac{|\alpha_0|^2}{2}} \cdot e^{i\omega \cdot \frac{t}{2}} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha_0 \cdot e^{-i\omega \cdot t})^n}{\sqrt{n!}} \cdot |n\rangle$$

$$= e^{i\omega \cdot \frac{t}{2}} \cdot e^{-\frac{|\alpha(t)|^2}{2}} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha(t))^n}{\sqrt{n!}} \cdot |n\rangle = e^{i\omega \cdot \frac{t}{2}} \cdot |\alpha(t)\rangle$$

mit  $\alpha(t) := \alpha_0 \cdot e^{-i\omega \cdot t}$ .

- Bemerkungen:

- Kohärenter Zustand bleibt kohärenter Zustand für alle t im harmonischen Oszillator.
- $\alpha(t) = \alpha_0 \cdot e^{-i\omega \cdot t} \hat{=}$  Drehung im Phasenraum im Uhrzeigersinn  $\hat{=}$  klassische Dynamik.
- Gilt auch für alle Gauß-Pakete beliebiger Breite, allerdings oszilliert die Breite.
- Beispiel: makroskopischer Oszillator: Pendel mit  $\ell = 10\text{cm}$ ,  $m=1\text{kg}$ , kleine Amplitude,

$$\ddot{\varphi} = -\frac{g}{\ell} \cdot \varphi \Rightarrow \omega = \sqrt{\frac{g}{\ell}} \quad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

Anfangsbedingungen  $x_0 = 1\text{cm}$ ,  $p_a = 0$ . Dann:

$$|\alpha|^2 = \frac{x_a^2}{2x_0} \approx 10^{30}$$

$$\Delta x \approx 10^{-18}\text{m} \quad \Delta p \approx 10^{-17}\text{kg} \frac{\text{m}}{\text{s}}$$

$$\Delta H = 10^{-18}\text{J} \quad \frac{\Delta H}{H} \approx 10^{-16}$$

### 4.3 3D harmonischer Oszillator

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m} + \frac{1}{2}m \cdot (\omega_x^2 \cdot X^2 + \omega_y^2 \cdot Y^2 + \omega_z^2 \cdot Z^2) = H_x + H_y + H_z$$

mit z.B.

$$H_x = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_x^2 \cdot X^2$$

Zentralpotential ist separierbar nach  $X, Y, Z$ .

$$H_x |n_x\rangle = \left( n_x + \frac{1}{2} \right) \cdot |n_x\rangle \cdot \hbar\omega_x$$

$$H_y |n_y\rangle = \left( n_y + \frac{1}{2} \right) \cdot |n_y\rangle \cdot \hbar\omega_y$$

$$H_z |n_z\rangle = \left( n_z + \frac{1}{2} \right) \cdot |n_z\rangle \cdot \hbar\omega_z$$

mit  $n_x, n_y, n_z \in \mathbb{N}_0$ ,  $|n_i\rangle \in \varepsilon_i$  Zustandsraum 1D in  $x_i$ . Zustandsraum in 3d:

$$\varepsilon_{\vec{r}} = \varepsilon_x \otimes \varepsilon_y \otimes \varepsilon_z$$

mit  $\otimes$  Tensorprodukt. Eigenvektoren:

$$|n_x, n_y, n_z\rangle = |n_x\rangle \otimes |n_y\rangle \otimes |n_z\rangle$$

Spezialfall: isotroper harmonischer Oszillator, d.h.  $\omega_x = \omega_y = \omega_z =: \omega$ :

$$E_n = \left(n + \frac{3}{2}\right) \cdot \hbar\omega$$

mit  $n := n_x + n_y + n_z$ .

# 5

## Dreidimensionale Probleme

### 5.1 Drehimpuls

(i). klassisch:

$$\vec{\mathcal{L}} = \vec{r} \times \vec{p} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y \cdot p_z - z \cdot p_y \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Drehimpulserhaltung:

$$\frac{d}{dt} \vec{\mathcal{L}} = 0$$

für isoliertes System oder Zentralpotential

(ii). quantenmechanisch: Observablen

$$L_x := Y \cdot P_z - Z \cdot P_y \quad L_y := Z \cdot P_x - X \cdot P_z \quad L_z := X \cdot P_y - Y \cdot P_x$$

Hermitizität:

$$L_x^+ = (Y \cdot P_z)^+ - (Z \cdot P_y)^+ = P_z^+ \cdot Y^+ - P_y^+ \cdot Z^+ = Y \cdot P_z - Z \cdot P_y = L_x$$

mit Kommutatorbeziehungen

$$[L_x, L_y] = \imath \hbar \cdot L_z \quad [L_y, L_z] = \imath \hbar \cdot L_x \quad [L_z, L_x] = \imath \hbar \cdot L_y$$

• Definition: Falls für Observablen  $J_x, J_y, J_z$  gilt

$$[J_x, J_y] = \imath \hbar \cdot J_z \quad [J_y, J_z] = \imath \hbar \cdot J_x \quad [J_z, J_x] = \imath \hbar \cdot J_y$$

bzw.  $[J_i, J_k] = \varepsilon_{ikl} \cdot \imath \hbar \cdot J_l$ , so ist  $\vec{J} := (J_x, J_y, J_z)^T$  ein Drehimpuls.

• Bemerkungen:

- Bahndrehimpuls  $\vec{L}$ : entsprechender klassischer Drehimpuls existiert
- Spindrehimpuls  $\vec{S}$ : kein entsprechender klassischer Drehimpuls existiert
- Nichtvertauschbarkeit  $\Rightarrow J_x, J_y, J_z$  können nicht gleichzeitig gemessen werden.

• Betrachte  $\vec{J}^2 := J^2 := J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$ . Es gilt:

- $\vec{J}^2$  ist hermitesch, denn  $J_x, J_y, J_z$  sind hermitesch.
- Es gilt

$$\begin{aligned} [\vec{J}^2, J_x] &= [J_x^2 + J_y^2 + J_z^2, J_x] = [J_y^2, J_x] + [J_z^2, J_x] \\ &= J_y \cdot \underbrace{[J_y, J_x]}_{-\imath \hbar \cdot J_z} + \underbrace{[J_y, J_x]}_{-\imath \hbar \cdot J_z} \cdot J_y + J_z \cdot \underbrace{[J_z, J_x]}_{\imath \hbar \cdot J_y} + \underbrace{[J_z, J_x]}_{\imath \hbar \cdot J_y} \cdot J_z \\ &= 0 \end{aligned}$$

Analog:

$$[\vec{J}^2, J_y] = [\vec{J}^2, J_z] = 0$$

d.h.  $\vec{J}^2, J_x$  bzw.  $\vec{J}^2, J_y$  bzw.  $\vec{J}^2, J_z$  können paarweise gleichzeitig gemessen werden.

• Ziel: Suche gemeinsame Eigenvektoren von  $\vec{J}^2$  und  $J_z$  und deren Eigenwerte.

### 5.1.1 Kommutatoralgebra

$$J_+ := J_x + i J_y$$

$$J_- := J_x - i J_y$$

- Bemerkung:  $J_+, J_-$  sind nicht hermitesch:

$$J_+^\dagger = J_x - i J_y = J_-$$

$$J_-^\dagger = J_x + i J_y = J_+$$

- Es gilt:

$$[J_+, J_-] = 2\hbar \cdot J_z$$

$$[J_z, J_+] = \hbar \cdot J_+$$

$$[J_z, J_-] = -\hbar \cdot J_-$$

$$[J^2, J_z] = [J^2, J_y] = [J^2, J_x] = 0$$

$$J_+ J_- = J^2 - J_z^2 + \hbar \cdot J_z$$

$$J_- J_+ = J^2 - J_z^2 - \hbar \cdot J_z$$

Folgerungen für Eigenwerte, Eigenfunktion von  $J^2, J_z$ :

- (i). Eigenwerte von  $J^2$ : Sei  $|\psi\rangle$  ein Eigenvektor, d.h.  $J^2|\psi\rangle = \lambda \cdot |\psi\rangle$ , dann

$$\langle \psi | J^2 | \psi \rangle = \lambda \cdot \underbrace{\langle \psi | \psi \rangle}_{\geq 0}$$

$$\Leftrightarrow \underbrace{\langle \psi | J_x^2 | \psi \rangle}_{\langle J_x \psi | J_x \psi \rangle \geq 0} + \underbrace{\langle \psi | J_y^2 | \psi \rangle}_{\langle J_y \psi | J_y \psi \rangle \geq 0} + \underbrace{\langle \psi | J_z^2 | \psi \rangle}_{\langle J_z \psi | J_z \psi \rangle \geq 0} = \lambda \cdot \underbrace{\langle \psi | \psi \rangle}_{\geq 0}$$

also  $\lambda \geq 0$ . Setze  $\lambda = j \cdot (j + 1) \cdot \hbar^2$  mit  $j \in \mathbb{R}, j \geq 0$ .

Bemerkungen:

- richtige Einheit
- eindeutig:

$$j = -\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{\lambda}{\hbar^2}}$$

- vorteilhaft im Weiteren

- (ii). Eigenwerte von  $J_z$ :  $m \cdot \hbar$  mit zunächst  $m \in \mathbb{R}$ .

- (iii). Eigenwertgleichungen:

$$J^2 |j, m\rangle = j \cdot (j + 1) \cdot \hbar^2 \cdot |j, m\rangle$$

$$J_z |j, m\rangle = m \hbar \cdot |j, m\rangle$$

- (iv). Eigenwertbeziehung:  $-j \leq m \leq j$

Beweis:  $J_+ |j, m\rangle$  hat Norm

$$\begin{aligned} 0 &\leq \langle j, m | J_- J_+ |j, m\rangle = \langle j, m | J^2 - J_z^2 - \hbar \cdot J_z |j, m\rangle \\ &= j \cdot (j + 1) \cdot \hbar^2 - m^2 \cdot \hbar^2 - m \cdot \hbar^2 = \hbar^2 \cdot (j \cdot (j + 1) - m^2 - m) \\ &\Rightarrow j \cdot (j + 1) \geq m \cdot (m + 1) \Rightarrow m \leq j \end{aligned}$$

Betrachte Norm von  $J_- |j, m\rangle$ , dann folgt  $m \geq -j$ .

- (v). Eigenschaften von  $J_- |j, m\rangle$ :

(a)  $J_- |j, m\rangle = |0_{L^2}\rangle \Leftrightarrow m = -j$

Beweis:

- „ $\Leftarrow$ “:  $J_- |j, -j\rangle$  hat Norm

$$\begin{aligned} \langle j, -j | \underbrace{J_+ J_-}_{J^2 - J_z^2 + \hbar J_z} |j, -j\rangle &= \hbar^2 \cdot (j \cdot (j+1) - j^2 - j) = 0 \\ \Rightarrow J_- |j, -j\rangle &= |0_{L^2}\rangle \end{aligned}$$

- „ $\Rightarrow$ “:

$$J_+ \underbrace{J_- |j, m\rangle}_{|0_{L^2}\rangle} = \hbar^2 \cdot \underbrace{(j \cdot (j+1) - m^2 + m)}_{(j+m) \cdot (j+1-m)} \cdot \underbrace{|j, m\rangle}_{\neq |0_{L^2}\rangle} \stackrel{!}{=} |0_{L^2}\rangle$$

also  $j = -m$  wegen  $j+1-m > 0$ .

- (b) Es gilt

$$\begin{aligned} \underbrace{[J_z, J_-]}_{-\hbar J_-} |j, m\rangle &= -\hbar \cdot J_- |j, m\rangle \\ \Rightarrow J_z (J_- |j, m\rangle) &= J_- J_z |j, m\rangle - \hbar \cdot J_- |j, m\rangle \\ &= (m-1) \cdot \hbar \cdot (J_- |j, m\rangle) \end{aligned}$$

d.h.  $J_- |j, m\rangle$  ist Eigenvektor von  $J_z$  mit Eigenwert  $(m-1) \cdot \hbar$  für  $m > -j$ . ( $J_-$ : Absteigeoperator)

- (c)  $m > -j \Rightarrow \exists p \in \mathbb{N}_0 : -j \leq m-p < -j+1$ . Damit  $J_-^p |j, m\rangle$  Eigenvektor zu  $J_z$  mit Eigenwert  $(m-p) \cdot \hbar$ . Zwei Fälle:

- $m-p > -j$ :  $J_-^{p+1} |j, m\rangle$  ist Eigenvektor zu  $J_z$  mit Eigenwert  $(m-p-1) \cdot \hbar < -j$ . Widerspruch!
- $m-p = -j$ :  $J_-^{p+1} |j, m\rangle = |0_{L^2}\rangle$

also existiert ein  $p \in \mathbb{N}_0$  mit  $m-p = -j$ .

- (d) Aus

$$\underbrace{[J^2, J_-]}_0 |j, m\rangle = |0_{L^2}\rangle$$

folgt

$$J^2 (J_- |j, m\rangle) = J_- \left( \underbrace{J^2 |j, m\rangle}_{j \cdot (j+1) \cdot \hbar^2 |j, m\rangle} \right) = j \cdot (j+1) \cdot \hbar^2 \cdot J_- |j, m\rangle$$

also  $J_- |j, m\rangle$  Eigenvektor von  $J^2$  zum Eigenwert  $j \cdot (j+1) \cdot \hbar^2$ .

- (vi). Eigenschaften von  $J_+ |j, m\rangle$ : Es existiert  $q \in \mathbb{N}_0$  mit  $m+q = j$ .  $J_+ |j, m\rangle$  ist Eigenvektor zu  $J_z$  mit Eigenwert  $(m+1) \cdot \hbar$ . ( $J_+$ : Aufsteigeoperator)  $J_+ |j, m\rangle$  ist Eigenvektor zu  $J^2$  mit Eigenwert  $j \cdot (j+1) \cdot \hbar^2$ .

- (vii). Eigenschaften von  $J^2$ : Es existieren  $q, p \in \mathbb{N}_0$  mit  $m+q = j, m-p = -j$ , daher

$$q+p = 2j \Rightarrow j = \frac{q+p}{2}$$

also  $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$

- (viii). Eigenwerte von  $J_z$ :

j	m
0	0
$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
1	$-1, 0, 1$
$\frac{3}{2}$	$-\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$
$\vdots$	$\vdots$

Bemerkungen:

- $2j + 1$  Möglichkeiten für  $m$
- alle werden realisiert
- $j$  (un)ganzzahlig  $\Leftrightarrow m$  (un)ganzzahlig

(ix). Basiszustände und Unterräume  $\varepsilon(j, m)$ :

- Betrachte alle gemeinsamen Eigenvektoren von  $J^2$  und  $J_z$ . Wähle zu gegebenem  $j, m$  alle Eigenvektoren, diese bilden Unterraum  $\varepsilon(j, m)$  des Zustandsraums mit Dimension  $g(j, m)$ . Bilde orthonormale Basis  $(|k, j, m\rangle)_{k=1, \dots, g(j, m)}$ , dann  $\langle k_1, m, j | k_2, m, j \rangle = \delta_{k_1 k_2}$ . Konstruiere hieraus Basis in  $\varepsilon(j, m + 1)$  (für  $m < j$ ).
- Behauptung:  $J_+ |k_1, j, m\rangle$  ist orthogonal zu  $J_+ |k_2, j, m\rangle$  für  $k_1 \neq k_2$ .

Beweis:

$$\langle k_1, j, m | \underbrace{J_- J_+}_{J^2 - J_z^2 - \hbar J_z} | k_2, j, m \rangle = \hbar^2 \cdot (j \cdot (j + 1) - m^2 - m) \cdot \underbrace{\langle k_1, j, m | k_2, j, m \rangle}_{\delta_{k_1 k_2}} = 0$$

- Definition:

$$|k, j, m + 1\rangle := \frac{1}{\hbar \cdot \sqrt{j \cdot (j + 1) - m \cdot (m + 1)}} \cdot J_+ |k, j, m\rangle$$

... damit Orthonormalsystem in  $\varepsilon(j, m + 1)$ .

- Ebenso Orthonormalsystem in  $\varepsilon(j, m - 1)$ :

$$|k, j, m - 1\rangle = \frac{1}{\hbar \cdot \sqrt{j \cdot (j + 1) - m \cdot (m - 1)}} \cdot J_- |k, j, m\rangle$$

für  $k = 1, \dots, g(j, m), m > -j$ . Damit folgt  $g(j, m - 1) = g(j, m + 1) = g(j, m) =: g(j)$ . Basis!

- Orthonormalität:

$$\langle k', j', m' | k, j, m \rangle = \delta_{kk'} \cdot \delta_{mm'} \cdot \delta_{jj'}$$

Vollständigkeit:

$$\sum_j \sum_{m=-j}^j \sum_{k=1}^{g(j)} |k, j, m\rangle \langle k, j, m| = \mathbb{1}$$

Übersicht:

$$\begin{array}{ccccccc} |1, j, j\rangle & |2, j, j\rangle & \dots & |g(j), j, j\rangle & & & \\ |1, j, j-1\rangle & |2, j, j-1\rangle & \dots & |g(j), j, j-1\rangle & \leftarrow & \varepsilon(j, j) & \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \leftarrow & \varepsilon(j, j-1) & \\ |1, j, -j\rangle & |2, j, -j\rangle & \dots & |g(j), j, -j\rangle & & \vdots & \\ \uparrow & \uparrow & & \uparrow & \leftarrow & \varepsilon(j, -j) & \\ \varepsilon(1, j) & \varepsilon(2, j) & \dots & \varepsilon(g(j), j) & & & \end{array}$$

Nachteile der Unterräume  $\varepsilon(j, m)$ :

- Dimension  $g(j)$  hängt vom physikalischen System ab
- Raum  $\varepsilon(j, m)$  ist nicht invariant unter Operatoren der Form  $F(\vec{J})$

(x). Unterräume  $\varepsilon(k, j)$ : Vorteile

- Dimension  $2j + 1$  unabhängig vom physikalischen System
- Raum  $\varepsilon(k, j)$  ist invariant unter beliebigem Operator  $F(\vec{J})$

$$J^2 |k, j, m\rangle = j \cdot (j + 1) \cdot \hbar^2 \cdot |k, j, m\rangle$$

$$J_z |k, j, m\rangle = m \hbar \cdot |k, j, m\rangle$$

$$J_{\pm} |k, j, m\rangle = \hbar \cdot \sqrt{j \cdot (j + 1) - m \cdot (m \pm 1)} \cdot |k, j, m \pm 1\rangle$$



- Raum ist irreduzibel bzgl.  $\vec{J}$ , d.h. es gibt keinen kleineren Unterraum mit dieser Eigenschaft.

(xi). Matrixdarstellung von  $\vec{J}$  bzw.  $F(\vec{J})$ : Matrixelemente

$$\begin{aligned}\langle k, j, m | J_z | k', j', m' \rangle &= m \hbar \cdot \delta_{kk'} \cdot \delta_{jj'} \cdot \delta_{mm'} \\ \langle k, j, m | J_{\pm} | k', j', m' \rangle &= \hbar \sqrt{j \cdot (j+1) - m \cdot (m \pm 1)} \cdot \delta_{kk'} \cdot \delta_{jj'} \cdot \delta_{m, m' \pm 1} \\ \langle k, j, m | J^2 | k', j', m' \rangle &= j \cdot (j+1) \cdot \hbar^2 \cdot \delta_{kk'} \cdot \delta_{jj'} \cdot \delta_{mm'} \\ \Rightarrow \langle k, j, m | F(\vec{J}) | k', j', m' \rangle &\sim \delta_{kk'} \cdot \delta_{jj'}\end{aligned}$$

Matrix:

$$\begin{array}{c} \varepsilon(k, j) \quad \varepsilon(k', j') \quad \varepsilon(k, j') \\ \varepsilon(k, j) \begin{pmatrix} \blacksquare & 0 & 0 \\ 0 & \blacksquare & 0 \\ 0 & 0 & \blacksquare \end{pmatrix} \\ \varepsilon(k', j') \\ \varepsilon(k, j') \end{array}$$

wobei  $\blacksquare$  jeweils  $(2j+1) \times (2j+1)$ -Matrizen.

Bemerkungen:

- Blockdiagonalform
- Blöcke irreduzibel für beliebige  $F(\vec{J})$

(a) Blöcke mit  $j=0 \Rightarrow m=0 \Rightarrow 1 \times 1$ -Matrix

$$J_z = 0 \quad J_{\pm} = 0 \quad J_x = \frac{1}{2}(J_+ + J_-) = 0 \quad J_y = 0 \quad J^2 = 0$$

(b) Blöcke mit  $j = \frac{1}{2} \Rightarrow m = \pm \frac{1}{2} \Rightarrow 2 \times 2$ -Matrix

$$\begin{aligned}(J_z)_{k, j=\frac{1}{2}, m, k, j=\frac{1}{2}, m'} &= m \hbar \cdot \delta_{mm'} \\ \Rightarrow J_z &= \frac{\hbar}{2} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ (J_+)_{k, j=\frac{1}{2}, m, k, j=\frac{1}{2}, m'} &= \hbar \cdot \sqrt{\frac{3}{4} - m' \cdot (m' + 1)} \cdot \delta_{m, m'+1} \\ \Rightarrow J_+ &= \hbar \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ (J^2)_{k, j=\frac{1}{2}, m, k, j=\frac{1}{2}, m'} &= \underbrace{j \cdot (j+1)}_{\frac{3}{4}} \cdot \hbar^2 \cdot \delta_{mm'} \\ \Rightarrow J^2 &= \frac{3}{4} \hbar^2 \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Damit folgt:

$$\begin{aligned}J_x &= \frac{1}{2} \cdot (J_+ + J_-) = \frac{\hbar}{2} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ J_y &= \frac{1}{2i} \cdot (J_+ - J_-) = \frac{\hbar}{2} \cdot \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

(Test: Es gilt  $[J_x, J_y] = i\hbar J_z$ .) Pauli-Matrizen  $\vec{\sigma}$  für  $j = \frac{1}{2}$  (Spin  $\frac{1}{2}$ -Teilchen) aus  $\vec{J} = \frac{\hbar}{2} \cdot \vec{\sigma}$ :

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

(c) Blöcke mit  $j = 1 \Rightarrow m \in \{-1, 0, 1\} \Rightarrow 3 \times 3$ -Matrix

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

$$J_+ = \hbar \cdot \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

- Messung von  $J_x$  und  $J_y$ : Da  $[J_x, J_y] \neq 0$  ist  $|k, j, m\rangle$  kein Eigenvektor von  $J_x$ , d.h. Messergebnisse können nur mit Wahrscheinlichkeit vorhergesagt werden. Mögliche Messergebnisse sind unverändert  $m\hbar$  mit  $m \in \{-j, \dots, j\}$ .
- Erwartungswert:

$$\langle k, j, m | J_x | k, j, m \rangle = \langle k, j, m | \frac{1}{2} \cdot (J_+ + J_-) | k, j, m \rangle = 0$$

$$\langle k, j, m | J_x^2 | k, j, m \rangle = \langle k, j, m | \frac{1}{4} \cdot (J_+^2 + J_-^2 + \underbrace{J_+ J_- + J_- J_+}_{2(J^2 - J_z^2)}) | k, j, m \rangle$$

$$= \frac{1}{2} \hbar^2 \cdot (j \cdot (j+1) - m^2)$$

$$\langle J_x \rangle = \langle J_y \rangle = 0$$

$$\Delta J_x = \Delta J_y = \hbar \cdot \sqrt{\frac{1}{2} \cdot (j \cdot (j+1) - m^2)}$$

### 5.1.2 Bahndrehimpuls

- Spezielle Realisierung des quanten-mechanischen Drehimpuls für Bahnbewegung eines Teilchens. Drehimpulsoperator:

$$\vec{L} := \vec{R} \times \vec{P} \Rightarrow [L_x, L_y] = i\hbar \cdot L_z$$

also quantenmechanischer Drehimpuls.

- Ziele:
  - (i). Ortsdarstellung ( $\Rightarrow \ell \in \mathbb{N}_0$ )
  - (ii). Eigenfunktionen von  $\vec{L}^2, L_z$  in Ortsdarstellung (Kugelkoordinaten)
- Ortsdarstellung in Kugelkoordinaten: Zur Erinnerung:

$$\langle \vec{r} | \vec{R} | \varphi \rangle = \vec{r} \cdot \underbrace{\langle \vec{r} | \varphi \rangle}_{\varphi(\vec{r})}$$

$$\langle \vec{r} | \vec{P} | \varphi \rangle = \frac{\hbar}{i} \nabla \varphi(\vec{r})$$

$$\Rightarrow \langle \vec{r} | L_x | \varphi \rangle = \langle \vec{r} | Y P_z - P_y Z | \varphi \rangle = \frac{\hbar}{i} \cdot \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \varphi(x, y, z)$$

Kugelkoordinaten ( $r \geq 0, 0 \leq \vartheta \leq \pi, 0 \leq \varphi \leq 2\pi$ ):

$$x = r \cdot \sin \vartheta \cdot \cos \varphi$$

$$y = r \cdot \sin \vartheta \cdot \sin \varphi$$

$$z = r \cdot \cos \vartheta$$

Dann:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \vartheta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$\Rightarrow L_x = i \hbar \cdot \left( \sin \varphi \cdot \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \cot \vartheta \cdot \cos \varphi \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

$$L_y = i \hbar \cdot \left( -\cos \varphi \cdot \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \cot \vartheta \cdot \sin \varphi \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

Übung 11.1(b):

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

$$L_+ = e^{i\varphi} \cdot \hbar \cdot \left( \frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \cot \vartheta \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

$$L_- = e^{-i\varphi} \cdot \hbar \cdot \left( -\frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \cot \vartheta \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

Damit Eigenwertgleichung:

$$-\hbar^2 \cdot \left( \frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \cot \vartheta \cdot \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \psi(r, \vartheta, \varphi) = \ell \cdot (\ell + 1) \cdot \hbar^2 \cdot \psi(r, \vartheta, \varphi)$$

$$\frac{\hbar}{i} \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi(r, \vartheta, \varphi) = m \hbar \cdot \psi(r, \vartheta, \varphi)$$

• Bemerkungen:

- Partielle Differentialgleichung
- $r$  nur als Parameter, also Ansatz  $\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) \cdot Y_\ell^m(\vartheta, \varphi)$ .

$$L^2 Y_\ell^m(\vartheta, \varphi) = \ell \cdot (\ell + 1) \cdot \hbar^2 \cdot Y_\ell^m(\vartheta, \varphi)$$

$$L_z Y_\ell^m(\vartheta, \varphi) = m \hbar \cdot Y_\ell^m(\vartheta, \varphi)$$

- Normierung:

$$1 = \int_{r=0}^{\infty} \int_{\vartheta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} r^2 \cdot \sin \vartheta \cdot |\psi(r, \vartheta, \varphi)|^2 d\varphi d\vartheta dr$$

$$= \underbrace{\left( \int_0^{\infty} r^2 \cdot |R(r)|^2 dr \right)}_{\stackrel{!}{=} 1} \cdot \underbrace{\int_{\vartheta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} \sin \vartheta \cdot |Y_\ell^m(\vartheta, \varphi)|^2 d\varphi d\vartheta}_{\stackrel{!}{=} 1}$$

Folgerungen:

- (i). Behauptung:  $\ell, m$  sind ganzzahlig.

Beweis:

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} Y_\ell^m(\vartheta, \varphi) = m \hbar \cdot Y_\ell^m(\vartheta, \varphi)$$

Integration liefert  $Y_\ell^m(\vartheta, \varphi) = e^{i m \cdot \varphi} \cdot F_\ell^m(\vartheta)$ . Stetigkeit bei  $\varphi = 2\pi$  liefert

$$e^{i m \cdot 2\pi} \stackrel{!}{=} e^{i m \cdot 0} = 1 \Rightarrow m \in \mathbb{Z} \Rightarrow \ell \in \mathbb{N}_0$$

(ii). Bestimmung von  $Y_\ell^m(\vartheta, \varphi)$  für  $m = \ell$ : Nutzung von  $L_+$  ergibt

$$L_+ |\ell, m = \ell\rangle = |0_{L^2}\rangle$$

$$\Rightarrow \langle \vec{r} | : \quad \hbar e^{i\varphi} \cdot \left( \frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) F_\ell^\ell(\vartheta) \cdot e^{i\ell\varphi} \stackrel{!}{=} 0$$

$$\Rightarrow \left( \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \ell \cdot \cot \vartheta \right) F_\ell^\ell(\vartheta) \stackrel{!}{=} 0$$

Gewöhnliche Differentialgleichung 1. Ordnung, daher eindeutige Lösung  $F_\ell^\ell(\vartheta) \propto (\sin \vartheta)^\ell$ .  
Normierung:

$$Y_\ell^\ell(\vartheta, \varphi) = \frac{(-1)^\ell}{2^\ell \cdot \ell!} \cdot \sqrt{\frac{(2\ell+1)!}{4\pi}} \cdot (\sin \vartheta)^\ell \cdot e^{i\ell\varphi}$$

(iii). Bestimmung von  $Y_\ell^m(\vartheta, \varphi)$ : Wiederholte Anwendung von  $L_-$  auf  $Y_\ell^\ell(\vartheta, \varphi)$ ,

$$L_- Y_\ell^m(\vartheta, \varphi) = Y_\ell^{m-1}(\vartheta, \varphi) \cdot \hbar \cdot \sqrt{\ell \cdot (\ell+1) - m \cdot (m-1)}$$

Bemerkungen:

- $Y_\ell^{m-1}$  automatisch normiert
- Phasenwahl fixiert

Man erhält:

$$Y_\ell^m(\vartheta, \varphi) = \frac{(-1)^\ell}{2^\ell \cdot \ell!} \cdot \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \cdot \frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!}} \cdot e^{im\varphi} \cdot (\sin \vartheta)^{-m} \cdot \frac{d^{\ell-m}}{d(\cos \vartheta)^{\ell-m}} (\sin \vartheta)^{2\ell}$$

Bemerkungen:

- $|Y_\ell^m(\vartheta, \varphi)|^2 d\Omega$  ist Wahrscheinlichkeit für Teilchen in  $d\Omega$ .
- Spezialfälle:
  - (a)  $\ell = 0, m = 0$ :

$$Y_0^0(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

(b)  $\ell = 1, m = 0$ :

$$Y_1^0(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cdot \cos \vartheta$$

(c)  $\ell = 1, m = \pm 1$ :

$$Y_1^{\pm 1}(\vartheta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \cdot \sin \vartheta \cdot e^{\pm i\varphi}$$

reelle Form:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (Y_\ell^{-1} - Y_\ell^1) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cdot \sin \vartheta \cdot \cos \varphi$$

( $P_x$ -Orbital, mit  $r$ -Abbildung),

$$\frac{1}{\sqrt{2i}} \cdot (-Y_\ell^1 - Y_\ell^{-1}) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cdot \sin \vartheta \cdot \sin \varphi$$

( $P_y$ -Orbital)

(d) Legendre-Polynome (bei  $m = 0$ ):

$$Y_\ell^0(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} \cdot \frac{(-1)^\ell}{2^\ell \cdot \ell!} \cdot \underbrace{\frac{d^\ell}{d(\cos \vartheta)^\ell} (\sin \vartheta)^{2\ell}}_{P_\ell(\cos \vartheta)}$$

mit

$$P_\ell(\vartheta) = \frac{(-1)^\ell}{2^\ell \cdot \ell!} \cdot \frac{d^\ell}{du^\ell} (1-u^2)^\ell$$

orthonormales Funktionensystem auf  $[-1, 1]$ .

## 5.2 Wasserstoffatom

### 5.2.1 Zweikörperproblem

$$H = \frac{\vec{P}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{P}_2^2}{2m_2} + V(\vec{R}_1 - \vec{R}_2) = \dots = \underbrace{\frac{\vec{P}_s^2}{2M}}_{=:H_s} + \underbrace{\frac{\vec{P}_r^2}{2\mu}}_{=:H_r} + V(\vec{R}_r)$$

Zerlegung in Schwerpunkt- und Relativbewegung analog zur klassischen Mechanik:

$$\begin{aligned} M &:= m_1 + m_2 && \text{Gesamtmasse} \\ \mu &:= \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2} && \text{reduzierte Masse} \\ \vec{R}_s &:= \frac{m_1 \cdot \vec{R}_1 + m_2 \cdot \vec{R}_2}{m_1 + m_2} && \text{Schwerpunktoperator} \\ \vec{P}_s &:= \vec{P}_1 + \vec{P}_2 \\ \vec{R}_r &:= \vec{R}_1 - \vec{R}_2 && \text{Relativoperator} \\ \vec{P}_r &:= \frac{m_2 \cdot \vec{P}_1 - m_1 \cdot \vec{P}_2}{m_1 + m_2} \end{aligned}$$

Es gilt zum Beispiel  $[X_s, P_{x,s}] = i\hbar$ ,  $[X_s, P_{x,r}] = 0$ ,  $[X_r, P_{x,r}] = i\hbar$ . Insbesondere  $[H_s, H_r] = 0$ , d.h. es existiert eine gemeinsame Basis aus Eigenvektoren:

$$H_s |\psi\rangle = E_s \cdot |\psi\rangle \quad H_r |\psi\rangle = E_r \cdot |\psi\rangle \Rightarrow H |\psi\rangle = (E_s + E_r) \cdot |\psi\rangle$$

Aufteilung des Zustandsraums  $\varepsilon = \varepsilon_s \otimes \varepsilon_r$  und der Zustände  $|\psi\rangle = |\psi_s\rangle \otimes |\psi_r\rangle$ :

- $\varepsilon_s$ :

$$E_s = \frac{p_s^2}{2M} \quad \langle \vec{r}_s | \psi \rangle = e^{i \vec{p}_s \cdot \vec{r}_s}$$

(ebene Welle)

- $\varepsilon_r$ :  $H_r |\psi_r\rangle = E_r \cdot |\psi_r\rangle$

### 5.2.2 Allgemeines Zentralpotential

- Betrachte Relativbewegung des Zweikörperproblems ( $H_r \rightarrow H$ ):

$$H\psi(\vec{r}) = E \cdot \psi(\vec{r}) \quad H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r)$$

zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung in Ortskoordinaten.

- Aus  $V(\vec{r}) = V(r)$  mit  $r = |\vec{r}|$  folgt

$$\vec{F} = -\nabla V(\vec{r}) = -\frac{\partial V}{\partial r} \cdot \frac{\vec{r}}{r}$$

also Kraft zum Zentrum (Zentralpotential)

- Laplace-Operator:

$$\begin{aligned} \Delta &= \nabla \nabla = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \stackrel{11.1}{=} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{1}{\hbar^2 r^2} L^2 \\ \Rightarrow \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{L^2}{2\mu r^2} + V(r) \right) \psi(r, \vartheta, \varphi) &= E \cdot \psi(r, \vartheta, \varphi) \end{aligned}$$

- Bemerkung: klassisch:

$$\mathcal{H} = \frac{p_r^2}{2\mu} + \frac{\mathcal{L}^2}{2\mu r^2} + V(r) \qquad P_r = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r$$

- Es gilt  $[H, \vec{L}] = 0$ , denn  $L_x, L_y, L_z$  wirken nur auf  $\vartheta, \varphi$  und es gilt  $[L^2, \vec{L}] = 0$ . Es folgt  $\frac{d}{dt} \langle \vec{L} \rangle = 0$ , d.h. Drehimpuls ist Erhaltungsgröße für Teilchen im Zentralpotential.
- Analog folgt  $[H, L^2] = 0$ . Damit:  $H, L^2, L_z$  besitzen gemeinsames System aus Eigenfunktionen.

$$H\psi(\vec{r}) = E \cdot \psi(\vec{r}) \quad L^2\psi(\vec{r}) = \ell \cdot (\ell + 1) \cdot \hbar^2 \psi(\vec{r}) \quad L_z\psi(\vec{r}) = m \hbar \cdot \psi(\vec{r})$$

Separationsansatz:

$$\psi(\vec{r}) = R(r) \cdot Y_\ell^m(\vartheta, \varphi)$$

mit  $Y_\ell^m$  aus 5.1 erfüllt 2. und 3. Gleichung. Bleibt 1. Gleichung:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\ell \cdot (\ell + 1) \cdot \hbar^2}{2\mu r^2} + V(r) \right) \cdot R(r) = E \cdot R(r)$$

- Bemerkungen:

- Reduktion auf 1D-Differentialgleichung
- Für jedes  $\ell \in \mathbb{N}_0$  muss neue Differentialgleichung gelöst werden.
- Wert von  $m \in \{-\ell, \dots, \ell\}$  für  $R(r)$  und  $E$  unwichtig, d.h. Energie  $E$  min.  $(2\ell + 1)$ -fach entartet.
- $R(r) \rightarrow R_{k,\ell}(r)$  mit  $k$  als Index für verschiedene Eigenfunktionen von  $H$ .

- Vereinfachung des Operators durch Ersetzung  $R_{k,\ell}(r) = \frac{1}{r} U_{k,\ell}(r)$  (und Multiplikation mit  $r$  der Gleichung):

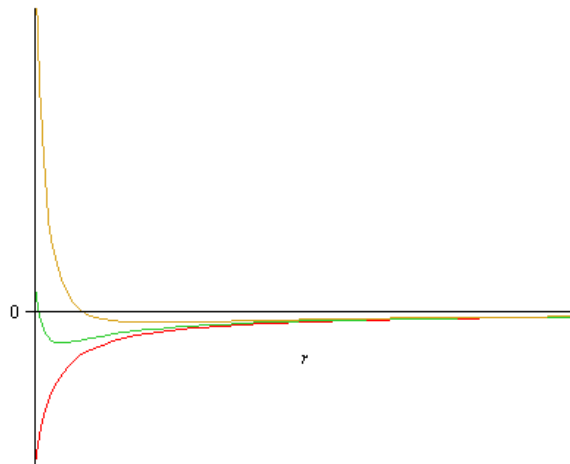
$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\ell \cdot (\ell + 1) \cdot \hbar^2}{2\mu r^2} + V(r) \right) U_{k,\ell}(r) = E_{k,\ell} U_{k,\ell}(r)$$

Entspricht Teilchen mit Masse  $\mu$  im effektiven 1D-Potential

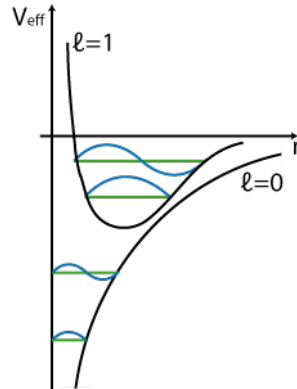
$$V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\ell \cdot (\ell + 1) \cdot \hbar^2}{2\mu}$$

z.B. für Coulomb-Potential:

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot r}$$



gebundene Zustände für  $E < 0 \rightarrow$  diskretes Spektrum, ungebundene Zustände für  $E > 0 \rightarrow$  kontinuierliches Spektrum



- Verhalten bei  $r = 0$ : Laplace-Operator in Kugelkoordinaten nicht definiert für  $r = 0$ . Kartesische Koordinaten bei  $r = 0$  bringen Ergebnis:  $U_{k,\ell}(0) = 0$  (auch Widerspruchsbeweis möglich).
- Folgerung aus Randbedingung: Für jede Energie  $E$  (bei gegebenem  $\ell$ ) hat die Differentialgleichung maximal eine Lösung. Also bilden  $H, L^2, L_z$  einen vollständigen Satz kommutierender Observablen.

### 5.2.3 Coulomb-Potential

$$V(r) = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot r} \quad \mu = \frac{m_e \cdot m_p}{m_e + m_p} \approx m_e \cdot \left(1 - \frac{m_e}{m_p}\right) \approx m_e$$

Bohrsches Atommodell:

- Kreisbahnen mit Energien

$$E = \frac{1}{2} \mu \cdot v^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot r}$$

- Zentrifugalkraft = Coulombkraft:

$$\frac{\mu \cdot v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot r}$$

- Bohr-Sommerfeld-Quantisierung: Wirkung  $\oint p dq$ ,

$$\oint p dq = \underbrace{p}_{\mu \cdot v_n} \cdot \underbrace{\oint dq}_{2\pi \cdot r_n} \stackrel{!}{=} n \cdot h \quad (n \in \mathbb{N})$$

$$\Rightarrow v_n = \frac{v_1}{n} \quad v_1 := \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot \hbar} =: \alpha \cdot c \quad \alpha := \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar \cdot c} \approx \frac{1}{137}$$

$$r_n = n^2 \cdot a_B \quad a_B := \frac{4\pi\epsilon_0 \cdot \hbar^2}{\mu \cdot e^2} \approx 0,52 \text{ \AA} \text{ bohrscher Atomradius}$$

also relativistische Effekte (vorerst) vernachlässigbar. Es gilt  $E_n = -\frac{E_I}{n^2}$  mit  $E_I = \frac{\mu e^4}{2(4\pi\epsilon_0 \hbar)^2} \approx 13,6 \text{ eV}$  (Ionisationsenergie, 1 Rydberg), daher

$$\frac{\alpha^2}{2} \mu c^2 \ll m_e \cdot c^2 \approx 511 \text{ keV}$$

- Bemerkung: Vorhersagen nur teilweise richtig.  $E_n$  ist okay, aber nicht Kreisbahn.

Quantentheorie:

- Aus 5.2.2:

$$\psi_{k,\ell,m}(\vec{r}) = \underbrace{\frac{1}{r} \cdot u_{k,\ell}(r)}_{R_{k,\ell}(r)} \cdot Y_\ell^m(\vartheta, \varphi)$$

$$\Rightarrow \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell \cdot (\ell + 1) \cdot \hbar^2}{2\mu \cdot r^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot r} \right) \cdot u_{k,\ell}(r) = E_{k,\ell} \cdot u_{k,\ell}(r)$$

und es gilt  $u_{k,\ell}(r=0) = 0$ . Führe einheitenlose Variablen ein:

$$\varrho := \frac{r}{a_B} \qquad \lambda_{k,\ell}^2 = -\frac{E_{k,\ell}}{E_I}$$

( $E_{k,\ell} < 0$  für gebundene Zustände.) Damit:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\mu a_B^2} \frac{d^2}{d\varrho^2} + \frac{\hbar^2}{2\mu a_B} \cdot \frac{\ell \cdot (\ell + 1)}{\varrho^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_B} \cdot \frac{1}{\varrho} + E_I \lambda_{k,\ell}^2 \right) u_{k,\ell}(a_B \cdot \varrho) = 0$$

$$\Rightarrow \left( \frac{d^2}{d\varrho^2} - \frac{\ell \cdot (\ell + 1)}{\varrho^2} + \frac{2}{\varrho} - \lambda_{k,\ell}^2 \right) \tilde{u}_{k,\ell}(\varrho) = 0 \quad (*)$$

mit  $\tilde{u}_{k,\ell}(\varrho) := u_{k,\ell}(a_B \cdot \varrho)$ .

- Verhalten für  $\varrho \rightarrow 0$ :

$$\tilde{u}_{k,\ell}(\varrho) \propto \varrho^{\ell+1}$$

Herleitung: Wähle Ansatz  $\tilde{u}_{k,\ell}(\varrho) \propto \varrho^{s+1}$  (mit  $s > -1$  wegen  $\tilde{u}_{k,\ell}(0) = 0$ ). Bestimmung von  $s$ : Einsetzen in (\*):

$$(s+1) \cdot s \cdot \varrho^{s-1} - \ell \cdot (\ell + 1) \cdot \varrho^{s-1} + 2 \cdot \varrho^s - \lambda_{k,\ell}^2 \cdot \varrho^{s+1} = 0$$

Dominante Terme für  $\varrho \rightarrow 0$ :  $\varrho^{s-1}$ . Also Forderung

$$s \cdot (s+1) - \ell \cdot (\ell + 1) = 0$$

Erfüllt für  $s = \ell$  oder  $s = -(\ell + 1)$ . Wegen  $\ell \geq 0$  und  $s > -1$  folgt  $s = \ell$ .

Folgerung:  $R_{k,\ell} \propto r^\ell$ . Höhere Drehimpulsquantenzahl  $\ell$  bedeutet größeren Abstand vom Zentrum.

- Verhalten für  $\varrho \rightarrow \infty$ :

$$\left( \frac{d^2}{d\varrho^2} - \lambda_{k,\ell}^2 \right) \tilde{u}_{k,\ell}(\varrho) = 0$$

$$\Rightarrow \tilde{u}_{k,\ell}(\varrho) = e^{\pm \lambda_{k,\ell} \cdot \varrho}$$

nur „-“ physikalisch sinnvoll.

- Allgemein: Ansatz

$$u_{k,\ell}(\varrho) = \varrho^{\ell+1} \cdot e^{-\lambda_{k,\ell} \cdot \varrho} \cdot y_{k,\ell}(\varrho)$$

(keine Einschränkung) Dann gilt:

$$\frac{d}{d\varrho} u_{k,\ell}(\varrho) = e^{-\lambda_{k,\ell} \cdot \varrho} \cdot \left( (\ell + 1) \cdot \varrho^\ell \cdot y_{k,\ell}(\varrho) - \lambda_{k,\ell} \cdot \varrho^{\ell+1} \cdot y_{k,\ell}(\varrho) + \varrho^{\ell+1} \cdot \frac{d}{d\varrho} y_{k,\ell}(\varrho) \right)$$

$$\frac{d^2}{d\varrho^2} u_{k,\ell}(\varrho) = e^{-\lambda_{k,\ell} \cdot \varrho} \cdot \left( (\ell + 1) \cdot \ell \cdot \varrho^{\ell-1} \cdot y_{k,\ell}(\varrho) + 2(\ell + 1) \cdot \varrho^\ell \cdot \frac{d}{d\varrho} y_{k,\ell}(\varrho) \right.$$

$$\left. + \varrho^{\ell+1} \cdot \frac{d^2}{d\varrho^2} y_{k,\ell}(\varrho) - 2\lambda_{k,\ell}(\ell + 1) \cdot \varrho^\ell \cdot y_{k,\ell}(\varrho) - 2\lambda_{k,\ell} \cdot \varrho^{\ell+1} \cdot \frac{d}{d\varrho} y_{k,\ell}(\varrho) \right.$$

$$\left. + \lambda_{k,\ell}^2 \cdot \varrho^{\ell+1} \cdot y_{k,\ell}(\varrho) \right)$$



Einsetzen in (\*), Division durch  $\varrho^\ell e^{-\lambda_{k,\ell} \cdot \varrho}$ :

$$\left( \varrho \cdot \frac{d^2}{d\varrho^2} + (2(\ell+1) - 2\lambda_{k,\ell} \cdot \varrho) \frac{d}{d\varrho} + 2 - 2(\ell+1) \cdot \lambda_{k,\ell} \right) y_{k,\ell}(\varrho) = 0$$

Polynomialansatz:

$$y_{k,\ell}(\varrho) = \sum_{q=0}^{\infty} c_q \cdot \varrho^q$$

$$\Rightarrow \sum_{q=0}^{\infty} c_q \cdot (q(q-1) \cdot \varrho^{q-1} + 2(\ell+1)q \cdot \varrho^{q-1} - 2\lambda_{k,\ell}q \cdot \varrho^q + 2\varrho^q - 2(\ell+1)\lambda_{k,\ell} \cdot \varrho^q) = 0$$

Koeffizienten zur gleichen Potenz  $\varrho^{q-1}$  müssen verschwinden:

$$c_q \cdot (q(q-1) + 2(\ell+1)q) \stackrel{!}{=} 2c_{q-1}(-1 + \lambda_{k,\ell} \cdot ((\ell+1) + (q-1)))$$

$$\Rightarrow c_q = 2c_{q-1} \cdot \frac{\lambda_{k,\ell} \cdot (\ell+q) - 1}{q \cdot (2\ell+q+1)}$$

mit  $c_0 \neq 0$  beliebig (wird durch Normierung festgelegt). Konvergenz der Reihe (Quotientenkriterium): (falls alle  $c_q \neq 0$ )

$$\frac{c_q}{c_{q-1}} = \frac{2\lambda_{k,\ell}}{q} \rightarrow 0 \quad (q \rightarrow \infty)$$

Dieses Konvergenzverhalten (?) entspricht der Funktion

$$e^{2\lambda_{k,\ell} \cdot \varrho} = \sum_{q=0}^{\infty} d_q \cdot \varrho^q \quad d_q := \frac{(2\lambda_{k,\ell})^q}{q!}$$

also  $\frac{d_q}{d_{q-1}} = \frac{2\lambda_{k,\ell}}{q}$ . Damit

$$u_{k,\ell}(\varrho) = \varrho^{\ell+1} \cdot e^{-\lambda_{k,\ell} \cdot \varrho} \cdot e^{2\lambda_{k,\ell} \cdot \varrho} = \varrho^{\ell+1} \cdot e^{\lambda_{k,\ell} \cdot \varrho}$$

Keine physikalische Lösung (s. Verhalten für  $\varrho \rightarrow \infty$ ). Also: Rekursion muss abbrechen, d.h.  $c_k = 0$  für beliebiges  $k \geq 1$ .

$$c_k = 0 \Leftrightarrow \lambda_{k,\ell} \cdot (\ell+k) - 1 = 0 \Leftrightarrow \lambda_{k,\ell} = \frac{1}{\ell+k}$$

Offenbar folgt dann  $c_{q \geq k} = 0$ , d.h.

$$y_{k,\ell}(\varrho) = \sum_{q=0}^{k-1} c_q \cdot \varrho^q$$

Damit

$$u_{k,\ell}(\varrho) = \varrho^{\ell+1} \cdot e^{-E_{k,\ell} \cdot \varrho} \cdot \sum_{q=0}^{k-1} c_q \cdot \varrho^q$$

$$R_{k,\ell}(r) = \frac{1}{r} \cdot u_{k,\ell} \left( \frac{r}{a_B} \right)$$

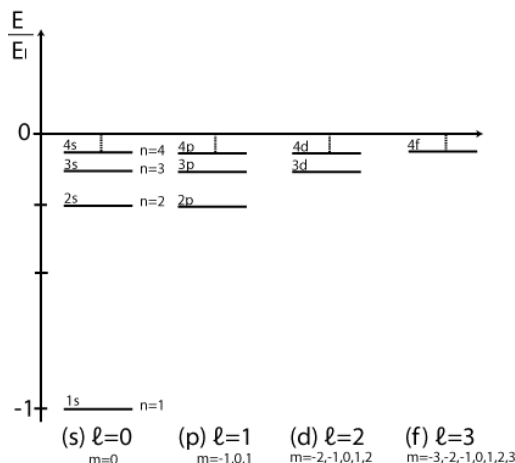
- Energiespektrum:

$$E_{k,\ell} = -\lambda_{k,\ell}^2 \cdot E_I = -\frac{1}{(k+\ell)^2} \cdot E_I$$

mit  $\ell \in \mathbb{N}_0$ ,  $k \in \mathbb{N}$ .  $n := k + \ell$  heißt Hauptquantenzahl, damit

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \cdot E_I \quad (n \in \mathbb{N})$$

Termschema:



Entartung:  $n \Rightarrow \ell = 0, 1, \dots, n - 1$  (zufällige Entartung auf Grund des Coulomb-Potentials),  $m = -\ell, \dots, \ell$  (essentielle Entartung). Entartungsgrad:

$$g_k = \sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = n^2$$

- Eigenfunktionen:

$$\psi_{n,\ell,m}(r, \vartheta, \varphi) = R_{n,\ell}(r) \cdot Y_{\ell}^m(\vartheta, \varphi)$$

- (i). 1s:  $n = 1, \ell = 0$

$$\psi_{n=1,\ell=0,m=0} \propto e^{-\frac{r}{a_B}}$$

- (ii). 2s:  $n = 2, \ell = 0$

$$\psi_{n=2,\ell=0,m=0} \propto \left(1 - \frac{r}{2a_B}\right) \cdot e^{-\frac{r}{2a_B}}$$

- (iii). 2p:  $n = 2, \ell = 1, m \in \{-1, 0, 1\}$

$$\psi_{n=2,\ell=1,m=1} \propto \frac{r}{a_B} \cdot e^{-\frac{r}{a_B}} \cdot \sin \vartheta \cdot e^{i\varphi}$$

$$\psi_{n=2,\ell=1,m=0} \propto \frac{r}{a_B} \cdot e^{-\frac{r}{a_B}} \cdot \cos \vartheta$$

$$\psi_{n=2,\ell=1,m=-1} \propto \frac{r}{a_B} \cdot e^{-\frac{r}{a_B}} \cdot \sin \vartheta \cdot e^{-i\varphi}$$

- Bemerkungen:

- Woher kommt  $E_I$ ? Unschärferelation
- Klassisch: Kreisbahn bei maximalem Drehimpuls, d.h.  $\ell = n - 1$ . Die Funktion  $R_{n,n-1}(r)$  hat Maximum bei  $r_n = n^2 \cdot a_B$  (Bohrsches Modell)
- Wellenpaket aus mehreren Eigenfunktionen mit  $n = n_0 \gg 1$  und  $\ell = n - 1, m = \ell$  folgt Kepler-Orbit mit richtiger Frequenz. Wellenpaket zerfließt aber nach wenigen Umläufen.
- Entartung  $\Rightarrow$  Linearkombination von Eigenfunktionen ist auch Eigenfunktion  $\Rightarrow P_x, P_y, P_z$ -Orbitale,  $sp^2$ -Hybridisierung

## 5.3 Spin

### 5.3.1 Elektron im Magnetfeld

- (i). klassisch:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \cdot (\vec{p} - e \cdot \vec{A}(\vec{r}, t))^2 + e \cdot \Phi(\vec{r}, t)$$

mit  $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ ,  $\vec{A}$  Vektorpotential

(ii). quanten-mechanisch (Ortsdarstellung):

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{1}{2m} \cdot \left( \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - e \cdot \vec{A}(\vec{r}, t) \right)^2 + e \cdot \Phi(\vec{r}, t) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + i \cdot \frac{e \cdot \hbar}{2m} (\vec{\nabla} \vec{A} + \vec{A} \vec{\nabla}) + \underbrace{\frac{e^2}{2m} \vec{A}^2}_{=: \hat{H}_{\text{diamagn}}} + e \cdot \Phi\end{aligned}$$

Wegen  $\vec{\nabla} \vec{A} = 0$  (Coulomb-Eichung) gilt

$$\vec{\nabla}(\vec{A}\psi) = \vec{\nabla}\vec{A}\psi + \vec{A}\vec{\nabla}\psi = \vec{A}\vec{\nabla}\psi$$

Für konstantes Magnetfeld (in Coulomb-Eichung):  $\vec{A} = -\frac{1}{2}(\vec{r} \times \vec{B})$ . Dann folgt:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \hat{H}_{\text{Bahn}} + \hat{H}_{\text{diamagn}} + e \cdot \Phi$$

mit

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\text{Bahn}} &= i \frac{e \cdot \hbar}{2m} \vec{A} \vec{\nabla} = -i \frac{e \cdot \hbar}{2m} (\vec{r} \times \vec{B}) \vec{\nabla} \\ &= i \frac{e \cdot \hbar}{2m} (\vec{r} \times \vec{\nabla}) \vec{B} = -\frac{e}{2m} \vec{L} \cdot \vec{B} \\ &= -\underbrace{\frac{e \cdot \hbar}{2m}}_{\mu_B} \frac{\vec{L}}{\hbar} \cdot \vec{B} = -\underbrace{\mu_B \cdot \frac{\vec{L}}{\hbar}}_{=: \vec{\mu}} \cdot \vec{B} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}\end{aligned}$$

$\mu_B$  heißt Bohrsches Magneton,  $\vec{L}$  Bahndrehimpuls. Experimente:

- Zeeman-Effekt: Atom in konstantem Magnetfeld  $\Rightarrow$  Aufspaltung der Energie in  $2\ell + 1$  Drehimpulszustände um  $\mu_B \cdot B \cdot m$  mit  $m = -\ell, \dots, \ell$ . Aber: Auch Aufspaltung in gerade Anzahl! Ist  $\ell$  halbzahlig? Widerspruch!
- Stern-Gerlach-Versuch (1922):

$$\vec{F} = -\vec{\nabla} H_{\text{Bahn}} = \vec{\nabla}(\vec{\mu} \cdot \vec{B}) = \mu_z \cdot \frac{\partial B_z}{\partial z} \cdot \vec{e}_z$$

Ablenkung  $\hat{=}$  Messung von  $L_z$ , d.h.  $m\hbar$  mit  $m = -\ell, \dots, \ell$ . Aber: Silber-Atom ( $\ell = 0$ ) werden zweifach aufgespalten. Wieso? „Erklärung“: Elementarteilchen haben intrinsische Eigenschaft, genannt Spin. Magnetisches Moment:

$$\vec{\mu}_S = -g \cdot \mu_B \cdot \frac{\vec{S}}{\hbar} \qquad \vec{\mu}_L = -\mu_B \cdot \frac{\vec{L}}{\hbar}$$

Postulate für Spinoperator  $\vec{S}$ :

(1)  $\vec{S}$  ist ein Drehimpuls

$$[S_x, S_y] = i \hbar S_z \qquad [S_y, S_z] = i \hbar S_x \qquad [S_z, S_x] = i \hbar S_y$$

mit

$$\begin{aligned}\vec{S}^2 |s, m\rangle &= s \cdot (s + 1) \hbar^2 \cdot |s, m\rangle \\ S_z |s, m\rangle &= m \hbar \cdot |s, m\rangle\end{aligned}$$

- (2) Jedes Element hat genau einen Wert von  $S$  (bisher  $0, \dots, \frac{11}{2}$  bekannt).  $s = \frac{1}{2}$ : Elektron, Proton, Neutron
- (3) Spin-Zustandsraum  $\varepsilon_s$  hat Dimension  $2s + 1$ . Zustandsraum  $\varepsilon = \varepsilon_r \otimes \varepsilon_s$ . Vollständiger Satz kommutierender Observablen, z.B.  $X, Y, Z, S_z$ .

Bemerkungen:

- Spin-Statistik-Theorem (QFT):

halbzahliger Spin  $\leftrightarrow$  Fermionen (antisymmetrisch)

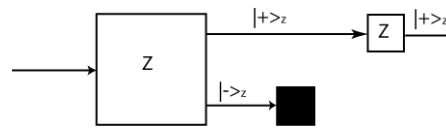
ganzzahliger Spin  $\leftrightarrow$  Bosonen (symmetrisch)

- $g$  ist gyromagnetischer Faktor. Elektron:

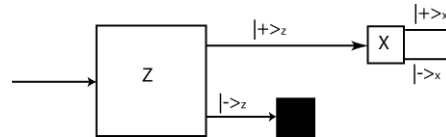
$$g = 2 \cdot \left( 1 + \frac{\alpha}{2\pi} + \dots \right)$$

- Es gibt kein klassisches Analogon.
- Quantenmechanik-Postulate können allein aus der Analyse von SG-Experimenten motiviert werden.

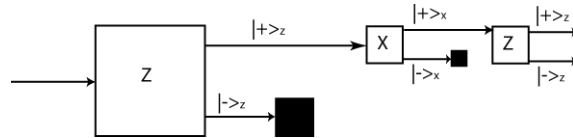
(1) Wiederholung der Messung bringt gleiches Ergebnis



(2) Messergebnisse sind Eigenwerte von  $S_x$ . Wahrscheinlichkeit aus  $|\langle \pm | + \rangle_z|^2$



(3)  $S_x$ -Messung ändert Zustand. Messungen nicht vertauschbar,  $[S_x, S_z] \neq 0$ .



### 5.3.2 Spin $\frac{1}{2}$

$$s = \frac{1}{2} \Rightarrow m = \pm \frac{1}{2}$$

d.h. es liegt ein 2-dimensionaler Zustandsraum vor. Definiere

$$|+\rangle := \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \qquad |-\rangle := \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$$

dann gilt

$$S^2 |\pm\rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 \cdot |\pm\rangle \qquad S_z |\pm\rangle = \pm \frac{1}{2} \hbar |\pm\rangle$$

- Orthonormierung:

$$\langle + | - \rangle = \langle - | + \rangle = 0 \qquad \langle + | + \rangle = \langle - | - \rangle = 1$$

- Vollständigkeit:

$$|+\rangle \langle +| + |-\rangle \langle -| = \mathbb{1}$$

- beliebiger Zustand:

$$|\chi\rangle = c_+ \cdot |+\rangle + c_- \cdot |-\rangle$$

mit  $|c_+|^2 + |c_-|^2 = 1$  (Normierungsbedingung) oder

$$|\chi\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \cdot e^{-i\frac{\varphi}{2}} |+\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \cdot e^{i\frac{\varphi}{2}} |-\rangle$$

- Spindarstellung:

$$|\chi\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} \langle +|\chi\rangle \\ \langle -|\chi\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix}$$

d.h. insbesondere

$$|+\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad |-\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

- Matrixdarstellung der Operatoren  $S_x, S_y, S_z, S^2, S_+, S_-$ :

$$S^2 \rightarrow \begin{pmatrix} \langle +|S^2|+\rangle & \langle +|S^2|-\rangle \\ \langle -|S^2|+\rangle & \langle -|S^2|-\rangle \end{pmatrix} = \frac{3}{4}\hbar^2 \cdot \mathbb{1}$$

$$S_z \rightarrow \frac{\hbar}{2} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\vec{S} \rightarrow \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$$

- Definition: Pauli-Matrizen  $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  mit

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

- Eigenschaften der Pauli-Matrizen:

(i).  $\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \mathbb{1}$

(ii).  $\sigma_x \cdot \sigma_y = i\sigma_z$  (und entsprechende zyklische Vertauschung). Es folgt  $\sigma_x \cdot \sigma_y + \sigma_y \cdot \sigma_x = 0$  und  $[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z$ .

(iii).  $\text{sp } \sigma_x = \text{sp } \sigma_y = \text{sp } \sigma_z = 0$

(iv).  $\det \sigma_x = \det \sigma_y = \det \sigma_z = -1$

(v). Jede  $2 \times 2$ -Matrix ist Linearkombination der 3 Pauli-Matrizen und der Einheitsmatrix  $\mathbb{1}$

(vi). Es gilt für  $a, b \in (C^2)^3$

$$(\vec{\sigma} \vec{a})(\vec{\sigma} \vec{b}) = \vec{a} \vec{b} + i \vec{\sigma} (\vec{a} \times \vec{b})$$

- Zustandsraum des Elektrons:

$$\zeta = \zeta_{\vec{r}} \otimes \zeta_S$$

Basiszustände:

$$|\vec{r}\rangle \otimes |+\rangle \qquad |\vec{r}\rangle \otimes |-\rangle$$

für  $\vec{r} \in \mathbb{R}^3$ ,  $|\pm\rangle$  Eigenzustände von  $S_z$ .  $|\psi\rangle \in \zeta$ :

– Produktzustand (z.B. Atom vor Stern-Gerlach-Versuch)

$$|\psi\rangle = |\varphi\rangle \otimes (c_+ |+\rangle + c_- |-\rangle)$$

– verschränkter Zustand (z.B. nach Stern-Gerlach-Versuch)

$$|\psi\rangle = c_+ |\varphi_{\text{oben}}\rangle \otimes |+\rangle + c_- |\varphi_{\text{unten}}\rangle \otimes |-\rangle$$

- Orts- und Spindarstellung:

$$\psi_+(\vec{r}) := (\langle \vec{r} | \otimes \langle + |) |\psi\rangle$$

$$\psi_-(\vec{r}) := (\langle \vec{r} | \otimes \langle - |) |\psi\rangle$$

Spinor:

$$\begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix}$$

- Normierung:

$$1 = \int |\psi_+(\vec{r})|^2 + |\psi_-(\vec{r})|^2 d^3r$$

Ortsdichte ohne Berücksichtigung von Spin:  $|\psi_+(\vec{r})|^2 + |\psi_-(\vec{r})|^2$

- Spinmessung ohne Berücksichtigung von Ort:  $\int |\psi_+(\vec{r})|^2 d^3r$  ist die Wahrscheinlichkeit für Messung von +.
- Gesamtes magnetisches Moment:

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}_L + \vec{\mu}_S = -\frac{\mu_B}{\hbar}(\vec{L} + 2\vec{S}) = -\mu_B \cdot \left(\frac{\vec{L}}{\hbar} + \vec{\sigma}\right)$$

- Elektron im konstanten Magnetfeld:

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \mu_B \cdot \left(\frac{\vec{L}}{\hbar} + \vec{\sigma}\right) \cdot \vec{B} + \hat{H}_{\text{diamagn}} + e \cdot \Phi \quad i\hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle$$

- Pauli-Gleichung (1927):

$$i\hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}, t) \\ \psi_-(\vec{r}, t) \end{pmatrix} = \left( \left( \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{\mu_B \cdot \vec{L} \cdot \vec{B}}{\hbar} + \hat{H}_{\text{diamagn}} + e \cdot \Phi \right) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \mu_B \cdot \vec{\sigma} \cdot \vec{B} \right) \cdot \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}, t) \\ \psi_-(\vec{r}, t) \end{pmatrix}$$

- Bemerkungen:

– Sei  $\vec{B} = B \cdot \vec{e}_z$ . Dann

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{B} = \sigma_z \cdot B_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot B_z$$

d.h. Entkopplung der Gleichungen.

- Grenzfall der Dirac-Gleichung
- Zu jedem Orbital zwei Zustände (positiver und negativer Spin)
- Spin-Bahn-Kopplung als weiterer relativistischer Effekt ( $\rightarrow$  Feinstruktur)
- Kernspintomographie

## 5.4 Addition von Drehimpulsen

- (i). klassisch: Gesamtdrehimpuls von  $N$  Teilchen:

$$\vec{L} = \sum_{i=1}^N \vec{L}_i \quad \vec{L}_i = \vec{r}_i \times \vec{p}_i$$

Erhaltungsgrößen? Hängt von  $\mathcal{H}$  ab.

- keine äußeren Kräfte:  $\vec{L}$  Erhaltungsgröße
- bei Wechselwirkung: innere Kräfte, also  $\vec{L}_i$  keine Erhaltungsgrößen.

- (ii). quantenmechanisch:

- Beispiel: Ein Teilchen im Zentralpotential mit Bahndrehimpuls  $\vec{L}$  und Spin  $\vec{S}$ . Spin-Bahn-Kopplung (relativistische Korrektur aus Dirac-Gleichung):

$$H = H_0 + H_{\text{SB}} \quad H_{\text{SB}} = \xi(r) \cdot \vec{L} \cdot \vec{S}$$

Erhaltungsgrößen?

$$\begin{aligned} [L_z, H] &= [L_z, H_{\text{SB}}] = \xi(r) \cdot [L_z, L_x S_x + L_y S_y + L_z S_z] \\ &= \xi(r) \cdot i\hbar \cdot (L_y S_x - L_x S_y) \neq 0 \\ [S_z, H] &= \dots = \xi(r) \cdot i\hbar \cdot (-L_y S_x + L_x S_y) \end{aligned}$$

d.h. weder  $\vec{L}$  noch  $\vec{S}$  sind Erhaltungsgrößen. Definiere Gesamtdrehimpuls  $\vec{J} := \vec{L} + \vec{S}$ , dann

$$[J_z, H] = [L_z + S_z, H] = 0$$

also  $\vec{J}$  Erhaltungsgröße. Man kann zeigen:  $[L^2, H] = [S^2, H] = 0$ .

- Allgemeine Fragestellung: Drehimpuls  $\vec{J}_1, \vec{J}_2$  gegeben mit  $[\vec{J}_1, \vec{J}_2] = 0$ , dann bilden  $J_1^2, J_2^2, J_{1z}, J_{2z}$  einen Satz kommutierender Observablen mit gemeinsamen Eigenzuständen  $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$ .

$H$  enthalte einen Wechselwirkungsterm, dann  $[\vec{J}_1, H] \neq 0, [\vec{J}_2, H] \neq 0$ , d.h.  $\vec{J}_1, \vec{J}_2$  sind keine Erhaltungsgrößen. Gesamtdrehimpuls  $\vec{J} := \vec{J}_1 + \vec{J}_2$  (ist Drehimpuls!) kann Erhaltungsgröße sein, zum Beispiel für  $H_{\text{WW}} = \vec{J}_1 \cdot \vec{J}_2$ .

Neuer Satz von Observablen ist vorteilhaft. Welche Observablen kommutieren mit  $J^2, J_z$ ? Aus  $[\vec{J}_1, J_1^2] = [\vec{J}_2, J_2^2] = 0$  folgt  $[\vec{J}, J_1^2] = 0$ , daher

$$[J_z, J_1^2] = [J^2, J_1^2] = 0$$

Analog für  $J_2^2$ . Somit sind  $J^2, J_z, J_1^2, J_2^2$  kommutierende Observablen. Wähle neue Basis  $|j, m, j_1, j_2\rangle$ . Ziele:

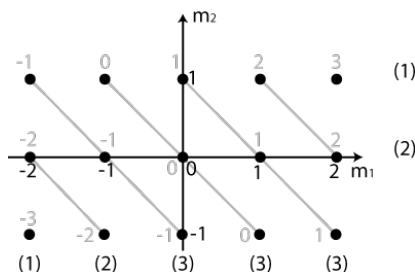
- Gegeben  $j_1, j_2$ . Welche Werte  $j$  treten auf? Welche Werte  $m$  treten auf?
- Verbindung neue Basis zu alter Basis

- Eigenwerte von  $J_z$ : Aus  $J_z = J_{1z} + J_{2z}$  folgt

$$J_z |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle = \hbar \cdot \underbrace{(m_1 + m_2)}_m \cdot |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$$

Wegen  $m_1 \in \{-j_1, \dots, j_1\}$  und  $m_2 \in \{-j_2, \dots, j_2\}$  gilt also  $m \in \{-(j_1 + j_2), \dots, j_1 + j_2\}$  mit Entartung.

- Beispiel:  $j_1 = 2, j_2 = 1$ , dann  $-3 \leq m \leq 3$ ,



Zahl der Zustände:  $(2j_1 + 1) \cdot (2j_2 + 1)$ , maximaler Entartungsgrad:  $\min\{2j_1 + 1, 2j_2 + 1\}$

- Eigenwerte von  $J^2$ : Maximalwert von  $m = m_1 + m_2$  ist  $j_1 + j_2$ , daher Maximalwert von  $j = j_1 + j_2$ . Also  $(2j + 1)$  Zustände. Weitere Werte von  $j$ :

$$\begin{aligned} j &= j_1 + j_2 - 1 && \Rightarrow 2 \cdot (j_1 + j_2 - 1) + 1 \text{ Zustände} \\ &\vdots \\ j &= |j_1 - j_2| && \Rightarrow 2|j_1 - j_2| + 1 \text{ Zustände} \end{aligned}$$

Offenbar gilt:

$$\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (2j+1) = (2j_1+1) \cdot (2j_2+1)$$

(Dimensionsargument!) Zerlegung in Unterräume

$$\epsilon(j_1, j_2) = \epsilon(j_1 + j_2) \otimes \epsilon(j_1 + j_2 - 1) \otimes \dots \otimes \epsilon(|j_1 - j_2|)$$

- Eigenzustände von  $J^2, J_z$  zu festem  $j_1, j_2$ :

$$\underbrace{|j, m, j_1, j_2\rangle}_{|j, m\rangle} = \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \underbrace{\langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j, m, j_1, j_2 \rangle}_{\text{Clebsch-Gordan-Koeffizienten}}$$

- Eigenschaften der Clebsch-Gordan-Koeffizienten:

(i). von Null verschieden für  $m = m_1 + m_2$ ,  $|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$ .

(ii). reell (durch Wahl der Phase)

(iii).  $j = j_1 + j_2$ :

(1)  $m = j$ :

$$|j_1 + j_2, m = j_1 + j_2\rangle = |j_1, j_2, m_1 = j_1, m_2 = j_2\rangle$$

(2)  $m = j - 1$ : Erinnerung:

$$J_- |j, m\rangle = \hbar \cdot \sqrt{j \cdot (j + 1) - m \cdot (m - 1)} \cdot |j, m - 1\rangle$$

Daher:

$$\begin{aligned} & J_- |j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle \\ &= \hbar \cdot \underbrace{\sqrt{(j_1 + j_2) \cdot (j_1 + j_2 + 1) - (j_1 + j_2) \cdot (j_1 + j_2 - 1)}}_{2 \cdot (j_1 + j_2)} |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \stackrel{!}{=} (J_{1-} + J_{2-}) |j_1, j_2, j_1, j_2\rangle \\ &= \hbar \cdot \left( \sqrt{2j_1} \cdot |j_1, j_2, j_1 - 1, j_2\rangle + \sqrt{2j_2} \cdot |j_1, j_2, j_1, j_2 - 1\rangle \right) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle = \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} \cdot |j_1, j_2, j_1 - 1, j_2\rangle + \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} \cdot |j_1, j_2, j_1, j_2 - 1\rangle$$

(3) Analog für  $m < j - 1$  durch wiederholte Anwendung von  $J_-$  bis  $m = -j$ .

$$|j_1 + j_2, -(j_1 + j_2)\rangle = |j_1, j_2, -j_1, -j_2\rangle$$

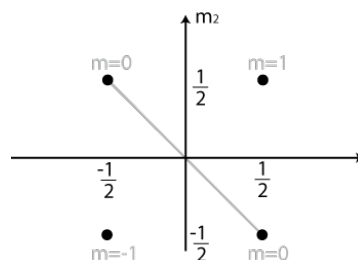
(iv).  $j = j_1 + j_2 - 1$ :

(1)  $m = j$ :

$$|j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle = \alpha \cdot |j_1, j_2, j_1 - 1, j_2\rangle + \beta \cdot |j_1, j_2, j_1, j_2 - 1\rangle$$

Bestimme  $\alpha, \beta$  aus der Orthonormalität zu  $|j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle$  und Normierung.

- Beispiel: Zwei Spin  $\frac{1}{2}$ -Teilchen, dann vier Eigenzustände von  $S_1^2, S_2^2, S_{1z}, S_{2z}$ , nämlich  $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle$ . Kurzschreibweise:  $|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle$ .





Gesamtspin  $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$ . Eigenzustände  $S^2, S_z, S_1^2, S_2^2$ :

$$|1, 1\rangle = |++\rangle$$

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (|+-\rangle + |-+\rangle)$$

$$|1, -1\rangle = |--\rangle$$

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (|+-\rangle - |-+\rangle)$$

Für  $s = 1$ : Triplet (symmetrisch unter Vertauschung), für  $s = 0$ : Singulett (antisymmetrisch unter Vertauschung).

# 6

## Bilder der Quantentheorie

### 6.1 Zeitentwicklungsoperator

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

Eigenschaften:

(i).  $U$  ist linear (folgt aus Linearität der Schrödinger-Gleichung)

(ii).  $U(t_0, t_0) = \mathbb{1}$

(iii). Schrödinger-Gleichung:

$$\begin{aligned} i\hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t} (U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle) &= H(t) (U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle) \\ \Rightarrow i\hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) &= H(t) U(t, t_0) \end{aligned} \quad (*)$$

da  $|\psi(t_0)\rangle$  beliebig.

(iv). Integralgleichung zu (\*):

$$U(t, t_0) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(s) U(s, t_0) ds$$

(v).  $U(t, t') U(t', t'') = U(t, t'')$

(vi).  $U(t_n, t_1) = U(t_n, t_{n-1}) \dots U(t_3, t_2) U(t_2, t_1)$  mit  $t_1, \dots, t_n$  beliebig

(vii). Für  $t'' = t$  in (v):

$$U(t, t') U(t', t) = \mathbb{1} \Rightarrow U(t', t) = U(t, t')^{-1}$$

(viii). infinitesimaler Zeitentwicklungsoperator:

$$\begin{aligned} d|\psi(t)\rangle &:= |\psi(t+dt)\rangle - |\psi(t)\rangle \stackrel{\text{SG}}{=} -\frac{i}{\hbar} H |\psi(t)\rangle dt \\ \Rightarrow |\psi(t+dt)\rangle &= \underbrace{\left( \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} H(t) dt \right)}_{U(t+dt, t)} |\psi(t)\rangle \end{aligned}$$

(ix). Unitarität ( $A^\dagger = A^{-1}$ ):

$$\begin{aligned} U^\dagger(t+dt, t) &= \mathbb{1} + \frac{i}{\hbar} \underbrace{H^\dagger(t)}_{H(t)} dt \\ \Rightarrow U^\dagger(t+dt, t) U(t+dt, t) &= \mathbb{1} + \frac{1}{\hbar^2} H^2(t) (dt)^2 = \mathbb{1} + \mathcal{O}(dt^2) \end{aligned}$$

also  $U(t+dt)$  unitär und somit  $U(t,t')$  unitär. *Mathematisch nicht korrekt. Sondern:  $H$  ist unitär äquivalent zu einem zeitunabhängigen Operator (Schrödinger-Bild). In dieser Darstellung hat  $U$  den Erzeuger  $-\frac{i}{\hbar}H$ , welcher schief-selbstadjungiert ist. Das heißt  $U$  ist unitär, denn das Spektrum ist eine Teilmenge von  $e^{i\mathbb{R}}$ .*

Normerhaltung:

$$\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t_0) | U^\dagger(t, t_0) U(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle = \langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle = 1$$

Eigenwerte:

$$U | \psi \rangle = u \cdot | \psi \rangle \quad \Rightarrow \quad \langle \psi | \psi \rangle = \langle \psi | U^\dagger U | \psi \rangle = |u|^2 \cdot \langle \psi | \psi \rangle$$

also  $|u|^2 = 1$ , d.h.  $u = e^{i\varphi}$  für  $\varphi \in \mathbb{R}$ .

(x). „Lösung“ der Differentialgleichung bei (iii)

$$U(t, t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(s) ds\right)$$

ist falsch, da  $\frac{d}{dt} e^{F(t)} \neq \frac{dF}{dt} \cdot e^{F(t)}$  (nur gleich, falls  $F(t)$ ,  $\frac{dF}{dt}$  vertauschen).

$$\begin{aligned} U(t, t_0) &= T \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(s) ds\right) \\ &:= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H(t-dt) dt\right) \cdots \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H(t_0+dt) dt\right) \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H(t_0) dt\right) \end{aligned}$$

wobei  $T$  Zeit-Ordnungs-Operator. Sei  $H(t) = H$  zeitunabhängig. Dann

$$U(t, t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \cdot (t - t_0) H\right)$$

*falls  $H$  beschränkt ist. (Sonst: Yosida-Approximation)*

## 6.2 Schrödinger-Bild

Entspricht bisherigem, d.h.

- Zustände sind zeitabhängig  $|\psi_s(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$
- Operatoren sind meist zeitunabhängig (Ort, Impuls,...)
- Zeitentwicklung durch Schrödinger-Gleichung beschrieben:

$$i\hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t} |\psi_s(t)\rangle = H_s |\psi_s(t)\rangle$$

## 6.3 Heisenberg-Bild

Definitionen:

- Zustände zeitunabhängig

$$|\psi_H\rangle := U^\dagger(t, t_0) |\psi_s(t)\rangle = U^\dagger(t, t_0) U(t, t_0) |\psi_s(t_0)\rangle = |\psi_s(t_0)\rangle$$

- Operatoren sind zeitabhängig

$$A_H(t) := U^\dagger(t, t_0) A_s(t) U(t, t_0)$$

Folgerungen:

(i). Eigenwerte sind bildunabhängig:  $U^+AU = U^{-1}AU$ , d.h. Ähnlichkeits-Transformation. Ändert Eigenwert nicht.

(ii). Erwartungswerte bildunabhängig:

$$\begin{aligned}\langle \psi_s(t) | A_s(t) | \psi_s(t) \rangle &= \langle \psi_s(t_0) | U^+(t, t_0) A_s(t) U(t, t_0) | \psi_s(t_0) \rangle \\ &= \langle \psi_H | A_H(t) | \psi_H \rangle\end{aligned}$$

(iii). Vertauschungsrelationen bildunabhängig:

$$[A_s, B_s] = c_s \Leftrightarrow [A_H, B_H] = c_H$$

Beweis:

$$\begin{aligned}[A_H, B_H] &= (U^+ A_s U)(U^+ B_s U) - (U^+ B_s U)(U^+ A_s U) \\ &= U^+ A_s B_s U - U^+ B_s A_s U = U^+ \underbrace{[A_s, B_s]}_{c_s} U = c_H\end{aligned}$$

(iv). Zeitentwicklung (Heisenberg-Bewegungs-Gleichung):

$$i\hbar \cdot \frac{d}{dt} A_H(t) = [A_H(t), H_H(t)] + i\hbar \left( \frac{d}{dt} A_s(t) \right)_H$$

Beweis:

$$\begin{aligned}i\hbar \cdot \frac{d}{dt} A_H(t) &= i\hbar \underbrace{\left( \frac{d}{dt} U^+(t, t_0) \right)}_{\stackrel{6.1(iii)}{=} -U^+(t, t_0) H_s(t)} A_s(t) U(t, t_0) + i\hbar \cdot U^+(t, t_0) A_s(t) \underbrace{\left( \frac{d}{dt} U(t, t_0) \right)}_{H_s(t) U(t, t_0)} + \\ & \quad i\hbar U^+(t, t_0) \left( \frac{d}{dt} A_s(t) \right) U(t, t_0) \\ &= -U^+(t, t_0) H_s(t) \mathbb{1} A_s(t) U(t, t_0) + U^+(t, t_0) A_s(t) \mathbb{1} H_s(t) U(t, t_0) + i\hbar \left( \frac{d}{dt} A_s(t) \right)_H \\ &= [A_H(t), H_H(t)] + i\hbar \left( \frac{d}{dt} A_s(t) \right)_H\end{aligned}$$

#### 6.4 Wechselwirkungs-Bild/Dirac-Bild

• Sei  $H = H_0 + V(t)$  mit  $H_0$  zeitunabhängig und wohlbekannt.

• Zustände:

$$|\psi_w(t)\rangle := \underbrace{U_0^+(t, t_0)}_{\stackrel{6.1}{=} \exp\left(\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H_0\right)} |\psi_s(t)\rangle = U_0^+(t, t_0) U(t, t_0) \underbrace{|\psi_s(t_0)\rangle}_{|\psi_H(t_0)\rangle}$$

• Operatoren:

$$A_w(t) := U_0^+(t, t_0) A_s(t) U_0(t, t_0)$$

• Zeitentwicklung:

(i). Zustände:

$$i\hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t} |\psi_w(t)\rangle = V_w(t) |\psi_w(t)\rangle$$

Beweis:

$$\begin{aligned}i\hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t} \underbrace{|\psi_w(t)\rangle}_{U_0^+ |\psi_s(t)\rangle} &= \left( i\hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t} U_0^+ + U_0^+ H_s(t) \right) \mathbb{1} |\psi_s(t)\rangle \\ &= V_w(t) |\psi_w(t)\rangle\end{aligned}$$

(ii). Operatoren:

$$i\hbar \cdot \frac{d}{dt} A_w(t) = [A_w(t), H_0] + i\hbar \cdot \left( \frac{d}{dt} A_s(t) \right)_w$$

Beweis: Analog.

Zeitentwicklung von Zuständen durch Störung  $V(t)$ , von Operatoren durch zeitunabhängiges  $H_0$

• Bemerkungen:

- $V = 0 \Rightarrow$  Heisenberg-Bild,  $H_0 = 0 \Rightarrow$  Schrödinger-Bild
- Wichtig für zeitabhängige Störungstheorie
- Alle Bilder liefern gleiche Vorhersagen für Messergebnisse.

# 7

## Quantenmechanische Näherungsverfahren

- Motivation: Eigenwertproblem von  $H$  nur für wenige Systeme analytisch lösbar (z.B. Harmonischer Oszillator, Wasserstoff-Atom nicht-relativistisch)
- Beispiele:
  - (i). Variationsprinzip
  - (ii). zeitunabhängige Störungstheorie, entartet und nicht-entartet
  - (iii). zeitabhängige Störungstheorie
  - (iv). WKB-Theorie (Semiklassik)
  - (v). Born'sche Näherung (Streuprobleme)  $\rightarrow$  QT II

### 7.1 Variationsprinzip

- Ziel: Bestimmung der Grundzustandsenergie
- Sei  $|\psi\rangle$  beliebig. Es gilt

$$\langle H \rangle = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \geq E_0$$

Beweis: Sei  $H|n\rangle = E_n|n\rangle$  mit  $n \in \mathbb{N}_0$ ,  $E_0 < E_1 < \dots$ . Dann  $|\psi\rangle = \sum_n c_n \cdot |n\rangle$ , also

$$\langle \psi | \psi \rangle = \sum_{n,m \in \mathbb{N}_0} \langle m | \bar{c}_m \cdot c_n | n \rangle = \sum_{n \in \mathbb{N}_0} |c_n|^2$$

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \sum_{n,m \in \mathbb{N}_0} \langle m | \bar{c}_m \cdot E_n \cdot c_n | n \rangle = \sum_{n \in \mathbb{N}_0} |c_n|^2 \cdot E_n \geq \left( \sum_{n \in \mathbb{N}_0} |c_n|^2 \right) \cdot E_0$$

- Ritzsches Variationsverfahren:
  - (i). „Rate“ Zustand  $|\psi(\alpha, \beta, \dots)\rangle$
  - (ii). Berechne  $\langle H \rangle(\alpha, \beta, \dots)$ , minimiere durch Variation der Parameter  $\alpha, \beta, \dots$ . Dann Minimum  $\langle H \rangle(\alpha_{\min}, \beta_{\min}, \dots)$  obere Schranke für  $E_0$ .
- Beispiel: Potentialtopf. Exakte Lösung:

$$\langle x|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{a}} \cdot \cos\left(\frac{\pi \cdot x}{2a}\right) \qquad E_0 = \frac{\pi^2 \cdot \hbar^2}{8m \cdot a^2}$$

Wähle Ansatz  $\langle x|\varphi\rangle = a^\alpha - |x|^\alpha$ , dann

$$\begin{aligned} \langle H \rangle(\alpha) &\propto \frac{(\alpha+1) \cdot (2\alpha+1)}{(2\alpha-1)} \\ \Rightarrow \alpha_{\min} &= \frac{1 + \sqrt{6}}{2} \\ \Rightarrow \langle H \rangle(\alpha_{\min}) &= \underbrace{\frac{5 + 2 \cdot \sqrt{6}}{\pi^2}}_{\approx 1,003} \cdot E_0 \end{aligned}$$

## 7.2 Zeitunabhängige Störungstheorie

- Sei  $H$  zeitunabhängig. Gesucht: Stationäre Lösung  $H|n\rangle = E_n|n\rangle$ .
- Sei  $H = H_0 + W$  mit  $H_0$  gelöst, d.h.  $H_0|n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|n^{(0)}\rangle$ , und  $W$  „klein“. Untersuche  $H(\lambda) := H_0 + \lambda \cdot W$ , dann für  $\lambda \rightarrow 0 : H(\lambda) \rightarrow H_0$  und für  $\lambda = 1 : H(1) = H_0 + W$ .
- Potenzreihenentwicklung von  $E_n, |n\rangle$  nach  $\lambda$ :

$$E_n(\lambda) = E_n^{(0)} + \lambda \cdot E_n^{(1)} + \lambda^2 \cdot E_n^{(2)} + \dots = \sum_{k \in \mathbb{N}_0} \lambda^k \cdot E_n^{(k)}$$

$$|n\rangle(\lambda) = |n^{(0)}\rangle + \lambda \cdot |n^{(1)}\rangle + \lambda^2 \cdot |n^{(2)}\rangle + \dots = \sum_{k \in \mathbb{N}_0} \lambda^k \cdot |n^{(k)}\rangle$$

### 7.2.1 Nicht-entarteter Fall

$$(H_0 + \lambda \cdot W) \left( \sum_{k \in \mathbb{N}_0} \lambda^k \cdot |n^{(k)}\rangle \right) = \left( \sum_{k \in \mathbb{N}_0} \lambda^k \cdot E_n^{(k)} \right) \cdot \left( \sum_{k \in \mathbb{N}_0} \lambda^k \cdot |n^{(k)}\rangle \right)$$

Sei  $\langle n^{(0)}|m^{(0)}\rangle = \delta_{nm}$ . Koeffizienten-Vergleich:

$$\begin{aligned} \lambda^0 : H_0|n^{(0)}\rangle &= E_n^{(0)}|n^{(0)}\rangle \\ \lambda^1 : H_0|n^{(1)}\rangle + W|n^{(0)}\rangle &= E_n^{(0)}|n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)}|n^{(0)}\rangle \\ &\Leftrightarrow (H_0 - E_n^{(0)})|n^{(1)}\rangle + (W - E_n^{(0)})|n^{(0)}\rangle = 0 \end{aligned} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \lambda^2 : H_0|n^{(2)}\rangle + W|n^{(1)}\rangle &= E_n^{(0)}|n^{(2)}\rangle + E_n^{(1)}|n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)}|n^{(0)}\rangle \\ &\Leftrightarrow (H_0 - E_n^{(0)})|n^{(2)}\rangle + (W - E_n^{(1)})|n^{(1)}\rangle = E_n^{(2)}|n^{(0)}\rangle \end{aligned} \quad (2)$$

Normierung von  $|n\rangle$ :

$$\begin{aligned} 1 &\stackrel{!}{=} \langle n|n\rangle = \left( \sum_{k \in \mathbb{N}_0} \lambda^k \cdot \langle n^{(k)}| \right) \left( \sum_{k \in \mathbb{N}_0} \lambda^k \cdot |n^{(k)}\rangle \right) \\ &= \underbrace{\langle n^{(0)}|n^{(0)}\rangle}_1 + \lambda \cdot \underbrace{(\langle n^{(0)}|n^{(1)}\rangle + \langle n^{(1)}|n^{(0)}\rangle)}_{\stackrel{!}{=} 0} + \lambda^2 \cdot \underbrace{(\langle n^{(2)}|n^{(0)}\rangle + \langle n^{(1)}|n^{(1)}\rangle + \langle n^{(0)}|n^{(2)}\rangle)}_{\stackrel{!}{=} 0} + \dots \end{aligned} \quad (3)$$

Es sei  $\langle n^{(0)}|n\rangle \in \mathbb{R}$ , dann folgt

$$\mathbb{R} \ni \langle n^{(0)}|n\rangle = \underbrace{\langle n^{(0)}|n^{(0)}\rangle}_1 + \underbrace{\lambda \cdot \langle n^{(0)}|n^{(1)}\rangle}_{\in \mathbb{R}} + \underbrace{\lambda^2 \cdot \langle n^{(0)}|n^{(2)}\rangle}_{\in \mathbb{R}} + \dots$$

In (3) gilt somit:

$$\begin{aligned} \lambda^1 : \langle n^{(1)}|n^{(0)}\rangle + \langle n^{(0)}|n^{(1)}\rangle &= 0 \quad \Rightarrow \langle n^{(1)}|n^{(0)}\rangle = 0 \\ &\vdots \end{aligned} \quad (4)$$

(i). 1. Ordnung: Bestimme  $\langle n^{(0)}|(1)\rangle$ :

$$\begin{aligned} \underbrace{\langle n^{(0)}|H_0 - E_n^{(0)}|n^{(1)}\rangle + \langle n^{(0)}|W - E_n^{(1)}|n^{(0)}\rangle}_0 &= 0 \\ &\Rightarrow E_n^{(1)} = \langle n^{(0)}|W|n^{(0)}\rangle \\ &\Rightarrow E_n(\lambda) = E_n^{(0)} + \lambda \cdot \langle n^{(0)}|W|n^{(0)}\rangle + \mathcal{O}(\lambda^2) \end{aligned}$$

Berechne  $\langle m^{(0)} | (1) \rangle$  für  $m \neq n$ :

$$\begin{aligned} \langle m^{(0)} | H_0 - E_n^{(0)} | n^{(1)} \rangle + \langle m^{(0)} | W - E_n^{(1)} | n^{(0)} \rangle &= 0 \\ \Rightarrow (E_m^{(0)} - E_n^{(0)}) \langle m^{(0)} | n^{(1)} \rangle + \langle m^{(0)} | W | n^{(0)} \rangle &= 0 \\ \Rightarrow \langle m^{(0)} | n^{(1)} \rangle &= \frac{\langle m^{(0)} | W | n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \end{aligned}$$

Mit (4) folgt:

$$|n\rangle(\lambda) = |n^{(0)}\rangle + \lambda \cdot \sum_{m \neq n} |m^{(0)}\rangle \cdot \frac{\langle m^{(0)} | W | n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} + \mathcal{O}(\lambda^2)$$

Bemerkungen:

- Korrektur von  $|n^{(0)}\rangle$  zu  $|n\rangle$  ist „genügend klein“, wenn  $\langle m^{(0)} | W | n^{(1)} \rangle$  klein gegen  $E_n^{(0)} - E_m^{(0)}$ .
  - Bei Entartung versagt dieses Verfahren ( $E_n^{(0)} = E_m^{(0)}$ ).
- (ii). 2. Ordnung: Bestimme  $\langle n^{(0)} | (2) \rangle$ , dann

$$E_n(\lambda) = E_n^{(0)} + \lambda \cdot \langle n^{(0)} | W | n^{(0)} \rangle + \lambda^2 \cdot \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m^{(0)} | W | n^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} + \mathcal{O}(\lambda^3)$$

## 7.2.2 Entarteter Fall

- Motivation: Entartete Niveaus des Wasserstoff-Atoms unter Berücksichtigung relativistischer Korrekturen.
- Statt  $|n^{(0)}\rangle$  jetzt Basis zu Unterraum ( $|n_i^{(0)}\rangle$ ), d.h.  $H |n_i^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n_i^{(0)}\rangle$  mit  $i = 1, \dots, g_n$ . Ansatz:

$$|n\rangle = \underbrace{\sum_{i=1}^{g_n} c_i \cdot |n_i^{(0)}\rangle}_{=: |n_\alpha^{(0)}\rangle} + \sum_{k \in \mathbb{N}} \lambda^k \cdot |n^{(k)}\rangle$$

mit unbekanntem  $c_i$ .

- Berechne  $\langle n_i^{(0)} | (1) \rangle$ :

$$\begin{aligned} \underbrace{\langle n_i^{(0)} | H_0 - E_n^{(0)} | n^{(1)} \rangle + \langle n_i^{(0)} | W - E_n^{(1)} | n_\alpha^{(0)} \rangle}_0 &= 0 \\ \Rightarrow \langle n_i^{(0)} | W | n_\alpha^{(0)} \rangle &= E_n^{(1)} \cdot \langle n_i^{(0)} | n_\alpha^{(0)} \rangle \\ \Rightarrow \sum_k \sum_{i=1}^{g_k} \langle n_i^{(0)} | W | k_j^{(0)} \rangle \underbrace{\langle k_j^{(0)} | n_\alpha^{(0)} \rangle}_{=0(k \neq n)} &= E_n^{(1)} \langle n_i^{(0)} | n_\alpha^{(0)} \rangle \\ \Rightarrow \sum_{j=1}^{g_n} \underbrace{\langle n_i^{(0)} | W | n_j^{(0)} \rangle}_{=: W_{ij}} \cdot \underbrace{\langle n_j^{(0)} | n_\alpha^{(0)} \rangle}_{=: c_j} &= E_n^{(1)} \cdot \underbrace{\langle n_i^{(0)} | n_\alpha^{(0)} \rangle}_{c_i} \\ \Rightarrow \sum_{j=1}^{g_n} W_{ij} \cdot c_j &= E_{n,i}^{(1)} \cdot c_i \end{aligned}$$

also  $g_n$  Eigenwerte.

$$E_{n,j}(\lambda) = E_n^{(0)} + \lambda \cdot E_{n,j}^{(1)} + \mathcal{O}(\lambda^2)$$

- Bemerkung: Diagonalisierung von  $W$  im Unterraum der  $|n_i^{(0)}\rangle$  ist leichter als im gesamten Zustandsraum.



### 7.3 Zeitabhängige Störungstheorie

- zeitunabhängiges System  $H_0$ :  $H_0 |\varphi_n\rangle = E_n \cdot |\varphi_n\rangle$ . Anfangszustand  $|\psi(0)\rangle = |\varphi_m\rangle$ , also

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \cdot E_m \cdot t\right) \cdot |\varphi_m\rangle$$

- zeitabhängige Störung:  $H(t) = H_0 + V(t)$  mit  $V(t) = 0$  für  $t < 0$ , d.h. es gibt keine stationären Zustände für  $H(t)$ .

- Bemerkungen:

- Man kann zu jedem festen  $t$  für  $H(t)$  Eigenzustände finden:

$$H(t) |\varphi_{n,t}\rangle = E_{n,t} \cdot |\varphi_{n,t}\rangle$$

Im Allgemeinen sagt das nichts über die Zeitentwicklung von  $|\psi(t)\rangle$  aus. Ausnahme:  $V(t)$  sehr „langsam“ ( $\rightarrow$  Quanten-Adiabotizität, Born 1926).

- Falls  $V$  periodisch, d.h.  $V(t) = V(t+T)$ : Floquet-Theorie, betrachte Eigenzustände von  $U(t+T, t_0)$

- Allgemeines  $|\psi(t)\rangle$ ? Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \cdot \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = (H_0 + V(t)) |\psi(t)\rangle$$

mit Anfangsbedingung  $|\psi(0)\rangle = |\varphi_m\rangle$ , also existiert eindeutige Lösung. Ist jedoch generell nicht analytisch lösbar.

- Interessante Aussagen über  $|\psi(t)\rangle$ :

- Wieviel bleibt im Ausgangszustand, d.h. wie groß ist  $|\langle \varphi_m | \psi(t) \rangle|^2$ ?
- Mit welcher Wahrscheinlichkeit gibt es einen Übergang in anderen Zustand  $n$ ?

$$P_{m \rightarrow n}(t) := |\langle \varphi_n | \psi(t) \rangle|^2$$

Im Allgemeinen nur im Grenzfall „kleiner“ Störung  $V(t)$ .

- Wähle Wechselwirkungsbild mit  $t_0 = 0$ :

$$\begin{aligned} |\psi_w(t)\rangle &= U_0^+(t, 0) |\psi_s(t)\rangle \\ V_w &= \underbrace{U_0^+(t, 0)}_{e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t}} V(t) \underbrace{U_0(t, 0)}_{e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t}} \\ \Rightarrow i\hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t} |\psi_w(t)\rangle &= V_w(t) |\psi_w(t)\rangle \end{aligned}$$

Integralgleichung:

$$|\psi_w(t)\rangle = |\psi_w(0)\rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t V_w(t') |\psi_w(t')\rangle dt'$$

(iteratives Einsetzungsverfahren) Reihen-Entwicklung (von Neumann-Reihe):

$$|\psi_w(t)\rangle = \left( 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t V_w(t') dt' + \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_0^t V_w(t') dt' \cdot \int_0^t V_w(t') dt' \right) |\psi_w(0)\rangle$$

- Beschränkung auf 1. Ordnung:

$$|\psi_w(t)\rangle \approx \left( 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t V_w(t') dt' \right) \underbrace{|\psi_s(0)\rangle}_{|\varphi_m\rangle}$$

Daher:

$$\begin{aligned}
 P_{m \rightarrow n}(t) &= |\langle \varphi_n | \psi_s(t) \rangle|^2 = \left| \langle \varphi_n | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_0 t\right) \left(1 + \frac{1}{i\hbar} \int V_w(t') dt'\right) | \varphi_m \rangle \right|^2 \\
 &\stackrel{n \neq m}{=} \left| e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \cdot \frac{1}{i\hbar} \cdot \int_0^t \underbrace{\langle \varphi_n | V_w(t') | \varphi_m \rangle}_{\langle \varphi_n | U_0^\dagger(t',0) V(t') U_0(t',0) | \varphi_m \rangle} dt' \right|^2 \\
 &= \left| e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \cdot \frac{1}{i\hbar} \cdot \int_0^t e^{\frac{i}{\hbar} E_n t'} \langle \varphi_n | V(t') | \varphi_m \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_m t'} dt' \right|^2 \\
 &= \frac{1}{\hbar^2} \cdot \left| \int_0^t e^{\frac{i}{\hbar} (E_n - E_m) t'} \cdot \langle \varphi_n | V(t') | \varphi_m \rangle dt' \right|^2 \\
 &= \frac{1}{\hbar^2} \cdot \left| \int_0^t e^{i w_{nm} t'} \cdot V_{nm}(t') dt' \right|^2
 \end{aligned}$$

mit

$$w_{nm} := \frac{E_n - E_m}{\hbar} \qquad V_{nm} := \langle \varphi_n | V(t) | \varphi_m \rangle$$

- Bemerkung: Falls Matrixelement  $V_{nm}(t) = 0$ : kein Übergang von  $m$  nach  $n$  (in 1. Ordnung)  $\hat{=}$  Auswahlregel; aber eventuell in höherer Ordnung
- Beispiele:
  - (i). Konstante Störung  $V(t) = V \cdot \Theta(t)$ :

$$\begin{aligned}
 P_{m \rightarrow n}(t) &= \frac{|V_{nm}|^2}{\hbar^2} \cdot \left| \int_0^t e^{i w_{nm} t'} dt' \right|^2 = \frac{|V_{nm}|^2}{\hbar^2} \cdot \left| \frac{e^{i w_{nm} t} - 1}{i w_{nm}} \right|^2 \\
 &= \frac{|V_{nm}|^2}{\hbar^2} \cdot \underbrace{\left( \frac{\sin\left(w_{nm} \cdot \frac{t}{2}\right)}{\frac{w_{nm}}{2}} \right)^2}_{\rightarrow 2\pi t \cdot \delta(w_{nm}) \text{ (} t \rightarrow \infty \text{)}}
 \end{aligned}$$

Endliches  $t$ : Übergang mit  $E_n - E_m \propto \frac{2\pi\hbar}{t}$  Wahrscheinlichkeit. Für  $t \rightarrow \infty$  nur Übergänge mit  $E_n = E_m$  (zwischen entarteten Zuständen),

$$P_{m \rightarrow n}(t) = \frac{|V_{nm}|^2}{\hbar} \cdot 2\pi t \cdot \delta(E_n - E_m)$$

Übergangsrate:

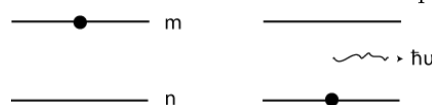
$$\Gamma_{n \rightarrow m} := \frac{d}{dt} P_{m \rightarrow n}(t) = \frac{|V_{nm}|^2}{\hbar} \cdot 2\pi \cdot \delta(E_n - E_m)$$

Bemerkung:

- $E_n \neq E_m \Rightarrow \Gamma = 0$ ,  $E_n = E_m \Rightarrow \Gamma = \infty$  ( $P_{m \rightarrow n} \sim t$ ). Grund: 1. Ordnung Störungstheorie (trotzdem nützlich)

Lösung: Betrachte Übergang in ein Kontinuum von Endzuständen (d.h.  $|\varphi_n\rangle$  kontinuierlich).

- $\alpha$ -Zerfall: Kontinuum an Endzuständen  $|m\rangle$
- spontane Emission eines Photons mit kontinuierlicher Frequenz



- Streuung:  $|m\rangle \hat{=}$  einfallende ebene Welle  $e^{i\vec{k}\vec{r}}$ ,  $|n\rangle \hat{=}$  ausfallende ebene Welle  $e^{i\vec{k}'\vec{r}}$ .  $\vec{k}'$  ist kontinuierlich verteilt.

Da es unendlich viele Zustände  $|\varphi_n\rangle$  gibt, gilt  $\Gamma_{m \rightarrow n} = 0$ , d.h. Integral über Energiebereich sinnvoll,

$$\Gamma = \sum_n \Gamma_{m \rightarrow n} \Rightarrow \int_{\Delta E} \varrho(E) \cdot \Gamma_{m \rightarrow n}(E) dE$$

Hier:

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} \cdot |\langle n|V|m\rangle|^2 \cdot \varrho(E_m)$$

Fermis goldene Regel (von Pauli hergeleitet):  $E_n \approx E_m$ .  $\varrho(E)$  heißt Zustandsdichte,  $\varrho(E) dE$  ist Anzahl der Zustände in  $[E, E + dE]$

(ii). Periodische Störung  $V(t) = \Theta(t) \cdot V(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})$ :

$$\begin{aligned} P_{m \rightarrow n}(t) &= \frac{|V_{nm}|^2}{\hbar^2} \cdot \left| \int_0^t e^{i(w_{nm}+\omega) \cdot t'} + e^{i(w_{nm}-\omega) \cdot t'} dt' \right|^2 \\ &= \frac{|V_{nm}|^2}{\hbar^2} \cdot \left| \frac{e^{i(w_{nm}+\omega)t} - 1}{i(w_{nm} + \omega)} + \frac{e^{i(w_{nm}-\omega)t} - 1}{i(w_{nm} - \omega)} \right|^2 \\ &= \frac{|V_{nm}|^2}{\hbar^2} \cdot \left| e^{i(w_{nm}+\omega)\frac{t}{2}} \cdot \frac{\sin\left((w_{nm} + \omega)\frac{t}{2}\right)}{\frac{w_{nm}+\omega}{2}} \right. \\ &\quad \left. + e^{i(w_{nm}-\omega)\frac{t}{2}} \cdot \frac{\sin\left((w_{nm} - \omega)\frac{t}{2}\right)}{\frac{w_{nm}-\omega}{2}} \right|^2 \end{aligned}$$

$t \rightarrow \infty$ : Vernachlässige Differenz

$$\begin{aligned} P_{m \rightarrow n}(t) &= \frac{|V_{nm}|^2}{\hbar^2} \cdot 2\pi\hbar \cdot t \cdot (\delta(E_n - (E_m - \hbar\omega)) + \delta(E_n - (E_m + \hbar\omega))) \\ \Gamma_{m \rightarrow n} &= \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n|V|m\rangle|^2 \cdot (\delta(E_n - (E_m - \hbar\omega)) + \delta(E_n - (E_m + \hbar\omega))) \end{aligned}$$

Kontinuum:

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} \cdot (|\langle n, E_m - \hbar\omega|V|m\rangle|^2 \cdot \varrho(E_m - \hbar\omega) + |\langle n, E_m + \hbar\omega|V|m\rangle|^2 \cdot \varrho(E_m + \hbar\omega))$$



Frequenz  $\omega$  der Störung  $\hat{=}$  Anregungsenergie  $w_{nm}$  des ungestörten Systems (Resonanzphänomen). Bemerkung zur Gültigkeit der 1. Ordnung Störungstheorie:

- notwendiges Kriterium:  $P_{m \rightarrow n}(t) < 1 \Leftrightarrow \frac{|V_{nm}|^2}{\hbar^2} \cdot t^2 < 1$ , also  $t < \frac{\hbar}{|V_{nm}|}$ , d.h. für nicht zu lange Zeiten.
- hinreichendes Kriterium: Terme höherer Ordnung der von-der-Neumann-Reihe müssen vernachlässigbar sein.

(iii). Wechselwirkung eines atomaren Elektrons mit einer elektromagnetischen Welle

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m} (\vec{p} - q \cdot \vec{A}(\vec{R}, t))^2 + V(\vec{R}) - \frac{q}{m} \cdot \vec{B}(\vec{R}, t, \vec{S}) \\ H_0 &= \frac{1}{2m} \vec{P}^2 + V(\vec{R}) \end{aligned}$$

Ansatz:

$$\vec{A}(\vec{R}, t) = A_0 \cdot (e^{i\vec{k} \cdot \vec{y} - i\omega t}) \cdot \vec{e}_z + h.c.$$

Näherung  $e^{i\vec{k} \cdot \vec{y}} \approx 1$ . Elektrische Dipol-Wechselwirkung:

$$\begin{aligned} V_{DE} &\sim \frac{q \cdot E_0}{m\omega} \cdot \sin(\omega t) \cdot \hat{p}_z & [z, H_0] &= i\hbar \cdot \frac{\hat{p}_z}{m} \\ \Rightarrow V_{nm} &= \langle \varphi_n | Z | \varphi_m \rangle \end{aligned}$$

mit  $Z = r \cdot \cos\vartheta = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \cdot r \cdot Y_1^0(\vartheta)$ .  $V_{nm} \neq 0 \rightarrow$  Auswahlregeln:  $\delta\ell = \pm 1$ ,  $\Delta m = \pm 1, 0$ .

## 7.4 WKB-Näherung

- Wentzel, Kramers, Brillouin (1926)
- Quantenmechanik im Grenzfall kleiner de-Broglie-Wellenlänge im Vergleich zur Systemgröße  
→ semiklassischer Fall
- Schrödinger-Gleichung (zeitunabhängig) in Ortsdarstellung (1d):

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right) \psi(x) = E \cdot \psi(x)$$

- Spezialfall:  $V(x) = \text{const.}$ , dann

$$E > V : \psi(x) = \exp\left(\pm i \cdot \frac{p \cdot x}{\hbar}\right) \quad E < V : \psi(x) = \exp\left(\pm \frac{|p| \cdot x}{\hbar}\right)$$

mit  $p = \sqrt{2m \cdot (E - V)}$ .

- Allgemein: Ansatz  $\psi(x) = e^{i \frac{\sigma(x)}{\hbar}}$ , dann

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{i}{\hbar} \frac{\partial}{\partial x} \left( \sigma'(x) \cdot \exp\left(i \frac{\sigma(x)}{\hbar}\right) \right) + (V(x) - E) \cdot e^{i \frac{\sigma(x)}{\hbar}} &= 0 \\ \Rightarrow \frac{\sigma'(x)^2}{2m} - \frac{i \hbar}{2m} \cdot \sigma''(x) &= E - V(x) = \frac{p^2(x)}{2m} \\ \Rightarrow \sigma'(x)^2 - i \hbar \cdot \sigma''(x) &= p^2(x) \end{aligned} \quad (1)$$

Potenzreihenansatz:

$$\sigma(x) = \sum_{j=0}^{\infty} \sigma_j(x) \cdot \left(\frac{\hbar}{i}\right)^j$$

Näherungslösung für (1):

- (i). 0. Ordnung:  $\sigma(x) = \sigma_0(x)$ . Vernachlässige Term mit  $\hbar$ :

$$\sigma_0'(x)^2 = p^2(x) \Rightarrow \sigma_0(x) = \pm \int^x p(t) dt$$

- (ii). 1. Ordnung:  $\sigma(x) = \sigma_0(x) + \frac{\hbar}{i} \sigma_1(x)$ , in (1):

$$\underbrace{\sigma_0'(x)^2}_{p^2(x)} + \frac{2}{i} \hbar \cdot \sigma_0'(x) \cdot \sigma_1'(x) - \hbar^2 \cdot \sigma_1'(x)^2 - i \hbar \cdot \left( \sigma_0''(x) + \frac{\hbar}{i} \sigma_1''(x) \right) = p^2(x)$$

Vernachlässige Terme der Ordnung  $\hbar^2$ :

$$\begin{aligned} \frac{2}{i} \hbar \cdot \sigma_0'(x) \cdot \sigma_1'(x) - i \hbar \cdot \sigma_0''(x) &= 0 \\ \Rightarrow 2\sigma_0'(x) \cdot \sigma_1'(x) + \sigma_0''(x) &= 0 \\ \Rightarrow \sigma_1'(x) &= -\frac{1}{2} \frac{\sigma_0''(x)}{\sigma_0'(x)} = -\frac{1}{2} \frac{p'(x)}{p(x)} \\ \Rightarrow \sigma_1(x) &= -\frac{1}{2} \ln p(x) + c \end{aligned}$$

Damit:

$$\psi(x) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \cdot \left( \sigma_0(x) + \frac{\hbar}{i} \left( -\frac{1}{2} \ln p(x) + c \right) \right)\right) \propto \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \cdot \exp\left(\pm \frac{i}{\hbar} \int^x p(t) dt\right)$$

Bereiche:

$$E > V(x) : \psi(x) = \frac{A}{\sqrt{p(x)}} \cdot \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int^x p(t) dt\right) + \frac{B}{\sqrt{p(x)}} \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int^x p(t) dt\right)$$

$$E < V(x) : \psi(x) = \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} \cdot \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int^x |p(t)| dt\right) + \frac{D}{\sqrt{|p(x)|}} \cdot \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int^x |p(t)| dt\right)$$

• Bemerkungen:

- Für  $p(x) = \text{const.}$  entspricht dies obigen Lösungen.
- Es gilt  $|\psi(x)|^2 \propto \frac{1}{p(x)}$ , d.h. je größer der Impuls bzw. Geschwindigkeit, desto kleiner ist die Aufenthalts-Wahrscheinlichkeit (entspricht klassischem Fall)
- Gültigkeit der Näherung: De-Broglie-Wellenlänge  $\lambda = \frac{h}{p(x)}$  darf sich innerhalb einer Wellenlänge nur wenig ändern:  $\frac{d}{dx} \lambda \ll 1$ . Näherung ungültig für  $p(x) \rightarrow 0$ , d.h. bei  $V(x) \approx E$  ( $\hat{=}$  klassischer Umkehrpunkt).

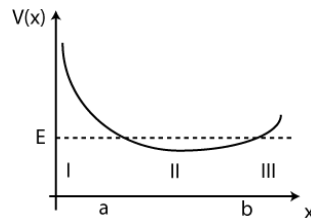
### 7.4.1 Verhalten am Umkehrpunkt

Lineare Näherung von  $V(x)$  um Umkehrpunkt  $\Rightarrow$  exakte Lösung mit Airy-Funktion  $Ai(x)$ , dann richtige Verbindung der WKB-Lösung:

$$E < V(x) : \frac{C}{2 \cdot \sqrt{|p(x)|}} \cdot \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_0^x |p(t)| dt\right) \quad \text{exp. Abfall}$$

$$E > V(x) : \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \cdot \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_0^x p(t) dt - \frac{\pi}{4}\right) \quad \text{Oszillation}$$

### 7.4.2 Gebundene Zustände



$$a : \psi_{II}(x) = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \cdot \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(t) dt - \frac{\pi}{4}\right) \quad =: \varphi_1(x)$$

$$b : \psi_{II}(x) = \frac{D}{\sqrt{p(x)}} \cdot \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^b p(t) dt - \frac{\pi}{4}\right) \quad =: \varphi_2(x)$$

Müssen in Bereich II gleich sein. Damit  $D = \pm C$ , d.h.  $\varphi_1(x) = \pm \varphi_2(x) + n \cdot \pi$  für  $n \in \mathbb{Z}$ .

$$+ : \frac{1}{\hbar} \left( \underbrace{\int_a^x p(t) dt - \int_x^b p(t) dt}_{\int_a^b p(t) dt - \int_x^b p(t) dt} \right) = n \cdot \pi$$

$$- : \frac{1}{\hbar} \cdot \left( \underbrace{\int_a^b p(t) dt - \frac{\pi}{2}}_{\frac{1}{2} \oint p(t) dt} \right) = n \cdot \pi$$

$$\Rightarrow \oint p(x) dx = \left(n + \frac{1}{2}\right) \cdot h \quad (n \in \mathbb{N}_0)$$

+ entfällt, da Integral von  $x$  abhängt.

Bemerkungen:

- Bohr-Sommerfeld (alte Quantentheorie) korrigiert um  $\frac{1}{2}$
- jedem quanten-mechanischen Zustand  $\hat{=}$  Fläche  $h$  im Phasenraum
- $E_{n+1} - E_n = \Delta E = -\frac{\hbar}{\tau(E)}$  mit  $\tau$  als klassische Periodendauer.

Beispiel:

(i). Harmonischer Oszillator:

$$\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}mw \cdot x^2 = E_n \Rightarrow x_n = \sqrt{\frac{2E_n}{m \cdot w^2}} \quad p_n = \sqrt{2m \cdot E_n}$$

Fläche der Ellipse im Phasenraum:

$$\oint p(x) dx = \pi \cdot x_n \cdot p_n = \frac{2E_n \cdot \pi}{w} \stackrel{!}{=} \left(n + \frac{1}{2}\right) \cdot h$$
$$\Rightarrow E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \cdot \hbar w$$

Exakte Lösung!

Bemerkung: Für allgemeine  $V(x)$  ist WKB gute Näherung.

### 7.4.3 Tunnel durch Potentialbarriere

- Beispiel: symmetrische Doppelmulde

$$\psi_{\text{sym}} = \frac{\psi_L + \psi_R}{\sqrt{2}} \quad \psi_{\text{asym}} = \frac{\psi_L - \psi_R}{\sqrt{2}}$$

Tunnelaufspaltung:

$$\Delta E = \frac{\hbar w}{\pi} \cdot \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \cdot \int_a^b |p(x)| dx\right)$$

Tunnelperiode  $\tau = \frac{\hbar}{\Delta E}$ . Transmission  $\propto \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_a^b p(x) dx\right)$ , Tunnelrate  $\Gamma \propto \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_a^b p(x) dx\right)$ .

# 8

## Verschränkung, Indeterminismus, Nichtlokalität

### 8.1 Verschränkung

- Einfachstes Beispiel: Zwei Spin  $\frac{1}{2}$ -Teilchen. Beliebiger Zustand von Teilchen 1 und Teilchen 2:

$$|\psi_1\rangle = c_1 |+\rangle + c_2 |-\rangle \in \varepsilon_1 \quad |\psi_2\rangle = c_3 |+\rangle + c_4 |-\rangle \in \varepsilon_2$$

Produktzustand in  $\varepsilon_1 \otimes \varepsilon_2$ :

$$|\varphi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle = |\psi_1, \psi_2\rangle = c_1 c_3 \cdot |++\rangle + c_1 c_4 \cdot |+-\rangle + c_2 c_3 \cdot |-+\rangle + c_2 \cdot c_4 |--\rangle$$

- Ist Spin-Singulett-Zustand  $\frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (|+-\rangle - |-+\rangle)$  ein Produktzustand? Bestimme  $c_i$ :

$$c_1 \cdot c_3 = 0 \quad c_2 \cdot c_4 = 0 \quad c_1 \cdot c_4 = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad c_2 \cdot c_3 = -\frac{1}{\sqrt{2}}$$

Nicht lösbar, d.h. kein Produktzustand. Produktzustände  $|\varphi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$  beschreiben nur einen Teil der Zustände in  $\varepsilon_1 \otimes \varepsilon_2$ .

- Beliebiger Zustand

$$|\varphi\rangle = \alpha |++\rangle + \beta |+-\rangle + \gamma |-+\rangle + \delta |--\rangle$$

Ist im Allgemeinen kein Produktzustand.

- Definition: Ein verschränkter Zustand ist ein Zustand, der nicht als Produktzustand beschreibbar ist.
- Definition: Ein Zustand heißt maximal verschränkt, wenn aus dem Messergebnis für ein Teilchen zwingend das Messergebnis für das andere Teilchen folgt. Beispiel: Spin-Singulett-Zustand.

### 8.2 Indeterminismus, Nichtlokalität

- Paar verschränkter Teilchen entferne sich auf makroskopische Distanz. Strikte Korrelation der Messergebnisse unabhängig von Entfernung  $\rightarrow$  Nichtlokalität der Quantentheorie
- War der Zustand des Systems statt durch Superposition  $|+-\rangle + |-+\rangle$  in „Wirklichkeit“ durch  $|+-\rangle$  oder  $|-+\rangle$  vorher festgelegt? Quantentheorie: Nein! ( $\rightarrow$  Indeterminismus der Quantentheorie) Erst Messung legt das Ergebnis fest.
- Schrödinger-Katze:  $|\text{kein Zerfall, Katze lebt}\rangle + |\text{Zerfall, Katze tot}\rangle$
- Theorie der verborgenen Parameter (mit lokalen Realismus, Einstein): Zustand des Systems wird durch weitere Parameter eindeutig determiniert. „Verborgen“  $\hat{=}$  nicht direkt messbar.
- Gibt es unterschiedliche Vorhersagen für Experimente? Ja!

(i). Bell'sche Ungleichung macht statistische Aussage für Zwei-Teilchen-Systeme

(ii). GHZ-Zustand für 3-Teilchen-Systeme (1 Messung genügt)

Experiment: Quantentheorie ist richtig. Indeterminismus und Nichtlokalität sind experimentelle Fakten.

### 8.2.1 GHZ-Zustand

- Greenberger, Horne, Zeilinger

$$|\psi\rangle_{\text{GHZ}} := \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (|+++ \rangle_{zzz} + |-- - \rangle_{zzz})$$

- Messung von  $S_z^{(1)}$ : Ergebnis +, dann  $S_z^{(2)}$  und  $S_z^{(3)}$  ebenfalls +. Ergebnis -, dann  $S_z^{(2)}$  und  $S_z^{(3)}$  ebenfalls -.
- Messung von  $S_x, S_y$ : Darstellung in Basis der Eigenzustände  $|\pm\rangle_x$  von  $S_x$  bzw.  $|\pm\rangle_y$  von  $S_y$ .

$$|+\rangle_z = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (|+\rangle_x + |-\rangle_x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (|+\rangle_y + |-\rangle_y)$$

$$|-\rangle_z = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (|+\rangle_x - |-\rangle_x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (|+\rangle_y - |-\rangle_y)$$

Messung von  $S_y^{(1)}, S_y^{(2)}, S_x^{(3)}$ : Schreibe GHZ-Zustand in Basis  $|\pm \pm \pm\rangle_{yyx}$ :

$$\begin{aligned} |\psi\rangle_{\text{GHZ}} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2^3}} \cdot \left( (|+\rangle_y + |-\rangle_y)(|+\rangle_y + |-\rangle_y)(|+\rangle_x + |-\rangle_x) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{i} (|+\rangle_y - |-\rangle_y) \frac{1}{i} (|+\rangle_y - |-\rangle_y) (|+\rangle_x - |-\rangle_x) \right) \\ &= \frac{1}{4} \cdot (2|++-\rangle_{yyx} + 2|+-+\rangle_{yyx} + 2|-++\rangle_{yyx} + 2|---\rangle_{yyx}) \end{aligned}$$

Somit:

$S_y^{(1)}, S_y^{(2)}$	$\Rightarrow S_x^{(3)}$
++	-
+-	+
-+	+
--	-

Die vier Möglichkeiten treten mit gleicher Wahrscheinlichkeit auf.

- Messung von  $S_y^{(1)}, S_x^{(2)}, S_y^{(3)}$  und  $S_x^{(1)}, S_y^{(2)}, S_y^{(3)}$ : Analoge Rechnung.
- Messung von  $S_x^{(1)}, S_x^{(2)}, S_x^{(3)}$ :

$$|\psi\rangle_{\text{GHZ}} = \frac{1}{2} \cdot (|+++ \rangle_{xxx} + |+- - \rangle_{xxx} + |-+ - \rangle_{xxx} + |-- + \rangle_{xxx})$$

d.h. von den 8 prinzipiellen Möglichkeiten treten nur 4 auf.

- Vorhersage nach Theorie verborgener Parameter:
  - Jeder Spin sei durch einen Parameter  $x_i = \pm 1$  für  $i \in \{1, 2, 3\}$  charakterisiert. Ebenso durch  $y_i, z_i$ .



– Man erhält:

$$S_y^{(1)} S_y^{(2)} S_x^{(3)} : y_1 \cdot y_2 \cdot x_3 = -1$$

$$S_y^{(1)} S_x^{(2)} S_y^{(3)} : y_1 \cdot x_2 \cdot y_3 = -1$$

$$S_x^{(1)} S_y^{(2)} S_y^{(3)} : x_1 \cdot y_2 \cdot y_3 = -1$$

Multiplikation sämtlicher Terme gibt

$$(x_1 \cdot x_2 \cdot x_3) \cdot \underbrace{(y_1^2 \cdot y_2^2 \cdot y_3^2)}_1 = -1$$
$$\Rightarrow x_1 \cdot x_2 \cdot x_3 = -1$$

Damit mögliche Messergebnisse für  $S_x^{(1)}, S_x^{(2)}, S_x^{(3)}$ :

$$|---\rangle \quad |-++\rangle \quad |+-+\rangle \quad |++-\rangle$$

d.h. genaues Gegenteil von Vorhersage der Quantentheorie.

- Experiment: 2000, Zeiliger mit Photonen. Ergebnis: 85 Prozent der Messungen am GHZ-Zustand liefern Ergebnis der Quantentheorie.
- Somit: Ausschluss der Theorie der verborgenen Parameter, also Bestätigung der Quantentheorie (Indeterminismus, Nichtlokalität)