

# Vorlesung Quantenmechanik (I)

---

Version vom SS 2023\*

Universität Mainz  
Institut für Physik, FB 08  
Theorie der kondensierten Materie  
Prof. Dr. Friederike Schmid<sup>†</sup>

Inhalt: Einleitung: Experimentelle Hinweise auf die Quantenmechanik  
Wellenmechanik  
  Grundkonzepte  
  Lösungen der Schrödingergleichung  
  Zweikörperproblem und Wasserstoffatom  
Allgemeine Formulierung der Quantenmechanik  
  Der mathematische Rahmen der Quantenmechanik  
  Elementare Prinzipien der Quantenmechanik  
  Anwendung: Der harmonische Oszillator  
  Symmetrien  
  Identische Teilchen  
Quantenmechanik des Drehimpulses  
  Allgemeiner Drehimpuls, Spin, Addition von Drehimpulsen  
  Anwendungsbeispiel:  $H_2$ -Molekül und Austauschwechselwirkung  
Näherungsverfahren  
  Variationsverfahren  
  Stationäre und zeitabhängige Störungsrechnung  
Die Pfadintegralformulierung der Quantenmechanik  
  Pfadintegral, Propagator und Eichinvarianz  
  Anwendung: Der Aharonov-Bohm Effekt  
Verschränkte Zustände  
  Das EPR-Paradox und die Bellsche Ungleichung  
  Praktische Anwendung: Quanteninformatik

---

\*Letzte Änderung der PDF-Datei am 31.05.2023

<sup>†</sup>Staudingerweg 9, 03-523, Tel. 06131/3920365, <Friederike.Schmid@uni-mainz.de>

## Einige empfohlene Bücher

- F. Schwabl: *Quantenmechanik*. (Springer) (viele Beispiele)
- J. J. Sakurai: *Modern Quantum Mechanics*. (Addison Wesley) (ausführlich, modern)
- L. Ballentine: *Quantum Mechanics - A Modern Development*. (World Scientific) (originell)
- C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloe: *Quantenmechanik* Bd. 1 und 2. (de Gruyter) (ausführlich, klassisch)
- A. Messiah: *Quantenmechanik* Bd. 1 und 2. (de Gruyter)
- L. D. Landau, E. M. Lifshitz: *Quantenmechanik*. (Vieweg)
- E. Fick: *Einführung in die Grundlagen der Quantenmechanik*. (Aula-Verlag)
- W. Greiner: *Quantenmechanik* Bd. 1. (Harri Deutsch)
- D. J. Griffiths *Introduction to Quantum Mechanics*. (Prentice Hall)
- W. Nolting *Quantenmechanik* Bd. 1 und 2. (Vieweg) (viele Aufgaben)
- H. Haken, H. C. Wolf, *Atom- und Quantenphysik*. (Springer) (gute Einführung)
- John von Neumann, *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics* (Klassiker)
- J. Audretsch *Verschränkte Systeme: Die Quantenphysik auf neuen Wegen*. (Wiley) (aktuelle Themen zu Grundlagen der Quantenmechanik)
- J. Audretsch *Verschränkte Welt*. (Wiley) (populärwissenschaftlich)

© Copyright 2003 Friederike Schmid

Die Verteilung dieses Dokuments in elektronischer oder gedruckter Form ist gestattet, solange sein Inhalt einschließlich Autoren- und Copyright-Angabe unverändert bleibt und die Verteilung kostenlos erfolgt, abgesehen von einer Gebühr für den Datenträger, den Kopiervorgang usw.

Das im Original handschriftlich vorliegende Skript entspricht dem Tafelbild bei der Vorlesung. Es wurde 1:1 mit L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X umgesetzt<sup>‡</sup>.

---

<sup>‡</sup>von Christhard Schmid, <christhardschmid@gmx.de>, als Gratulation zum Karl Peter Grottemeyer-Preis 2003 der Westfälisch-Lippischen Universitätsgesellschaft (<http://www.uni-bielefeld.de/ugb/Foerderung/GrottemeyerPreis.html>), der im Zusammenhang mit dieser Vorlesung verliehen wurde

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Experimentelle Hinweise</b>	<b>1</b>
1.1	„Historische“ Experimente . . . . .	1
1.1.1	Hinweise auf diskrete Strukturen in Atomen . . . . .	1
1.1.2	Hinweise darauf, dass Licht aus Teilchen besteht . . . . .	3
1.1.3	Hinweise darauf, dass Materie Wellencharakter hat . . . . .	4
1.2	„Modernere“ Experimente . . . . .	5
1.2.1	Zum Wellencharakter der Materie . . . . .	5
1.2.2	Zum Teilchencharakter des Lichts . . . . .	7
1.3	Wissensfragen . . . . .	8
<b>2</b>	<b>Wellenmechanik</b>	<b>9</b>
2.1	Grundkonzepte . . . . .	9
2.1.1	De Broglie-Wellen („freie Teilchen“) . . . . .	10
2.1.2	Mathematischer Einschub . . . . .	15
2.1.3	Die Schrödingergleichung . . . . .	19
2.1.4	Interpretation von Materiewellen . . . . .	21
2.1.5	Folgerungen . . . . .	26
2.2	Lösungen der Schrödingergleichung . . . . .	30
2.2.1	Die stationäre (zeitunabhängige) Schrödingergleichung . . . . .	30
2.2.2	Lösungen der stationären Schrödingergleichung in einer Dimension . . . . .	31
2.3	Zweikörperproblem und Wasserstoffatom . . . . .	38
2.3.1	Reduktion auf Einteilchenproblem . . . . .	38
2.3.2	Reduktion auf eindimensionales Problem . . . . .	40
2.3.3	Einschub: Eigenfunktionen des Bahndrehimpulses . . . . .	41
2.3.4	Coulombpotential und Wasserstoffatom . . . . .	43
2.4	Wissensfragen . . . . .	45
<b>3</b>	<b>Allgemeine Formulierung</b>	<b>47</b>
3.1	Mathematischer Rahmen der Quantenmechanik . . . . .	47
3.1.1	Der Hilbertraum . . . . .	47
3.1.2	Lineare Operatoren . . . . .	51
3.1.3	Das Eigenwertproblem linearer Operatoren . . . . .	54
3.2	Elementare Prinzipien der Quantenmechanik . . . . .	56
3.2.1	„Postulate“ der Quantenmechanik . . . . .	56
3.2.2	Dynamische Entwicklung abgeschlossener Systeme . . . . .	60

3.2.3	Offene Systeme und Messprozess . . . . .	66
3.3	Harmonischer Oszillator und Leiteroperatoren . . . . .	72
3.3.1	Berechnung der (Energie-)Eigenwerte von $H$ . . . . .	72
3.3.2	Energieeigenvektoren in Ortsdarstellung (Schrödingerbild) . . . . .	74
3.3.3	Operatoren im Heisenbergbild . . . . .	74
3.4	Symmetrien . . . . .	75
3.4.1	Allgemeine Vorüberlegungen . . . . .	75
3.4.2	Homogenität von Raum und Zeit und Isotropie . . . . .	77
3.4.3	Vorläufige Zusammenfassung und Verallgemeinerung: Symmetrien und Erhaltungsgrößen . . . . .	81
3.4.4	Invarianz unter speziellen Galilei-Transformationen . . . . .	82
3.4.5	Diskrete Symmetrien . . . . .	84
3.5	Identische Teilchen . . . . .	87
3.5.1	Ununterscheidbarkeit . . . . .	87
3.5.2	Symmetrisierungspostulat . . . . .	89
3.6	Wissensfragen . . . . .	92
<b>4</b>	<b>Quantenmechanik des Drehimpulses</b> . . . . .	<b>95</b>
4.1	Wiederholung: Bahndrehimpuls . . . . .	95
4.1.1	Definition . . . . .	95
4.1.2	Eigenwerte und Eigenfunktionen . . . . .	95
4.1.3	Darstellung in Polarkoordinaten . . . . .	96
4.2	Allgemeiner Drehimpuls . . . . .	97
4.2.1	Definition . . . . .	97
4.2.2	Eigenwerte und Eigenvektoren . . . . .	97
4.3	Der Spin . . . . .	99
4.3.1	Experimenteller Hinweis: Der Stern-Gerlach-Versuch . . . . .	99
4.3.2	Beschreibung von Teilchen mit Spin . . . . .	99
4.3.3	Nichtrelativistischer Spin im elektromagnetischen Feld - Pauligleichung . . . . .	101
4.3.4	Wirkung von Drehungen auf Spinzustände . . . . .	102
4.3.5	Drehgruppe und spezielle unitäre Gruppe . . . . .	104
4.4	Addition von Drehimpulsen . . . . .	105
4.4.1	Problemstellung . . . . .	105
4.4.2	Additionstheorem . . . . .	105
4.4.3	Lösung des Problems: Clebsch-Gordan-Koeffizienten . . . . .	106
4.4.4	Beispiele . . . . .	108
4.5	Tensoren und Wigner-Eckart Theorem . . . . .	109
4.5.1	Sphärische Tensoroperatoren . . . . .	109
4.5.2	Wigner-Eckart Theorem . . . . .	111
4.6	Anwendungsbeispiele . . . . .	112
4.6.1	Helium-Atom . . . . .	112
4.6.2	Wasserstoffmolekül und Austauschwechselwirkung . . . . .	113
4.7	Wissensfragen . . . . .	115

<b>5</b>	<b>Näherungsverfahren</b>	<b>117</b>
5.1	Stationäre Störungsrechnung . . . . .	117
5.1.1	Nichtentarteter Fall: Eigenwert $E_n^0$ nicht entartet . . . . .	119
5.1.2	Entarteter Fall . . . . .	120
5.1.3	Quasientarteter Fall . . . . .	122
5.1.4	Anwendungsbeispiele . . . . .	123
5.2	Zeitabhängige Störungsrechnung . . . . .	126
5.2.1	Wechselwirkungsbild (vergl. 3.2.2.4 S.65) . . . . .	126
5.2.2	Dyson-Reihe . . . . .	126
5.2.3	Anwendung: Störungstheorie erster Ordnung . . . . .	127
5.2.4	Beispiel: Wechselwirkung von Atomen mit klassischem elektromagnetischem Feld . . . . .	130
5.2.5	Störungstheorie zweiter Ordnung für konstante Störung: Lebensdauer und Linienbreite . . . . .	131
5.3	Nichtperturbative Näherungsverfahren . . . . .	133
5.3.1	Variationsverfahren . . . . .	133
5.3.2	Adiabatische Näherung und Berry-Phase . . . . .	134
5.4	Wissensfragen . . . . .	138
<b>6</b>	<b>Pfadintegralformulierung</b>	<b>139</b>
6.1	Pfadintegral und Propagator . . . . .	139
6.2	Eichinvarianz . . . . .	142
6.2.1	Allgemeine Eichtransformationen . . . . .	142
6.2.2	Eichinvarianz und elektromagnetische Felder . . . . .	143
6.3	Anwendung: Der Aharonov-Bohm Effekt . . . . .	144
6.4	Pfadintegral und Störungstheorie . . . . .	145
<b>7</b>	<b>Verschränkte Zustände</b>	<b>147</b>
7.1	Das EPR-Paradox und die Bellsche Ungleichung . . . . .	148
7.1.1	EPR-Paradox . . . . .	148
7.1.2	Bellsche Ungleichung (1964) . . . . .	149
7.1.3	Bohmsche Mechanik . . . . .	150
7.2	Anwendung: Quanteninformatik . . . . .	151
7.2.1	Quanteninformation . . . . .	151
7.2.2	Quantenkryptographie . . . . .	151





# Kapitel 1

## Einleitung: Experimentelle Hinweise auf die Quantentheorie

© Copyright 2020 Friederike Schmid<sup>1</sup>

### 1.1 „Historische“ Experimente

(„historisch“: Aus der Zeit, in der die Quantentheorie entwickelt wurde)

#### 1.1.1 Hinweise auf diskrete Strukturen in Atomen

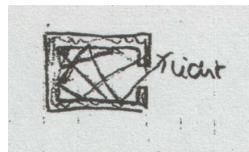
##### a) Atomspektren (19. Jahrhundert, Kirchhoff und Bunsen)

Jedes Element hat ein charakteristisches Emissionsspektrum.

Es werden bestimmte Frequenzlinien emittiert  
(großes Rätsel der Jahrhundertwende)

##### b) Hohlraumstrahlung und Plancksches Strahlungsgesetz (1900)

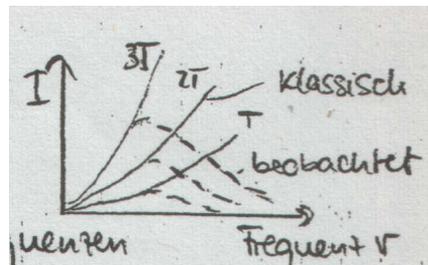
Hohlraum:



(Schwarzkörperstrahlung)

Klassisch erwartete Strahlungsintensität (Rayleigh-Jeans):  $dI \propto \nu^2 d\nu$

Tatsächlich: Abknicken bei hohen Frequenzen



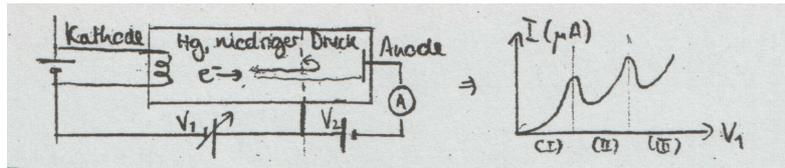
<sup>1</sup>Prof. Dr. Friederike Schmid, Vorlesung Quantenmechanik (I), Universität Mainz, SS 2023.  
Letzte Änderung der PDF-Datei am 31.05.2023.

Erklärung durch Plancksche Hypothese:

- Licht wird in Quanten der Energie  $E = h \cdot \nu$  emittiert und absorbiert.  
 $h =$  Plancksche Konstante:  $h = 6.6 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$
- Zwischen Strahlung und Hohlraum besteht thermisches Gleichgewicht.

$\leadsto$  Plancksche Strahlungsformel:  $dI \propto \frac{\nu^3}{e^{h\nu}-1} d\nu$

c) Franck-Hertz-Versuch (1914)

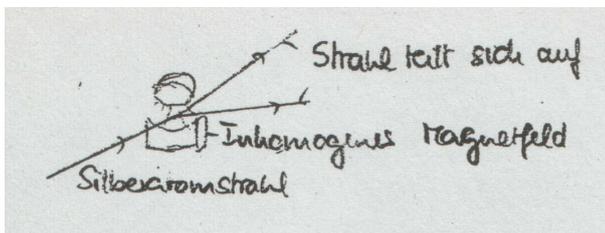


Nachweis stationärer Atomzustände. Interpretation:

- Bereich (I): Je höher die Spannung, desto mehr Elektronen gewinnen genug kinetische Energie, dass sie die Anode erreichen können und nicht am Gitter abgefangen werden.  
 $\leadsto$  Verluste durch elastische Stöße.
- Bereich (II): Einige Elektronen können einen Teil der Energie - ein festgelegtes Quantum - in inelastischem Stoß an Hg-Atome abgeben. Verbleibende kinetische Energie so klein, dass sie abgefangen werden.  
 $\leadsto$  Verluste durch einen inelastischen Stoß.
- Bereich (III): Verluste durch zwei inelastische Stöße.
- etc.

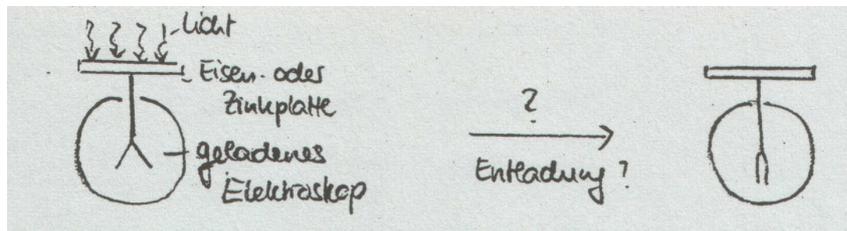
**Folgerung:** Atome nehmen Energie inelastisch nur in festen Quanten auf.

d) Stern-Gerlach-Versuch (1921)



Silberatomstrahl teilt sich im inhomogenen Magnetfeld auf. „Richtungsquantelung“ des magnetischen Moments. (Kommt in Kapitel 4 S.95 nochmal)

## 1.1.2 Hinweise darauf, dass Licht aus Teilchen besteht

a) Photoeffekt (Hallwachs 1900, Erklärung nach Einstein 1905)

Beobachtungen (Hallwachs)

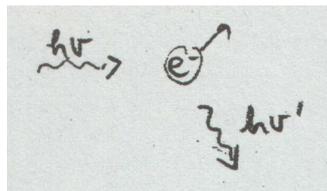
- Falls Elektroskop positiv geladen  $\leadsto$  Licht bewirkt nichts
- Falls Elektroskop negativ geladen:
  - sichtbares Licht, egal wie intensiv, bewirkt nichts
  - UV-Licht auf Eisenplatte bewirkt nichts
  - Aber: Bereits schwacher UV-Strahl auf Zink entlädt Elektroskop

Interpretation (Einstein)

- Licht besteht aus Quanten der Energie  $E = h \cdot \nu$  (Photonen)
- Lichtphotonen treten einzeln mit Elektronen in Wechselwirkung
- Zum Freisetzen eines Elektrons ist Austrittsenergie  $V_c$  notwendig. Falls Energie des Lichtquants ausreicht, das Elektron freizusetzen ( $E > V_c$ ), entweicht es (das ist der Fall bei UV-Licht auf Zink). Andernfalls bleibt das Elektron gebunden (und die Energie wird anderweitig dissipiert).

b) Compton-Effekt (1923)

Licht ändert Frequenz bei der Streuung an Elektronen.



Streuprozess mit Energie- und Impulserhaltung

Energie des Photons:  $E = h \cdot \nu$

Impuls des Photons:  $p = h/\lambda$

$\leadsto$  Damit kann Compton-Effekt quantitativ verstanden werden.

NB: Nach der speziellen Relativitätstheorie müssen Teilchen mit Lichtgeschwindigkeit masselos sein. Das sollte natürlich auch für Photonen zutreffen.

$\leadsto$  Viererimpuls  $(\frac{E}{c}, \vec{p})$  hat Norm Null:  $p^2 - (\frac{E}{c})^2 = 0$

$\leadsto p^2 = \frac{E^2}{c^2} = \frac{(h\nu)^2}{c^2} = \frac{h^2}{\lambda^2} \quad \checkmark$

**Fazit** aus 1.1.2 S.3:

Lichtwellen, bzw. allgemeine elektromagnetische Wellen verhalten sich unter bestimmten Umständen so, als bestünden sie aus Teilchen. Andererseits sind es natürlich auch Wellen (d.h., sie zeigen Interferenzen etc.)

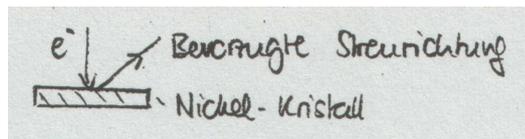
**Bemerkung:** Streng genommen ist weder der Photoeffekt noch der Compton-Effekt wirklich ein „Beweis“ für den Teilchencharakter des Lichts. Beide können auch innerhalb einer (Quanten-)Theorie erklärt werden, in der elektromagnetische Wellen noch als reine Welle behandelt werden. Dennoch gehören diese Versuche hierher, weil sie für die Entwicklung der Quantentheorie sehr wichtig waren.

**1.1.3 Hinweise darauf, dass Materie Wellencharakter hat**

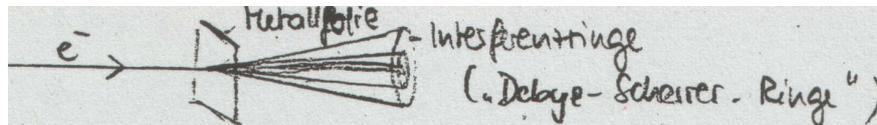
Zunächst: von de Broglie 1924 postuliert (in seiner Doktorarbeit!).

Beziehungen  $E = h \cdot \nu$  und  $p = h/\lambda$  sollen für alle Teilchen gelten.

Experimentelle Hinweise:

a) Davisson-Germer (1927)

„Bragg-Streuung“  
von Elektronen an  
einem Nickel-Kristall

b) Thomson (1927)

„Debye-Scherrer-Ringe“ von Elektronen hinter einer Metallfolie

↪ Interferenzen bei Streuung von Elektronen an periodischen Strukturen (Kristallen).

**Fazit** von 1.1.2 S.3, 1.1.3 S.4: „Welle-Teilchen-Dualismus“

Je nach Experiment haben Materie oder Licht entweder Teilchen- oder Wellencharakter.

**Nutzen** dieser Betrachtungsweise:

Erklärt Experimente, löst Probleme der Atomspektren (siehe Kapitel 2 S.9)

**Nachteil:** Interpretation/Deutung bis heute umstritten.

Man stößt auf Widersprüche, die nur schwer (oder gar nicht) aufgelöst werden können (siehe z.B. Kapitel 3 S.47).

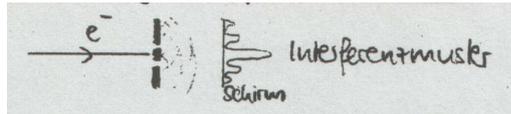
## 1.2 „Modernere“ Experimente

Zahlreich, hier nur ausgewählte Beispiele

### 1.2.1 Zum Wellencharakter der Materie

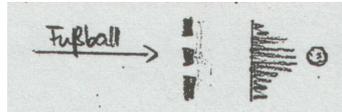
Interferenz von Fullerenen (Arndt, Nain, ... Zeilinger 1999)

Vorbemerkung: Doppelspaltversuch mit Elektronen



Frage: Könnte man denselben Versuch mit Fußbällen machen?

Fußball → Impuls  $p = h/\lambda$  groß → Wellenlänge  $\lambda$  klein



Interferenzmuster wird sehr viel feiner als Fußball sein

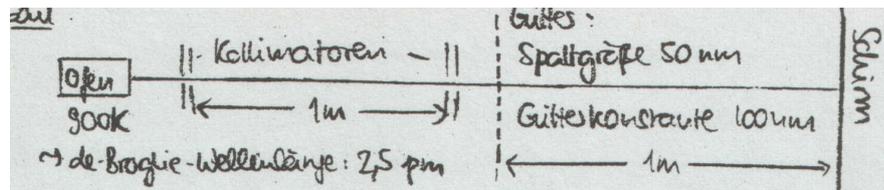
→ praktisch vermutlich nicht zu sehen

Nun zu Zeilingers Experiment (1999)

- nicht gerade Fußbälle, aber  $C_{60}$ -Moleküle
- 60 Kohlenstoffatome, Durchmesser 1 nm
- 174 interne Schwingungs- und Rotationsmoden
- Masse nicht eindeutig (Kohlenstoffisotope)



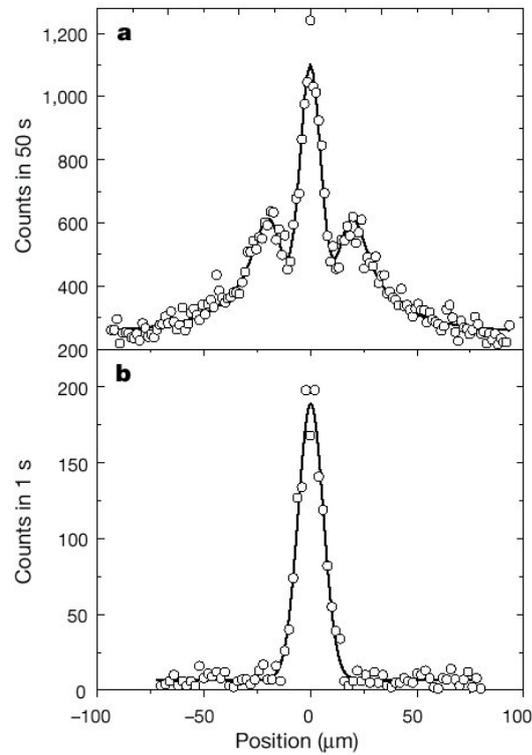
Aufbau:



Entscheidend: Kollimatoren → Strahl hat Divergenz von  $10 \mu\text{rad}$   
 Zahlenvergleich:  $C_{60}$  (1 nm): Schlitzgröße (50 nm)  $\hat{=}$  Fußball : Tor.

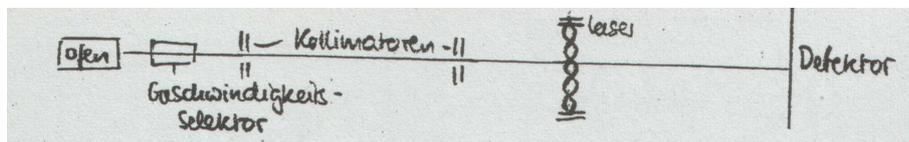
Auf dieser Skala wäre Abstand Quelle-Detektor  $\hat{=}$  Abstand Erde-Mond.

Ergebnis: Interferenzmuster (a: Mit Gitter, b: Ohne Gitter)



Späteres Experiment (selbe Gruppe, 2001)

Streuung von  $C_{60}$  an stehenden Lichtwellen



→ Interferenzbilder

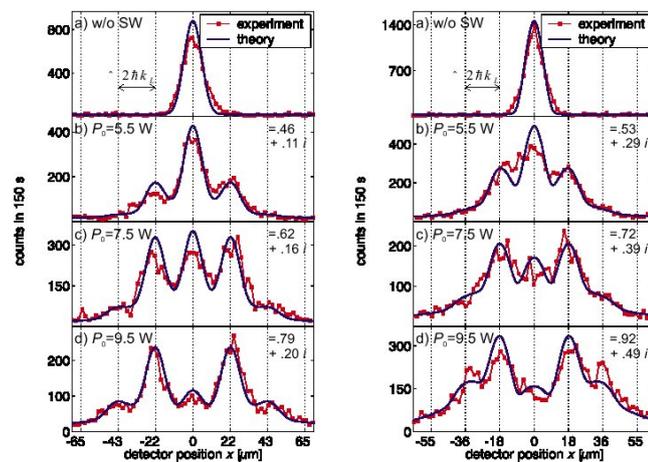
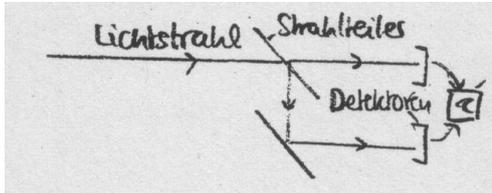


Abbildung 6.5.: Interferenz von  $C_{60}$  (links) und  $C_{70}$  an der stehenden Lichtwelle für verschiedene Laserleistungen. Oben jeweils zum Vergleich das Profil des ungebeugten Molekülstrahles.

### 1.2.2 Zum Teilchencharakter des Lichts

#### Photonen-Korrelations-Experimente

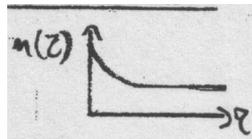
Aufbau (Hanbury, Brown, Twiss 1956)



Korrelator misst die Anzahl  $n(\tau)$  der Photonen, die im Abstand  $\tau$  in Detektoren registriert werden.

#### Beobachtungen

- Stellares Licht (auch sonst häufig)

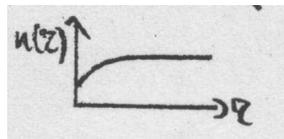


„Photon bunching“: Photonen korreliert, treffen häufig zusammen ein.

Erklärung: Bose-Einstein-Statistik (siehe Kapitel 3 S.47)

Aber: „Klassische“ Erklärung wäre auch möglich (fluktuierendes elektromagnetisches Feld)

- Fluoreszenz einfacher Atome (auch künstlicher „Atome“: Quantendots)



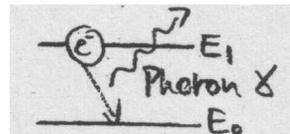
„Photon antibunching“  
(Kimble, Dagenais, Mandel 1977)

kann klassisch nicht erklärt werden

~> gilt endlich als Nachweis der Teilchennatur des Lichts.

Erklärung im Photonenbild ganz einfach:

Atom  $\hat{=}$  Zwei-Niveau-System



Fluoreszenz  $\rightarrow$  angeregtes Atom geht von Energie  $E_1$  zu  $E_0$  über, emittiert dabei ein Photon.

Nachdem das geschehen ist, kann nicht sofort ein zweites emittiert werden.

### 1.3 Wissensfragen

1. Erläutern Sie ein Experiment, daß auf den Teilchencharakter von Licht hindeutet.
2. Erläutern Sie ein Experiment, daß auf den Wellencharakter von Materie hindeutet.
3. Was ist ein Photon? Welche Energie und welchen Impuls hat ein Photon?
4. Welche Bedeutung hat die Plancksche Konstante und wie groß ist sie?

# Kapitel 2

# Wellenmechanik

© Copyright 2020 Friederike Schmid<sup>1</sup>

## 2.1 Grundkonzepte

### Allgemeine Vorbemerkungen

Experimente legen nahe:

- (i) Licht (klassische Welle) hat Teilchencharakter
- (ii) Materie (klassische Teilchen) hat Wellencharakter

In diesem Kapitel wird Aspekt (ii) behandelt

↪ historischer (klassischer) Zugang zur Quantenmechanik

- Daran kann man sich bereits die wichtigsten Konzepte der Quantenphysik erarbeiten.
- Man kann schon sehr viel ausrechnen.
- Vergleichsweise anschaulich

In Kapitel 3 S.47: Verallgemeinerung der Konzepte aus Kapitel 2 S.9, wodurch Quantentheorie zu einer sehr mächtigen und vielseitigen Theorie wird.

Spätere Kapitel: Anwendungen

Aspekt (ii) (Teilchencharakter des Lichts) wird in dieser Vorlesung nicht mehr behandelt: Gegenstand der Quantenoptik.

Problem: Photonenzahl nicht erhalten ↪ brauche eine Beschreibung, die Teilchenerzeugung und Teilchenvernichtung zulässt

↪ das leistet erst die Quantenfeldtheorie, ist hier noch nicht vorgesehen.

---

<sup>1</sup>Prof. Dr. Friederike Schmid, Vorlesung Quantenmechanik (I), Universität Mainz, SS 2023. Letzte Änderung der PDF-Datei am 31.05.2023.

Weitere Einschränkungen in diesem Kapitel:

- Betrachte im allgemeinen nur ein Teilchen  
 $\leadsto$  1-3 dimensionale Welle, je nach Raumdimension  
 Es ist zwar auch innerhalb der Wellenmechanik möglich, mehrere Teilchen zu behandeln. Trotzdem sollen Mehrteilchensysteme erst in Kapitel 3 S.47 behandelt werden.  
 (Ausnahme: Kapitel 2.3 S.38  $\rightarrow$  Zweikörperproblem)
- Nichtrelativistisch  
 (Relativistisch  $\rightarrow$  siehe Quantenmechanik II)

Fragen:

- Beschreibung der Wellen? Entwicklungsgesetze?  
 ( $\rightarrow$  Schrödingergleichung)
- Interpretation der Wellen?  
 ( $\rightarrow$  „Wahrscheinlichkeitsinterpretation“)

### 2.1.1 De Broglie-Wellen („freie Teilchen“)

#### 2.1.1.1 Einstein-de Broglie-Relationen und ebene Wellen

Ansatz von de Broglie:

Materieteilchen lassen sich als Welle beschreiben

Für freie Materieteilchen gelten dieselben Relationen wie für Licht:

$$\boxed{E = h \cdot \nu} \quad \text{und} \quad \boxed{p = h/\lambda} \quad \text{mit} \quad \boxed{h = 6.6 \cdot 10^{-34} \text{ Js}}$$

In Zukunft andere Schreibweise: Statt  $\nu$  (Frequenz) und  $\lambda$  (Wellenlänge) benutze  $\omega = 2\pi\nu$  („Winkelgeschwindigkeit“ des Phasenwinkels) und Wellenvektor  $\vec{k}$ : zeigt in Richtung  $\vec{p}$ , Betrag  $|\vec{k}| = 2\pi/\lambda$

$$\Rightarrow \boxed{E = \hbar\omega} \quad \text{und} \quad \boxed{\vec{p} = \hbar\vec{k}} \quad \text{mit} \quad \boxed{\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.05 \cdot 10^{-34} \text{ Js}}$$

Zusammenhang zwischen  $\omega$  und  $k$  folgt aus  $\boxed{E = p^2/2m}$

$$\Rightarrow \boxed{\omega(\vec{k}) = \frac{\hbar k^2}{2m}}$$

(Alternativ kann man auch  $E = \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2} \approx mc^2 + p^2/2m$  zugrunde legen. Zusatzterm  $mc^2$  stört nicht weiter.)

Folgerung: Ein Teilchen mit Impuls  $\vec{p}$  und Energie  $E$  hat die Wellenfunktion

$$\boxed{\psi(\vec{r}, t) = \mathcal{N} e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} = \mathcal{N} e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - Et)}$$

$\leadsto$  Gleichung für eine ebene Welle

NB: Unendlich ausgedehnt, keine räumliche Beschränkung!

### 2.1.1.2 Superpositionsprinzip und Wellenpakete

Eine Theorie, in der alle Teilchenwellen unendlich ausgedehnt sind, kann offenbar die Realität nicht befriedigend beschreiben.

Deshalb nächster Schritt: Wellenfunktion kann auch eine beliebige Überlagerung (lineare Kombination) ebener Wellen sein  $\leadsto$  Superpositionsprinzip

$\Rightarrow$  Allgemeine Form einer Wellenfunktion

$$\psi(\vec{r}, t) = \int d\vec{k} e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} f(\vec{k}) = \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar^d}}}_{\substack{\text{Vorfaktor} \\ d: \text{Raumdimension}}} \int d\vec{p} e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - Et)} \tilde{\psi}_0(\vec{p})$$

Vorfaktor: hier zunächst willkürlich. Motivation wird später ersichtlich. Dabei gilt nach wie vor  $\omega = \omega(\vec{k}) = \hbar k^2/2m$  bzw.  $E = E(p) = p^2/2m$ .

Vorteil: Eine solche Wellenfunktion kann räumlich lokalisiert sein.

(Man spricht dann von einem „Wellenpaket“.)

Nachteil: Impuls  $p$  bzw. Energie  $E$  nicht mehr eindeutig bestimmt.

$\rightarrow$  Unschärferelation: Ort und Impuls können nicht gleichzeitig scharf definiert sein! (mehr dazu in 2.1.5 S.26)

NB: Man kann zeigen  $\int d\vec{r} |\psi(\vec{r}, t)|^2 = \int d\vec{p} |\tilde{\psi}_0(\vec{p})|^2$  unabhängig von  $t$ !

(Übungsaufgabe. Brauche dazu Eigenschaften der Fouriertransformation, siehe 2.1.2.2 S.16)

Deutung des Wellenpakets (Max Born):

$\psi \hat{=}$  „Führungsfeld“, bestimmt Wahrscheinlichkeitsdichte  $|\psi|^2$

$|\psi(\vec{r}, t)|^2 d\vec{r}$  gibt Wahrscheinlichkeit an, das Teilchen zur Zeit  $t$  innerhalb eines infinitesimalen Volumens  $d\vec{r}$  um  $\vec{r}$  zu finden.

( $\leadsto$  Wahrscheinlichkeit, es in makroskopischem Volumen  $V$  zu finden:  
 $P_V = \int_V d\vec{r} |\psi(\vec{r}, t)|^2$ )

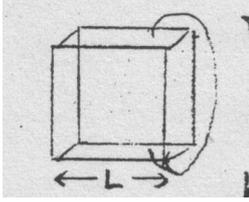
### 2.1.1.3 Normierung von de Broglie-Wellen

Wahrscheinlichkeitsdeutung  $\leadsto \psi$  normiert:  $\int_{\text{ganzer Raum}} d\vec{r} |\psi(\vec{r}, t)|^2 = 1$

Problem: Beinhaltet natürlich  $\int d\vec{r} |\psi|^2 < \infty$  ( $\psi$  quadratintegabel).

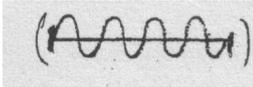
Das ist aber bei ebenen Wellen,  $\psi = \mathcal{N} e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - Et)}$ , nicht erfüllt.

$\leadsto$  Ebene Wellen nicht normierbar;  
 trotzdem würden wir sie gern behalten.

Abhilfemöglichkeiten:**(i) Praktische Variante: Boxnormierung**

Funktionen sind nur innerhalb eines sehr großen, aber endlichen Volumens  $V$  definiert, z.B. Würfel mit Kantenlänge  $L$  und periodischen Randbedingungen (d.h. gegenüberliegende Seiten werden miteinander identifiziert).

Dann ist Normierung kein Problem:  $\psi = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - Et)}$



Aber: Nicht mehr alle Impulse möglich, sondern nur noch die, deren Komponenten  $p_x, p_y, p_z$  ganzzahlige Vielfache von  $\hbar \frac{2\pi}{L}$  sind. Wenn  $L$  sehr groß ist, macht das nichts.

NB: Wenn periodische Randbedingungen zu unrealistisch sind, der kann auch andere wählen  $\leadsto$  kaum Unterschied, da der Einfluss des Randes auf Verteilungsdichte der erlaubten Impulse  $\vec{p}$  im Bereich großer  $|\vec{p}|$  sehr gering ist.

**(ii) Formalere Variante: Normierung auf  $\delta$ -Funktion**

(Kurze Einführung in  $\delta$ -Funktion siehe Kapitel 2.1.2 S.15)

Normiere  $\psi_{\vec{p}} = \mathcal{N} e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - Et)}$  so, dass  $\int d\vec{r} \psi_{\vec{p}}^*(\vec{r}, t) \psi_{\vec{p}'}(\vec{r}, t) = \delta(\vec{p} - \vec{p}')$

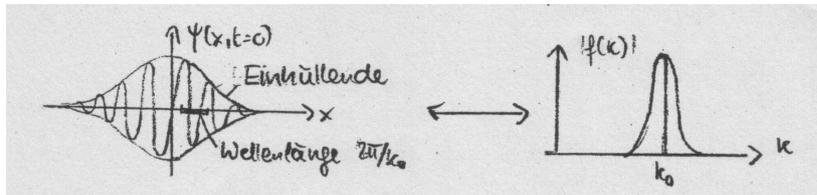
$\leadsto \mathcal{N} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar^d}}$  (d=Raumdimension) (siehe dazu 2.1.2.1 S.15, Ende)

**2.1.1.4 Zeitliche Entwicklung von de Broglie Wellenpaketen**

Der Einfachheit halber in einer Dimension

Betrachte Wellenpaket, das zur Zeit  $t = 0$  räumlich lokalisiert ist.

Wellenvektor  $k \approx k_0 \rightarrow$  Impuls  $p \approx p_0 = \hbar k_0$



Zur Zeit  $t = 0$ :  $\psi(x, t = 0) = \int dk e^{ikx} f(k)$

$\leadsto$  spätere Entwicklung:  $\psi(x, t) = \int dk e^{i(kx - \omega(k)t)} f(k)$  mit  $\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$

Was bedeutet das konkret?

(i) Phasengeschwindigkeit (Geschwindigkeit der „Wellenberge“)

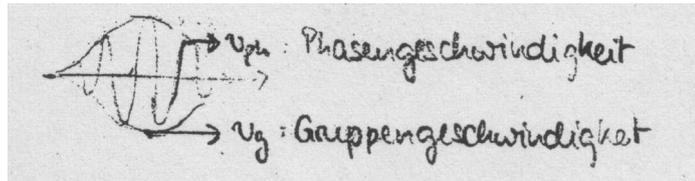
Punkte gleicher Phase  $\leadsto (kx - \omega(k)t) \equiv \text{const} \leadsto dx/dt = \omega/k$ .

$\Rightarrow$  Phasengeschwindigkeit  $v_{ph} = \omega/k \approx \hbar k_0/2m = p_0/2m$

$\leadsto$  unterscheidet sich immer um Faktor 1/2 vom klassischen Wert  $p_0/m$

$\leadsto$  zunächst irritierend, denn klassische Mechanik sollte ja in bestimmten Grenzfällen richtig sein.

Aber: Phasengeschwindigkeit ist für die Geschwindigkeit des Wellenpakets de facto nicht maßgeblich. Was zählt, ist die Geschwindigkeit der Einhüllenden = Gruppengeschwindigkeit.

(ii) Gruppengeschwindigkeit  $v_g$  (Geschwindigkeit der Einhüllenden)

Analysiere genauer  $\psi(x, t) = \int dk e^{i(kx - \omega(k)t)} f(k)$ :

Verteilung  $f(k)$  stark gepeakt bei  $k = k_0$

$\leadsto k \approx k_0$  im relevanten Bereich

$\rightarrow$  Entwickle  $\omega(k) \approx \omega(k_0) + \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} (k - k_0) + \dots$

$$\Rightarrow \psi(x, t) = \underbrace{e^{i(k_0 x - \omega(k_0) t)}}_{\text{Ebene Welle}} \underbrace{\int dk e^{i(k - k_0)(x - \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} t) + \dots} f(k)}_{\text{Einhüllende } E(x, t)}$$

mir  $E(x, t) \approx \int d\xi e^{i\xi(x - \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} t)} f(k_0 + \xi) =: \hat{E}(x - \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} t)$

$\Rightarrow$  Einhüllende hängt vor allem von  $(x - \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} t)$  ab

$\leadsto$  bewegt sich mit Geschwindigkeit  $v_g = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0}$  fort.

$\Rightarrow$  Gruppengeschwindigkeit  $v_g = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} = \frac{\hbar k_0}{m} = \frac{p_0}{m}$

passt zur klassischen Geschwindigkeit

(iii) Zeitliche Entwicklung der Form der Einhüllenden

Wird von höheren Termen in der Entwicklung  $\omega(k)$  bestimmt:

$$\omega(k) \approx \omega(k_0) + \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} (k - k_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2\omega}{dk^2} \right|_{k_0} (k - k_0)^2 + \dots$$

Falls sie nicht verschwinden ( $\left. \frac{d^2\omega}{dk^2} \right|_{k_0} \neq 0$  etc.; Hier  $\left. \frac{d^2\omega}{dk^2} \right|_{k_0} = \frac{\hbar}{m} \neq 0$ )

$\leadsto$  Einhüllende verbreitert sich, Wellenpaket zerfließt

(Beispiel: Siehe 2.1.1.5. Eleganter Beweis erst später möglich, z.B. mittels Ehrenfest-Theorem  $\rightarrow$  ggf. Übungsaufgabe)

### 2.1.1.5 Beispiel: Gaußsches Wellenpaket in einer Dimension

Verteilung der Wellenvektoren:  $f(k) = C \exp\left(-\frac{(k-k_0)^2}{2(\Delta k)^2}\right)$

→ Gaußsche Verteilung mit Breite  $\Delta k$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \psi(x, t=0) &= \int dk f(k) e^{ikx} = C \int dk e^{ikx - \frac{(k-k_0)^2}{2(\Delta k)^2}} \\ &\stackrel{\xi = \frac{k-k_0}{\Delta k}}{=} C \Delta k \int d\xi e^{-\xi^2/2} e^{ix(\xi\Delta k + k_0)} \\ &\stackrel{\tau = \xi + ix\Delta k}{=} C \Delta k e^{ik_0 x} e^{(-ix\Delta k)^2/2} \underbrace{\int d\tau e^{-\tau^2/2}}_{\sqrt{2\pi}} \\ &= C \Delta k \sqrt{2\pi} e^{ik_0 x} e^{-x^2/(\Delta k)^2} \end{aligned}$$

↪ Wellenpaket zur Zeit  $t=0$ : Einhüllende hat Gaußsche Form mit Breite  $\Delta x = 1/\Delta k$  (↪  $\Delta x \cdot \Delta k = 1$ )

Zeitliche Entwicklung:

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \int dk \overbrace{f(k)}^{(1)} e^{i(kx - \omega(k)t)} = \int dk \overbrace{C \exp\left(-\frac{(k-k_0)^2}{2(\Delta k)^2}\right)}^{(1)} e^{i(kx - \omega(k)t)} \\ &\quad \left. \begin{array}{l} \text{Trick: } \omega(k) = \omega(k_0) + \omega'(k_0)(k-k_0) + \frac{1}{2}\omega''(k_0)(k-k_0)^2 \\ \text{(keine höheren Terme, da } \omega(k) \text{ quadratisch in } k) \\ = \omega(k_0) + \underbrace{\frac{\hbar}{m}k_0}_{v_g}(k-k_0) + \frac{\hbar}{2m}(k-k_0)^2 \end{array} \right\} \\ &= \overbrace{C}^{(1)} e^{i(k_0 x - \omega(k_0)t)} \int dk e^{i(k-k_0)(x - \underbrace{v_g}_{(2)}t)} \underbrace{e^{-\frac{(k-k_0)^2}{2(\Delta k)^2} - i\frac{\hbar}{2m}(k-k_0)^2 t}}_{=: e^{-\xi^2/2}} \\ &\quad \left. \begin{array}{l} \text{Setze } b(t)^2 = \left(\frac{1}{(\Delta k)^2} + \frac{i\hbar}{m}t\right) \quad \text{und} \quad \xi = (k-k_0)b(t) \end{array} \right\} \\ &= C e^{i(k_0 x - \omega(k_0)t)} \frac{1}{b(t)} \int d\xi e^{-\xi^2/2} e^{i(x-v_g t)\xi/b(t)} \\ &\quad \left. \begin{array}{l} \int d\xi e^{-\xi^2/2} e^{i\xi/b} = \sqrt{2\pi} e^{-1/(2b^2)} \quad (b \in \mathbb{C}) \end{array} \right\} \\ &= C \frac{\sqrt{2\pi}}{b(t)} e^{i(k_0 x - \omega(k_0)t)} e^{-(x-v_g t)^2/2b(t)^2} \\ &= C \frac{\sqrt{2\pi}}{\sqrt{\frac{1}{(\Delta k)^2} + \frac{i\hbar}{m}t}} e^{i(k_0 x - \omega(k_0)t)} e^{-(x-v_g t)^2/2\left(\frac{1}{(\Delta k)^2} + \frac{i\hbar}{m}t\right)} \\ \Rightarrow |\psi(x, t)|^2 &= |C|^2 \frac{2\pi}{\sqrt{\left(\frac{1}{\Delta k}\right)^4 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2}}} e^{-\frac{(x-v_g t)^2}{2}\left(\frac{1}{(\Delta k)^2} + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2}(\Delta k)^2\right)^{-1}} \end{aligned}$$

Gaußkurve mit Zentrum  $v_g t$  und Breite  $\Delta x(t) = \sqrt{\frac{1}{(\Delta k)^2} + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2}}(\Delta k)^2$

↪ Verbreiterung des Wellenpakets gemäß

$$\boxed{\Delta x(t)^2 = \Delta x(0)^2 + \frac{1}{\Delta x(0)^2} \frac{\hbar^2 t^2}{m^2}}$$

### 2.1.2 Mathematischer Einschub

Zur  $\delta$ -Funktion und zur Fouriertransformation  
(siehe dazu auch Cohen-Tannoudji, Bd. 2, Anhang)

#### 2.1.2.1 Die Diracsche $\delta$ -Funktion

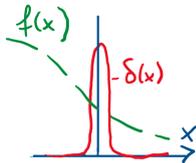
Zunächst in einer Dimension

(a) Formale Definition:  $\delta$  definiert eine Abbildung

$$\begin{aligned} C_\infty &\longrightarrow \mathbb{R} \\ f(x) &\longmapsto \int dx f(x) \delta(x - x_0) := f(x_0) \end{aligned}$$

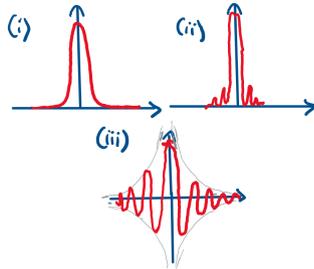
vom Raum  $C : w_\infty$  der  $\infty$  oft differenzierbaren Funktionen auf  $\mathbb{R}$  nach  $\mathbb{R}$ .

(b) Anschauliche Vorstellung:



Eine bei  $x = 0$  sehr scharf gepeakte Funktion mit  $\int dx \delta(x) = 1$ ,  $\delta(x) = 0$  für  $|x| \gg 0$ . Peak muss schmaler sein als jede charakteristische Längenskala der Funktion  $f(x)$ , auf die die  $\delta$ -Funktion angewendet werden soll.

(c) Darstellung als Grenzwert glatter Funktionen:



$$\begin{aligned} \text{(i)} \quad \delta(x) &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \frac{1}{\epsilon} e^{-\frac{x^2}{2\epsilon^2}} \\ \text{(ii)} \quad \delta(x) &= \frac{1}{\pi} \lim_{a \rightarrow \infty} \frac{(\sin ax)^2}{ax^2} \\ \text{(iii)} \quad \delta(x) &= \frac{1}{\pi} \lim_{a \rightarrow \infty} \frac{\sin ax}{x} \quad (\text{oszilliert} \\ &\quad \text{außerhalb } x = 0 \text{ so schnell, dass} \\ &\quad \text{Beiträge zu Integralen wegfallen}) \end{aligned}$$

(d) Darstellung als Integral

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx}$$

(e) Rechenregeln (ohne Beweis)

$$\delta(x) = 0 \text{ für } x \neq 0$$

$$x \cdot \delta(x) = 0$$

$$\delta(-x) = \delta(x) \quad (\rightarrow \delta(x) \text{ ist eine gerade Funktion})$$

$$\delta(x - y) \cdot f(x) = \delta(x - y) \cdot f(y)$$

$$\int_{-\infty}^x dy \delta(y) = \Theta(x) = \begin{cases} 1 & x > 0 \\ \frac{1}{2} & x = 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases} \quad (\text{Stufenfunktion})$$

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x)$$

$$\delta(\varphi(x)) = \sum_{\substack{\text{Nullstellen} \\ x_i \text{ von } \varphi(x)}} \frac{1}{|\varphi'(x_i)|} \delta(x - x_i)$$

Ableitungen:

$$\int \delta'(x - x_0) f(x) dx = -f'(x_0)$$

$$\delta'(x) = -\delta'(-x) \quad (\text{ungerade Funktion})$$

$$\int \delta^{(n)}(x - x_0) f(x) dx = (-1)^n f^{(n)}(x_0)$$

(f) Verallgemeinerung auf  $d = 3$  Dimensionen

$$\delta(\vec{r} - \vec{r}_0) = \delta(x - x_0) \cdot \delta(y - y_0) \cdot \delta(z - z_0)$$

$$\delta(\vec{r}) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^d \int d^d k e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

(Analog geht natürlich Verallgemeinerung auf beliebige Dimensionen)

Bemerkung: Damit ist die  $\delta$ -Funktions-Normierung der ebenen de Broglie-

Wellen  $\psi_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar^d}} e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - Et)}$  (Kapitel 2.1.1.3 S.11) klar:

$$\int d\vec{r} \psi_{\vec{p}}^*(\vec{r}, t) \psi_{\vec{p}'}(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \underbrace{\int d\vec{r} e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}' - \vec{p})\vec{r}}}_{\delta(\vec{p} - \vec{p}')} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}(E(\vec{p}) - E(\vec{p}'))t} = \delta(\vec{p} - \vec{p}') \quad \checkmark$$

### 2.1.2.2 Fouriertransformation

Wieder zunächst in einer Dimension

(a) Definition

Gegeben sei eine Funktion  $f(x): \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$

Die Fouriertransformierte von  $f$  ist, falls sie existiert, definiert durch

$$\tilde{f}(k) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx e^{-ikx} f(x)$$

Für Umkehrung gilt:

$$\Leftrightarrow f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk e^{ikx} \tilde{f}(k)$$

$$\begin{aligned} \text{(NB: Einsetzen)} \rightarrow f(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk e^{ikx} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx' e^{-ikx'} f(x') \\ &= \int dx' f(x') \underbrace{\frac{1}{2\pi} \int dk e^{ik(x-x')}}_{\delta(x-x')} = f(x) \quad \checkmark \end{aligned}$$

Bedingungen für Existenz der Fouriertransformierten

(hinreichend, aber nicht notwendig)

- Dirichletsche Bedingungen:  $f(x)$  stückweise stetig,  
hat in jedem endlichen Intervall höchstens endlich viele endliche Sprungstellen, an denen rechtsseitiger und linksseitiger Limes existiert.
- $f(x)$  absolut integrierbar,  $\int dx |f(x)| < \infty$

(b) Eigenschaften

(i) Linearität:  $h(x) = af(x) + bg(x) \Leftrightarrow \tilde{h}(k) = a\tilde{f}(k) + b\tilde{g}(k)$

(ii) Translation:  $h(x) = f(x - a) \Leftrightarrow \tilde{h}(k) = e^{-ika} \tilde{f}(k)$

(iii) Produkt:  $h(x) = f(x \cdot a) \Leftrightarrow \tilde{h}(k) = \frac{1}{|a|} \tilde{f}\left(\frac{k}{a}\right)$

(iv) Ableitungen:  $h(x) = \frac{d^n}{dx^n} f(x) \Leftrightarrow \tilde{h}(k) = (ik)^n \tilde{f}(k)$

$h(x) = x^n f(x) \Leftrightarrow \tilde{h}(k) = i^n \frac{d^n}{dk^n} \tilde{f}(k)$

(v) Symmetrien:  $f(x)$  reellwertig  $\Leftrightarrow \tilde{f}^*(k) = \tilde{f}(-k)$

$f(x)$  rein imaginär  $\Leftrightarrow \tilde{f}^*(k) = -\tilde{f}(-k)$

(vi) Parsevalsche Gleichung:  $\int dx |f(x)|^2 = \int dk |\tilde{f}(k)|^2$

bzw. verallgemeinerte Version:  $\int dx f^*(x)g(x) = \int dk \tilde{f}^*(k)\tilde{g}(k)$

(Beweis:  $\int dk \cdot \tilde{f}^*(k) \cdot \tilde{g}(k) = \int dk \cdot \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx e^{+ikx} f^*(x)}_{\tilde{f}^*(k)} \cdot \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx' e^{-ikx'} g(x')}_{\tilde{g}(k)}$

$$= \int dx f^*(x) \int dx' g(x') \frac{1}{2\pi} \int dk e^{ik(x-x')} = \int dx f^*(x)g(x) \quad \checkmark$$

$\delta(x-x')$

(vii) Faltungssatz: (Beweis: Übungsaufgabe)

$h(x) = \int dy f(y)g(x-y) \Leftrightarrow \tilde{h}(k) = \sqrt{2\pi} \tilde{f}(k)\tilde{g}(k)$

(c) Verallgemeinerung auf d Dimensionen

$\tilde{f}(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^d} \int d\vec{r} e^{-i\vec{k}\vec{r}} f(\vec{r}) \Leftrightarrow f(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^d} \int d\vec{k} e^{i\vec{k}\vec{r}} \tilde{f}(\vec{k})$

(d) Fouriertransformierte in der Quantenmechanik

In der Quantenmechanik wird mittels Fouriertransformation zwischen Ort  $\vec{r}$  und Impuls  $\vec{p}$  hin- und hergeschaltet.

Die Transformation wird hier üblicherweise so definiert:

$$\boxed{\tilde{\psi}(\vec{p}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar^d}} \int d\vec{r} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} \psi(\vec{r})} \Leftrightarrow \boxed{\psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar^d}} \int d\vec{p} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} \tilde{\psi}(\vec{p})}$$

(Beachte den Faktor  $1/\sqrt{\hbar^d}$  wegen  $\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}$ )

Es gelten die gleichen Rechenregeln wie oben, insbesondere die Parsevalsche Gleichung:

$$\boxed{\int d\vec{r} \psi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) = \int d\vec{p} \tilde{\psi}^*(\vec{p}) \tilde{\psi}(\vec{p})}$$

(Man kann es so auffassen, dass  $\vec{r}/\sqrt{\hbar}$  und  $\vec{p}/\sqrt{\hbar}$  ineinander transformiert werden. Damit kann man alle Regeln aus (b) übernehmen.)

(e) Beispiele für Fouriertransformationen

(i) Gaußverteilung  $\boxed{f(x) = e^{-x^2/2a^2}} \Leftrightarrow \boxed{\tilde{f}(k) = a \cdot e^{-k^2 a^2/2}}$

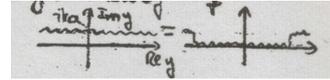
$$\begin{aligned} \text{denn } \tilde{f}(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ikx} e^{-x^2/2a^2} \stackrel{(a)}{=} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-k^2 a^2/2} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-(x+ika)^2/2a^2} \\ &\stackrel{(b)}{=} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-k^2 a^2/2} \int_{-\infty+ika}^{\infty+ika} dy e^{-y^2/2a^2} \stackrel{(c)}{=} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-k^2 a^2/2} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-y^2/2a^2}}_{\sqrt{2\pi a}} \quad \checkmark \end{aligned}$$

wobei:

(a)  $-ikx - x^2/a^2 = -\frac{1}{2a^2}(x + ika)^2 + \frac{(ika)^2}{2a^2}$   
(Quadratische Ergänzung)

(b) Variablensubstitution:  $y = x + ika$

(c) Verschiebung des Integrationswegs auf reelle Achse:



(ii) Lorentzverteilung  $\boxed{f(x) = \frac{1}{x^2 + a^2}} \Leftrightarrow \boxed{\tilde{f}(k) = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{|a|} e^{-k|a|}} \quad (a \text{ reell})$

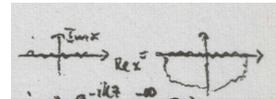
$$\begin{aligned} \text{denn } \tilde{f}(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ikx} \frac{1}{x^2 + a^2} \stackrel{(a)}{=} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \oint dz e^{-ikz} \frac{1}{z^2 + a^2} \\ &\stackrel{(b)}{=} -\sqrt{2\pi} i \sum_{\substack{\text{Eingeschlossene} \\ \text{Pole } z_0}} \text{Res}(e^{-ikz} \frac{1}{z^2 + a^2}, z_0) \stackrel{(c)}{=} -\sqrt{2\pi} i \text{Res}(e^{-ikz} \frac{1}{z^2 + a^2}, -i|a|) \\ &= -\sqrt{2\pi} i \lim_{z \rightarrow (-i|a|)} e^{-ikz} \frac{1}{z^2 + a^2} (z + i|a|) = -\sqrt{2\pi} i \lim_{z \rightarrow (-i|a|)} \frac{e^{-ikz}}{z - i|a|} \quad \checkmark \end{aligned}$$

wobei:

(a) Schließen des Integrationswegs (Unterer Halbkreis liefert keinen Beitrag, denn  $z \rightarrow x - i\infty \Rightarrow e^{-ikz} \rightarrow e^{-\infty} = 0$ )

(b) Residuensatz

(c)  $1/(z^2 + a^2)$  hat zwei einfache Pole bei  $z_0 = \pm i|a|$ , davon ist nur  $-i|a|$  im Integrationsweg (der unteren Halbebene) eingeschlossen.



### 2.1.3 Die Schrödingergleichung

Ziel: Verallgemeinerung der Beschreibung von Wellenfunktionen für freie Teilchen auf Teilchen in beliebigem Potential  $V(x)$ .

„Naiver“ Versuch:

Ausgehend von Einstein de Broglie Beziehungen  $E = \hbar\omega$  und  $p = \hbar k$  und dem klassischen Zusammenhang  $E = \frac{p^2}{2m} + V(x)$  einfach  $k$  und  $p$  ortsabhängig zu machen:  $p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}$ .

Verallgemeinerung der de Broglie-Welle wäre also:

$$e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} \rightarrow e^{\frac{i}{\hbar}(\int_{x_0}^x dy p(y) - Et)}$$

→ Essenz der sogenannten „WKB“-Näherung  
(Wentzel, Brillouin, Kramer)

Problem damit:

Funktioniert nur, solange  $p(x)$  auf deutlich größeren Längenskala variiert als Wellenlänge  $\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi\hbar}{p}$ , ( $\frac{p'(x)}{p(x)} \ll k = \frac{p}{\hbar}$ )

⇒ Taugt nicht als allgemeine Theorie  
(aber recht erfolgreich für spezielle Probleme, z.B. Tunneleffekt)

Zugang hier:

Bestimme Bewegungsgleichung für freie Teilchen.

Suche nach geeigneter Verallgemeinerung dieser Bewegungsgleichung

#### 2.1.3.1 Schrödingergleichung für freie Teilchen (de Broglie-Wellenpakete)

Gesucht: Differentialgleichung für  $\psi(\vec{r}, t)$  mit allgemeiner Lösung

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar^d}} \int d\vec{p} e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - \frac{p^2}{2m}t)} \tilde{\psi}_0(\vec{p}) \quad (*)$$

Bedingung: Es soll das Superpositionsprinzip gelten

(Eine Linearkombination von Lösungen ist selber eine Lösung)

⇒ Differentialgleichung muss linear und homogen sein.

Lösung: Einfacher im „Impulsraum“ zu finden

Die Fouriertransformierte von  $\psi(\vec{r}, t)$  ist:  $\tilde{\psi}(\vec{p}, t) = \tilde{\psi}_0(\vec{p})e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t}$

→ Einfache Exponentialfunktion, → Lösung der Gleichung:

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi}(\vec{p}, t) = -\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} \tilde{\psi}(\vec{p}, t)$$

Etwas umgestellt:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi}(\vec{p}, t) = \frac{p^2}{2m} \tilde{\psi}(\vec{p}, t) \quad (**)$$

Rücktransformation in den „Ortsraum“ ( $\vec{p}/\sqrt{\hbar} \leftrightarrow \vec{r}/\sqrt{\hbar}$ )

$$\text{Linke Seite von (**): } i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi}(\vec{p}, t) \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t)$$

$$\text{Rechte Seite von (**): } \frac{p^2}{2m} \tilde{\psi}(\vec{p}, t) \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t)$$

$$\text{(Beweis in 1 Dimension: } (\frac{p}{\sqrt{\hbar}})^2 \tilde{\psi}(p, t) \rightarrow (-i)^2 \frac{d^2}{d(x/\sqrt{\hbar})^2} \psi(x, t)$$

$$\text{also } p^2 \tilde{\psi}(p, t) \rightarrow -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} \psi(x, t) \quad \checkmark$$

$$\text{Beweis in 3 Dimensionen: } \vec{p}^2 \tilde{\psi}(\vec{p}, t) = \sum_{\alpha=1}^3 p_{\alpha}^2 \tilde{\psi}(\vec{p}, t)$$

$$\rightarrow -\hbar^2 \sum_{\alpha=1}^3 \frac{d^2}{d\vec{r}_{\alpha}^2} \psi(\vec{r}, t) = -\hbar^2 \Delta \psi(\vec{r}, t) \quad \checkmark \quad )$$

$$\Rightarrow \text{Freie Schrödinger-Gleichung: } \boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t)}$$

(Setze Lösung (\*) ein  $\rightarrow$  passt!)

### 2.1.3.2 Verallgemeinerung für Teilchen im äußeren Potential $V(\vec{r})$

Vergleiche  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi}(\vec{p}, t) = \frac{p^2}{2m} \tilde{\psi}(\vec{p}, t) = E_{kin} \tilde{\psi}(\vec{p}, t)$  mit der freien Schrödinger-Gleichung  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t)$

$\leadsto$  „ $-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$ “ steht für „ $E_{kin}$ “ (kinetische Energie)

Verallgemeinerung:  $E_{kin} \rightarrow E_{kin} + V(\vec{r})$

$$\leadsto \text{Vollständige Schrödinger-Gleichung } \boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \hat{H} \psi(\vec{r}, t)}$$

$$\text{mit } \boxed{\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r})} : \text{„Hamiltonoperator“}$$

Eigenschaften dieser Differentialgleichung

- linear und homogen
  - $\Rightarrow$  Superpositionsprinzip gilt nach wie vor. Wenn  $\psi_1$  und  $\psi_2$  die Schrödinger-Gleichung lösen, dann auch  $\alpha\psi_1 + \beta\psi_2$  ( $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ )
- Erster Ordnung in der Zeit  $t$ 
  - $\Rightarrow \psi(\vec{r}, t_0)$  zu gegebener Zeit  $t_0$  charakterisiert vollständig die Wellenfunktion  $\psi(\vec{r}, t)$  zu allen Zeiten.
  - (vgl. klassische Mechanik: Bewegungsgleichungen zweiter Ordnung in  $t \rightarrow$  Vollständige Charakterisierung erfordert Angabe von Ort und Impuls.)

## 2.1.4 Interpretation von Materiewellen

### 2.1.4.1 Wahrscheinlichkeitsdichten

(a) Materiewellen in Ortsdarstellung (siehe 2.1.1.2 S.11)

$|\psi(\vec{r}, t)|^2$  = Wahrscheinlichkeitsdichte dafür, dass das Teilchen zur Zeit  $t$  am Ort  $\vec{r}$  vorgefunden wird.

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

(Schwierigkeiten damit nur bei ebenen Wellen, siehe 2.1.1.3 S.11)

(b) Materiewellen in Impulsdarstellung

Impulsdarstellung:  $\psi(\vec{r}, t)$  wird zerlegt gemäß

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar^d}} \int d\vec{p} e^{i\vec{p}\vec{r}} \tilde{\psi}(\vec{p}, t)$$

$\rightsquigarrow \tilde{\psi}(\vec{p}, t)$  ist „Anteil“ des Impulses  $\vec{p}$  am Wellenpaket.

Legt analoge Wahrscheinlichkeitsdeutung wie bei (a) nahe:

$|\tilde{\psi}(\vec{p}, t)|^2$  = Wahrscheinlichkeitsdichte im Raum der Impulse  $\vec{p}$  dafür, dass das Teilchen zur Zeit  $t$  bei einer Impulsmessung mit dem Impuls  $\vec{p}$  vorgefunden wird.

Normierung stimmt automatisch, da (Parsevalsche Gleichung)

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

### 2.1.4.2 Wahrscheinlichkeitsstrom und Kontinuitätsgleichung

Erinnerung an Kontinuitätsgleichung allgemein: Gegeben sei eine beliebige Dichtefunktion  $\rho(\vec{r}, t)$ , z.B. Teilchendichte. Es gelte lokale Teilchenzahlerhaltung, d.h. Teilchen können sich nur stetig fortbewegen (über Flüsse). Dann folgt daraus, dass eine Gleichung der Form  $\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{r}, t) = -\vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{r}, t)$  gelten muss (Kontinuitätsgleichung).  $\vec{j}$  ist die Stromdichte.

Hier Wahrscheinlichkeitsdichte  $|\psi(\vec{r}, t)|^2$ . Gesamtwahrscheinlichkeit natürlich erhalten ( $\int d\vec{r} |\psi(\vec{r}, t)|^2 = 1$ ). Frage: Gilt das auch lokal?

$\rightsquigarrow$  Suche Kontinuitätsgleichung für  $|\psi|^2$ :  $\frac{\partial}{\partial t} |\psi(\vec{r}, t)|^2 = -\vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{r}, t)$

Rechnung

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 &= \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) = \psi^* \frac{\partial}{\partial t} \psi + \psi \frac{\partial}{\partial t} \psi^* \\ &\text{Schrödingergleichung: } i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V \psi \\ &\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar}{2mi} \Delta \psi + \frac{V}{i\hbar} \psi; \quad \frac{\partial}{\partial t} \psi^* = \frac{\hbar}{2mi} \Delta \psi^* - \frac{V}{i\hbar} \psi^* \\ &= -\frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*) \\ &\quad \vec{\nabla} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) = (\vec{\nabla} \psi^*) (\vec{\nabla} \psi) + \psi^* \Delta \psi - (\vec{\nabla} \psi) (\vec{\nabla} \psi^*) - \psi \Delta \psi^* \\ &= -\vec{\nabla} \cdot \left\{ \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) \right\} := -\vec{\nabla} \cdot \vec{j} \end{aligned}$$

$\Rightarrow$  Wahrscheinlichkeitsstromdichte:  $\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*)$

Bemerkung: Wir werden in Kürze sehen, dass der Operator  $\hbar/i\vec{\nabla}$  mit dem Impuls  $\vec{p}$  gleichgesetzt werden kann. Dann folgt mit  $\vec{v} = \vec{p}/m$  das intuitive Ergebnis  $\vec{j} \sim \psi^* \vec{v} \psi$ .

### 2.1.4.3 Erwartungswerte

#### (a) Fragestellung

Wahrscheinlichkeitsinterpretation:

Physikalische Größen (Ort, Impuls, ...) nicht mehr scharf definiert, aber man kann immerhin noch ihren Erwartungswert angeben: Statistischer Mittelwert des Messergebnisses nach unendlich vielen Wiederholungen desselben Experiments.

- Rein ortsabhängige Größen  $f(\vec{r})$  (z.B.  $V(\vec{r})$ )  
 $\leadsto$  klar:  $\langle f(\vec{r}) \rangle = \int d\vec{r} f(\vec{r}) |\psi(\vec{r}, t)|^2$
- Rein impulsabhängige Größen  $f(\vec{p})$  (z.B.  $E_{kin} = p^2/2m$ )  
 $\leadsto$  auch klar:  $\langle f(\vec{p}) \rangle = \int d\vec{p} f(\vec{p}) |\tilde{\psi}(\vec{p}, t)|^2$

Aber: Was ist mit Größen, die von Ort und Impuls abhängen?  
 (z.B. Drehimpuls  $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ )

$\leadsto$  Brauche Verfahren, das mir erlaubt, Erwartungswerte vom Impuls  $\vec{p}$  oder von abgeleiteten Größen  $f(\vec{p})$  auch in Ortsdarstellung, aus  $\psi(\vec{r}, t)$  auszurechnen - bzw. umgekehrt, Erwartungswerte des Ortes  $\vec{r}$  und abgeleiteter Größen  $f(\vec{r})$  aus  $\tilde{\psi}(\vec{p}, t)$ .

$\leadsto$  Diskutiere zunächst das erste Problem (Berechnung von  $\langle p \rangle$  und  $\langle f(p) \rangle$  aus  $\psi(x, t)$ ) für den Fall eines eindimensionalen Systems.

#### (b) Berechnung des Erwartungswerts $\langle p \rangle$ des Impulses (eindimensional)

$$\begin{aligned}
 \langle p \rangle &= \int dp p |\tilde{\psi}(p, t)|^2 \\
 &= \int dp p \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx e^{\frac{i}{\hbar}px} \psi^*(x, t) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx' e^{-\frac{i}{\hbar}px'} \psi(x', t) \\
 &= \int dx \psi^*(x, t) \int dx' \psi(x', t) \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp \underbrace{p e^{\frac{i}{\hbar}p(x-x')}}_{-\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx'} e^{\frac{i}{\hbar}p(x-x')}} \\
 &\quad \underbrace{-\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx'} \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp e^{\frac{i}{\hbar}p(x-x')}}_{\delta(x'-x)} \\
 &= \int dx \psi^*(x, t) \int dx' \psi(x', t) \left(-\frac{\hbar}{i}\right) \frac{d}{dx'} \delta(x' - x) \\
 &= \int dx \psi^*(x, t) \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi(x, t)
 \end{aligned}$$

$$\leadsto \boxed{\langle p \rangle = \int dp \tilde{\psi}^*(p, t) p \tilde{\psi}(p, t) = \int dx \psi^*(x, t) \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi(x, t)}$$

Struktur ähnlich in Orts- und Impulsdarstellung,  $p$  ersetzt durch  $\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$

**(c) Berechnung des Erwartungswerts  $\langle f(p) \rangle$  von Funktionen des Impulses**

- Betrachte Taylor-Reihe von  $f(p)$ :  $f(p) = \sum_{k=0}^{\infty} f_k p^k$   
 $\leadsto \langle f(p) \rangle = \sum_{k=0}^{\infty} f_k \langle p^k \rangle$
- Berechnung von  $\langle p^k \rangle$  kann analog wie oben durchgeführt werden.  
 $\langle p^k \rangle = \int dp \tilde{\psi}^*(p, t) p^k \tilde{\psi}(p, t) = \dots = \int dx \psi^*(x, t) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}\right)^k \psi(x, t)$   
 (Details der Rechnung: Übungsaufgabe)  
 $\leadsto$  Hier wird  $p^k$  ersetzt durch  $\left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}\right)^k$
- Beides zusammengenommen, erhält man

$$\langle f(p) \rangle = \int dp \tilde{\psi}^*(p, t) f(p) \tilde{\psi}(p, t) = \int dx \psi^*(x, t) f\left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}\right) \psi(x, t)$$

wobei  $f\left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}\right)$  ein Operator ist, formal definiert durch Potenzreihe

$$f\left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}\right) = \sum_{k=0}^{\infty} f_k \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}\right)^k$$

mit  $f_k = \frac{1}{k!} \frac{d^k}{d\tau^k} f(\tau)|_{\tau=0}$  (Taylorentwicklung)

$$(z.B. f(p) = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow f\left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \quad \checkmark)$$

Beachte: Funktion  $f$  kann zusätzlich noch von  $x$  abhängen.

**(d) Fazit:**

In Ortsdarstellung (eindimensional) errechnet man Erwartungswert von Funk-

tionen  $f(x, p)$  durch 
$$\langle f(x, p) \rangle = \int dx \psi^*(x, t) f\left(x, \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}\right) \psi(x, t)$$

$\leadsto$  Impuls  $p$  wird formal durch Operator  $\left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}\right)$  ersetzt: 
$$p \leftrightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$$

Für die Impulsdarstellung kann man ähnliche Überlegungen anstellen. Man

erhält: 
$$\langle x \rangle = \int dx \psi^*(x, t) x \psi(x, t) = \dots = \int dp \tilde{\psi}^*(p, t) \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dp}\right) \tilde{\psi}(p, t)$$

$$\langle f(x, p) \rangle = \int dp \tilde{\psi}^*(p, t) f\left(-\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dp}, p\right) \tilde{\psi}(p, t)$$

$\leadsto$  Ort  $x$  wird formal durch Operator  $\left(-\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dp}\right)$  ersetzt: 
$$x \leftrightarrow -\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dp}$$

**Achtung:** „Übersetzung“  $f(x, p) \rightarrow$  Operator  $f\left(x, \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}\right)$  bzw.  $f\left(-\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dp}, p\right)$  nicht immer eindeutig, da Reihenfolge von „ $x$ “ und „ $p$ “ wichtig wird. (Zum Beispiel ist  $\langle xp \rangle \neq \langle px \rangle$ , siehe Beispiel (iii).)

(e) Verallgemeinerung auf drei Dimensionen

Ersetzungsvorschrift	in Ortsdarstellung:	$\vec{p} \leftrightarrow \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$
	in Impulsdarstellung:	$\vec{r} \leftrightarrow -\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_{\vec{p}}$

$$\text{mit } \vec{\nabla}_{\vec{p}} = \left( \frac{\partial}{\partial p_x}, \frac{\partial}{\partial p_y}, \frac{\partial}{\partial p_z} \right)$$

⇒ Erwartungswert für Funktionen  $f(\vec{r}, \vec{p})$

in Ortsdarstellung:	$\langle f(\vec{r}, \vec{p}) \rangle = \int d\vec{r} \psi^*(\vec{r}, t) f(\vec{r}, \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}) \psi(\vec{r}, t)$
in Impulsdarstellung:	$\langle f(\vec{r}, \vec{p}) \rangle = \int d\vec{p} \tilde{\psi}^*(\vec{p}, t) f(-\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_{\vec{p}}, \vec{p}) \tilde{\psi}(\vec{p}, t)$

(f) Beispiele

(i) Gesamtenergie bzw. Hamiltonfunktion  $\mathcal{H}(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r})$

$$\text{In Ortsdarstellung ist } \vec{p}^2 \leftrightarrow \left( \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \right)^2 = -\hbar^2 \Delta$$

$$\Rightarrow \langle \mathcal{H} \rangle = \int d\vec{r} \psi^*(\vec{r}, t) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}, t) =: \int d\vec{r} \psi^*(\vec{r}, t) \hat{H} \psi(\vec{r}, t)$$

$$\text{mit } \hat{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V = \underline{\text{Hamiltonoperator}} \text{ (vgl. 2.1.3.2 S.20)}$$

(ii) Drehimpuls (Bahndrehimpuls)  $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$

$$\text{In Ortsdarstellung ist } \vec{r} \times \vec{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} (\vec{r} \times \vec{\nabla}) = \frac{\hbar}{i} \begin{pmatrix} y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \\ z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \\ x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \langle \vec{L} \rangle = \int d\vec{r} \psi^*(\vec{r}, t) \frac{\hbar}{i} [\vec{r} \times \vec{\nabla}] \psi(\vec{r}, t)$$

$$\text{z.B. } \langle L_x \rangle = \int d\vec{r} \psi^*(\vec{r}, t) \frac{\hbar}{i} (y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y}) \psi(\vec{r}, t)$$

$$\text{In Impulsdarstellung ist } \vec{r} \times \vec{p} \rightarrow \left( -\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_{\vec{p}} \right) \times \vec{p} \stackrel{\text{Beh.}}{=} \frac{\hbar}{i} [\vec{p} \times \vec{\nabla}_{\vec{p}}]$$

$$\text{(da: } (\vec{\nabla}_{\vec{p}} \times \vec{p})_i \tilde{\psi} = \epsilon_{ijk} \frac{\partial}{\partial p_j} p_k \tilde{\psi} = \epsilon_{ijk} \underbrace{(\partial p_k / \partial p_j)}_{\substack{\delta_{jk} \\ =0}} \tilde{\psi} + \epsilon_{ijk} p_k (\partial / \partial p_j) \tilde{\psi} = -\epsilon_{ijk} p_j (\partial / \partial p_k) \tilde{\psi} \text{)}$$

$$\Rightarrow \langle \vec{L} \rangle = \int d\vec{p} \tilde{\psi}^*(\vec{p}, t) \frac{\hbar}{i} [\vec{p} \times \vec{\nabla}_{\vec{p}}] \tilde{\psi}(\vec{p}, t)$$

Bemerkung: Dasselbe würde man erhalten, wenn man den Ausdruck  $\vec{L} = -\vec{p} \times \vec{r}$  übersetzen würde. Hier spielt die Reihenfolge von  $\vec{r}$  und  $\vec{p}$  keine Rolle. Im allgemeinen ist das jedoch schon der Fall (siehe (iii)).

(iii) Funktion  $f(x, p) = \frac{1}{2}(xp + px)$  (in eindimensionalem System)

Klassisch sind  $xp$ ,  $px$  und  $f(x, p) = \frac{1}{2}(xp + px)$  gleich.

In der Quantenmechanik muss allerdings unterschieden werden:

$$\begin{aligned} \langle xp \rangle &= \int dx \psi^*(x, t) x \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi(x, t) \\ \langle px \rangle &= \int dx \psi^*(x, t) \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} x \psi(x, t) \quad \text{Produktregel!} \\ &= \int dx \psi^*(x, t) \frac{\hbar}{i} \psi(x, t) + \int dx \psi^*(x, t) x \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi(x, t) \\ &= \frac{\hbar}{i} + \langle xp \rangle \\ \langle f(x, p) \rangle &= \frac{1}{2} (\langle xp \rangle + \langle px \rangle) = \frac{\hbar}{2i} + \langle xp \rangle \end{aligned}$$

2.1.4.4 Physikalische Observable und Operatoren

Physikalische Observablen: Größen, die im Prinzip gemessen werden können.

Klassisch: im Allgemeinen Funktionen  $\mathcal{O}(\vec{r}, \vec{p}, t)$  (z.B. Energie, Drehimpuls)

Quantenmechanisch: motiviert durch 2.1.4.3

→ Observablen werden Operatoren  $\hat{\mathcal{O}}$  zugeordnet,  
so dass der Erwartungswert einer Messung der Observablen gegeben ist

durch:  $\langle \mathcal{O} \rangle = \int d\vec{r} \psi^*(\vec{r}, t) \hat{\mathcal{O}} \psi(\vec{r}, t)$  (Beispiele:  $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla$ ,  $\hat{r} = \vec{r}$ )

Als Eigenschaften solcher Operatoren fordern wir:

(I) Linearität:  $\hat{\mathcal{O}}(\alpha\psi_1(\vec{r}, t) + \beta\psi_2(\vec{r}, t)) = \alpha\hat{\mathcal{O}}\psi_1(\vec{r}, t) + \beta\hat{\mathcal{O}}\psi_2(\vec{r}, t)$  für  $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$  (check: Für  $\hat{r}, \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla$  und abgeleitete Operatoren  $f(\hat{r}, \hat{p})$  erfüllt.)

(II) Erwartungswerte sollen reell sein:

$$\int d\vec{r} \psi^*(\vec{r}, t) [\hat{\mathcal{O}}\psi(\vec{r}, t)] = [\int d\vec{r} \psi^*(\vec{r}, t) \hat{\mathcal{O}}\psi(\vec{r}, t)]^* = \int d\vec{r} [\hat{\mathcal{O}}\psi(\vec{r}, t)]^* \psi(\vec{r}, t)$$

De facto fordern wir noch stärker:

Für quadratintegrale Funktionen  $\varphi, \psi$  soll gelten:

$$\int d\vec{r} \varphi^*(\vec{r}, t) [\hat{\mathcal{O}}\psi(\vec{r}, t)] = \int d\vec{r} [\hat{\mathcal{O}}\varphi(\vec{r}, t)]^* \psi(\vec{r}, t) \quad (*)$$

→ Operator  $\hat{\mathcal{O}}$  “hermitesch“.

NB: Strenggenommen reicht Hermitizität nicht aus, man muß fordern, dass der Operator “selbstadjungiert” ist. Dies beinhaltet zusätzlich zur Hermitizität noch eine subtile Forderung an den Definitionsbereich von  $\hat{\mathcal{O}}$ . Mehr dazu siehe Kapitel 3.1.2.2.

(Beispiele: Für  $\hat{r}, \hat{r}^2, \dots$  klarerweise erfüllt ✓

Für  $\hat{p}$ :  $\int d\vec{r} (\frac{\hbar}{i} \nabla \varphi)^* \psi = -\frac{\hbar}{i} \int d\vec{r} (\nabla \varphi)^* \psi = -\frac{\hbar}{i} \underbrace{\int d\vec{r} \nabla(\varphi^* \psi)}_{=0 \text{ (Gauß)}} + \int d\vec{r} \varphi^* (\frac{\hbar}{i} \nabla \psi)$  ✓

(Gaußscher Satz<sup>2</sup>:  $\int_V d\vec{r} \nabla(\varphi^* \psi) = \int_{\partial V} d\vec{\sigma}(\varphi^* \psi) = 0$ ,

wenn Oberfläche  $\partial V$  im Unendlichen,

denn  $\varphi, \psi$  quadratintegrel → schnell abfallend.)

Für  $\hat{p}^2$ :  $\int d\vec{r} (\hat{p}^2 \varphi)^* \psi = \int d\vec{r} (\hat{p}(\hat{p}\varphi))^* \psi \stackrel{\hat{p}=\hat{p}^\dagger}{=} \int d\vec{r} (\hat{p}\varphi)^* (\hat{p}\psi) = \int d\vec{r} \varphi^* (\hat{p}^2 \psi)$  ✓  
(etc.)

Bemerkung: Operatoren können im allgemeinen nicht vertauscht werden.

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

Im Allgemeinen ist  $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$

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

( $[\hat{x}, \hat{p}]\varphi(x, t) = [x, \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}]\varphi(x, t) = (x \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} - \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} x)\varphi(x, t) = i\hbar\varphi(x, t)$  für alle  $\varphi$  )

<sup>2</sup>Der Gaußsche Satz kann auch für skalare Funktionen  $f(\vec{r})$  angewendet werden:  $\int_V d\vec{r} \nabla f(\vec{r}) = \int_{\partial V} d\vec{\sigma} f(\vec{r})$ . Um das zu sehen, stellt man zuerst den verallgemeinerten Gaußschen Satz für Matrixwertige Funktionen  $M(\vec{r})$  auf:  $\int_V d\vec{r} \nabla M(\vec{r}) = \int_{\partial V} d\vec{\sigma} M(\vec{r})$ . mit  $\nabla M = \partial_i M_{ij}$ ,  $d\vec{\sigma} M = d\sigma_i O_{ij}$ . (folgt aus Anwendung dese Gaußschen Satzes auf die Spaltenvektoren  $\vec{m}_i = (M_{1i}, M_{2i}, M_{3i})$ ). Dann setzt man  $M = f\mathbf{1}$ .

## 2.1.5 Folgerungen

### 2.1.5.1 Symmetrie von Orts- und Impulsdarstellung und Bra-Ket Schreibweise

Beschreibung eines Teilchens  $\rightarrow$  verschiedene Möglichkeiten

#### (i) Ortsdarstellung:

Wellenfunktion  $\psi(\vec{r}, t)$

Physikalische Messgrößen: Operatoren  $\hat{\mathcal{O}}(\vec{r})$

damit werden Erwartungswerte berechnet gemäß

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \int d\vec{r} \psi^*(\vec{r}, t) \hat{\mathcal{O}}(\vec{r}) \psi(\vec{r}, t)$$

$$\text{z.B. } \hat{x}(\vec{r}) = x, \hat{p}_x(\vec{r}) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$$

#### (ii) Impulsdarstellung:

Fouriertransformierte  $\tilde{\psi}(\vec{p}, t)$

Physikalische Messgrößen: Wieder Operatoren  $\hat{\mathcal{O}}(\vec{p})$

Erwartungswerte werden berechnet gemäß

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \int d\vec{p} \tilde{\psi}^*(\vec{p}, t) \hat{\mathcal{O}}(\vec{p}) \tilde{\psi}(\vec{p}, t)$$

$$\text{z.B. } \hat{x}(\vec{p}) = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p_x}, \hat{p}_x(\vec{p}) = p_x$$

$\psi(\vec{r}, t)$  und  $\tilde{\psi}(\vec{p}, t)$  beschreiben ein- und dasselbe Teilchen. Operatoren  $\hat{\mathcal{O}}(\vec{r})$  und  $\hat{\mathcal{O}}(\vec{p})$  sehen verschieden aus, aber physikalischer Gehalt ist gleich.

$\rightsquigarrow$  beschreiben dieselbe physikalische Observable,  
liefern dieselben Erwartungswerte

$\Rightarrow$  Orts- und Impulsdarstellung völlig äquivalent.

Motiviert Einführung einer Notation, die diese Äquivalenz sichtbar macht, also von der konkreten Darstellung "abstrahiert".

$\rightsquigarrow$  Diracsche Bra- Ket- Schreibweise

- $\psi(\vec{r}, t)$  bzw.  $\tilde{\psi}(\vec{p}, t) \rightarrow |\psi\rangle$ : „Zustandsvektor“

$$\bullet \text{ Def. } \boxed{\overbrace{\langle \varphi |}^{\text{Bra}} \overbrace{|\psi\rangle}^{\text{Ket}} := \int d\vec{r} \varphi^*(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) \stackrel{\text{Parseval}}{=} \int d\vec{p} \tilde{\varphi}^*(\vec{p}, t) \tilde{\psi}(\vec{p}, t)}$$

(Parsevalsche Gleichung siehe 2.1.2.2 S.16b)

$|\psi\rangle$  quadratintegrabel  $\Rightarrow \langle \psi | \psi \rangle < \infty$

$|\psi\rangle$  normiert  $\Rightarrow \langle \psi | \psi \rangle = 1$

$\langle \varphi | c\psi \rangle = \langle c^* \varphi | \psi \rangle = c \langle \varphi | \psi \rangle$  für  $c \in \mathbb{C}$

$\langle \psi | \varphi \rangle = \langle \varphi | \psi \rangle^*$

- Observablen  $\hat{=}$  Operatoren  $\hat{\mathcal{O}}$  mit  $\langle \varphi | \hat{\mathcal{O}} \psi \rangle = \langle \hat{\mathcal{O}} \varphi | \psi \rangle \equiv \langle \varphi | \hat{\mathcal{O}} | \psi \rangle$

$\rightsquigarrow$  Erwartungswerte  $\boxed{\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle = \langle \psi | \hat{\mathcal{O}} | \psi \rangle}$  ( $|\psi\rangle$  normiert)

- Um Verknüpfung mit bestimmten Darstellungen herzustellen, führt man spezielle Bras  $\langle \vec{r}_0 |, \langle \vec{p}_0 |$  ein: „Dirac-Vektoren“,

so dass gilt:  $\boxed{\psi(\vec{r}_0, t) = \langle \vec{r}_0 | \psi \rangle}$ ;  $\boxed{\tilde{\psi}(\vec{p}_0, t) = \langle \vec{p}_0 | \psi \rangle}$

$$\rightsquigarrow \langle \vec{r}_0 | = \begin{cases} \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) & \text{in Ortsdarstellung} \\ \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar^d}} e^{i\vec{p}\vec{r}_0} & \text{in Impulsdarstellung} \end{cases}$$

$$\rightsquigarrow \langle \vec{p}_0 | = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar^d}} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}_0\vec{r}} & \text{in Ortsdarstellung} \\ \delta(\vec{p} - \vec{p}_0) & \text{in Impulsdarstellung} \end{cases}$$

$$\text{check: } \langle \vec{r}_0 | \psi \rangle = \begin{cases} \int d\vec{r} \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) \psi(\vec{r}, t) & = \psi(\vec{r}_0, t) \quad \checkmark \\ \int d\vec{p} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar^d}} e^{i\vec{p}\vec{r}_0} \tilde{\psi}(\vec{p}, t) & = \psi(\vec{r}_0, t) \quad \checkmark \end{cases}$$

Dirac-Vektoren sind nicht quadratintegabel und damit auch nicht auf 1 normierbar. Stattdessen Normierung auf  $\delta$ -Funktion gemäß 2.1.1.2 S.11

$$\boxed{\langle \vec{r}_0 | \vec{r}_1 \rangle = \delta(\vec{r}_0 - \vec{r}_1)} \quad ; \quad \boxed{\langle \vec{p}_0 | \vec{p}_1 \rangle = \delta(\vec{p}_0 - \vec{p}_1)}$$

### 2.1.5.2 Unschärferelation und Kommutatoren

Wir hatten schon gesehen, dass Ort und Impuls nicht gleichzeitig scharf definiert sein können  $\rightarrow$  Orts-Impuls-Unschärfe. Nun: Quantifizierung und Verallgemeinerung.

Seien zwei Observablen  $A, B$  mit Operatoren  $\hat{A}, \hat{B}$

$\Rightarrow$  Erwartungswerte  $\langle A \rangle, \langle B \rangle$

Streuung („Unschärfe“)  $\Delta A^2 := \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle, \Delta B^2 := \langle (B - \langle B \rangle)^2 \rangle$

$$\text{Dann gilt: } \boxed{\Delta A^2 \cdot \Delta B^2 \geq \left| \langle \frac{1}{2i} [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right|^2} \quad ([\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})$$

$\rightsquigarrow$  Observablen können nicht gleichzeitig scharf bestimmt sein, wenn ihre Operatoren nicht vertauschen.

(Beweis: Einfachheitshalber: Definiere  $a = \hat{A} - \langle A \rangle, b = \hat{B} - \langle B \rangle \Rightarrow \Delta A^2 = \langle a^2 \rangle, \Delta B^2 = \langle b^2 \rangle$ )

- Zeige:  $\langle a^2 \rangle \langle b^2 \rangle \geq \langle \psi | ab\psi \rangle \langle \psi | ba\psi \rangle$

(Spezialfall einer Cauchy-Schwarzschen Ungleichung, siehe Kapitel 3 S.47)

Dazu: Zerlege  $|a\psi\rangle = |b\psi\rangle \frac{\langle b\psi | a\psi \rangle}{\langle b\psi | b\psi \rangle} + |\varphi\rangle; \langle a\psi| = \langle b\psi| \frac{\langle b\psi | a\psi \rangle^*}{\langle b\psi | b\psi \rangle} + \langle \varphi|$

$$\Rightarrow \langle b\psi | \varphi \rangle = \langle b\psi | a\psi \rangle - \langle b\psi | b\psi \rangle \frac{\langle b\psi | a\psi \rangle}{\langle b\psi | b\psi \rangle} = 0; \langle \varphi | b\psi \rangle = \langle b\psi | \varphi \rangle^* = 0$$

$$\Rightarrow \langle a^2 \rangle = \langle \psi | a^2 | \psi \rangle = \langle a\psi | a\psi \rangle = \langle b\psi | b\psi \rangle \frac{|\langle b\psi | a\psi \rangle|^2}{\langle b\psi | b\psi \rangle^2} + \langle \varphi | \varphi \rangle = \frac{|\langle b\psi | a\psi \rangle|^2}{\langle b^2 \rangle} + \langle \varphi | \varphi \rangle$$

$$\Rightarrow \langle a^2 \rangle \langle b^2 \rangle = |\langle b\psi | a\psi \rangle|^2 + \underbrace{\langle \varphi | \varphi \rangle \langle b^2 \rangle}_{\geq 0} \geq |\langle b\psi | a\psi \rangle|^2 = \langle \psi | ab\psi \rangle \langle \psi | ba\psi \rangle \quad \checkmark$$

- Zerlege  $ab = S + iC, ba = S - iC$  mit  $S = \frac{1}{2}(ab + ba), C = \frac{1}{2i}(ab - ba)$

$\Rightarrow$  Für beliebige quadratintegrale  $\psi, \varphi$  gilt:

$$\langle S\varphi | \psi \rangle = \frac{1}{2} (\langle ab\varphi | \psi \rangle + \langle ba\varphi | \psi \rangle) = \frac{1}{2} (\langle \varphi | ba\psi \rangle + \langle \varphi | ab\psi \rangle) = \langle \varphi | S\psi \rangle$$

$$\langle C\varphi | \psi \rangle = \frac{1}{2i} (\langle ab\varphi | \psi \rangle - \langle ba\varphi | \psi \rangle) = \frac{1}{2i} (\langle \varphi | ba\psi \rangle - \langle \varphi | ab\psi \rangle) = \langle \varphi | C\psi \rangle$$

$\Rightarrow S$  und  $C$  selbstadjungiert:

$\Rightarrow S$  und  $C$  haben reelle Erwartungswerte (vgl. 2.1.4.4 S.25)

$$\Rightarrow \langle \psi | ab\psi \rangle \langle \psi | ba\psi \rangle = \langle \psi | (S + iC)\psi \rangle \langle \psi | (S - iC)\psi \rangle = (\langle S \rangle + i\langle C \rangle)(\langle S \rangle - i\langle C \rangle) = \langle S \rangle^2 + \langle C \rangle^2 \geq \langle C \rangle^2$$

- Zusammen:  $\langle a^2 \rangle \langle b^2 \rangle \geq \langle C \rangle^2 = \left| \langle \frac{1}{2i} [a, b] \rangle \right|^2 = \left| \langle \frac{1}{2i} [A, B] \rangle \right|^2 \quad \checkmark$

Anwendungen: Unschärferelationen(a) Orts-Impuls-Unschärfe:  $\hat{A} = \hat{x}$ ,  $\hat{B} = \hat{p}$ 

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \text{ (vgl. 2.1.4.4 S.25)} \Rightarrow \langle \frac{1}{2i}[\hat{x}, \hat{p}] \rangle = \frac{\hbar}{2} \Rightarrow \boxed{\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}}$$

(b) Drehimpulskomponenten:  $\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p}$ 

$$\text{Allgemein gilt: } [\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i\hbar \epsilon_{jkl} \hat{L}_l \quad (\text{Übungsaufgabe})$$

$$\text{also z.B. } [\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z \Rightarrow \boxed{\Delta L_x \Delta L_y \geq \frac{\hbar}{2} |\langle L_z \rangle|} \text{ usw.}$$

(c) Energie-Zeit-Unschärfe ?

Kann so nicht hergeleitet werden, denn die Zeit  $t$  ist eigentlich kein Operator, sondern nimmt eine Sonderrolle ein. Trotzdem gibt es eine Unschärferelation für Energie und Zeit.  $\leadsto$  Siehe nächster Abschnitt!

**2.1.5.3 Ehrenfest-Theorem und Energie-Zeit-Unschärfe**

- Ehrenfest-Theorem (vorab)

beschreibt zeitliche Entwicklung von Erwartungswerten:

$$\boxed{\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle + \left\langle \frac{i}{\hbar} [H, A] \right\rangle}$$

$$\begin{aligned} \text{Rechnung: } \frac{d}{dt} \langle A \rangle &= \frac{d}{dt} \langle \psi | A | \psi \rangle = \langle \psi | \frac{\partial}{\partial t} A | \psi \rangle + (\langle \frac{\partial}{\partial t} \psi | A | \psi \rangle + \langle \psi | A | \frac{\partial}{\partial t} \psi \rangle) \\ &\quad \text{Schrödingergleichung: } |\frac{\partial}{\partial t} \psi\rangle = \frac{1}{i\hbar} |H\psi\rangle, \langle \frac{\partial}{\partial t} \psi| = -\frac{1}{i\hbar} \langle H\psi| \\ &= \langle \psi | \frac{\partial A}{\partial t} | \psi \rangle + \frac{1}{i\hbar} (-\langle \psi | HA | \psi \rangle + \langle \psi | AH | \psi \rangle) \\ &= \langle \psi | \frac{\partial A}{\partial t} | \psi \rangle + \langle \psi | \frac{1}{i\hbar} [A, H] | \psi \rangle \end{aligned}$$

$$\text{NB: Vergleiche klassische Mechanik: } \frac{d}{dt} A = \frac{\partial A}{\partial t} - \{H, A\}$$

$\leadsto$  Formaler Zusammenhang zwischen Poissonklammer  $\{\bullet, \bullet\}$  und Kommutator  $[\bullet, \bullet]$ .

- Energie-Zeit-Unschärfe

Frage: Was bedeutet „Zeitunschärfe  $\Delta t$ “?

Interpretation: Betrachte Messreihe an beliebiger Observablen  $A$ , die nicht explizit zeitabhängig  $\leadsto$  Erwartungswert  $\langle A \rangle$ , Unschärfe  $\Delta A$ .

Dann gibt es charakteristische Zeitskala  $\tau_A$ , auf der sich  $\langle A \rangle$  „sichtbar“ (um mehr als  $\Delta A$ ) verändern kann.

$$\leadsto \text{„Zeitunschärfe“ bzgl. Observablen } A: \tau_A = \frac{\Delta A}{|\frac{d}{dt} \langle A \rangle|}$$

Mit dem Ehrenfest-Theorem und der Unschärferelation gilt:

$$\begin{aligned} \left| \frac{d}{dt} \langle A \rangle \right| &\stackrel{\text{Ehrenfest}}{=} \left| \left\langle \frac{i}{\hbar} [H, A] \right\rangle \right| \stackrel{2.1.4.2 \text{ S.21}}{\leq} \frac{2}{\hbar} \Delta A \Delta H \\ \Rightarrow \tau_A &\geq \frac{\Delta A}{\frac{2}{\hbar} \Delta A \Delta H} = \frac{\hbar}{2} \frac{1}{\Delta H} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \boxed{\tau_A \cdot \Delta H \geq \frac{\hbar}{2}} \text{ für alle charakteristischen Zeitskalen } \tau_A$$

$$\text{Identifiziere } \tau_A \geq \Delta t, \Delta H = \Delta E \rightarrow \boxed{\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}}$$

**2.1.5.4 Korrespondenzprinzip**

Formale „Übersetzungsregel“ für die Konstruktion eines Operators aus der entsprechenden „klassischen“ Größe:

$\vec{r}$	$\rightarrow$	$\hat{\vec{r}} = \vec{r}$
$\vec{p}$	$\rightarrow$	$\hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$
$E$	$\rightarrow$	$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$

Letzteres steht im Zusammenhang mit der Schrödingergleichung:

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V = \mathcal{H}(\vec{r}, p) \rightarrow \hat{E}\psi = \hat{H}\psi \Leftrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = (-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V)\psi$$

Aber: Übersetzung ist unter Umständen nicht eindeutig, da Reihenfolge der Operatoren in der Quantenmechanik wichtig.

Zusatzforderungen:

Operator selbstadjungiert (reicht oft schon).

Zusammenhang zwischen klassischer Poissonklammer und Kommutator

$$\{A, B\} = C \rightarrow [\hat{A}, \hat{B}] = i\hbar \hat{C} \text{ (siehe 2.1.5.3 S.28, Ehrenfest-Theorem)}$$

Bemerkung: Auf makroskopischer Skala (Grenzwert  $\hbar \rightarrow 0$ ) muss klassische nichtrelativistische Mechanik wiederhergestellt sein.

**2.1.5.5 Spezielle Operatoren & Kommutatoren**

„Observable“	Allgemeiner Ausdruck	Orts-Darstellung	Impuls-Darstellung
Ort	$\hat{\vec{r}}$	$\vec{r}$	$-\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_{\vec{p}}$
Impuls	$\hat{\vec{p}}$	$\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_{\vec{r}}$	$\vec{p}$
Drehimpuls	$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}$	$\frac{\hbar}{i} (\vec{r} \times \vec{\nabla}_{\vec{r}})$	$\frac{\hbar}{i} (\vec{p} \times \vec{\nabla}_{\vec{p}})$
Hamilton-Op.	$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(\vec{r})$	$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r})$	$\frac{\vec{p}^2}{2m} + V(-\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_{\vec{p}})$
Wahrscheinlichkeits-Dichten (*)	$\hat{W}(\vec{r}_0) =  \vec{r}_0\rangle \langle \vec{r}_0 $ $\hat{W}(\vec{p}_0) =  \vec{p}_0\rangle \langle \vec{p}_0 $	$\delta(\vec{r} - \vec{r}_0)$ kompliziert	kompliziert $\delta(\vec{p} - \vec{p}_0)$
Wahrscheinlichkeits-Stromdichte (**)	$\hat{j}(\vec{r}_0) = \frac{1}{2m} (\hat{W}(\vec{r}_0) \hat{\vec{p}} + \hat{\vec{p}} \hat{W}(\vec{r}_0))$	$\frac{1}{2m} (\delta(\vec{r} - \vec{r}_0) \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_{\vec{r}} + \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_{\vec{r}} \delta(\vec{r} - \vec{r}_0))$	kompliziert
Energie	$\hat{E} = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t}$		
Zeit	kein Operator: Sonderrolle		

(\*) Wahrscheinlichkeitsdichten - vgl. 2.1.4.1 S.21

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{W}(\vec{r}_0) | \psi \rangle &= \langle \psi | \vec{r}_0 \rangle \langle \vec{r}_0 | \psi \rangle = |\psi(\vec{r}_0, t)|^2 \\ \langle \psi | \hat{W}(\vec{p}_0) | \psi \rangle &= \langle \psi | \vec{p}_0 \rangle \langle \vec{p}_0 | \psi \rangle = |\psi(\vec{p}_0, t)|^2 \end{aligned}$$

(\*\*) Wahrscheinlichkeitsstrom - vgl. 2.1.4.2 S.21

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{j}(\vec{r}_0) | \psi \rangle &= \frac{1}{2m} (\langle \psi | \vec{r}_0 \rangle \langle \vec{r}_0 | \vec{p} | \psi \rangle + \langle \psi | \vec{p} | \vec{r}_0 \rangle \langle \vec{r}_0 | \psi \rangle) \\ &= \frac{\hbar}{2mi} (\psi^*(\vec{r}_0, t) \vec{\nabla} \psi(\vec{r}_0, t) - \psi(\vec{r}_0, t) \vec{\nabla} \psi^*(\vec{r}_0, t)) \end{aligned}$$

Spezielle Kommutatoren:  $[\hat{p}_j, \hat{r}_k] = \frac{\hbar}{i} \delta_{jk}$ ;  $[\hat{p}_j, \hat{p}_k] = 0$ ;  $[\hat{r}_j, \hat{r}_k] = 0$ ;

$$[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = -\frac{\hbar}{i} \epsilon_{jkl} \hat{L}_l; [\hat{L}^2, \hat{L}_j] = 0 \quad \text{(Übungsaufgaben)}$$

## 2.2 Lösungen der Schrödingergleichung

### 2.2.1 Die stationäre (zeitunabhängige) Schrödingergleichung

Erinnerung: Schrödingergleichung lautet  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H} \psi$

mit  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V$  : Hamiltonoperator

Nun sei  $\hat{H}$  nicht explizit zeitabhängig (d.h.  $V$  unabhängig von  $t$ ,  $V(\vec{r})$ )

Dann kann man einen Separationsansatz machen:

$$\begin{aligned} \psi &= \varphi(\vec{r}) \cdot \chi(t) && \text{(Separation der Variablen)} \\ \Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\varphi(\vec{r}) \cdot \chi(t)) &= \hat{H} (\varphi(\vec{r}) \cdot \chi(t)) \\ \rightarrow \varphi(\vec{r}) \cdot i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \chi(t) &= \chi(t) \cdot \hat{H} \varphi(\vec{r}) && | \text{ Teile durch } \varphi(\vec{r}) \cdot \chi(t) \\ \Rightarrow i\hbar \underbrace{\frac{\partial}{\partial t} \chi(t)}_{\substack{\text{hängt nur von } t \\ \text{ab, nicht von } \vec{r}}} &= \underbrace{\frac{\hat{H} \varphi(\vec{r})}{\varphi(\vec{r})}}_{\substack{\text{hängt nur von } \vec{r} \\ \text{ab, nicht von } t}} = \underbrace{\text{const}}_{\substack{\text{darf daher} \\ \text{weder von } \vec{r} \\ \text{noch von } t \\ \text{abhängen}}} \equiv E \end{aligned}$$

$\Rightarrow$  Man erhält zwei Gleichungen, die simultan erfüllt sein müssen:

- (i)  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \chi_E(t) = E \chi_E(t)$   
 $\leadsto$  Lösung lautet:  $\chi_E(t) = \text{const} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} E t}$
- (ii)  $\hat{H} \varphi_E(\vec{r}) = E \varphi_E(\vec{r})$  : zeitunabhängige Schrödingergleichung  
 $\leadsto$  kann gelöst werden für bestimmte (nicht für alle!) Werte von  $E$

Für die allgemeine Lösung der Schrödingergleichung folgt:

$$\psi(\vec{r}, t) = \underbrace{\sum_{\text{„dE“}} c_E}_{\substack{\text{Überlagerung von} \\ \text{Lösungen für} \\ \text{verschiedene } E}} \underbrace{\varphi_E(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} E t}}_{\substack{\text{Lösung für ein } E}} \quad \text{Notation } \sum_{\text{„dE“}} c_E \cdot \varphi_E(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \text{ steht für}$$

Überlagerung aller möglichen Eigenfunktionen mit Amplitude  $c_E$ .

Struktur der zeitunabhängigen Schrödingergleichung:

$$\text{Eigenwertgleichung: } \hat{H} \underbrace{\varphi_E(\vec{r})}_{\substack{\text{Eigenfunktion} \\ \text{zum Operator } \hat{H}}} = \underbrace{E}_{\substack{\text{Eigenwert}}} \varphi_E(\vec{r})$$

Das „Spektrum“ der Eigenwerte  $E$ , für die eine Lösung existiert, kann diskret sein (nur einzelne Werte möglich), kontinuierlich (Intervall von Werten) oder auch gemischt.

(Falls Spektrum kontinuierliche Anteile hat, sind allerdings die zugehörigen Eigenfunktionen nicht mehr normierbar, ähnlich ebenen Wellen. Siehe dazu Kapitel 3.1.3.2 S.54)

Forderung an den Hamiltonoperator: Das Spektrum ist nach unten beschränkt, d.h. es gibt einen Grundzustand, der  $E$  minimiert.

Interpretation: (Vorweggenommen von Kapitel 3.2 S.56)

Eigenwerte  $E$  sind die einzig möglichen Messwerte bei einer Energiemessung

$|c_E|^2$  gibt die Wahrscheinlichkeit an, einen bestimmten Energieeigenwert  $E$  zu messen.

(Zur Konsistenz mit der bisherigen Wahrscheinlichkeitsdeutung siehe Kapitel 3 S.47)

## 2.2.2 Lösungen der stationären Schrödingergleichung in einer Dimension

### 2.2.2.1 Freies Teilchen

Potential:  $V(x) \equiv 0$ ,  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$

Schrödingergleichung:  $(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}) \varphi_E(x) = E \varphi_E(x)$

Lösung:  $\varphi_E(x) = \mathcal{N} e^{\pm \lambda x}$  mit  $-\frac{\hbar^2 \lambda^2}{2m} = E \Rightarrow \hbar \lambda = \sqrt{-2mE}$

- $E > 0$ :  $\lambda = ik$  imaginär  $\rightarrow$  ebene de Broglie-Wellen
- $E < 0$ :  $\lambda$  reell:  $\varphi_E(x) \propto e^{\pm \lambda x}$  divergiert bei  $x \rightarrow +\infty$  oder  $x \rightarrow -\infty$   
 $\leadsto$  verboten! Lösungen mit  $E < 0$  existieren nicht.

Diskussion:

- (i) Beispiel für ein rein kontinuierliches Spektrum  
 Lösungen existieren für alle  $E \geq 0$   
 (vgl. klassisch:  $E = \frac{p^2}{2m} \geq 0$  : passt!)
- (ii)  $\varphi_E$  ist nicht quadratintegrabel, aber beschränkt ( $|\varphi| < \infty$ )  
 $\leadsto$  Boxnormierung oder Normierung auf  $\delta$ -Funktion möglich (2.1.1.3 S.11)

Deutung: Freies Teilchen, Wellenpaket zerfließt

$\leadsto$  Stationäre Lösung kann nicht lokalisiert sein

(vgl. klassisch: Wenn man unendlich lange wartet, bewegt sich das Teilchen beliebig weit weg.)

Formaler: Kontinuierliches Spektrum

$\leftrightarrow$  Eigenfunktionen sind nicht normierbar

- (iii) Eigenwerte  $E$  sind zweifach entartet  
 Unabhängige Lösungen  $\varphi_E(x) \propto e^{\pm \lambda x}$   
 ( $\hat{=}$  rechtslaufende und linkslaufende Welle)

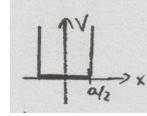
Hintergrund:  $\hat{H}$  ist symmetrisch bzgl. Vertauschung  $x \leftrightarrow -x$

$\leadsto$  mit  $\varphi(x)$  ist auch  $\varphi(-x)$  Eigenfunktion.

- (iv) Die Untergrenze der Energie (Grundzustandsenergie) ist  $E_0 = 0$ .

### 2.2.2.2 Teilchen im unendlich hohen Potentialtopf

Potential:  $V(x) = \begin{cases} 0 & |x| < \frac{a}{2} \\ \infty & |x| > \frac{a}{2} \end{cases}$



Schrödingergleichung:  $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) = (V - E) \varphi(x)$

Lösung:

- Symmetrieüberlegungen vorab (spart später Rechenaufwand!)

Symmetrie bzgl. Vertauschung  $x \leftrightarrow -x$

→ Mit  $\varphi_E(x)$  ist auch  $\varphi_E(-x)$  Eigenfunktion zum Eigenwert  $E$

→ Eigenfunktionen können zerlegt werden in „gerade“ und „ungerade“

Anteile:  $\varphi_E(x) = \varphi_g(x) + \varphi_u(x)$ , die selbst wieder Eigenfunktionen von  $E$  sind:  $\varphi_{g,u}(x) = \frac{1}{2}(\varphi_E(x) \pm \varphi_E(-x)) = \pm \varphi_{g,u}(-x)$

→ Lösungen können sortiert werden nach gerade / ungerade

- Form der Lösung innerhalb und außerhalb des Topfes

Außen ( $|x| > \frac{a}{2}$ ):  $(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + E) \varphi(x) = V \varphi(x) < \infty$   
Aber:  $V \rightarrow \infty \Rightarrow \varphi(x) \equiv 0$  überall

Innen ( $|x| < \frac{a}{2}$ ): Selbe Schrödingergleichung wie freies Teilchen

$$E > 0: \left. \begin{array}{l} \varphi_g(x) \propto \frac{1}{2}(e^{ikx} + e^{-ikx}) = \cos kx \\ \varphi_u(x) \propto \frac{1}{2}(e^{ikx} - e^{-ikx}) \propto \sin kx \end{array} \right\} \text{ mit } \hbar k = \sqrt{2mE}$$

$$E < 0: \left. \begin{array}{l} \varphi_g(x) \propto \frac{1}{2}(e^{\kappa x} + e^{-\kappa x}) = \cosh \kappa x \\ \varphi_u(x) \propto \frac{1}{2}(e^{\kappa x} - e^{-\kappa x}) = \sinh \kappa x \end{array} \right\} \text{ mit } \hbar \kappa = \sqrt{-2mE}$$

Die tatsächlich erlaubten Lösungen ergeben sich aus den Anschlussbedingungen bei  $x = \pm \frac{a}{2}$

- Anschlussbedingung bei  $|x| = \frac{a}{2}$ :  $\varphi(x)$  muss stetig sein.

Begründung: Erwartungswert  $\langle H \rangle = E < \infty$  muss beschränkt sein.

Es gilt  $\langle H \rangle = \langle \frac{p^2}{2m} \rangle + \langle V \rangle$  und  $\langle V \rangle = \int dx |\psi|^2 V(x) > 0 \Rightarrow \langle p^2 \rangle < \infty$

$\langle p^2 \rangle = \int dx \psi^*(x, t) \hat{p}^2 \psi(x, t) = \int dx (\hat{p}\psi)^*(\hat{p}\psi) = \hbar^2 \int dx |\frac{d\psi}{dx}|^2$

Wenn  $\varphi$  unstetig wäre, z.B. bei  $x = a/2$  um  $\Delta\varphi$  springen würde, dann wäre

→  $\frac{d\varphi}{dx} = \Delta\varphi \delta(x - \frac{a}{2}) + \dots \rightarrow \langle p^2 \rangle = \hbar^2 \int dx \delta(x - \frac{a}{2})^2 \Delta\varphi^2 + \dots$   
→  $\langle p^2 \rangle = \hbar^2 \Delta\varphi^2 \delta(0) + \dots \rightarrow \infty$  nicht erlaubt! )

- Konkret ergibt sich Anschlussbedingung:  $\varphi(\pm a/2) = 0$

$E > 0$ :  $\varphi_g(x) = \mathcal{N} \cos(kx)$  mit  $\cos(\frac{ka}{2}) \stackrel{!}{=} 0$

→ geht nur für  $\frac{ka}{2} = (m + \frac{1}{2})\pi$  ( $m \in \mathbb{Z}$ ) →  $k = \frac{\pi}{a}(2m + 1)$

$\varphi_u(x) = \mathcal{N} \sin(kx)$  mit  $\sin(\frac{ka}{2}) \stackrel{!}{=} 0$

→ geht nur für  $\frac{ka}{2} = m\pi$  ( $m \in \mathbb{Z}$ ) →  $k = \frac{\pi}{a}2m$

Normierungsfaktor in beiden Fällen:  $\mathcal{N} = \sqrt{2/a}$  (Übungsaufgabe)

$$\begin{aligned} \underline{E < 0}: \quad \varphi_g(x) &= \mathcal{N} \cosh(\kappa x) \text{ mit } \cosh\left(\frac{\kappa a}{2}\right) \stackrel{!}{=} 0 \\ &\leadsto \text{geht nicht} \\ \varphi_u(x) &= \mathcal{N} \sinh(\kappa x) \text{ mit } \sinh\left(\frac{\kappa a}{2}\right) \stackrel{!}{=} 0 \\ &\leadsto \text{geht nicht für } \kappa \neq 0, a \neq 0 \\ &\Rightarrow \text{Lösungen mit } E < 0 \text{ existieren nicht!} \end{aligned}$$

Zusammenfassend:

Mögliche Energieeigenwerte sind:  $E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\pi^2}{a^2} n^2$  mit  $n \in \mathbb{N}$ .

Falls  $n$  gerade: Eigenfunktion ungerade  $\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\pi n \frac{x}{a}\right)$

Falls  $n$  ungerade: Eigenfunktion gerade  $\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\pi n \frac{x}{a}\right)$

Diskussion:

- (i) Beispiel für ein diskretes Spektrum
- (ii)  $\varphi_n$  problemlos normierbar, lokalisiert im Potentialtopf  $|x| < \frac{a}{2}$   
(vgl. klassisch: Teilchen kann nicht entweichen)
- (iii) Energieeigenwerte nicht entartet

Es gilt zwar wieder: Schrödingergleichung symmetrisch bezüglich  
Vertauschung  $x \leftrightarrow -x$

Aber: Eigenfunktionen zu gegebenem Eigenwert  $E_n$  haben definierte Parität:

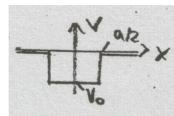
$$\varphi_E(x) = \pm \varphi_E(-x) \leadsto \varphi_E(x) \text{ und } \varphi_E(-x) \text{ sind nicht unabhängig!}$$

- (iv) Obwohl  $V(x) = 0$  im Topf, ist die Grundzustandsenergie nicht Null:  
 $E_0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m a^2} > 0!$

Interpretation: Da  $x$  lokalisiert ist, gilt  $\Delta x < \infty$ . Wegen der Unschärferelation  $\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$  kann  $\langle p^2 \rangle$  deshalb nicht Null sein und das Teilchen hat kinetische Energie!

### 2.2.2.3 Teilchen im endlich hohen Potentialtopf

Potential: 
$$V(x) = \begin{cases} V_0 & : |x| \leq \frac{a}{2} \\ 0 & : |x| > \frac{a}{2} \end{cases} \quad (V_0 < 0)$$



Schrödingergleichung: 
$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) = (V - E) \varphi(x)$$

Lösung:

- Symmetrieüberlegungen wie bei 2.2.2.2

Schrödingergleichung wieder symmetrisch bzgl.  $x \leftrightarrow -x$

$\leadsto$  Sortiere Lösungen nach geraden/ungeraden Funktionen  $\varphi_g(x)$ ,  $\varphi_u(x)$

- Form der Lösung innerhalb und außerhalb des Topfes

Innen:  $|x| < \frac{a}{2}$

$$E > V_0: \left. \begin{array}{l} \varphi_g(x) = \alpha \cos qx \\ \varphi_u(x) = \alpha \sin qx \end{array} \right\} \text{ mit } \hbar q = \sqrt{2m(E - V_0)}$$

$$E < V_0: \left. \begin{array}{l} \varphi_g(x) = \alpha \cosh \theta x \\ \varphi_u(x) = \alpha \sinh \theta x \end{array} \right\} \text{ mit } \hbar \theta = \sqrt{-2m(E - V_0)}$$

Außen rechts:  $x > \frac{a}{2}$

$$E > 0: \varphi_{g,u}(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \text{ mit } \hbar k = \sqrt{2mE}$$

$$E < 0: \varphi_{g,u}(x) = \underbrace{Ae^{\kappa x}}_{\substack{\text{verboten,} \\ \text{da divergent bei } x \rightarrow \infty}} + Be^{-\kappa x} \text{ mit } \hbar \kappa = \sqrt{-2mE}$$

Außen links:  $x < -\frac{a}{2}$

$$\text{Dieselbe Lösung gespiegelt: } \varphi_g(x) = \varphi_g(-x), \varphi_u(x) = -\varphi_u(-x)$$

- Anschlussbedingungen:

$$\text{Schrödingergleichung } \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) = (V - E) \varphi(x) < \infty$$

$$\Rightarrow \frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) < \infty \Rightarrow \frac{d}{dx} \varphi \text{ stetig und } \varphi \text{ stetig !}$$

- Konkret: Bedingung  $\varphi(x), \varphi'(x)$  stetig bei  $x = \frac{a}{2}$  (Stetigkeit bei  $-\frac{a}{2}$  folgt daraus)

$$E < V_0: \quad (\hbar \theta = \sqrt{2m(V_0 - E)}; \hbar \kappa = \sqrt{-2mE})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \varphi_g \text{ stetig} \rightarrow \alpha \cosh \frac{\theta a}{2} = Be^{-\frac{\kappa a}{2}} \\ \varphi'_g \text{ stetig} \rightarrow \alpha \theta \sinh \frac{\theta a}{2} = -B\kappa e^{-\frac{\kappa a}{2}} \end{array} \right\} \Rightarrow \frac{1}{\theta} \coth \frac{\theta a}{2} = \frac{-1}{\kappa} < 0$$

$\leadsto$  nicht möglich, da  $\coth y > 0$  für  $y > 0$

Analog folgt auch: Ungerade Lösungen  $\varphi_u$  nicht möglich

$\Rightarrow$  Lösungen mit  $E < V_0$  existieren nicht.

$$V_0 < E < 0: \quad (\hbar q = \sqrt{2m(E - V_0)}; \hbar \kappa = \sqrt{-2mE})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \varphi_g \text{ stetig} \rightarrow \alpha \cos \frac{qa}{2} = Be^{-\frac{\kappa a}{2}} \\ \varphi'_g \text{ stetig} \rightarrow -\alpha q \sin \frac{qa}{2} = -B\kappa e^{-\frac{\kappa a}{2}} \end{array} \right\} \Rightarrow \frac{1}{q} \cot \frac{qa}{2} = \frac{1}{\kappa}$$

$$\leadsto \text{geht nur für } \frac{qa}{2} = \text{arccot} \frac{q}{\kappa} + l\pi = m\pi + \frac{\pi}{2} - \arctan \frac{q}{\kappa} \quad (l \in \mathbb{Z})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \varphi_u \text{ stetig} \rightarrow \alpha \sin \frac{qa}{2} = Be^{-\frac{\kappa a}{2}} \\ \varphi'_u \text{ stetig} \rightarrow \alpha q \cos \frac{qa}{2} = -B\kappa e^{-\frac{\kappa a}{2}} \end{array} \right\} \Rightarrow \frac{1}{q} \tan \frac{qa}{2} = -\frac{1}{\kappa}$$

$$\leadsto \text{geht nur für } \frac{qa}{2} = -\arctan \frac{q}{\kappa} + l\pi \quad (l \in \mathbb{Z})$$

$$\Rightarrow \text{Zusammen: Diskrete Energieeigenwerte } E_n = \frac{\hbar^2 q_n^2}{2m} + V_0$$

$$\text{mit Quantisierungsbedingung: } q_n a + 2 \arctan \frac{q_n}{\kappa_n} = n\pi \quad (n \in \mathbb{N})$$

$$n \text{ ungerade} \rightarrow \text{Eigenfunktion } \varphi_n \text{ gerade} \quad (\kappa_n = q_n \sqrt{\frac{-E_n}{E_n - V_0}})$$

$$n \text{ gerade} \rightarrow \text{Eigenfunktion } \varphi_n \text{ ungerade}$$

$$E > 0: \quad (\hbar q = \sqrt{2m(E - V_0)}; \hbar k = \sqrt{2mE})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \varphi_g \text{ stetig} \rightarrow \alpha \cos \frac{qa}{2} = Ae^{\frac{ika}{2}} + Be^{-\frac{ika}{2}} \\ \varphi'_g \text{ stetig} \rightarrow q\alpha \sin \frac{qa}{2} = ik(Ae^{\frac{ika}{2}} - Be^{-\frac{ika}{2}}) \end{array} \right\} \left. \begin{array}{l} \text{Immer möglich} \\ \text{(Für jedes } B \\ \text{erhält man} \\ \text{lösbare Gleichungen} \\ \text{für } A \text{ und } \alpha) \end{array} \right\}$$

$\Rightarrow$  Zu jedem Wert  $E > 0$  existiert gerade und ungerade Eigenfunktion

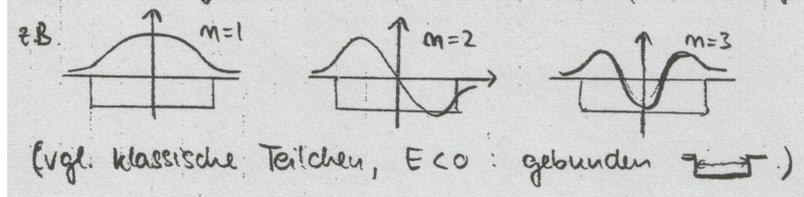
Diskussion:

(i) Spektrum hat diskreten und kontinuierlichen Anteil

- diskrete Eigenwerte:  $V_0 < E < 0$
- kontinuierliche Eigenwerte:  $E > 0$

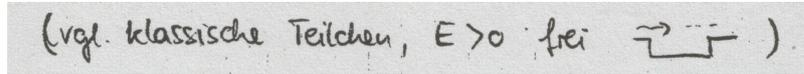
(ii) Eigenfunktionen

- zu diskreten Eigenwerten  $\rightarrow$  lokalisiert und quadratintegabel



- zu kontinuierlichen Eigenwerten  $\rightarrow$  delokalisiert, nicht quadratintegabel.

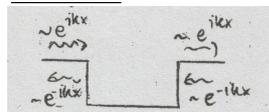
Eigenfunktionen außerhalb des Topfes sind quasi freie Teilchen



(iii) Entartung der Energieeigenwerte

- gebundene Zustände: nicht entartet, da definierte Parität
- freie Zustände: zweifach entartet, da zu jeder Parität (gerade/ungerade) eine eigene Lösung existiert.

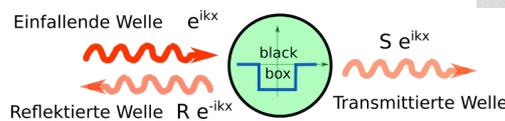
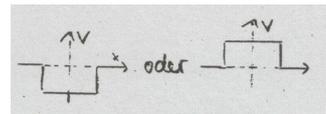
(iv) Deutung des Falles  $E > 0$



Streuung freier Teilchen an einem Potentialtopf. Dieses Szenario soll im nächsten Abschnitt genauer untersucht werden.

2.2.2.4 Streuung am Kastenpotential

Potential: 
$$V(x) = \begin{cases} V_0 & |x| \leq \frac{a}{2} \\ 0 & |x| > \frac{a}{2} \end{cases}$$



Frage: Wie wird ein freies Teilchen (Energie  $E > 0$ ) am Potential gestreut?

$\leadsto$  Wie groß sind die Amplituden  $R$  und  $S$ ?

Zugang über Wahrscheinlichkeitsströme  $j = \frac{\hbar}{2mi} (\varphi^* \frac{d}{dx} \varphi - \varphi \frac{d}{dx} \varphi^*)$

mit  $\varphi_{\text{links}} := \varphi(x \rightarrow -\infty) = \varphi_{\text{ein}} + \varphi_{\text{refl}} = e^{ikx} + R e^{-ikx}$ .

$\varphi_{\text{rechts}} := \varphi(x \rightarrow +\infty) = \varphi_{\text{trans}} = S e^{ikx}$ .

$\Rightarrow j_{\text{links}} = \frac{\hbar k}{m} (1 - |R|^2) = j_{\text{ein}} - j_{\text{refl}}$  (Interferenzterme heben sich weg.)

$j_{\text{rechts}} = \frac{\hbar k}{m} |S|^2 = j_{\text{trans}}$

NB: Es gilt  $j_{\text{links}} = j_{\text{rechts}}$  (Wahrscheinlichkeitserhaltung)

$\Rightarrow j_{\text{ein}} = j_{\text{refl}} + j_{\text{trans}}$  bzw.  $|R|^2 + |S|^2 = 1$ .

Gesucht also:

$$\text{Transmissionskoeffizient } T = \frac{|\text{Transmittierter Strom}|}{|\text{Einfallender Strom}|} = \frac{|j_{\text{trans}}|}{|j_{\text{ein}}|} = |S|^2$$

$$\text{Reflexionskoeffizient } \frac{|\text{Reflektierter Strom}|}{|\text{Einfallender Strom}|} = \frac{|j_{\text{refl}}|}{|j_{\text{ein}}|} = |R|^2$$

Lösung:  $(E > 0, \boxed{\hbar k = \sqrt{2mE}})$

$E > V_0$ : im Prinzip selbe Situation wie in 2.2.2.3  $\boxed{\hbar q = \sqrt{2m(E - V_0)}}$

Form der Lösung:  $\varphi(x) = \varphi_g(x) + \varphi_u(x)$  mit

$$\begin{aligned} |x| < \frac{a}{2} : \varphi_g(x) &= \alpha_g \cos qx & \varphi_u(x) &= \alpha_u \sin qx \\ x > \frac{a}{2} : \varphi_g(x) &= A_g e^{ikx} + B_g e^{-ikx}; \varphi_u(x) &= A_u e^{ikx} + B_u e^{-ikx} \\ x < -\frac{a}{2} : \varphi_g(x) &= A_g e^{-ikx} + B_g e^{ikx}; \varphi_u(x) &= -A_u e^{-ikx} - B_u e^{ikx} \end{aligned}$$

Hier: Teilchen läuft von links ein, also:

$$\begin{aligned} x > \frac{a}{2} : \varphi(x) &= \varphi_g + \varphi_u = S e^{ikx} \Rightarrow S = A_g + A_u, B_g + B_u = 0 \\ x < -\frac{a}{2} : \varphi(x) &= e^{ikx} + R e^{-ikx} \Rightarrow R = A_g - A_u, B_g - B_u = 1 \\ &\Rightarrow B_g = -B_u = \frac{1}{2}; A_g \text{ und } A_u \text{ legen } R \text{ und } S \text{ fest.} \end{aligned}$$

Anschlussbedingungen wie bei 2.2.2.3:  $\varphi_{g,u}(x)$  und  $\varphi'_{g,u}(x)$  stetig

$$\begin{aligned} \text{gerader Anteil } \varphi_g &\rightarrow \begin{pmatrix} \cos \frac{qa}{2} & -e^{ika/2} \\ i \frac{q}{k} \sin \frac{qa}{2} & -e^{ika/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_g \\ A_g \end{pmatrix} = \frac{1}{2} e^{-ika/2} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \\ \text{ungerader A. } \varphi_u &\rightarrow \begin{pmatrix} \sin \frac{qa}{2} & -e^{ika/2} \\ -i \frac{q}{k} \cos \frac{qa}{2} & -e^{ika/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_u \\ A_u \end{pmatrix} = \frac{1}{2} e^{-ika/2} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Auswertung: Nach Matrixinversion erhält man:

$$\begin{aligned} \alpha_g &= \frac{e^{-ika/2}}{\cos \frac{qa}{2} - i \frac{q}{k} \sin \frac{qa}{2}}; A_g = \frac{1}{2} \frac{\cos \frac{qa}{2} + i \frac{q}{k} \sin \frac{qa}{2}}{\cos \frac{qa}{2} - i \frac{q}{k} \sin \frac{qa}{2}} e^{-ika} \\ \alpha_u &= \frac{-e^{-ika/2}}{\sin \frac{qa}{2} + i \frac{q}{k} \cos \frac{qa}{2}}; A_u = -\frac{1}{2} \frac{\sin \frac{qa}{2} - i \frac{q}{k} \cos \frac{qa}{2}}{\sin \frac{qa}{2} + i \frac{q}{k} \cos \frac{qa}{2}} e^{-ika} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow S &= A_g + A_u = \frac{e^{-ika}}{\cos(qa) + \frac{1}{2i}(k/q + q/k) \sin(qa)} \\ R &= A_g - A_u = \frac{e^{-ika}}{2i} \frac{(k/q - q/k) \sin(qa)}{\cos(qa) + \frac{1}{2i}(k/q + q/k) \sin(qa)} \end{aligned}$$

$0 < E < V_0$ : (setzt  $V_0 > 0$  voraus)

Vorheriges Ergebnis kann übernommen werden, mit der einzigen

Änderung, dass  $q$  imaginär wird:  $q = i\theta$  mit  $\boxed{\hbar\theta = \sqrt{2m(V_0 - E)}}$

$$\begin{aligned} \Rightarrow S &= \frac{e^{-ika}}{\cosh(\theta a) + \frac{1}{2i}(k/\theta - \theta/k) \sinh(\theta a)} \\ R &= \frac{e^{-ika}}{2i} \frac{(k/\theta + \theta/k) \sinh(\theta a)}{\cosh(\theta a) + \frac{1}{2i}(k/\theta - \theta/k) \sinh(\theta a)} \end{aligned}$$

Zusammenfassend:

- Transmissionskoeffizient  $T = |S|^2$

$$E > V_0: \boxed{T = 1 / [1 + \frac{1}{4} (\frac{k}{q} - \frac{q}{k})^2 \sin^2(qa)]}$$

$$E < V_0: \boxed{T = 1 / [1 + \frac{1}{4} (\frac{k}{\theta} + \frac{\theta}{k})^2 \sinh^2(\theta a)]}$$

- Reflexionskoeffizient:  $|R|^2 = 1 - |S|^2$  (check durch Einsetzen)

Diskussion:

(i)  $E < V_0$ : Tunneleffekt

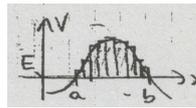
Transmission, wo sie klassisch verboten wäre

Für dicke Tunnelbarrieren gilt asymptotisch:

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

~ Motiviert WKB-Näherung für beliebige Potentialbarrieren:

(WKB: Wentzel, Brillouin, Kramer, 1926)



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

(vgl. Bemerkung am Anfang von 2.1.3 S.19)

kann verwendet werden, wenn  $V(x)$  hinreichend langsam variiert und wenn Transmission  $T$  sehr klein ist.

(ii)  $E > V_0$ : Resonanzen

Klassisch wäre  $T = 1$  (Teilchen wird immer transmittiert)

Hier:

$$T = 1 \text{ nur für } \sin(qa) = 0$$

~ wenn  $\varphi$  gerade in den Topf „passt“

Sonst ist  $T < 1$

$T$  besonders klein, wenn  $E$  klein und  $(E - V_0)$  groß ( $\leftrightarrow \frac{q}{k}$  groß)

~ Reflexion am Potentialtopf

$\Rightarrow T$  zeigt charakteristische Oszillationen:



## 2.3 Zweikörperproblem und Wasserstoffatom

Betrachte nun System von zwei Teilchen, Massen  $m_1, m_2$ , Potential  $V(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$

Symmetrien:

Translationsinvarianz  $\rightarrow V = V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$

Isotropie des Raumes  $\rightarrow V = V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$

Speziell Wasserstoffatom: Coulombpotential  $V = -e^2/r$

Vorüberlegung: Erinnerung an klassische Mechanik (Keplerproblem)

Vorgehen damals in drei Schritten:

(i) Reduktion auf Einteilchenproblem

Ausnutzen der Translationsinvarianz  $\leftrightarrow$  Impulserhaltung

$\rightarrow$  Schwerpunkt- und Relativkoordinaten

Schwerpunkt: allgemein lösbar für gegebenen Gesamtimpuls  $\vec{P}$

Relativkoordinaten  $\rightarrow$  äquivalentes Problem:

Ein Teilchen mit reduzierter Masse  $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$   
im Zentralpotential  $V(r)$

(ii) Reduktion auf eindimensionales Problem

Ausnutzen der Isotropie  $\leftrightarrow$  Drehimpulserhaltung

$\rightarrow$  Winkel- und Radialkoordinaten

Winkelkoordinaten: allgemein lösbar für gegebenen Drehimpuls  $l$

Radialkoordinaten  $\rightarrow$  äquivalentes Problem:

Ein Teilchen in einer Dimension  
im effektiven Potential  $V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{l^2}{2\mu r^2}$

(iii) Lösung für ein konkretes Potential

Speziell  $V(r) \propto -\frac{1}{r}$ : Kepler-Problem

Hier nun in der Quantenmechanik: Folge im wesentlichen demselben Programm

### 2.3.1 Reduktion auf Einteilchenproblem

Ausgangspunkt: Zwei Teilchen  $m_1, m_2$

Hamiltonoperator:  $\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$

wirkt auf Zweiteilchenwellenfunktion  $\varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$

$(\vec{p}_1 = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_{\vec{r}_1} = \frac{\hbar}{i} (\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial y_1}, \frac{\partial}{\partial z_1}), \vec{p}_2 = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_{\vec{r}_2})$

Schrödingergleichung:  $\hat{H}\varphi = E\varphi$

(NB: Vorgriff  $\rightarrow$  Vielteilchensysteme hatten wir noch nicht. Verallgemeinerung aber für den Fall unterscheidbarer Teilchen (Proton/Elektron unterscheidbar) ziemlich offensichtlich.)

Translationsinvarianz:  $V = V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$

→ legt Übergang zu Schwerpunkt- und Relativkoordinaten nahe

analog Mechanik:  $\vec{R} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2}$  ;  $\vec{r} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1$

⇒ Zugehörige Impulse sind:

$$\hat{\vec{P}} := \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_{\vec{R}} = \hat{p}_1 + \hat{p}_2 \quad ; \quad \hat{\vec{p}} := \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_{\vec{r}} = \frac{m_1 \hat{p}_2 - m_2 \hat{p}_1}{m_1 + m_2}$$

(Rechnung: Es gilt  $\vec{r}_1 = \vec{R} - \frac{m_2}{m_1 + m_2} \vec{r}$ ,  $\vec{r}_2 = \vec{R} + \frac{m_1}{m_1 + m_2} \vec{r}$

Allgemein gilt für Variablentransformationen  $(x_1 \dots x_n) \rightarrow (u_1 \dots u_n)$ :  $\frac{\partial}{\partial u_i} = \sum_j \frac{\partial x_j}{\partial u_i} \frac{\partial}{\partial x_j}$

Für  $\varphi(\vec{r}, \vec{R}) = \varphi(\vec{r}_1(\vec{r}, \vec{R}), \vec{r}_2(\vec{r}, \vec{R}))$  folgt mit  $\vec{e}_x := (1, 0, 0)$ :

$$\hat{P}_x \varphi = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial R_x} \varphi = \left[ \underbrace{\frac{\hbar}{i} \nabla_{\vec{r}_1}}_{\hat{p}_1} \varphi \underbrace{\frac{\partial \vec{r}_1}{\partial R_x}}_{\vec{e}_x} + \underbrace{\frac{\hbar}{i} \nabla_{\vec{r}_2}}_{\hat{p}_2} \varphi \underbrace{\frac{\partial \vec{r}_2}{\partial R_x}}_{\vec{e}_x} \right] = (\hat{p}_1 + \hat{p}_2) \vec{e}_x \varphi = (\hat{p}_{1x} + \hat{p}_{2x}) \varphi$$

$$\hat{p}_x \varphi = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r_x} \varphi = \left[ \underbrace{\frac{\hbar}{i} \nabla_{\vec{r}_1}}_{\hat{p}_1} \varphi \underbrace{\frac{\partial \vec{r}_1}{\partial r_x}}_{-\frac{m_2}{m_1 + m_2} \vec{e}_x} + \underbrace{\frac{\hbar}{i} \nabla_{\vec{r}_2}}_{\hat{p}_2} \varphi \underbrace{\frac{\partial \vec{r}_2}{\partial r_x}}_{\frac{m_1}{m_1 + m_2} \vec{e}_x} \right] = \frac{-m_1 \hat{p}_{1x} + m_1 \hat{p}_{2x}}{m_1 + m_2} \varphi$$

Analoges gilt auch für Komponenten  $y, z$  (✓)

Für den Hamiltonoperator folgt:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{P}}^2}{2M} + \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2\mu} + V(\vec{r}) \quad \text{mit} \quad M = m_1 + m_2, \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

(check (Einsetzen):

$$\rightarrow \frac{P^2}{2M} + \frac{p^2}{2\mu} = \frac{1}{2} \frac{(p_1 + p_2)^2}{m_1 + m_2} + \frac{1}{2} \frac{m_1 + m_2}{m_1 m_2} \left( \frac{m_1 p_2 - m_2 p_1}{m_1 + m_2} \right)^2 = \dots = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} \quad \checkmark)$$

→ Ergebnis analog zu dem der klassischen Mechanik

⇒ Stationäre Schrödingergleichung

$$\hat{H} \varphi = \left( \frac{\hat{\vec{P}}^2}{2M} + \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2\mu} + V(\vec{r}) \right) \varphi(\vec{r}, \vec{R}) = E \varphi(\vec{r}, \vec{R})$$

Lösungsansatz: Separationsansatz ähnlich 2.2.1 S.30:  $\varphi(\vec{r}, \vec{R}) = \chi(\vec{R}) \cdot \tilde{\varphi}(\vec{r})$

$$\rightarrow \frac{\hat{H} \varphi}{\varphi} = \underbrace{E_{\text{total}}}_{\text{Konstante}} = \underbrace{\frac{1}{2M} \hat{\vec{P}}^2 \chi(\vec{R})}_{\substack{\text{muss unabhängig} \\ \text{von } \vec{R} \text{ sein} \\ \rightarrow \text{const.} \equiv E_R}} + \underbrace{\frac{[\frac{1}{2\mu} \hat{\vec{p}}^2 + V(\vec{r})] \tilde{\varphi}(\vec{r})}{\tilde{\varphi}(\vec{r})}}_{\substack{\text{muss unabhängig} \\ \text{von } \vec{r} \text{ sein} \\ \rightarrow \text{const.} \equiv \tilde{E}}}$$

→ Man erhält wieder einen Satz von zwei Gleichungen

(a) Schwerpunktgleichung  $\frac{\hat{\vec{P}}^2}{2M} \chi(\vec{R}) = E_R \chi(\vec{R})$

→ entspricht Gleichung für freies Teilchen der Masse  $M$  (Gesamtmasse)

( $\hat{\vec{P}}$  Gesamtimpuls)

(b) Relativgleichung  $\left[ \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2\mu} + V(\vec{r}) \right] \tilde{\varphi}(\vec{r}) = \tilde{E} \tilde{\varphi}(\vec{r})$

→ entspricht Gleichung für ein Teilchen der reduzierten Masse  $\mu$  im Potential  $V(\vec{r})$

→ Problem reduziert sich auf effektives Einteilchenproblem (b)

### 2.3.2 Reduktion auf eindimensionales Problem

Ausgangspunkt: Ein Teilchen der Masse  $\mu$  im Potential  $V$

Isotropie des Raums:  $V = V(r)$  (Zentralpotential)

→ legt Übergang zu Polarkoordinaten nahe:

$$\vec{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} =: r \begin{pmatrix} \sin \vartheta \cos \varphi \\ \sin \vartheta \sin \varphi \\ \cos \vartheta \end{pmatrix}$$

$$\Delta = \underbrace{\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r}}_{=:\Delta_r} + \frac{1}{r^2} \left( \underbrace{\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta}}_{-\hat{L}^2/\hbar^2: \text{Übungsaufgabe}} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \overbrace{\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}}^{-\hat{L}_z^2/\hbar^2} \right)$$

⇒ Stationäre Schrödingergleichung

$$\hat{H} \tilde{\varphi}(r, \vartheta, \varphi) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_r + V(r) + \frac{1}{2\mu r^2} \hat{L}^2 \right] \tilde{\varphi}(r, \vartheta, \varphi) = \tilde{E} \tilde{\varphi}(r, \vartheta, \varphi)$$

Lösungsansatz wieder Separationsansatz:  $\tilde{\varphi}(r, \vartheta, \varphi) = U(r) \cdot Y(\vartheta, \varphi)$

$$\Rightarrow \underbrace{\tilde{E}}_{\text{Konstante}} = \frac{\hat{H} \tilde{\varphi}}{\tilde{\varphi}} = \frac{[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_r + V(r)] U(r)}{U(r)} + \frac{1}{2\mu r^2} \underbrace{\frac{\hat{L}^2 Y(\vartheta, \varphi)}{Y(\vartheta, \varphi)}}_{\substack{\text{muss unabhängig} \\ \text{von } \vartheta, \varphi \text{ sein} \\ \rightarrow \text{const.} \equiv \hbar^2 \lambda}}$$

→ (a) Winkelgleichung:  $\boxed{\hat{L}^2 Y(\vartheta, \varphi) = \hbar^2 \lambda Y(\vartheta, \varphi)}$

↪ Eigenwertgleichung zu  $\hat{L}^2$

mit Randbedingung:  $Y$  eindeutig  $\leftrightarrow Y(\vartheta, \varphi + 2\pi) = Y(\vartheta, \varphi)$

Lösung im nächsten Abschnitt (2.3.3 S.41)

Ergebnis:

- Eigenwerte  $\hbar^2 \lambda = \hbar^2 l(l+1)$  mit  $l \in \mathbb{N}_0$  (natürliche Zahl)
- Eigenfunktionen:  $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ : Kugelfunktionen

→ (b) Radialgleichung für festes  $l$ :  $\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_r + V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \right] U_l(r) = \tilde{E} U_l(r)$

Vereinfachung: Substituiere  $U_l(r) = u_l(r)/r$

$$\Delta_r U_l(r) = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} \left( \frac{u_l}{r} \right) = \dots = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} u_l(r)$$

$$\Rightarrow \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \right) u_l(r) = \tilde{E} u_l(r)$$

≡ Gleichung für Teilchen in einer Dimension ( $r$ )

im effektiven Potential  $V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}$

### 2.3.3 Einschub: Eigenfunktionen des Bahndrehimpulses

Gesucht: Funktionen  $Y(\vartheta, \varphi)$  mit  $\hat{L}^2 Y(\vartheta, \varphi) = \hbar^2 \lambda Y(\vartheta, \varphi)$

wobei Operatoren zum Drehimpuls in Polarkoordinaten gegeben sind durch

$$\hat{L}^2 = \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \left( -\hbar^2 \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \hat{L}_z^2 \right) \quad \text{mit} \quad \hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (\text{Übungsaufgabe})$$

Ansatz: Wieder Separationsansatz  $Y(\vartheta, \varphi) = \theta(\vartheta) \cdot \phi(\varphi)$

$$\Rightarrow \underbrace{\hbar^2 \lambda}_{\text{Konstante}} = -\hbar^2 \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \theta(\vartheta) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \underbrace{\hat{L}_z^2 \phi(\varphi)}_{\substack{\text{muss unabhängig von } \varphi \text{ sein} \\ \rightarrow \text{const.} =: \hbar^2 m^2}}$$

→ (a) Gleichung für  $\phi(\varphi)$ :  $\hat{L}_z^2 \phi = -\hbar^2 \frac{d^2}{d\varphi^2} \phi = \hbar^2 m^2 \phi(\varphi)$

mit Randbedingung:  $\phi(\varphi + 2\pi) = \phi(\varphi)$

$$\leadsto \boxed{\phi_m \sim e^{im\varphi}}, \quad m \text{ muss ganze Zahl sein.}$$

$$\Rightarrow \phi_m \text{ ist Eigenfunktion zu } \hat{L}_z: \boxed{\hat{L}_z \phi_m = \hbar m \phi_m}$$

→ (b) Gleichung für  $\theta(\vartheta)$  bei gegebenem  $m$

$$-\hbar^2 \left( \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \frac{m^2}{\sin^2 \vartheta} \right) \theta(\vartheta) = \hbar^2 \lambda \theta(\vartheta)$$

$$\text{Substituiere } \boxed{z = \cos \vartheta} \rightarrow \sin \vartheta = \sqrt{1-z^2}, \quad \frac{d}{d\vartheta} = \sqrt{1-z^2} \frac{d}{dz}$$

$$\Rightarrow \left( \frac{d}{dz} (1-z^2) \frac{d}{dz} + \lambda - \frac{m^2}{1-z^2} \right) \theta(z) = 0 \quad \begin{array}{l} \text{Legendresche} \\ \text{Differentialgleichung} \end{array}$$

Lösung der Legendreschen Differentialgleichung

Zunächst  $m \neq 0$  (obdA  $m > 0$ )

- Analyse des asymptotischen Verhaltens: Singularität bei  $z \rightarrow \pm 1$   
 $z \rightarrow \pm 1$ : Term  $\frac{m^2}{1-z^2} \approx \frac{m^2}{2(1 \mp z)}$  dominiert;  $(1-z^2) \approx 2(1 \mp z)$   
 $\leadsto \left[ \frac{d}{dz} 2(1 \mp z) \frac{d}{dz} - \frac{m^2}{2(1 \mp z)} \right] \theta(z) \approx 0$   
 $\Rightarrow \left[ (1 \mp z) \frac{d}{dz} (1 \mp z) \frac{d}{dz} - \frac{m^2}{4} \right] \theta(z) \approx 0$   
 Substituiere  $y = \ln(1 \mp z) \Rightarrow \frac{d}{dy} = (1 \mp z) \frac{d}{dz} \Rightarrow \left[ \frac{d^2}{dy^2} - \frac{m^2}{4} \right] \theta(z) \approx 0$   
 Lösung:  $\theta \sim e^{\frac{m}{2} y} = (1 \mp z)^{m/2}$

- Motiviert Ansatz:

$$\boxed{\theta(z) = (1-z)^{m/2} (1+z)^{m/2} p_m(z) = (1-z^2)^{m/2} p_m(z)}$$

Einsetzen:

$$(1-z^2)p_m'' - 2(m+1)z p_m'(z) + (\lambda - m(m+1))p_m(z) = 0 \quad (*)$$

- Trick: Diese Gleichung ableiten und sortieren

$$\rightarrow (1-z^2)p_m''' - 2(m+2)z p_m''(z) + (\lambda - (m+1)(m+2))p_m'(z) = 0$$

Vergleich mit (\*):  $p_{m+1}(z) = p_m'(z)$ ,

$$\text{also } p_m(z) = p_{m-1}'(z) = \dots = \frac{d^m}{dz^m} p_0(z)$$

$\Rightarrow$  Problem zurückgeführt auf  $m = 0$

Nun also  $m = 0$ :  $\left[ \frac{d}{dz}(1-z^2) \frac{d}{dz} + \lambda \right] \theta(z) = 0$

- Keine Singularitäten  $\rightarrow$  mache Potenzreihenansatz  $\theta(z) = \sum_{l=0}^{\infty} a_l z^l$

$$\begin{aligned} \text{Einsetzen: } \left[ \frac{d}{dz}(1-z^2) \frac{d}{dz} + \lambda \right] \sum_l a_l z^l &= \sum_l a_l [l(l-1)z^{l-2} - l(l+1)z^l + \lambda z^l] \\ &= \sum_l z^l \{ a_{l+2}(l+1)(l+2) - a_l l(l+1) + a_l \lambda \} \equiv 0 \text{ f\u00fcr alle } z \in [-1: 1] \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \text{Koeffizienten } \{ \dots \} = 0 \Rightarrow a_{l+2} = \frac{l(l+1) - \lambda}{(l+1)(l+2)} a_l$$

- M\u00f6glichkeiten

- Reihe bricht nicht ab  $\rightarrow$  Konvergenzradius  $\lim_{l \rightarrow \infty} \left| \frac{a_l}{a_{l+1}} \right| = 1$

F\u00fcr gro\u00dfe  $l$  ( $l^2 > \lambda$ ) gilt:

Alle geraden/ungeraden  $a_l$  haben dasselbe Vorzeichen

$\rightarrow$  Reihe divergiert bei  $z \rightarrow 1$  oder  $z \rightarrow -1$ : Widerspruch!

- Also muss Reihe abbrechen (Polynom)

$\Rightarrow \lambda = l(l+1)$  f\u00fcr ein  $l \geq 0$

$$l \begin{pmatrix} \text{gerade} \\ \text{ungerade} \end{pmatrix} \rightarrow a_k = 0 \text{ f\u00fcr } \begin{pmatrix} \text{ungerade} \\ \text{gerade} \end{pmatrix} k$$

$\Rightarrow$  Man erh\u00e4lt die sogenannten Legendre-Polynome  $P_l(z)$

$$\text{z.B. } P_0 = 1, P_1 = z, P_2 = \frac{1}{2}(3z^2 - 1) \quad (\text{Normierung: } P_l(1) = 1)$$

### Zusammenfassend

Die Eigenfunktionen zu  $\hat{L}^2$  und  $\hat{L}_z$  sind die „Kugelfl\u00e4chenfunktionen“

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \mathcal{N}_{lm} e^{im\varphi} (-1)^m \sin^m \vartheta \frac{d^m}{(d \cos \vartheta)^m} P_l(\cos \vartheta) \quad (m > 0)$$

$$\text{und } Y_{l-m}(\vartheta, \varphi) = (-1)^m Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi) \quad ((-1)^m: \text{Konvention})$$

Der Normierungsfaktor  $\mathcal{N}$  ist so gew\u00e4hlt, dass

$$\int \sin \vartheta d\vartheta d\varphi |Y_{lm}(\vartheta, \varphi)|^2 = 1$$

$P_l(\cos \vartheta)$  ist das Legendre-Polynom  $l$ -ten Grades

(NB: Daraus folgt, dass  $|m| \leq l$  sein muss!)

Es gilt:

$$\begin{cases} \hat{L}^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm} \\ \hat{L}_z Y_{lm} = \hbar m Y_{lm} \end{cases} \text{ mit } l \in \mathbb{N}_0 \text{ und } m \in [-l, -l+1, \dots, l-1, l]$$

Wichtigste Eigenschaft der Legendre-Polynome

$$\text{Orthogonal: } \int_{-1}^1 dz P_l(z) P_{l'}(z) = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}$$

Wichtigste Eigenschaft der Kugelfunktionen

$$\text{Orthonormal: } \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \vartheta d\vartheta Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi) Y_{l'm'}(\vartheta, \varphi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

$$\text{Vollst\u00e4ndig: } \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi) Y_{lm}(\vartheta', \varphi') = \delta(\varphi - \varphi') \delta(\cos \vartheta - \cos \vartheta')$$

(Folgt daraus, dass der Operator  $\hat{L}$  selbstadjungiert ist im Hilbertraum der Funktionen  $f(\theta, \phi)$  auf der Kugeloberfl\u00e4che, siehe Kapitel 3 S.47)

Konkret:

$$\begin{aligned}
 Y_{00} &= \sqrt{\frac{1}{4\pi}} & Y_{10} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta & Y_{20} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \vartheta - 1) \\
 Y_{11} &= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta e^{i\varphi} & Y_{21} &= -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \vartheta \cos \vartheta e^{i\varphi} \\
 Y_{22} &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \vartheta e^{2i\varphi}
 \end{aligned}$$

### 2.3.4 Coulombpotential und Wasserstoffatom

Löse nun Radialgleichung aus 2.3.2 S.40 mit dem Potential  $V(r) = -\frac{e^2}{r}$

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r} \right) u_l(r) = \tilde{E} u_l(r)$$

$\tilde{E} \geq 0$ : Streuzustände

sollen hier nicht behandelt werden.

Nur so viel: Zu jedem  $\tilde{E} \geq 0$  existiert eine Lösung.

$\tilde{E} < 0$ : Gebundene Zustände

Lösungsweg ähnlich dem bei der Legendreschen Differentialgleichung

- Reskalierung: Definiere  $\varrho := \sqrt{\frac{8\mu|\tilde{E}|}{\hbar^2}} r$ ,  $\nu = \frac{e^2}{\hbar c} \sqrt{\frac{\mu c^2}{2|\tilde{E}|}}$ 

$$\rightarrow \left( -\frac{1}{4|\tilde{E}|} \right) \left( \frac{d^2}{d\varrho^2} - \frac{l(l+1)}{\varrho^2} + \frac{\nu}{\varrho} - \frac{1}{4} \right) u_l(\varrho) = 0$$
 (check: Einsetzen)
- Analyse des asymptotischen Verhaltens
  - $\varrho \rightarrow \infty$ : Term  $(-\frac{1}{4})$  dominiert
$$\Rightarrow \frac{d^2}{d\varrho^2} u_l(\varrho) \approx \frac{1}{4} u_l(\varrho) \Rightarrow u_l \sim e^{-\varrho/2}$$
 ( $e^{+\varrho/2}$  verboten)
  - $\varrho \rightarrow 0$  und  $l > 0$ : Term  $(\frac{l(l+1)}{\varrho^2})$  dominiert
$$\Rightarrow \frac{d^2}{d\varrho^2} u_l(\varrho) \approx l(l+1) u_l(\varrho) \Rightarrow u_l \sim \varrho^{l+1}$$
- Motiviert Ansatz:  $u_l(\varrho) = \varrho^{l+1} e^{-\varrho/2} p(\varrho)$ 

(NB: Spezialfall  $l = 0$ : Mit dem Ansatz  $u_0(\rho) \sim \rho e^{-\rho/2} p(\rho) \Leftrightarrow U(\rho) = \rho u_0(\rho) \sim e^{-\rho/2} p(\rho)$  macht man jedenfalls nichts verkehrt!

Einsetzen:  $\varrho p''(\varrho) + (2l+2-\varrho) p'(\varrho) + (\nu-l-1) p(\varrho) = 0$

Potenzreihenansatz für  $p$ :  $p(\varrho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \varrho^k$

Einsetzen, Koeffizientenvergleich  $\rightarrow a_{k+1} = \frac{k+l+1-\nu}{(k+1)(k+2l+2)} a_k$
- Möglichkeiten:
  - Reihe bricht nicht ab  $\rightarrow$  Konvergenzradius  $\lim_{k \rightarrow \infty} \left| \frac{a_k}{a_{k+1}} \right| \rightarrow \infty$ 

Bei  $k \rightarrow \infty$  gilt  $a_k/a_{k-1} \rightarrow 1/k$ .

$\rightsquigarrow$  asymptotisch Exponentialfunktion:  $a_k \sim \frac{1}{k!}$ ,  $p(\rho) \sim e^\rho$

$\rightsquigarrow u_l(\rho)$  würde wie  $\exp(\rho/2)$  divergieren: Verboten!

- Also bricht Reihe ab (Polynom)
  - $\Rightarrow k + l + 1 = \nu$  für ein  $k$
  - $\leadsto$  geht nur, wenn  $\underline{\nu = n}$  (natürliche Zahl) und  $\underline{n > l}$
- $\Rightarrow$  Man erhält die
  - „zugeordneten Laguerre-Polynome“  $p_{nl}(\varrho) \propto L_{n-l-1}^{2l+1}(\varrho)$
  - (Grad:  $n - l - 1$ ; z.B.  $p_{10} \sim 1$ ,  $p_{21} \sim 1$ ,  $p_{20} \sim 1 - \varrho/2$ )

Fazit und Rückrechnung: (Erinnerung:  $\phi(\vec{r}) = Y_{lm}(\theta, \phi) U_{nl}(r)$ )

mit  $U_{nl}(r) = u_{nl}(r)/r = \rho^l e^{-\rho/2} p_{nl}(\rho)$

Gebundene Zustände ( $E < 0$ ) im Coulombpotential  $V(r) = -\frac{e^2}{r}$

$\rightarrow$  Energieeigenwerte:  $\tilde{E}_n = -\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 \frac{\mu c^2}{2n^2}$  (aus  $n = \nu = \frac{e^2}{\hbar c} \sqrt{\frac{\mu c^2}{2|E|}}$ )

Eigenfunktionen:  $\tilde{\varphi}_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = \mathcal{N}_{nlm} \rho^l e^{-\rho/2} L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$

mit  $\rho = \sqrt{\frac{8\mu|\tilde{E}_n|}{\hbar^2}} r$

und „Quantenzahlen“  $n \in \mathbb{N}$   
 $l \in \mathbb{N}_0, l \leq n - 1$   
 $m \in \mathbb{Z}, |m| \leq l$

Bemerkungen:

Energieeigenwerte sind entartet bzgl.  $l$  und  $m$ .

Entartungsgrad: Jeder Eigenwert kommt  $\sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^l 1 = \underline{\underline{n^2}}$  mal vor.

Entartung bzgl.  $m \leftrightarrow$  Isotropie des Raums

( $m$  ist Quantenzahl zu  $\hat{L}_z$ ,  
 aber nichts zeichnet  $\hat{L}_z$  vor  $\hat{L}_x, \hat{L}_y$  aus.)

Entartung bzgl.  $l$ : Eigenheit des Coulombpotentials, also in gewisser Weise „zufällig“

## 2.4 Wissensfragen

5. Wie lauten die Einstein-de Broglie Beziehungen für Materie?
6. Was besagt das Superpositionsprinzip?
7. Wie lautet die Gleichung für eine ebene de Broglie-Welle?
8. Wie lautet die allgemeine Gleichung für ein Wellenpaket?
9. Wie werden Wellenpakete normiert? Warum?
10. Wie werden ebene Wellen normiert?
11. Was ist der Unterschied zwischen der Phasen- und der Gruppengeschwindigkeit eines Wellenpaketes?
12. Wie entwickelt sich ein Wellenpaket zeitlich?
13. Erklären Sie die Bornsche Wahrscheinlichkeitsdeutung von Materiewellen.
14. Wie lautet die Schrödingergleichung für freie Teilchen und bei Anwesenheit eines Potentials ?
15. Was versteht man in der Quantenmechanik unter Orts- und Impulsdarstellung? Wie hängen die beiden Darstellungen miteinander zusammen?
16. Was ist die quantenmechanische Interpretation von  $\psi(\vec{r}, t)$  und  $\tilde{\psi}(\vec{p}, t)$ ?
17. Was versteht man unter Wahrscheinlichkeitsstrom?
18. Wie lautet die Kontinuitätsgleichung für die Wahrscheinlichkeitsdichte? Interpretieren Sie die einzelnen Terme.
19. Wie berechnet man in Ortsdarstellung den Erwartungswert des Ortes / Impulses eines Teilchens?
20. Wie berechnet man in Impulsdarstellung den Erwartungswert des Ortes / Impulses eines Teilchens?
21. Wie berechnet man den Erwartungswert einer beliebigen physikalischen Observablen?
22. Wie hängen physikalische Observablen mit Operatoren zusammen?
23. Welche Eigenschaften muss ein Operator erfüllen, der eine physikalische Observable beschreibt?
24. Nennen Sie mindestens drei Beispiele für Operatoren, die physikalische Observablen beschreiben.
25. Was ist der Hamiltonoperator und welche Funktion hat er?
26. Was ist ein Kommutator?
27. Welchen Wert hat der Kommutator  $[\hat{x}, \hat{p}]$ ?
28. Formulieren Sie die Unschärferelation für Ort und Impuls.
29. Formulieren Sie die Unschärferelation für Energie und Zeit.
30. Nennen Sie weitere Unschärferelationen.
31. Nach welcher einfachen Gleichung können Sie die rechte Seite in der Unschärferelation “ $\Delta A \Delta B \geq ?$ ” für zwei Observablen  $A$  und  $B$  berechnen?
32. Wann kann man zwei Größen gleichzeitig scharf messen?
33. Wie lautet das Ehrenfestsche Theorem? Interpretieren Sie die einzelnen Terme.

34. Welchen Wert haben die Kommutatoren  $[\hat{p}_j, \hat{r}_k]$ ,  $[\hat{r}_j, \hat{r}_k]$ ,  $[\hat{p}_j, \hat{p}_k]$  für Orts- bzw. Impulskomponenten  $\hat{r}_j$  und  $\hat{p}_j$  ?
35. Welchen Wert haben die Kommutatoren  $[\hat{L}_j, \hat{L}_k]$  für Drehimpulskomponenten  $\hat{L}_j$ ?  
Was ist  $[\hat{L}^2, \hat{L}_j]$ ?
36. Wie lautet das Korrespondenzprinzip?
37. Wie lauten in Ortsdarstellung die Operatoren für Ort  $\hat{r}$ , Impuls  $\hat{p}$ , Drehimpuls  $\hat{L}$ , Energie  $\hat{E}$ ? Welche Form hat der Hamiltonoperator  $\hat{H}$  ?
38. Was versteht man unter einer Eigenwertgleichung?
39. Wie lautet die stationäre Schrödingergleichung?
40. Wie hängt die stationäre Schrödingergleichung mit der allgemeinen (zeitabhängigen) Schrödingergleichung zusammen? Wann kann man die stationäre Schrödingergleichung benutzen?
41. Wie setzt man aus den Lösungen der stationären Schrödingergleichung die allgemeinste Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung zusammen?
42. Wie kann man von dieser allgemeinen Lösung die Wahrscheinlichkeit ablesen, zur Zeit  $t$  eine bestimmte Energie  $E$  zu messen?
43. Woraus ergeben sich die möglichen Messwerte für die Energie in einem System?
44. Wann spricht man bei einem quantenmechanischen System von einem diskreten Energiespektrum? von einem kontinuierlichen Energiespektrum? Nennen Sie jeweils ein Beispiel.
45. Wann erwartet man ein gemischtes Spektrum? Was ist physikalisch der Unterschied zwischen Zuständen im diskreten und im kontinuierlichen Teil des Spektrums?
46. Wie sind Transmissions- und Reflexionskoeffizienten definiert? Welche physikalische Information vermitteln sie?
47. Erklären Sie den Tunneleffekt.
48. Warum kann man die "WKB"-Näherung im Fall von Tunnelbarrieren verwenden? Warum nicht für allgemeine Probleme?
49. Was für weitere typisch quantenmechanische Effekte können bei Streuung an einem eindimensionalen Potential eintreten?
50. Wie lassen sich Resonanzen anschaulich verstehen?
51. Welche Symmetriebedingungen müssen erfüllt sein, damit man ein Zweikörperproblem auf ein Einteilchenproblem reduzieren kann?
52. Welches sind die Eigenwerte der Operatoren  $\hat{L}^2$  und  $\hat{L}_z$  (Bahndrehimpuls)? Welches sind die zugehörigen Eigenfunktionen?
53. Was versteht man unter Quantenzahlen? Welche Quantenzahlen haben Eigenfunktionen des Drehimpulses?
54. Welche Quantenzahlen haben Energie-Eigenzustände im Wasserstoffatom? Welche Bedeutung haben sie?
55. Wann spricht man davon, daß ein Energieeigenwert entartet ist?
56. Diskutieren Sie die Entartung der Eigenzustände im Wasserstoffatom.

# Kapitel 3

## Allgemeine Formulierung der Quantenmechanik

© Copyright 2020 Friederike Schmid<sup>1</sup>

In Kapitel 2 S.9: Wellenmechanik

~> Wellenfunktionen, Wahrscheinlichkeitsdichten, Operatoren  
Darstellungen im Orts- und Impulsraum

Aber: Physikalische Eigenschaften unabhängig von der Darstellung

Jetzt: Systematisierung der Theorie, allgemeiner Formalismus

→ Grundlage dessen, was moderne Quantenmechanik ausmacht.

### 3.1 Der mathematische Rahmen der Quantenmechanik

#### 3.1.1 Der Hilbertraum

##### 3.1.1.1 Lineare Vektorräume

Ein linearer Vektorraum  $V$  über einem Körper  $K$  (z.B.  $\mathbb{R}$  oder  $\mathbb{C}$ ) ist

- eine Menge  $V$  von Vektoren  $|\psi\rangle$
- eine „Addition“ in  $V$ :  
$$V \times V \longrightarrow V$$
$$(|\psi\rangle, |\varphi\rangle) \longmapsto |\psi\rangle + |\varphi\rangle$$
- und eine „Multiplikation“:  
$$K \times V \longrightarrow V$$
$$(\lambda, |\psi\rangle) \longmapsto \lambda|\psi\rangle$$

so dass gilt

1.  $\lambda_1, \lambda_2 \in K, |\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in V \Rightarrow \lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle \in V$
2. Distributivgesetze:  $\lambda(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle) = \lambda|\psi_1\rangle + \lambda|\psi_2\rangle$   
 $(\lambda_1 + \lambda_2)|\psi\rangle = \lambda_1|\psi\rangle + \lambda_2|\psi\rangle$
3. Assoziativgesetz:  $\lambda(\mu|\psi\rangle) = (\lambda\mu)|\psi\rangle$

---

<sup>1</sup>Prof. Dr. Friederike Schmid, Vorlesung Quantenmechanik (I), Universität Mainz, SS 2023.  
Letzte Änderung der PDF-Datei am 31.05.2023.

Beispiele:

- $\mathbb{R}^n$  oder  $\mathbb{C}^n$
- Quadratintegrale (nicht normierte) Funktionen  $\psi(\vec{r}): L^2$
- Glatte Funktionen auf einer Kugeloberfläche  $f(\vartheta, \varphi)$

Innerhalb eines Vektorraums definiert man

Lineare Unabhängigkeit: Mehrere Vektoren  $|\psi_i\rangle$  heißen linear unabhängig, wenn aus  $\sum_i \lambda_i |\psi_i\rangle = 0$  folgt  $\lambda_i = 0 \quad \forall i$

Basis: Ein Satz von linear unabhängigen Vektoren  $|b_i\rangle$ , die  $V$  erzeugen, d.h. jedes  $|\psi\rangle \in V$  kann als Linearkombination  $|\psi\rangle = \sum_i c_i |b_i\rangle$  dargestellt werden.

Es gilt der Basis-Existenzsatz: Jeder Vektorraum hat eine Basis.

Die Anzahl der Basisvektoren ist eindeutig  $\sim$  Dimension von  $V$  (Beweis über Zornsches Lemma).

### 3.1.1.2 Unitäre Vektorräume

Ein unitärer Vektorraum ist ein Vektorraum über  $\mathbb{C}$  mit einem Skalarprodukt:

$$\begin{aligned} V \times V &\longrightarrow \mathbb{C} \\ (|\varphi\rangle, |\psi\rangle) &\longmapsto \langle \varphi | \psi \rangle \end{aligned}$$

mit den folgenden Eigenschaften:

- linear:  $\langle \varphi | \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2 \rangle = \lambda_1 \langle \varphi | \psi_1 \rangle + \lambda_2 \langle \varphi | \psi_2 \rangle$
- hermitesch:  $\langle \varphi | \psi \rangle = \langle \psi | \varphi \rangle^*$  (N.B.  $\Rightarrow \langle \varphi | \varphi \rangle$  reell)
- positiv definit:  $\langle \varphi | \varphi \rangle > 0$  für  $|\varphi\rangle \neq 0$ ,  $\langle \varphi | \varphi \rangle = 0$  für  $|\varphi\rangle = 0$ ,

Beispiele:

- $\mathbb{C}^n$  mit  $\langle \vec{a} | \vec{b} \rangle = \vec{a}^* \cdot \vec{b} = \sum_{\alpha} a_{\alpha}^* b_{\alpha}$
- Quadratintegrale Funktionen:  $L^2$ :  $\langle \varphi | \psi \rangle = \int d\vec{r} \varphi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r})$
- Funktionen auf Kugeloberfläche:  $\langle f_1 | f_2 \rangle = \int_0^{\pi} \sin \vartheta d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi f_1^*(\vartheta, \varphi) f_2(\vartheta, \varphi)$

Damit kann man definieren:

Norm:  $\|\varphi\| = \sqrt{\langle \varphi | \varphi \rangle}$

Abstand, Metrik:  $d(\varphi, \psi) = \|\varphi - \psi\|$

Orthogonalität:  $|\varphi\rangle$  und  $|\psi\rangle$  sind orthogonal, wenn  $\langle \varphi | \psi \rangle = 0$

Winkel:  $\cos \angle(|\varphi\rangle, |\psi\rangle) = \frac{\langle \varphi | \psi \rangle}{\|\varphi\| \cdot \|\psi\|}$

Orthonormalbasis: Eine Basis von auf 1 normierten Vektoren, die orthogonal aufeinander stehen.

Es gilt: Jeder unitäre Vektorraum von endlicher oder abzählbar unendlicher Dimension hat eine Orthonormalbasis (Beweis: Konstruktion mit Gram-Schmidtschem Orthonormalisierungsverfahren).

Weiterhin gilt: (Beweis ähnlich 2.1.5.2 S.27 - evtl. Übungen)

- Cauchy-Schwarzsche Ungleichung  $|\langle \varphi | \psi \rangle| \leq \|\varphi\| \cdot \|\psi\|$
- Dreiecksungleichung:  $\|\varphi + \psi\| \leq \|\varphi\| + \|\psi\|$

### 3.1.1.3 Hilbertraum

Ein komplexer Hilbertraum ist ein unitärer Vektorraum, der vollständig ist: Der Grenzwert jeder Cauchyfolge liegt im Hilbertraum.

Dabei heißt Cauchyfolge eine Folge  $|\psi_m\rangle$  mit

$$\forall \epsilon > 0 \quad \exists \quad n_0 : d(|\psi_m\rangle, |\psi_n\rangle) < \epsilon \quad \forall n, m > n_0$$

Ein Hilbertraum  $\mathfrak{H}$  heisst separabel, wenn es eine abzählbare Teilmenge  $V$  gibt, die in dem Hilbertraum dicht liegt (d.h. jede zu jedem Vektor  $|\psi\rangle \in \mathfrak{H}$  und  $\epsilon > 0$  gibt es einen Vektor  $|\phi\rangle \in V$  mit  $d(|\phi\rangle, |\psi\rangle) < \epsilon$ ).

Es gilt: Die Dimension separabler Hilberträume ist endlich oder abzählbar unendlich.

Separable Hilberträume bilden den Rahmen, in dem die Quantenmechanik formuliert wird.

In der Wellenmechanik konkret: Der Raum  $L^2$  der quadratintegriblen Funktionen ( $\rightsquigarrow$  „Wellenfunktionen“  $\psi(\vec{r})$ ) Später werden noch andere Hilberträume dazukommen.

Aus praktischen Gründen: Erweiterung um „Dirac“-Vektoren

(z.B.  $\langle \vec{r}_0 | = \delta(\vec{r} - \vec{r}_0)$ ,  $\langle \vec{p}_0 | = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p}_0 \vec{r}}$  in Ortsdarstellung)

$\rightsquigarrow$  Lasse für Dirac-Vektoren Forderung nach Normierbarkeit fallen. Fordere stattdessen, dass Skalarprodukt mit „gewöhnlichem“ Vektor existiert.

Normierung:

„Gewöhnliche“ Vektoren sind normiert, wenn  $\langle \psi | \psi \rangle = 1$

„Dirac“-Vektoren normiert, wenn  $\langle d_k | d_{k'} \rangle = \delta(k - k')$

( $k$ : kontinuierlicher Index)

Bemerkung: Dirac-Vektoren sind physikalisch nicht wirklich notwendig, da

- nie ein unendlicher Raum zur Verfügung steht
- alle experimentellen Messungen (Ort, Impuls) mit einem Fehler behaftet sind.

Z.B. könnte man definieren:  $|x_0\rangle_\epsilon = \frac{1}{\sqrt{\epsilon}} \int_{x_0-\epsilon/2}^{x_0+\epsilon/2} \delta(x - x') dx'$

Der Dirac-Vektor  $|x_0\rangle$  entspricht dem idealisierten Grenzwert  $\epsilon \rightarrow 0$ , vereinfacht die Notation.

### 3.1.1.4 Darstellungen und Basistransformation

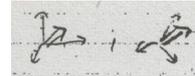
Gegeben sei eine orthonormale Basis  $\{|b_i\rangle\}$

Ein Vektor  $|\psi\rangle$  wird in dieser Basis dargestellt als

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |b_i\rangle \text{ mit } c_i = \langle b_i|\psi\rangle. \quad (\text{check: } \langle b_j|\psi\rangle = \sum_i c_i \langle b_j|b_i\rangle = \sum_i c_i \delta_{ji})$$

- Beispiele

$\mathbb{R}^n$ : neue Koordinaten, selber Vektor



Funktionen: Ortsdarstellung  $\langle \vec{r}|\psi\rangle = \psi(\vec{r})$ ;  
Impulsdarstellung  $\langle \vec{p}|\psi\rangle = \psi(\vec{p})$

- Zerlegung der Eins

Wegen  $|\psi\rangle = \sum_i |b_i\rangle \langle b_i|\psi\rangle$  für alle Vektoren  $|\psi\rangle$  gilt formal:

$$\sum_i |b_i\rangle \langle b_i| = \mathbb{1} \text{ (Einheitsoperator)} \rightarrow \text{„Vollständigkeitsrelation“}$$

Z.B. Funktionen auf Kugel  $\rightarrow$  Kugelfunktionen  $Y_{lm}$  bilden Basis:

– Orthormal:  $\langle lm|l'm'\rangle = \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi Y_{lm}^*(\theta, \phi) Y_{l'm'}(\theta, \phi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$

– Vollständig:  $\sum_{l,m} |lm\rangle \langle lm| = \mathbb{1}$

$$\text{bzw. } \sum_{l,m} Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi) Y_{lm}(\vartheta', \varphi') = \delta(\varphi - \varphi') \delta(\cos\vartheta - \cos\vartheta')$$

N.B. Einen Ausdruck der Form  $|\psi\rangle \langle \varphi|$  nennt man auch „dyadisches Produkt“. Er liefert einen Operator in  $V$  (vgl. nächstes Kapitel).

z.B.  $\mathbb{C}^n$ :  $|\vec{a}\rangle \langle \vec{b}| = \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} (b_1^* \dots b_n^*) = \begin{pmatrix} a_1 b_1^* & \dots & a_1 b_n^* \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_n b_1^* & \dots & a_n b_n^* \end{pmatrix}$

- Wechsel der Darstellung, Basistransformation

Neue Orthonormalbasis  $\{|b'_i\rangle\}$

– Darstellung der neuen Basis in der alten:

$$|b'_j\rangle = \underbrace{\sum_i |b_i\rangle \langle b_i|}_{=\mathbb{1}} |b'_j\rangle = \sum_i U_{ij} |b_i\rangle \text{ mit } U_{ij} = \langle b_i|b'_j\rangle: \text{Transformationsmatrix}$$

Es gilt:  $UU^{*T} = \mathbb{1} \rightsquigarrow U^{-1} = U^{*T}$ : U ist eine unitäre Matrix.

$$(\text{check: } [UU^{*T}]_{ik} = \sum_j U_{ij} U_{kj}^* = \langle b_i | \underbrace{\sum_j |b'_j\rangle \langle b'_j|}_{=\mathbb{1}} |b_k\rangle = \langle b_i | b_k\rangle = \delta_{ik} = \mathbb{1}) \quad \checkmark$$

– Transformation der Koeffizienten:  $|\psi\rangle = \sum_i c_i |b_i\rangle = \sum_i c'_i |b'_i\rangle$

$$c_i = \langle b_i|\psi\rangle = \sum_j \langle b_i|b'_j\rangle \langle b'_j|\psi\rangle = \sum_j U_{ij} c'_j$$

$$c'_i = \langle b'_i|\psi\rangle = \sum_j \langle b'_i|b_j\rangle \langle b_j|\psi\rangle = \sum_j U_{ji}^* c_j$$

Beispiel: Übergang Ortsraum  $\rightarrow$  Impulsraum in einer Dimension

$$\text{Transformationsmatrix: } \langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}px}$$

( $\hat{=}$  Dirac-Vektor  $|p\rangle$  in Ortsdarstellung)

$$\Rightarrow \langle x|\psi\rangle = \langle x|\underbrace{\int dp|p\rangle\langle p|}_{=1}\psi\rangle = \int dp \langle x|p\rangle\langle p|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp e^{\frac{i}{\hbar}px} \langle p|\psi\rangle$$

$\leadsto$  Fouriertransformation!

### 3.1.1.5 Produkt von Hilberträumen

Problem: Komplexere Systeme, zum Beispiel

- Zwei-Teilchen-System, jedes Teilchen  $i$  wird durch Vektoren (Wellenfunktionen) im Hilbertraum  $V_i$  beschrieben.
- Zusätzliche Freiheitsgrade (Spin, ...)

$\Rightarrow$  Bildung eines Produktraums  $V_1 \otimes V_2$  (Tensorprodukt):

Enthält Elemente  $|\psi\rangle|\chi\rangle$  mit  $|\psi\rangle \in V_1$  und  $|\chi\rangle \in V_2$  und sämtliche Linearkombinationen aus solchen Elementen.

Es gilt

- $(a|\psi_1\rangle + b|\psi_2\rangle) \cdot (c|\chi_1\rangle + d|\chi_2\rangle)$   
 $= a c |\psi_1\rangle|\chi_1\rangle + b c |\psi_2\rangle|\chi_1\rangle + a d |\psi_1\rangle|\chi_2\rangle + b d |\psi_2\rangle|\chi_2\rangle$
- Skalarprodukt:  $\langle \chi_1|\langle \psi_1|1|\psi_2\rangle|\chi_2\rangle = \langle \chi_1|\chi_2\rangle \cdot \langle \psi_1|\psi_2\rangle$
- Dimension des Produktraums:  $\dim(V_1 \otimes V_2) = \dim(V_1) \cdot \dim(V_2)$

## 3.1.2 Lineare Operatoren

### 3.1.2.1 Allgemeine Aussagen

(\*) Operatoren: (von jetzt an vereinfachte Symbolik  $A, B, \dots$  statt  $\hat{A}, \hat{B}, \dots$ )

$$\text{Transformationen } A: \quad V \longrightarrow V$$

$$|\psi\rangle \longmapsto A|\psi\rangle$$

(\*) Produkt von Operatoren:  $A_1 A_2 |\psi\rangle = A_1 (A_2 |\psi\rangle)$

(\*) Lineare Operatoren: Operatoren  $L$  mit der Eigenschaft  
 $L|\lambda_1 \psi_1\rangle + \lambda_2 \psi_2\rangle = \lambda_1 L|\psi_1\rangle + \lambda_2 L|\psi_2\rangle$

(\*) Summe linearer Operatoren:  
 $(\lambda_1 L_1 + \lambda_2 L_2)|\psi\rangle = \lambda_1 L_1|\psi\rangle + \lambda_2 L_2|\psi\rangle \quad (\lambda_i \in \mathbb{C})$

(\*) Darstellung linearer Operatoren in einer Basis  $\{|b_i\rangle\}$ :

$$\text{Gegeben sei } |\psi\rangle = \sum_i c_i |b_i\rangle \quad (\hat{=} \text{ Darstellung von } |\psi\rangle)$$

$$\text{und } L|\psi\rangle = \sum_i c'_i |b_i\rangle \quad (\hat{=} \text{ Darstellung von } L|\psi\rangle)$$

Dann gilt  $c'_i = \sum_j L_{ij} c_j$  mit  $L_{ij} = \langle b_i | L | b_j \rangle$

$$(\text{Check: } L|\psi\rangle = \sum_j c_j L|b_j\rangle = \sum_j c_j \underbrace{\sum_i |b_i\rangle \langle b_i|}_{=1} L|b_j\rangle = \sum_i \underbrace{\sum_j c_j L_{ij}}_{=c'_i} |b_i\rangle \quad \checkmark)$$

$\leadsto$  Darstellung von  $L$  ist eine Matrix

Falls Basis abzählbar: Zeilen und Spalten (evtl. unendlich viele)

Falls Basis überabzählbar ( $\leadsto$  Dirac-Vektoren)

$\leadsto$  lineare Operatoren in der jeweiligen Darstellung,  
z.B. Integral- oder Differentialoperator

Beispiele (in einer Dimension)

Ort  $x$  in Ortsdarstellung:  $\langle x_0 | x | x'_0 \rangle = x'_0 \langle x_0 | x'_0 \rangle = x'_0 \delta(x_0 - x'_0)$

Impuls  $p$  in Ortsdarstellung:

$$\begin{aligned} \langle x_0 | p | x'_0 \rangle &= \int dx \underbrace{\delta(x - x_0)}_{\langle x_0 |} \underbrace{\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}}_p \underbrace{\delta(x - x'_0)}_{|x'_0 \rangle} \\ &= \int dx \delta(x - x_0) \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \delta(x - x'_0) = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx_0} \delta(x_0 - x'_0) \end{aligned}$$

(\*) Spur eines Operators:  $\text{Sp}(L) = \sum_i \langle b_i | L | b_i \rangle$

NB: Hängt nicht von der Wahl der Basis ab (Übungsaufgabe)

Eigenschaften:

$$\text{Sp}(AB) = \text{Sp}(BA) \quad \left( = \sum_j \langle b_j | A \underbrace{\sum_i |b_i\rangle \langle b_i|}_{=1} B | b_j \rangle \right)$$

$$\text{Sp}(A + B) = \text{Sp}(A) + \text{Sp}(B)$$

Falls Basis kontinuierlich:  $\{|b_\lambda\rangle\} \rightarrow \text{Sp}(L) = \int d\lambda \langle b_\lambda | L | b_\lambda \rangle$

(\*) Vertauschbarkeit und Kommutatoren

Operatoren dürfen im Allgemeinen nicht vertauscht werden.

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

definiert "Multiplikation" im Raum der Operatoren mit den Eigenschaften:

$$\text{- distributiv: } [A_1 + A_2, B] = [A_1, B] + [A_2, B]$$

$$[A, B_1 + B_2] = [A, B_1] + [A, B_2]$$

$$\text{- antikommutativ: } [A, B] = -[B, A]$$

$$\text{- Jacobi-Identität: } [A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0$$

(NB: nicht assoziativ:  $[A, [B, C]] \neq [[A, B], C]$  im Allgemeinen)

$\leadsto$  Diese Eigenschaften definieren eine Lie Algebra über  $\mathbb{C}$

(vgl. Analogie zum Kreuzprodukt  $\vec{a} \times \vec{b}$  in  $\mathbb{C}^n$ )

Antikommutator  $[A, B]_+ = AB + BA$

(kommutative und assoziative Multiplikation

$\rightarrow$  assoziative Algebra)

(\*) Operatorfunktionen

- Definition über Taylorentwicklung:  $f(L) = \sum_k f_k L^k$

mit  $f_k =$  Koeffizienten der Taylorreihe von  $f(x)$  um  $x = 0$ .

- Ableitung einer Funktion  $F(L_1, \dots, L_k)$ :

$$\frac{\partial F}{\partial L_i} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} (F(L_1, \dots, L_i + \epsilon \mathbf{1}, \dots, L_k) - F(L_1, \dots, L_i, \dots, L_k))$$

$\leadsto$  Produktregel, Kettenregel etc. gelten nach wie vor, wenn man Nichtvertauschbarkeit richtig berücksichtigt.

**3.1.2.2 Spezielle Operatoren**(\*) Einsoperator:  $\mathbf{1}|\psi\rangle = |\psi\rangle$  für alle  $|\psi\rangle$ 

(Zerlegung:  $\mathbf{1} = \sum_k |b_k\rangle\langle b_k|$ )

(\*) Inverser Operator  $L^{-1}$  zu linearem Operator  $L$ :

$L^{-1}$  mit  $L^{-1}L = \mathbf{1}$  also  $L^{-1}L|\psi\rangle = |\psi\rangle$  für alle  $|\psi\rangle$  ( $\Rightarrow LL^{-1} = \mathbf{1}$ )

(\*) Adjungierter Operator  $L^\dagger$  zu linearem Operator  $L$ :

$L^\dagger$  mit  $\langle L^\dagger\varphi|\psi\rangle = \langle\varphi|L\psi\rangle$  für alle  $|\psi\rangle, |\varphi\rangle$  im Def.bereich von  $L, L^\dagger$ .

Dabei ist der Definitionsbereich von  $L$  beliebig, der von  $L^\dagger$  "maximal", d.h. er enthält alle  $|\varphi\rangle$ , für die  $\langle L^\dagger\varphi|\psi\rangle = \langle\varphi|L\psi\rangle$  erfüllt ist.

Es gilt:  $(L^\dagger)^\dagger = L$  auf dem Definitionsbereich von  $L$ ;  $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$

(\*) Hermitescher Operator:

Operator  $H$ , für den gilt:  $\langle\varphi|H\psi\rangle = \langle H\varphi|\psi\rangle$

(\*) Selbstadjungierter Operator:

Hermitescher Operator mit zusätzlicher Bedingung:

$H$  und  $H^\dagger$  haben dieselben Definitionsbereiche

$\Rightarrow H = H^\dagger$  (für Matrixdarstellungen gilt:  $H_{ik}^* = H_{ki}$ )

Es gilt: Wenn  $H, K$  selbstadjungiert, dann sind auch

$HK + KH$  und  $i[H, K]$  selbstadjungiert. (Übungsaufgabe)

(\*) Positiv definiter selbstadjungierter Operator:  $\langle\psi|H|\psi\rangle > 0$  für alle  $|\psi\rangle$ (\*) Unitärer Operator:  $U^{-1} = U^\dagger$ 

Unitäre Operatoren sind normerhaltend:  $\|U\psi\|^2 = \langle\psi|U^\dagger U|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle$

(\*) Projektionsoperatoren: Selbstadjungierte Operatoren mit  $P^2 = P$ 

Beispiele:

- $|e\rangle$  Einheitsvektor (d.h.  $\langle e|e\rangle = 1$ )  
 $\Rightarrow P_e = |e\rangle\langle e|$  projiziert Vektoren auf  $|e\rangle$
- $\{|e_k\rangle\}$  orthonormale Vektoren  
 $\Rightarrow P = \sum_k |e_k\rangle\langle e_k|$  projiziert auf den Unterraum von  $V$ ,  
 der von  $\{|e_k\rangle\}$  aufgespannt wird.

### 3.1.3 Das Eigenwertproblem linearer Operatoren

#### 3.1.3.1 Eigenwertgleichung eines linearen Operators $L$

Struktur: 
$$L |v_\lambda\rangle = \underbrace{\lambda}_{\text{Eigenwert}} \underbrace{|v_\lambda\rangle}_{\text{Eigenvektor}} \quad (\lambda \in \mathbb{C})$$

Gesamtheit aller Eigenwerte: Spektrum des Operators

- im eigentlichen Hilbertraum: Diskret (abzählbar)
- mit Dirac-Vektoren: Auch kontinuierliches Spektrum möglich.

Beachte: Eigenwerte sind natürlich unabhängig von der Darstellung.

Beispiele:

- Eigenwerte von Matrizen im  $\mathbb{C}^n$
- (Diskrete) Eigenwerte des Drehimpulsoperators im Raum der Funktionen auf einer Kugeloberfläche:  $|lm\rangle \hat{=} Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ 
  - $L_z |lm\rangle = \hbar m |lm\rangle$
  - $\vec{L}^2 |lm\rangle = \hbar^2 l(l+1) |lm\rangle$
- Eigenwerte des Hamiltonoperators in der Wellenmechanik
  - gebundene Zustände: diskretes Spektrum
  - freie Zustände: kontinuierliches Spektrum

#### 3.1.3.2 Eigenwerte von hermiteschen Operatoren

(\*) reell (Beweis: siehe unten)

(\*) Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal

- (Aus  $\langle v_\lambda | H v_{\lambda'} \rangle = \langle H v_\lambda | v_{\lambda'} \rangle$  (H hermitesch) und  $H |v_{\lambda'}\rangle = \lambda' |v_{\lambda'}\rangle$  bzw.  $\langle H v_\lambda | = \lambda^* \langle v_\lambda |$  (Eigenwertgleichung) folgt:  $\lambda' \langle v_\lambda | v_{\lambda'} \rangle = \lambda^* \langle v_\lambda | v_{\lambda'} \rangle$ )
- Spezialfall  $\lambda' = \lambda \Rightarrow \langle v_\lambda | v_{\lambda'} \rangle = \langle v_\lambda | v_\lambda \rangle = 1 \Rightarrow \lambda' = \lambda = \lambda^*$   
 $\leadsto$  Alle Eigenwerte sind reell  $\checkmark$
  - Fall  $\lambda' \neq \lambda = \lambda^*$ :  $\leadsto \langle v_\lambda | v_{\lambda'} \rangle = 0$  Eigenvektoren orthogonal  $\checkmark$ )

(\*) Entartung eines Eigenwerts: Dimension des zugehörigen Eigenvektorraums

(\*) Folgerung: In einem separablen Hilbertraum müssen Eigenwerte diskret sein (kontinuierliche Eigenwerte  $\leftrightarrow$  Eigenvektoren sind Dirac-Vektoren)

#### 3.1.3.3 Selbstadjungierter Operatoren und Spektraldarstellung

Für selbstadjungierte Operatoren  $L$  gilt, dass die Eigenvektoren den Hilbertraum erzeugen (Saloppe Version des “Spektraltheorems“)

(\*) L-Darstellung oder Spektraldarstellung eines selbstadjungierten Operators  $L$ :

- Falls Eigenwerte von  $L$  nicht entartet sind, bilden die normierten Eigenvektoren eine Orthonormalbasis  $\{|b_l\rangle\}$
- Falls  $L$  entartete Eigenwerte  $l$  hat, wählt man zu jedem Eigenvektorraum eine Orthonormalbasis  $\{|b_{l,\nu}\rangle\}$ . Die Basisvektoren zu verschiedenen  $l$  stehen sowieso senkrecht aufeinander.  
→ Man erhält eine orthogonale Basis für den ganzen Raum.

• Konkret: Spektraldarstellung von  $L$ : 
$$L = \sum_l l \sum_\nu |b_{l,\nu}\rangle \langle b_{l,\nu}|$$

Für Operatorfunktionen  $f(L)$  folgt 
$$f(L) = \sum_l f(l) \sum_\nu |b_{l,\nu}\rangle \langle b_{l,\nu}|$$

(\*) Speziell: Eigenwerte und Eigenvektoren von Projektionsoperatoren:

$$P = P^2 \Rightarrow P|v_\lambda\rangle = \lambda|v_\lambda\rangle = P^2|v_\lambda\rangle = \lambda P|v_\lambda\rangle = \lambda^2|v_\lambda\rangle$$

⇒ Eigenwerte sind  $\lambda = 0$  oder  $\lambda = 1$

$\lambda = 1$ : Eigenvektorraum  $\hat{=}$  Projektionsebene

$\lambda = 0$ : Eigenvektorraum steht senkrecht auf Projektionsebene

### 3.1.3.4 Eigenwertproblem von vertauschbaren selbstadjungierten Operatoren

Gegeben zwei selbstadjungierte Operatoren  $L, M$

Falls  $l$  Eigenwert von  $L$  und  $[L, M] = 0$  gilt: Mit  $|v_l\rangle$  ist auch  $M|v_l\rangle$  Eigenvektor von  $L$  zum Eigenwert  $l$ .

$$(ML|v_l\rangle = lM|v_l\rangle = LM|v_l\rangle \quad \checkmark)$$

Folgerung: Man kann immer eine Basis finden mit Basisvektoren, die sowohl Eigenvektoren von  $L$  als auch von  $M$  sind.

(- Falls  $l$  nicht entartet:  $M|v_l\rangle \propto |v_l\rangle \rightarrow |v_l\rangle$  automatisch Eigenvektor

- Falls  $l$  entartet:  $M|v_l\rangle$  liegt im Eigenraum von  $l$ .

Betrachte Darstellung von  $M$  in diesem Eigenraum:

$$M_{\nu\nu'} = \langle b_{l\nu}|M|b_{l\nu'}\rangle; \quad M_{\nu\nu'} = M_{\nu'\nu}^* \text{ ist selbstadjungiert}$$

→  $M_{\nu\nu'}$  kann diagonalisiert werden.)

### 3.1.3.5 Vollständiger Satz kommutierender Observablen (VSKO)

Ein Satz von selbstadjungierten Operatoren  $\{A, B, \dots\}$ , die paarweise kommutieren und deren gemeinsames Basissystem eindeutig bestimmt ist.

(Beispiel: Teilchen im Coulombpotential:  $\{H, \vec{L}^2, L_z\}$  (Kapitel 2.3.4 S.43)

Gebundene Zustände: Quantenzahlen  $(n, l, m)$  bestimmen eindeutig ein System von Basisvektoren für quadratintegrale Funktionen.

Freie Zustände: Fügen Dirac-Vektoren hinzu.)

## 3.2 Elementare Prinzipien der Quantenmechanik

Wir sind nun in der Lage, innerhalb des mathematischen Rahmens von 3.1 S.47 die Quantenmechanik auf einem abstrakten Niveau neu zu formulieren.

### 3.2.1 „Postulate“ der Quantenmechanik

#### 3.2.1.1 Die Postulate

(vgl. Ballentine)

I: Ein quantenmechanisches System wird durch Zustandsvektoren in einem unitären Vektorraum (separabler Hilbertraum + Diracvektoren) dargestellt. (Es gilt also insbesondere das Superpositionsprinzip: Linearkombinationen von Zustandsvektoren sind auch Zustandsvektoren.)

Jede Richtung im Zustandsraum (d.h. jede Schar von parallelen Vektoren  $\lambda|\Psi\rangle$ ) entspricht einem „reinen Zustand“. Dieser enthält die maximal mögliche Information über ein System. (In der Praxis wird die Schar von Vektoren üblicherweise durch einen normierten Vektor repräsentiert,  $\langle\Psi|\Psi\rangle = 1 \rightarrow$  eindeutig bis auf Phasenfaktor).

II: Jeder dynamischen Variable (messbaren Größe) ist ein selbstadjungierter Operator (eine Observable) zugeordnet. Der Zustandsraum wird von den Eigenvektoren eines vollständigen Satzes kommutierender Observablen aufgespannt.

(d.h. es gibt keine „überflüssigen“ Freiheitsgrade)

III: Ein allgemeiner Zustand wird durch einen „statistischen Operator“  $\varrho$  beschrieben, der die folgenden Eigenschaften hat:

- $\varrho$  ist selbstadjungiert
- $\varrho$  ist positiv semidefinit ( $\langle\Psi|\varrho|\Psi\rangle \geq 0$  für alle  $|\Psi\rangle$ )
- $\text{Sp}(\varrho) = 1$

Der Erwartungswert einer Observablen  $O$  bei einer Messung ist

$$\langle O \rangle = \text{Sp}(\varrho O)$$

Zwei Zustände gelten als identisch, wenn sie durch denselben statistischen Operator beschrieben werden (d.h., alle Erwartungswerte physikalisch messbarer Größen sind identisch)

(NB:  $O$  selbstadjungiert mit (reellen) Eigenwerten  $\lambda_i$  und Eigenvektoren  $|v_i\rangle$   
 $\Rightarrow \text{Sp}(\varrho O) = \sum_i \langle v_i | \varrho O | v_i \rangle = \sum_i \lambda_i \langle v_i | \varrho | v_i \rangle$  automatisch reell!)

## 3.2.1.2 Erläuterungen zum Konzept des statistischen Operators

- Speziell: „Reiner“ Zustand:  $\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$  ( $|\Psi\rangle$  normiert)

$$\Rightarrow \langle O \rangle = \langle \Psi | O | \Psi \rangle$$

$$\text{(check: } \langle O \rangle = Sp(\rho O) = \sum_k \langle b_k | \Psi \rangle \langle \Psi | O | b_k \rangle = \langle \Psi | O \overbrace{\sum_k |b_k\rangle\langle b_k|}^{=1} \Psi \rangle \quad \checkmark)$$

~> Für ein Teilchen (ohne Spin, siehe Kap. 4) erhält man das Ergebnis der Wellenmechanik für einen Zustand mit Wellenfunktion  $\Psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \Psi \rangle$

Kennzeichen reiner Zustände:  $\rho^2 = \rho$  (d.h.,  $\rho$  ist Projektionsoperator)

$\rho \leftrightarrow |\Psi\rangle$ : enthält maximal mögliche Information über ein System.

- Erweiterung: Lasse auch „Gemischte“ Zustände zu

$$\text{Konstruktion: } \rho = \sum_i p_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i| \text{ mit } p_i \geq 0, \sum_i p_i = 1 \quad (\star)$$

mit:  $|\varphi_i\rangle$  normiert, aber nicht notwendig orthogonal

(Erfüllt Bedingungen von Postulat IV, da:

$\rho$  selbstadjungiert: Summe von Projektionsoperatoren  $\checkmark$

$\rho$  positiv semidefinit:  $\langle \Psi | \rho | \Psi \rangle = \sum_i p_i \langle \Psi | \varphi_i \rangle \langle \varphi_i | \Psi \rangle = \sum_i p_i |\langle \Psi | \varphi_i \rangle|^2 \geq 0 \quad \forall |\Psi\rangle \quad \checkmark$

$Sp(\rho) = \sum_i p_i \sum_k \langle b_k | \varphi_i \rangle \langle \varphi_i | b_k \rangle = \sum_i p_i \langle \varphi_i | \underbrace{\sum_k |b_k\rangle\langle b_k|}_{=1} \varphi_i \rangle = \sum_i p_i = 1 \quad \checkmark$

~> Gemisch von reinen Zuständen mit statistischen Gewichten  $p_i$

Es gilt:  $\langle O \rangle = \sum_i p_i \langle \varphi_i | O | \varphi_i \rangle$

$$\text{(Rechnung: } \langle O \rangle = Sp(\rho O) = \sum_i p_i \sum_k \langle b_k | \varphi_i \rangle \langle \varphi_i | O | b_k \rangle = \sum_i p_i \langle \varphi_i | O \overbrace{\sum_k |b_k\rangle\langle b_k|}^{=1} \varphi_i \rangle \quad \checkmark)$$

~> entspricht in der Wellenmechanik dem Erwartungswert von  $O$  in einem Ensemble von Wellenfunktionen  $\varphi_i$ , die mit der relativen Häufigkeit  $p_i$  vorliegen.

Bemerkungen

\* Da  $\rho$  selbstadjungiert und positiv semidefinit ist, gibt es mindestens eine Zerlegung der Form  $(\star)$  (z.B. die Spektraldarstellung von  $\rho$ ). In der Regel gibt es aber sogar mehrere Zerlegungen.

~> In der Regel kann man die  $|\varphi_i\rangle$  und  $p_i$  aus  $\rho$  nicht eindeutig bestimmen, und sie haben keine physikalische Bedeutung.

\* Die statistische Mischung reiner Zustände ist etwas fundamental anderes als ihre quantenmechanischer Superposition.

Illustrationsbeispiel: Betrachte Kombinationen von Zuständen aus orthonormalen Vektoren  $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle$  ( $\langle \phi_\alpha | \phi_\beta \rangle = \delta_{\alpha\beta}$ )

(1) Quantenmechanische Superposition:

~> Zustandsvektor  $|\Psi\rangle = c_1 |\phi_1\rangle + c_2 |\phi_2\rangle$  mit  $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$

~> Zugehöriger reiner Zustand  $\rho_1 = |\Psi\rangle\langle\Psi|$

~> Erwartungswert von  $O$ :

$$\langle O \rangle_1 = |c_1|^2 \langle \phi_1 | O | \phi_1 \rangle + |c_2|^2 \langle \phi_2 | O | \phi_2 \rangle + 2\text{Re}(c_1^* c_2 \langle \phi_1 | O | \phi_2 \rangle)$$

(2) Statistisches Gemisch mit Gewichten  $p_1$  und  $p_2$

~> Zugehöriger gemischter Zustand  $\rho_2 = p_1 |\phi\rangle\langle\phi| + p_2 |\chi\rangle\langle\chi|$

~> Erwartungswert von  $O$ :

$$\langle O \rangle_2 = p_1 \langle \phi | O | \phi \rangle + p_2 \langle \chi | O | \chi \rangle$$

$\Rightarrow$  Bei der Superposition (1) treten zusätzliche Kreuzterme auf:

$\text{Re}(c_1^* c_2 \langle \phi_1 | O | \phi_2 \rangle) \sim$  Interferenzen!

### 3.2.1.3 Unmittelbare Folgerungen aus den Postulaten

- (a) Berechnung der Wahrscheinlichkeit  $W_\lambda$ ,  
bei Messung einer Größe  $O$  einen konkreten Wert  $\lambda$  zu messen

- Herangehensweise: Nutze  $W_\lambda = \langle \delta_{O,\lambda} \rangle$

(Begründung:  $\delta_{O,\lambda}$  hat den „Messwerte“ +1, falls die Messung von  $O$  den Messwert  $\lambda$  liefert, und anderenfalls den Messwert 0. Also liefert  $\langle \delta_{O,\lambda} \rangle$  die relative Häufigkeit des Messwerts  $\lambda$ .)

Operator  $\delta_{O,\lambda}$  kann definiert werden über die Spektraldarstellung von  $O$ :  $\delta_{O,\lambda} = \sum_m \lambda_m |b_m\rangle \langle b_m|$   
mit  $|b_m\rangle$ : Orthonormalbasis aus Eigenvektoren von  $O$   
und  $\lambda_m$ : zugehörige Eigenwerte (können auch entartet sein)  
Der Fall, dass  $O$  ein kontinuierliches Spektrum hat, wird unten separat diskutiert.

- Zunächst vereinfachte Annahmen: Spektrum diskret ( $\lambda_m$  wie oben) und Eigenwerte nicht entartet, d.h. alle  $\lambda_m$  sind verschieden und zu jedem Eigenwert gehört genau ein Basisvektor  $|b_m\rangle$ .

Allgemeiner Fall

$$\begin{aligned} W_\lambda = \langle \delta_{O,\lambda} \rangle &= \text{Sp}(\varrho \delta_{O,\lambda}) = \sum_m \langle b_m | \varrho \delta_{O,\lambda} | b_m \rangle = \sum_m \langle b_m | \varrho | b_m \rangle \delta_{\lambda_m, \lambda} \\ &= \begin{cases} 0 & \text{: Falls } \lambda \text{ kein Eigenwert von } O \text{ ist} \\ \langle b_l | \varrho | b_l \rangle & \text{: Falls es ein } l \text{ gibt mit } \lambda = \lambda_l \end{cases} \end{aligned}$$

Speziell: Reiner Zustand

$$\varrho = |\Psi\rangle \langle \Psi|, \quad |\Psi\rangle = \sum_m c_m |b_m\rangle \text{ mit } c_m = \langle b_m | \Psi \rangle$$

$$\Rightarrow W_\lambda = \begin{cases} 0 & \text{: Falls } \lambda \text{ kein Eigenwert von } O \text{ ist} \\ \langle b_l | \Psi \rangle \langle \Psi | b_l \rangle = |\langle b_l | \Psi \rangle|^2 = |c_l|^2 & \text{: Für } \lambda = \lambda_l \end{cases}$$

$\rightsquigarrow$  Wahrscheinlichkeitsinterpretation für Koeffizienten  $c_m$  eines Zustandsvektors  $|\Psi\rangle$  in der Spektraldarstellung einer Observablen  $O$ :  $|c_m|^2 \hat{=} \text{Wahrscheinlichkeit}$ , zugehörigen Eigenwert  $\lambda_m$  in einem reinen Zustand  $\varrho = |\Psi\rangle \langle \Psi|$  zu messen.

- Verallgemeinerungen:

- Eigenwerte  $\lambda_l$  entartet  $\rightarrow$  Eigenvektoren  $|b_{l\nu}\rangle$   
(mit  $\nu$ =Entartungsindex)

Allgemeiner Fall: $W_{\lambda_l} = \sum_\nu \langle b_{l\nu}   \varrho   b_{l\nu} \rangle$ Reiner Fall: $W_{\lambda_l} = \sum_\nu  \langle \Psi   b_{l\nu} \rangle ^2$
---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

- Spektrum kontinuierlich  $\rightarrow$  Eigenvektoren  $|b_\nu(\lambda)\rangle$   
(mit  $\nu$ =Entartungsindex)

$$\text{Spur wird ausgewertet gemäß } \text{Sp}(\varrho A) = \sum_\nu \int d\lambda \langle b_\nu(\lambda) | \varrho A | b_\nu(\lambda) \rangle$$

$\rightsquigarrow$ Allgemeiner Fall: $W(\lambda) = \langle \delta(O - \lambda) \rangle = \sum_\nu \langle b_\nu(\lambda)   \varrho   b_\nu(\lambda) \rangle$ Reiner Fall: $W(\lambda) = \sum_\nu  \langle \Psi   b_\nu(\lambda) \rangle ^2$
------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

$\rightsquigarrow$  Ausdrücke dieselben wie im Fall des diskreten Spektrums, allerdings ist  $W(\lambda)$  hier eine Verteilungsdichte:  
 $W(\lambda)d\lambda$  entspricht der Wahrscheinlichkeit, einen Messwert im Intervall  $[\lambda, \lambda + d\lambda]$  zu messen.

- Wichtigste Schlussfolgerung: Falls  $\lambda$  kein Eigenwert von  $O$  ist, ist  $W_\lambda = 0$ , d.h. der Messwert  $\lambda$  tritt nie auf.

Die einzig möglichen Werte (Messwerte) einer dynamischen Variable sind die Eigenwerte der zugeordneten Observable.

(wird oft bei den Postulaten mitgenannt, aber wir haben es hier aus den Postulaten I-III hergeleitet.)

- (b) Unschärferelation (vgl. Kapitel 2.1.5 S.26)

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

Zwei Größen können nur dann gleichzeitig scharf messbar sein, wenn sie vertauschbar sind.

(Beweis:

- Definiere  $a = A - \langle A \rangle$ ,  $b = B - \langle B \rangle \Rightarrow \Delta A^2 = \langle a^2 \rangle$ ,  $\Delta B^2 = \langle b^2 \rangle$ ,  $[A, B] = [a, b]$   
Es gilt:  $i[A, B] = i[a, b]$  ist selbstadjungiert  
(da  $(i[A, B])^\dagger = -i(AB - BA)^\dagger = -i(B^\dagger A^\dagger - A^\dagger B^\dagger) = i(AB - BA) = i[A, B] \checkmark$ )
- Definiere  $d := a + i\lambda b$  (nicht hermitesch)  $\rightarrow d^\dagger = a - i\lambda b$   
und  $D(\lambda) := Sp(d^\dagger \varrho d)$   
 $\Rightarrow D(\lambda) = Sp(d^\dagger \varrho d) = \sum_k \langle b_k | d^\dagger \varrho d | b_k \rangle = \sum_k \langle db_k | \varrho | db_k \rangle \geq 0$   
 $\Rightarrow D(\lambda) = Sp(\varrho dd^\dagger) = Sp(\varrho(a + i\lambda b)(a - i\lambda b)) = Sp(\varrho(a^2 + \lambda^2 b^2 - i\lambda[a, b]))$   
 $= \langle a^2 \rangle + \lambda^2 \langle b^2 \rangle - \lambda \langle i[a, b] \rangle \geq 0$  (reell, da  $i[a, b]$  hermitesch!)
- Wähle speziell  $\lambda = \frac{\langle i[a, b] \rangle}{2\langle b^2 \rangle}$  (minimiert übrigens  $D(\lambda)$ )  
 $\Rightarrow \langle a^2 \rangle - \frac{1}{4} \frac{\langle i[a, b] \rangle^2}{\langle b^2 \rangle} \geq 0 \Rightarrow \langle a^2 \rangle \langle b^2 \rangle \geq \frac{1}{4} \langle i[a, b] \rangle^2 \checkmark$

NB: Beweis gilt natürlich auch für reine Zustände

$\leadsto$  Alternativer Beweis zu dem von 2.1.5 S.26

### 3.2.2 Dynamische Entwicklung abgeschlossener Systeme

Abgeschlossenes System: Keine Wechselwirkung mit der Außenwelt  
Beschreibung in Kapitel 2 S.9 → im wesentlichen Schrödingergleichung

Hier: Struktur der dynamischen Gleichungen aus allgemeinen Prinzipien

- Rekapitulation der Schrödingergleichung („Schrödingerbild“)
- Einführung alternativer, äquivalenter Beschreibungen, in denen sich statt bzw. außer Zustandsvektoren auch Operatoren dynamisch entwickeln („Heisenbergbild“ und „Wechselwirkungsbild“)

#### 3.2.2.1 Der Zeitentwicklungsoperator

Betrachte zeitliche Entwicklung von reinen Zuständen: Repräsentiert durch Zustandsvektor  $|\Psi(t)\rangle$ ; Statistischer Operator:  $\rho(t) = |\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)|$ .

zur Zeit  $t_0$ :  $|\Psi(t_0)\rangle$  bzw.  $\rho(t_0) = |\Psi(t_0)\rangle\langle\Psi(t_0)|$ .

zur Zeit  $t > t_0$ :  $|\Psi(t)\rangle =: U(t, t_0)|\Psi(t_0)\rangle$   
bzw.  $\rho(t) = U(t, t_0)\rho(t_0)U^\dagger(t, t_0)$

↪ definiert Zeitentwicklungsoperator  $U$

Forderungen an U

- (i) stetig, speziell  $\lim_{t \rightarrow t_0} U(t, t_0) = \mathbb{1}$  ( $\leadsto \lim_{t \rightarrow t_0} |\Psi(t)\rangle = |\Psi(t_0)\rangle$ )  
⇒  $|\Psi\rangle$  soll sich stetig, nicht sprunghaft entwickeln
- (ii) unitär:  $UU^\dagger = \mathbb{1}$  ( $\leadsto$  normierte Zustandsvektoren bleiben normiert)  
Folgt aus Wahrscheinlichkeitserhaltung in reinen Zuständen.  
Sei  $\varrho(t_0) = |\Psi_0\rangle\langle\Psi_0|$  ( $\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle = 1$ )  $\varrho(t) = U(t, t_0)|\Psi_0\rangle\langle\Psi_0|U^\dagger(t, t_0)$   
↪  $Sp(\varrho(t)) = \sum_k \langle b_k|U|\Psi_0\rangle\langle\Psi_0|U^\dagger|b_k\rangle = \langle\Psi_0|U^\dagger U|\Psi_0\rangle = 1$   
Gilt für alle normierten  $|\Psi_0\rangle$ , also auch für Eigenvektoren von  $U^\dagger U$   
⇒  $UU^\dagger = \mathbb{1}$  ✓
- (iii) zusammensetzbar:  $U(t, t_0) = U(t, t_1)U(t_1, t_0)$  für  $t \geq t_1 \geq t_0$

Folgerung:

- Infinitesimaler Zeitschritt  $dt$

Ansatz:  $U(t_0 + dt, t_0) = \mathbb{1} + \epsilon(t_0, dt)$

- $\epsilon$  muss mit  $dt$  gegen Null gehen wegen (i)
- $\epsilon$  muss linear in  $dt$  sein wegen (iii)

$$\begin{aligned} U(t_0 + dt_1 + dt_2, t_0) &= U(t_0 + dt_1 + dt_2, t_0 + dt_1)U(t_0 + dt_1, t_0) \\ &\Rightarrow \mathbb{1} + \epsilon(t_0, dt_1 + dt_2) = (\mathbb{1} + \epsilon(t_0 + dt_1, dt_2))(\mathbb{1} + \epsilon(t_0, dt_1)) \\ &\Rightarrow \epsilon(t_0, dt_1 + dt_2) \approx \epsilon(t_0 + dt_1, dt_2) + \epsilon(t_0, dt_1) \approx \epsilon(t_0, dt_2) + \epsilon(t_0, dt_1) \quad \checkmark \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - i\epsilon \text{ muss hermitesch sein wegen (ii)} \\
& (\mathbb{1} = U(t_0 + dt, t_0)^\dagger U(t_0 + dt, t_0) = (\mathbb{1} + \epsilon)^\dagger (\mathbb{1} + \epsilon) = \mathbb{1} + \epsilon^\dagger + \epsilon + \underbrace{o(\epsilon^2)}_{o(dt^2)} \\
& \Rightarrow \epsilon + \epsilon^\dagger = 0 \Rightarrow \epsilon = -\epsilon^\dagger \Rightarrow (i\epsilon) = (i\epsilon)^\dagger \quad \checkmark \\
& \Rightarrow U(t_0 + dt, t_0) = \mathbb{1} - i \Omega(t_0) dt, \quad \Omega(t_0) \text{ hermitesch}
\end{aligned}$$

- Endlicher Zeitschritt

Setzt sich aus vielen infinitesimalen Intervallen zusammen

$$\begin{aligned}
& \text{„Rekursiv“: } U(t + dt, t_0) = U(t + dt, t)U(t, t_0) = (\mathbb{1} - i \Omega dt)U(t, t_0) \\
& \Rightarrow U(t + dt, t_0) - U(t, t_0) = -i \Omega dt U(t, t_0)
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \boxed{i \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = \Omega U(t, t_0)}$$

Falls  $\Omega$  nicht zeitabhängig ist

$$\leadsto \text{Formale Lösung möglich: } U(t, t_0) = e^{-i\Omega(t-t_0)}$$

Allgemein: schwieriger (Reihe, siehe z.B. Kapitel 5.2 S.126)

### 3.2.2.2 Schrödingerbild

Schrödingerbild  $\rightarrow$  der Zugang, den wir aus der Wellenmechanik kennen. Wurde bis jetzt implizit immer verwendet.

Kennzeichen:

Operatoren  $O$  für Observablen im allgemeinen zeitunabhängig, es sei denn, es gibt explizite Zeitabhängigkeit (z.B. Potential  $V(t)$ )

Zustandsvektoren  $|\Psi(t)\rangle$  verändern sich in der Zeit

Dann ist:  $\Omega = H/\hbar$  mit  $H$ : Hamiltonoperator (dies definiert  $H$ )

Es folgt für die dynamische Entwicklung ...

- des Zeitentwicklungsoperators  $U(t, t_0)$ :

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = H U(t, t_0)}$$

Falls  $H$  nicht explizit zeitabhängig:  $U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)}$

- von reinen Zuständen bzw. den zugehörigen Zustandsvektoren: mit  $|\Psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\Psi(t_0)\rangle$  folgt:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = H |\Psi(t)\rangle} : \text{Schrödingergleichung}$$

- von Operatoren zu Observablen:  $\boxed{\frac{dO}{dt} = \frac{\partial O}{\partial t}}$

- des statistischen Operators  $\rho$ :

Für allgemeine gemischte Zustände  $\rho = \sum_i p_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i|$  gilt:

$$\rho(t) = \sum_i p_i |\phi_i(t)\rangle\langle\phi_i(t)| = \sum_i p_i U(t, t_0) |\phi_i(t_0)\rangle\langle\phi_i(t_0)| U^\dagger(t, t_0) = U(t, t_0) \rho(t_0) U^\dagger(t, t_0)$$

$$\rightarrow \boxed{\varrho(t) = U(t, t_0) \varrho(t_0) U^\dagger(t, t_0)}$$

$$\begin{aligned} \text{Zugehörige Differentialgleichung: } i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varrho &= (i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U) \varrho(t_0) U^\dagger - U \varrho(t_0) (i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U)^\dagger \\ &= H \underbrace{U \varrho(t_0) U^\dagger}_{\varrho(t)} - \underbrace{U \varrho(t_0) U^\dagger}_{\varrho(t)} H \end{aligned}$$

$$\rightarrow \boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varrho = [H, \varrho]} : \underline{\text{von-Neumann-Gleichung}}$$

- von Erwartungswerten:

$$\boxed{\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \langle \frac{i}{\hbar} [H, A] \rangle + \langle \frac{\partial A}{\partial t} \rangle} : \underline{\text{Ehrenfest-Gleichung}}$$

$$\begin{aligned} (\frac{d}{dt} Sp(\varrho A) &= Sp(\frac{\partial \varrho}{\partial t} A) + Sp(\varrho \frac{\partial A}{\partial t}) = Sp(\frac{i}{\hbar} [H, \varrho] A) + \langle \frac{\partial A}{\partial t} \rangle \\ &= Sp(\frac{i}{\hbar} \varrho HA) - Sp(\frac{i}{\hbar} \varrho AH) + \langle \frac{\partial A}{\partial t} \rangle = Sp(\frac{i}{\hbar} \varrho [H, A]) + \langle \frac{\partial A}{\partial t} \rangle = \langle \frac{i}{\hbar} [H, A] \rangle + \langle \frac{\partial A}{\partial t} \rangle \quad \checkmark) \end{aligned}$$

Konkret: Berechnung von Zeitentwicklungsoperatoren im Schrödingerbild

→ sinnvollerweise in H-Darstellung (Energiedarstellung):

$$H|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle (\simeq \text{stationäre Schrödingergleichung})$$

Falls H zeitunabhängig:  $U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)}$

$$U(t, t_0) = \sum_{n,m} |\varphi_n\rangle \underbrace{\langle \varphi_n | U | \varphi_m \rangle}_{\delta_{nm} e^{-\frac{i}{\hbar} E_n(t-t_0)}} \langle \varphi_m | = \sum_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n | e^{-\frac{i}{\hbar} E_n(t-t_0)}$$

$$|\Psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle = \sum_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n | \Psi(t_0)\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_n(t-t_0)}$$

Falls H explizit zeitabhängig: schwieriger (z.B. Dyson-Reihe, Kapitel 5.2 S.126)

Beispiel: Zeitentwicklungsoperator für freies Teilchen in einer Dimension

$$H = \frac{p^2}{2m} \rightarrow U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\frac{p^2}{2m}} = \int dp |p\rangle \langle p| e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\frac{p^2}{2m}} \quad (*)$$

in Ortsdarstellung:

$$\langle x | U(t, t') | x' \rangle =: G(x, t; x', t') \rightarrow \text{„Propagator“}$$

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \langle x | \Psi(t) \rangle = \langle x | U(t, t') | \Psi(t') \rangle = \int dx' \langle x | U(t, t') | x' \rangle \langle x' | \Psi(t') \rangle \\ &= \int dx' G(x, t; x', t') \Psi(x', t') \end{aligned}$$

$$\leadsto G(x, t; x', t') = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar (t-t')}} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(x-x')^2}{(t-t')}}$$

$$\begin{aligned} (\text{Rechnung: } \langle x | U(t, t') | x' \rangle &= \int dp \underbrace{\langle x | p \rangle}_{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} x p}} \underbrace{\langle p | x' \rangle}_{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar} x' p}} e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t')\frac{p^2}{2m}} \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp e^{\frac{i}{\hbar} p(x-x')} e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t')\frac{p^2}{2m}} \\ &\quad \text{quadratische Ergänzung} \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(x-x')^2}{(t-t')}} \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{(t-t')}{2m} (p - m \frac{x-x'}{t-t'})^2} \\ &\quad \text{Gaußsches Integral} \\ &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar (t-t')}} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(x-x')^2}{(t-t')}} \quad \checkmark) \end{aligned}$$

**3.2.2.3 Heisenbergbild**

Alternative, äquivalente Beschreibung zum Schrödingerbild

Idee: Zustandsvektoren  $|\Psi\rangle$  ändern sich im Grunde nicht, werden nur gedreht.

Was sich ändert, sind Erwartungswerte von Observablen

~> Es wäre in manchen Situationen transparenter, eine Beschreibung zu haben, in der Zustandsvektoren zeitunabhängig und Observablen zeitabhängig sind. → „Heisenbergbild“

\* Entwicklung des Heisenbergbilds aus dem Schrödingerbild

(i) Schrödingerbild, übliche Darstellungen (Index S bedeutet Schrödinger)

Zustandsvektoren: $ \Psi_S(t)\rangle = U_S(t, 0)  \Psi_S(0)\rangle$	zeitabhängig
Observablen: $O_S$	im allgemeinen zeitunabhängig
Statistischer Operator: $\varrho_S(t) = U_S \varrho_S(0) U_S^\dagger$	zeitabhängig

Üblicherweise wählt man zeitunabhängige Basis  $|b_n\rangle$

~> Zustandsvektoren:  $\langle b_n | \psi_S(t) \rangle \rightarrow$  zeitabhängige Koeffizienten

Observablen:  $\langle b_n | O_S | b_m \rangle \rightarrow$  zeitunabhängige Matrixelemente

(ii) Schrödingerbild mit mitbewegten Basisvektoren

Im Prinzip kann Basis auch mitbewegt werden:  $|\tilde{b}_n(t)\rangle = U_S(t, 0) |b_n\rangle$

~> In solchen Darstellungen gilt:

Zustandsvektoren:  $\langle \tilde{b}_n(t) | \Psi_S(t) \rangle = \langle b_n | U_S^\dagger U_S | \Psi_S(0) \rangle = \langle b_n | \Psi_S(0) \rangle$   
 → zeitunabhängige Koeffizienten

Observablen:  $\langle \tilde{b}_n(t) | O_S | \tilde{b}_m(t) \rangle$   
 → i.a. zeitabhängige Matrixelemente

NB: Koeffizienten der Zustandsvektoren in solchen Darstellungen sind zwar zeitunabhängig, aber für  $|\Psi_S(t)\rangle$  selber gilt nach wie vor (i) (immer noch Schrödingerbild)

(iii) Heisenbergbild (Index H bedeutet Heisenberg)

Darstellungen von Zustandsvektoren und Observablen haben die gleichen Eigenschaften wie in (ii), aber in fester Basis  $|b_n\rangle$

→ Passe Zustandsvektoren  $|\Psi\rangle$  und Observablen  $O$  an:

$$\langle \tilde{b}_n(t) | \Psi_S(t) \rangle = \langle b_n | U_S^\dagger(t, 0) | \Psi_S(t) \rangle = \langle b_n | \Psi_S(0) \rangle =: \langle b_n | \Psi_H \rangle$$

$$\langle \tilde{b}_n(t) | O_S | \tilde{b}_m(t) \rangle = \langle b_n | U_S^\dagger O_S U_S | b_m \rangle =: \langle b_n | O_H | b_m \rangle$$

~> neue Zustandsvektoren, Observablen, statistischer Operator

Zustandsvektoren: $ \Psi_H\rangle = U_S^\dagger(t, 0)  \Psi_S(t)\rangle =  \Psi_S(0)\rangle$	zeitunabhängig
Observablen: $O_H(t) = U_S^\dagger(t, 0) O_S U_S(t, 0)$	i.a. zeitabhängig
Stat. Op.: $\varrho_H = U_S^\dagger(t, 0) \varrho_S(t) U_S(t, 0) = \varrho_S(0)$	zeitunabhängig

(Beweis von  $\varrho_H = \varrho_S(0)$  ergibt sich aus der Forderung  $\langle O \rangle = Sp(\varrho_S O_S) = Sp(\varrho_H O_H)$ :

$$\Rightarrow Sp(\varrho_S O_S) = Sp(\varrho_H U_S^\dagger O_S U_S) = Sp(U_S \varrho_H U_S^\dagger O_S) \text{ für alle Observablen } O_S$$

$$\Rightarrow U_S \varrho_H U_S^\dagger = \varrho_S(t) \Rightarrow \varrho_H = U_S^\dagger \varrho_S(t) U_S$$

$$\text{Weiterhin gilt: } \varrho_S(t) = U_S \varrho_H U_S^\dagger \Rightarrow \varrho_H = \varrho_S(0) \quad \checkmark$$

\* Charakterisierung des Heisenbergbilds

- Beschreibung völlig kompatibel mit den Postulaten aus 3.2.1 S.56
  1.  $|\Psi_H\rangle$  sind Zustandsvektoren im Hilbertraum
  2.  $O_H = U_S^\dagger O_S U_S$  selbstadjungiert, falls  $O_S$  selbstadjungiert
  3. Eigenwerte von  $O_H$  und  $O_S$  sind identisch  
(Eigenvektor  $|v_S\rangle$  geht über in  $|v_H\rangle = U^\dagger |v_S\rangle$ )
  4. Statistischer Operator  $\varrho_H$  so konstruiert, dass  $\langle O \rangle = Sp(\varrho_H O_H) = Sp(\varrho_S O_S)$

- Beschreibung auch kompatibel mit 3.2.2.1 S.60,

wenn man trivial setzt:  $\Omega = 0 \Rightarrow U_H(t, 0) \equiv \mathbb{1}$

- Es folgt für die dynamische Entwicklung ...

- des Zeitentwicklungsoperators:  $\frac{d}{dt} U_H = 0$  ( $U_H \equiv \mathbb{1}$ )

- von Zustandsvektoren:  $\frac{d}{dt} |\Psi_H\rangle = 0$

- von Operatoren zu Observablen:

$$\boxed{i\hbar \frac{d}{dt} O_H = [O_H, H_H] + i\hbar \left(\frac{\partial O}{\partial t}\right)_H} : \text{Heisenberg-Gleichung}$$

$$\text{mit } \left(\frac{\partial O}{\partial t}\right)_H := U_S^\dagger(t, 0) \frac{\partial O_S}{\partial t} U_S(t, 0)$$

(Beweis:  $O_H(t) = U_S^\dagger O_S U_S$  und  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_S = H_S U_S$  wobei  $U_S = U_S(t, 0)$ :

$$\begin{aligned} \Rightarrow i\hbar \frac{d}{dt} O_H &= -(i\hbar \frac{d}{dt} U_S)^\dagger O_S U_S + U_S^\dagger O_S (i\hbar \frac{d}{dt} U_S) + U_S^\dagger (i\hbar \frac{d}{dt} O_S) U_S \\ &= -(H_S U_S)^\dagger O_S U_S + U_S^\dagger O_S H_S U_S + i\hbar U_S^\dagger \left(\frac{d}{dt} O_S\right) U_S \\ &= -U_S^\dagger H_S \underbrace{U_S U_S^\dagger}_1 O_S U_S + U_S^\dagger O_S \underbrace{U_S U_S^\dagger}_1 H_S U_S + i\hbar \left(\frac{\partial O}{\partial t}\right)_H \\ &= -H_H O_H + O_H H_H + i\hbar \left(\frac{\partial O}{\partial t}\right)_H \quad \checkmark \end{aligned}$$

- des statistischen Operators:  $\frac{d}{dt} \varrho_H = 0$

- von Erwartungswerten: Ehrenfest-Gleichung wie gehabt

Ergibt sich hier direkt aus der Heisenberg-Gleichung

- Bemerkungen

- Falls  $H_S$  zeitunabhängig ist  $\Leftrightarrow U_S(t, 0) = e^{-\frac{i}{\hbar} H_S t}$

folgt:  $H_H = e^{\frac{i}{\hbar} H_S t} H_S e^{-\frac{i}{\hbar} H_S t} = H_S \equiv H$  (auch zeitunabhängig)

und  $O_H = e^{\frac{i}{\hbar} H t} O_S e^{-\frac{i}{\hbar} H t}$  für allgemeine Observable

- Beispiel: Freies Teilchen in einer Dimension

$$H_S = \frac{p_S^2}{2m}; H_H = H_S = H; p_H = e^{\frac{i}{\hbar} \frac{p_S^2}{2m} t} p_S e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p_S^2}{2m} t} = p_S$$

$$\Rightarrow r_H(t) = r_S + \frac{p_S}{m} t$$

$$(i\hbar \frac{d}{dt} r_H = [r_H, H] = U^\dagger [r_S, \frac{p_S^2}{2m}] U = i\hbar \frac{p_H}{m} \Rightarrow r_H(t) - r_H(0) = \frac{p_H}{m} t = \frac{p_S}{m} t \quad \checkmark)$$

**3.2.2.4 Wechselwirkungsbild**

Noch eine weitere, äquivalente Beschreibung

Mittelding zwischen Schrödingerbild und Heisenbergbild

- nützlich z.B. in der Störungstheorie (siehe Kapitel 5 S.117)

z.B. Wasserstoff im elektromagnetischen Strahlungsfeld, Strahlungsübergänge

→ Wähle ein Bild, in dem die Zustandsvektoren

zu festen Energieniveaus fest sind.

Unter Strahlung variieren Zustandsvektoren langsam

≈ Übergänge zwischen Niveaus

Zerlege:  $H_S = H_0 + H'(t)$  so, dass  $H_0$  zeitunabhängig ist

Definiere:  $|\Psi_W(t)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}H_0t}|\Psi_S(t)\rangle$   
 $O_W(t) = e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} O_S e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}$

Daraus ergibt sich analog zum Heisenbergbild:  $\varrho_W(t) = e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} \varrho_S e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}$

⇒ Dynamische Gleichungen: mit  $H'_W(t) = e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} H'(t) e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}$

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi_W(t)\rangle = H'_W |\Psi_W(t)\rangle$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} O_W(t) = [O_W, H_0] + i\hbar \left(\frac{dO}{dt}\right)_W$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \varrho_W(t) = [H'_W, \varrho_W]$$

Zeitentwicklungsoperator:  $U_W(t, 0) = e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} U_S(t, 0) e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}$

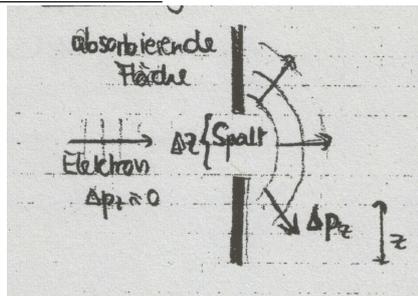
### 3.2.3 Offene Systeme und Messprozess

In Kapitel 3.2.2 S.60: Störungsfreie Zeitentwicklung in abgeschlossenem System

Messung: Ankopplung an „Außenwelt“ notwendig, kann nicht störungsfrei vonstatten gehen

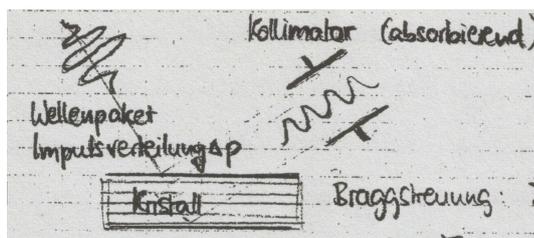
#### 3.2.3.1 Einfache Beispiele von Messungen

##### (i) „Ortsmessung“



Falls Elektron nicht absorbiert wurde, (feststellbar /  $\leftrightarrow$  messbar) ist es durch den Spalt getreten  
 → Ort bestimmt mit Unschärfe  $\Delta z$   
 → Impulsunschärfe  $\Delta p_z$  (Richtung)

##### (ii) „Impulsmessung“ (Analysator)

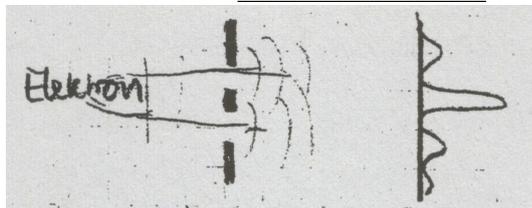


Braggstreuung: Durch Interferenz wird eine Frequenz herausgefiltert  
 → „Monochromatisierter“ Strahl, Ort weniger scharf als vorher. „Grund“: Eindringtiefe in den Kristall unbekannt

⇒ (i) und (ii) sind Beispiele für eine „Messung“, aber auch für die Präparation eines Systems → Messung beeinflusst gemessenes Objekt.

Zusammenhang mit Unschärferelation: Man kann zwei inkompatible Observablen nicht gleichzeitig scharf messen, nur hintereinander. Mit der zweiten Messung erübrigt sich der Messwert aus der ersten Messung.

##### (iii) Weiteres Beispiel: Doppelspaltversuch



“ Unschärfe“ hier: Man kann nicht gleichzeitig wissen, durch welchen Spalt das Elektron gelaufen ist, und Interferenzmuster erhalten.

Versuch, eine Information über den Weg des Elektrons zu erhalten

(nach Feynman, Lectures on physics)



Lichtquelle. Licht wird an Elektron gestreut. So könnte man evtl. Trajektorien des Elektrons verfolgen.

Aber: Streuprozess stört Elektron, zerstört Kohärenz  
 → keine Interferenz

Abhilfversuche:

- Schwächeres Licht → nur noch wenige Streuprozesse (wenig Photonen)
  - ↪ nur noch wenige Elektronen an Streuprozessen beteiligt
  - ↪ Gestreute Elektronen liefern inkohärentes Muster
  - Ungestrene Elektronen liefern Interferenzmuster
  - (über diese liegt aber keine "Welcher Weg"-Information vor)
- Licht größerer Wellenlänge
  - ↪ Einzelne Streuprozesse beeinflussen Elektronen weniger
  - ↪ irgendwann ist Störung so klein, dass Interferenzmuster wieder auftaucht
  - Aber: Die Wellenlänge ist dann so groß, dass man zwischen den beiden Spalten nicht mehr unterscheiden kann.

Frage: Was geschieht nun allgemein bei einer Messung?

### 3.2.3.2 „Kopenhagener Interpretation“ und Reduktionspostulat

(stammt aus der Gruppe um Niels Bohr, "klassische" Deutung)

Zusätzliches Postulat: (zu den Postulaten aus 3.2.1 S.56)

„Nach einer Messung befindet sich das System in einem dem Messergebnis entsprechenden Eigenzustand.“

$$\varrho_{\text{initial}} \xrightarrow{\substack{\text{Messung einer Observablen } \hat{O} \\ \text{Ergebnis: Eigenwert } \lambda_n, \\ \text{zugehöriger Eigenvektor } |v_n\rangle}} \varrho_{\text{final}} = |v_n\rangle\langle v_n|$$

Im Fall eines von Anfang an reinen Zustands

$$\varrho_i = |\Psi\rangle\langle\Psi| \rightarrow \varrho_f = |v_n\rangle\langle v_n|$$

entspricht dies einer „Zeitentwicklung“  $|\Psi\rangle \rightarrow |v_n\rangle$

Neue Dynamik, im Lauf derer der Zustandsvektor  $|\Psi\rangle$  auf den Eigenvektorraum von  $\lambda_n$  projiziert wird:  $|\Psi\rangle \rightarrow |v_n\rangle\langle v_n|\Psi\rangle$

„Reduktion“ des Zustands (daher Reduktionspostulat) bzw. „Kollaps“

Probleme mit dem Reduktionspostulat

- Zwei verschiedene Dynamiken
  - Schrödingergleichung: reversibel, unitäre Zeitentwicklung
  - Messung; Kollaps: irreversibel, nicht unitär
  - ↪ passt nicht zusammen, in sich inkonsistent
- Wenn schon zwei Dynamiken, dann muss man fragen:
  - Wann genau setzt Reduktion ein?
  - Was ist eine Messung?

(z.B. Doppelspaltversuch: Ab wann wird Interferenzmuster zerstört?  
 Muss ich (Beobachter) wissen, wo Elektron durchgegangen ist?  
 Was ist, wenn ich eine Messung mache, aber nicht hinschaue?  
 Was ist, wenn ich prinzipiell gar nicht hinschauen kann?)

Berühmtes Gedankenexperiment: Schrödingers Katze

Setup: - Radioaktives Atom  $|1\rangle$ , zerfällt zu  $|0\rangle$ , emittiert dabei Photon  
 - Photon wird detektiert, das legt einen „Schalter“ um  
 - Der Schalter öffnet einen Behälter mit Gift  
 - Die Katze frisst das Gift und stirbt

Betrachtet man das Atom alleine (reiner Zustand), würde man sagen:  
 Nach einer Halbwertszeit wird es durch Zustandsvektor  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |0\rangle)$   
 beschrieben.

Betrachtet man den ganzen Setup, kommt man auf  
 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|1, \dots, \text{Katze lebendig}\rangle + |0, \dots, \text{Katze tot}\rangle)$

$\leadsto$  Was bedeutet das? Wie kann eine Katze tot und lebendig sein?  
 bzw. Wann entscheidet sich, ob sie tot oder lebendig ist?  
 Erst wenn ich hinschaue?

Häufiges Argument:

Messung und Kollaps finden da statt, wo ein makroskopisches Messgerät  
 an ein mikroskopisches Quantenobjekt (Elektron, Atom) gekoppelt wird.  
 Mikroskopisches System  $\rightarrow$  quantenmechanische Beschreibung  
 Makroskopisches System  $\rightarrow$  klassische Beschreibung  
 An der Schnittstelle findet angeblich Kollaps statt.

Aber: Nanotechnologie  $\rightarrow$  Messgeräte (Sensoren) werden immer kleiner.  
 Tieftemperaturphysik  $\rightarrow$  Quantenobjekte werden immer ausgedehnter  
 Übergang mikroskopisch/makroskopisch ist fließend  
 Die strenge Unterscheidung makroskopisch/klassisch und mikroskopisch/quantal  
 lässt sich heute nicht mehr ohne weiteres aufrechterhalten.

### 3.2.3.3 Statistische Interpretation und Dekohärenz

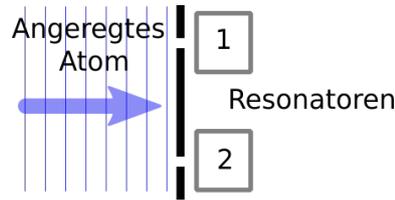
Ausweg aus den in 3.2.3.2 S.67 angesprochenen Problemen

Statistischer Ansatz: Diskutiere von vornherein nicht Einzelsysteme, sondern  
 statistisches Ensemble, beschrieben durch Operator  $\varrho$   
 $\rightarrow$  selbst ein „reines System“  $\varrho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$  entspricht dann einem Ensemble  
 identisch präparierter Systeme

Dieser Ansatz räumt die grundlegendsten Probleme zwar nicht aus (siehe dazu (4)), aber er umgeht sie und ermöglicht das aufstellen eines in sich konsistenten Formalismus.

Wichtig ist dabei: Konsequente Berücksichtigung dessen, dass man offene Systeme immer gemeinsam mit der Umwelt betrachten muss.

(a) Beispiel: Noch einmal Doppelspalt (Gedankenexperiment, Scully, 1991)



Resonator wird so eingestellt, dass das Atom genau abgeregt wird und Photon im Resonator bleibt

~> Information über den Weg des Atoms ist im System gespeichert, aber dem Beobachter („mir“) nicht zugänglich

~> Wie wirkt sich das auf Interferenzen aus?

• Referenzsystem ohne Resonatoren:

Zustandsvektor  $|\Psi\rangle$  zerlegt in Anteile  $|\Psi_1\rangle$  (vom oberen Spalt) und  $|\Psi_2\rangle$  (vom unteren Spalt).

$$\Rightarrow |\Psi\rangle \propto |\Psi_1\rangle + |\Psi_2\rangle,$$

$$\varrho = |\Psi\rangle\langle\Psi| \propto (|\Psi_1\rangle\langle\Psi_1| + |\Psi_2\rangle\langle\Psi_2| + \underbrace{|\Psi_1\rangle\langle\Psi_2| + |\Psi_2\rangle\langle\Psi_1|}_{\text{Kreuzterme} \rightarrow \text{Interferenzen}})$$

(Interferenzmuster: Anzahl  $n(z_0)$  der Atome bei  $z_0$  gegeben durch:

$$\begin{aligned} n(z_0) &\propto \langle z_0|\varrho|z_0\rangle \propto (|\langle z_0|\Psi_1\rangle|^2 + |\langle z_0|\Psi_2\rangle|^2 + \underbrace{\langle z_0|\Psi_1\rangle\langle\Psi_2|z_0\rangle + \langle z_0|\Psi_2\rangle\langle\Psi_1|z_0\rangle}_{\text{oszilliert} \rightarrow \text{Interferenzen}}) \\ &= |\Psi_1(z_0)|^2 + |\Psi_2(z_0)|^2 + \underbrace{2\Re(\Psi_1^*(z_0)\Psi_2(z_0))}_{\text{oszilliert} \rightarrow \text{Interferenzen}} \end{aligned}$$

• Füge Resonatoren hinzu:

Resonatoren  $\leftrightarrow$  Beschreibung durch Zustandsvektoren  $\begin{cases} |0\rangle & \text{kein Photon} \\ |1\rangle & \text{Photon in 1} \\ |2\rangle & \text{Photon in 2} \end{cases}$

Kein Überlapp, also  $\langle i|j\rangle = 0$

Gekoppeltes System:

vor dem Spaltdurchgang:  $|\Psi\rangle|0\rangle = \mathcal{N}(|\Psi_1\rangle|0\rangle + |\Psi_2\rangle|0\rangle)$

nach dem Durchgang:  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\Psi_1\rangle|1\rangle + |\Psi_2\rangle|2\rangle)$

$$\rightarrow \varrho = \frac{1}{2}(|\Psi_1\rangle|1\rangle + |\Psi_2\rangle|2\rangle)(\langle 1|\langle\Psi_1| + \langle 2|\langle\Psi_2|)$$

Nun interessieren hauptsächlich Erwartungswerte von Größen, die nur von Atompositionen abhängen (z.B. Interferenzmuster)

→ Über den Freiheitsgrad des Resonators kann Spur vorab gebildet werden (statistische Mittelung über Zustand des Resonators)

→ „trunkierter“ statistischer Operator

$$\begin{aligned} \varrho^{trunk} &= \sum_{i=0,1,2} \langle i|\varrho|i\rangle = \underbrace{\langle 0|\varrho|0\rangle}_0 + \underbrace{\langle 1|\varrho|1\rangle}_{\frac{1}{2}|\Psi_1\rangle\langle\Psi_1|} + \underbrace{\langle 2|\varrho|2\rangle}_{\frac{1}{2}|\Psi_2\rangle\langle\Psi_2|} \\ &= \frac{1}{2}(|\Psi_1\rangle\langle\Psi_1| + |\Psi_2\rangle\langle\Psi_2|) \end{aligned}$$

~> Interferenzterme sind verschwunden!

(Interferenzmuster  $n(z_0) \propto \langle z_0|\varrho^{trunk}|z_0\rangle = \langle z_0|\varrho^{trunk}|z_0\rangle = \frac{1}{2}(|\Psi_1(z_0)|^2 + |\Psi_2(z_0)|^2)$

~> kein oszillierender Beitrag mehr!)

- Weitergehende Gedankenexperimente:

Kopple Resonatoren aneinander, so dass <u>Photonenaustausch</u> möglich wird		$\leadsto \langle i j \rangle = 0$ stimmt nicht mehr genau $\leadsto$ Interferenzen erscheinen wieder Aber: Weginformation geht gleichzeitig auch verloren.
---------------------------------------------------------------------------------------	--	----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

**(b) Verallgemeinerung dieser Gedankengänge**

Untersuche einen Prozess, in dem an einem quantenmechanischen Objekt eine Observable  $O$  gemessen wird.

Betrachte das gekoppelte System von  
 I: dem Objekt, an dem gemessen wird  
 II: dem Messgerät

System I: Observable hat Eigenwerte  $\lambda_n$ , Eigenvektoren  $|v_n\rangle$

System II: Observable gekoppelt an „Zeiger“, Zeigeroperator  $Z$

Eigenvektoren:  $\left. \begin{array}{l} |z_0\rangle \rightarrow \text{neutraler Zeigerstand} \\ |z_n\rangle \rightarrow \text{zeigt Messwert } \lambda_n \text{ an} \end{array} \right\} \langle z_i|z_j \rangle = 0$

Dynamik während einer Messung

vorher: Zeigerstand neutral  $\rightarrow |z_0\rangle$

nachher: Systeme I und II so gekoppelt,  
dass  $|v_n\rangle|z_0\rangle$  übergeht in  $|v_n\rangle|z_n\rangle$

Ein solcher Übergang kann konsistent mit Schrödinger-Dynamik sein (kein Informationsverlust  $\leftrightarrow$  reversibel. Wie die Dynamik konkret aussieht, muss von Fall zu Fall extra untersucht werden.)

$\leadsto$  Auswirkungen auf den statistischen Operator des Systems:

vorher:  $\varrho = \sum_{n,m} \varrho_{nm} |z_0\rangle |v_n\rangle \langle v_m| \langle z_0|$  (allgemeinster Ansatz)

nachher:  $\varrho = \sum_{n,m} \varrho_{nm} |z_n\rangle |v_n\rangle \langle v_m| \langle z_m|$

$\rightarrow$  Information ( $\varrho_{nm}$ ) bleibt vollständig erhalten  $\Rightarrow$  reversibel

Betrachte nun den Fall, dass das Objekt I und das Messgerät II im weiteren Verlauf nicht mehr miteinander verquickt sind.

$\leadsto$  Es interessiert nur noch das System I,

$\leadsto$  Über das System II kann vorab per Teilspurbildung gemittelt werden.

$\Rightarrow$  Trunkierter Operator:  $\varrho^{trunk} = \sum_l \langle z_l | \varrho | z_l \rangle$ ,

enthält alle Information über das System I (d.h. alle Erwartungswerte, die nur von I abhängen, können damit berechnet werden).

Dynamische Entwicklung des trunkierten Operators bei der Messung:

vorher:  $\varrho^{trunk} = \sum_{n,m,l} \varrho_{nm} \underbrace{\langle z_l | z_0 \rangle}_{\delta_{l0}} |v_n\rangle \langle v_m| \underbrace{\langle z_0 | z_l \rangle}_{\delta_{0l}} = \sum_{n,m} \varrho_{nm} |v_n\rangle \langle v_m|$

nachher:  $\varrho^{trunk} = \sum_{n,m,l} \varrho_{nm} \underbrace{\langle z_l | z_n \rangle}_{\delta_{ln}} |v_n\rangle \langle v_m| \underbrace{\langle z_m | z_l \rangle}_{\delta_{ml}} = \sum_n \varrho_{nn} |v_n\rangle \langle v_n|$

⇒ Nicht-Diagonalterme verschwinden, inkohärente Überlagerung von Eigenvektoren  $|v_n\rangle$ : Dekohärenz

⇒  $\varrho^{trunk}$  reproduziert die Reduktion des statistischen Operators, diesmal aber völlig kompatibel mit der Schrödinger-Dynamik.

Bemerkung: Die Zeitentwicklung des totalen statistischen Operators  $\varrho$  ist unitär. Die Zeitentwicklung des trunkierten statistischen Operators  $\varrho^{trunk}$  muss nicht unitär sein.

( $\varrho^{trunk}$  erleidet Informationsverlust bei Messung – Nebendiagonalterme  $\varrho_{nm}$  gehen verloren. Diese Information kann nur zusammen mit System II (Messgerät) wiederbeschafft werden.)

### 3.2.3.4 Diskussion

(sehr unvollständig)

- Der Effekt der Dekohärenz spielt bei Messungen offenbar eine wichtige Rolle. Er macht deutlich, worauf es bei einer Messung ankommt:

- Offenes Quantensystem  
(Wechselwirkung mit Umgebung  $\leftrightarrow$  Messgerät)
- Umgebung muss zwischen den Eigenvektoren der gemessenen Observable unterscheiden können (d.h. Zeigerzustandsvektoren orthogonal)

- Mit dem statistischen Zugang aus (3) lässt sich eine konsistente Theorie formulieren, die ohne zwei verschiedene Dynamiken auskommt. Aber man bezahlt einen Preis → man betrachtet nur noch Ensembles, nicht mehr einzelne, individuelle Systeme.

- Fragt man sich, was in einem konkreten, einzelnen System (unserer Welt) passiert, dann sind alle Interpretationsprobleme wieder da.

↪ Führe noch dritte Ebene ein: III – Beobachter mit "Bewusstsein"  
(nach John von Neumann: „Mathematical foundations of Quantum Mechanics“)

Gekoppelte Zustandsvektoren sind nun  $|\text{System I}\rangle|\text{Messgerät II}\rangle|\text{Beobachter III}\rangle$

z.B. Gesamtvektor zu „Schrödingers Katze“:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle|\text{Katze lebt}\rangle|\text{Ich sehe lebende Katze}\rangle + |0\rangle|\text{Katze tot}\rangle|\text{Ich sehe tote Katze}\rangle)$$

↪ Wie kommt man von da zu einem eindeutigen Ergebnis?

Optionen:

- Kollaps (nun doch wieder) zu einem der beiden Möglichkeiten
- Alle Möglichkeiten bleiben erhalten, also auch alle Beobachterzustände → Everettsche Vielweltheorie („meine“ Welt bestimmt sich daraus, was ich gesehen habe)
- Alternativen?

### 3.3 Harmonischer Oszillator und Leiteroperatoren

Wichtigstes Modellsystem der Quantenmechanik

Lösungsstrategie über Leiteroperatoren liefert „Vorlage“ für die Konstruktion der Quantenfeldtheorie

→ soll deshalb in diesem Kapitel über Grundlagen der Quantenmechanik behandelt werden

System: Hamiltonoperator 
$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (\text{eindimensional})$$

Vorbemerkungen:

- Heisenbergbild vs. Schrödingerbild

$$- [x_S, p_S] = i\hbar \Rightarrow [x_H, p_H] = i\hbar$$

$$\begin{aligned} (\text{denn: } [x_H, p_H] &= U_S^\dagger x_S U_S U_S^\dagger p_S U_S - U_S^\dagger p_S U_S U_S^\dagger x_S U_S \\ &= U_S^\dagger [x_S, p_S] U_S = U_S^\dagger i\hbar U_S = i\hbar \quad \checkmark) \end{aligned}$$

- Funktionale Form des Hamiltonoperators gleich:

$$H = \frac{p_S^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x_S^2 = \frac{p_H^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x_H^2 \quad (\text{Übungsaufgabe})$$

- Wir hätten den harmonischen Oszillator auch in der Wellenmechanik schon lösen können, das ist nur aus Zeitgründen nicht geschehen.

Vorgehen: Ähnlich dem, das beim Wasserstoffatom verwendet wurde:

- zeitunabhängige Schrödingergleichung  $H\varphi = E\varphi$

(diskretes Spektrum, da alle Zustände gebunden)

- Analyse des asymptotischen Verhaltens

$$\rightarrow \varphi(x) \xrightarrow{|x| \rightarrow \infty} e^{-\frac{1}{2\hbar}m\omega^2 x^2}$$

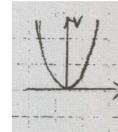
- Potenzreihenansatz für den Rest

$$\rightarrow \text{Eigenfunktionen } \varphi_n \propto e^{-\frac{1}{2\hbar}m\omega^2 x^2} \underbrace{H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)}_{\text{„Hermite“-Polynome}}$$

$$\text{Energieeigenwerte } E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$$

- Hier: alternativer Lösungsweg - „algebraisches“ Verfahren

Führt Methode ein, die in der Quantenmechanik immer wieder verwendet wird.



#### 3.3.1 Berechnung der (Energie-)Eigenwerte von H

★ Vorab: Reskalierung  $x = \sqrt{\frac{1}{m\omega}}\tilde{x}$ ,  $p = \sqrt{m\omega}\tilde{p}$

→  $[\tilde{x}, \tilde{p}] = i\hbar$  (unabhängig vom Bild)

$$H = \frac{\omega}{2}(\tilde{p}^2 + \tilde{x}^2) = \frac{\omega}{2}((\tilde{x} - i\tilde{p})(\tilde{x} + i\tilde{p}) + \hbar)$$

★ Leiteroperatoren

Definiere: 
$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(\tilde{x} + i\tilde{p}) \\ a^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(\tilde{x} - i\tilde{p}) \end{aligned} \quad (\text{nicht hermitesch})$$

$$\text{und } \boxed{N = a^\dagger a} \quad (\text{hermitesch}) \Rightarrow \boxed{H = \hbar\omega(N + \frac{1}{2})}$$

Eigenschaften:

- (i)  $[a, a^\dagger] = 1$  ( $\frac{1}{2\hbar}[\tilde{x} + i\tilde{p}, \tilde{x} - i\tilde{p}] = \frac{i}{2\hbar}([\tilde{p}, \tilde{x}] - [\tilde{x}, \tilde{p}]) = 1$ )
- (ii)  $N$  ist positiv semidefinit ( $\langle \Psi | a^\dagger a | \Psi \rangle = \|a|\Psi\rangle\|^2 \geq 0$  für alle  $|\Psi\rangle$ )  
 $\leadsto$  Alle Eigenwerte von  $N$  sind positiv
- (iii)  $[N, a] = -a$  ( $[N, a] = a^\dagger a a - a a^\dagger a = [a^\dagger, a]a = -a$ )  
 $[N, a^\dagger] = a^\dagger$  ( analog )

Folgerungen:

- Falls  $|\lambda\rangle$  Eigenvektor zu  $N$  ist mit Eigenwert  $\lambda$ , dann ist  
 $\rightarrow a|\lambda\rangle$  Eigenvektor zu  $\lambda - 1$ :  $a|\lambda\rangle = \sqrt{\lambda}|\lambda - 1\rangle$   
 und  $a^\dagger|\lambda\rangle$  Eigenvektor zu  $\lambda + 1$ :  $a^\dagger|\lambda\rangle = \sqrt{\lambda + 1}|\lambda + 1\rangle$   
(denn:  $Na|\lambda\rangle = aN|\lambda\rangle - a|\lambda\rangle = (\lambda - 1)a|\lambda\rangle$   
 Normierung:  $\|a|\lambda\rangle\|^2 = \langle \lambda | a^\dagger a | \lambda \rangle = \langle \lambda | N | \lambda \rangle = \lambda \langle \lambda | \lambda \rangle = \lambda$ ,  
 Analog:  $Na^\dagger|\lambda\rangle = a^\dagger N|\lambda\rangle + a^\dagger|\lambda\rangle = (\lambda + 1)a^\dagger|\lambda\rangle$ ,  
 Normierung:  $\|a^\dagger|\lambda\rangle\|^2 = \langle \lambda | a a^\dagger | \lambda \rangle = \langle \lambda | (1 + N) | \lambda \rangle = (\lambda + 1) \langle \lambda | \lambda \rangle = \lambda + 1$   $\checkmark$ )
- Eigenwerte von  $N$  müssen natürliche Zahlen sein  
 Folgt aus  $a|\lambda\rangle = \sqrt{\lambda}|\lambda - 1\rangle$  und der Positivität von  $N$ .  
(Wäre  $\lambda = m - \varepsilon$  nicht natürlich ( $m$  natürlich,  $0 < \varepsilon < 1$ )  
 $\leadsto a^m|\lambda\rangle = \sqrt{\lambda(\lambda - 1) \cdots (\lambda - m + 1)}|\lambda - m\rangle$  hätte negativen Eigenwert  
 $\leadsto$  Widerspruch!  
 Einzige Möglichkeit:  $\lambda = m \Rightarrow a^m|m\rangle = \sqrt{m!}|0\rangle, a^{m+1}|m\rangle = 0$ : Abbruch)
- Eigenvektoren:  $|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, \dots, |m\rangle$   
 mit  $|m\rangle = \frac{1}{\sqrt{m!}}(a^\dagger)^m|0\rangle$  (wg.  $a^\dagger|m\rangle = \sqrt{m+1}|m+1\rangle$ )

★ Folgerungen für den harmonischen Oszillator:  $H = \hbar\omega(N + \frac{1}{2})$

- Eigenvektoren von  $H \equiv$  Eigenvektoren von  $N$ :  $|m\rangle$
- Eigenwerte von  $H$ :  $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$   
 Speziell Grundzustand:  $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$

★ Interpretation

Energie des Oszillators verteilt sich auf  $n$  Energiequanten

- Operator  $a$  vernichtet ein Energiequant  
Vernichtungs- oder Absteigeoperator
- Operator  $a^\dagger$  erzeugt ein Energiequant  
Erzeugungs- oder Aufsteigeoperator
- Operator  $N$  zählt Quanten  $N|n\rangle = n|n\rangle$   
Anzahloperator

★ Anwendungen: Überall

- Festkörperphysik, Kristallgitterschwingungen  $\rightarrow$  Phononen  
 (multidimensionaler harmonischer Oszillator)
- Festkörperphysik, Anregungen von Elektronen auf höhere Niveaus  
 $\rightarrow$  „Quasiteilchen“
- Quantenfeldtheorie  $\rightarrow$  Erzeugung und Vernichtung von Teilchen

### 3.3.2 Energieeigenvektoren in Ortsdarstellung (Schrödingerbild)

★ Grundzustand  $|0\rangle$       $\langle x|0\rangle = u_0(x)$

Es gilt  $a|0\rangle = 0$

$$\Rightarrow \langle x|a|0\rangle = \int dx' \langle x|a|x'\rangle \langle x'|0\rangle = 0$$

$$\text{mit } \langle x|a|x'\rangle = \langle x|\sqrt{m\omega}x + \frac{i}{\sqrt{m\omega}}p|x'\rangle = \sqrt{m\omega}x\delta(x-x') + \frac{\hbar}{\sqrt{m\omega}}\frac{d}{dx}\delta(x-x')$$

$$\Rightarrow \int dx' (\sqrt{m\omega}x\delta(x-x') + \frac{\hbar}{\sqrt{m\omega}}\frac{d}{dx}\delta(x-x'))u_0(x') = (\sqrt{m\omega}x + \frac{\hbar}{\sqrt{m\omega}}\frac{d}{dx})u_0(x) = 0$$

$$\Rightarrow \frac{du_0}{dx} = -\frac{m\omega}{\hbar}x u_0 \Rightarrow \underbrace{\frac{du_0}{u_0}}_{d(\ln u_0)} = -\frac{m\omega}{\hbar} \underbrace{x dx}_{\frac{1}{2}dx^2} \Rightarrow \ln u_0 = \text{const} - \frac{m\omega}{2\hbar}x^2$$

$$\leadsto \boxed{u_0(x) = \mathcal{N} \cdot \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)}$$

★ Angeregte Zustände  $|n\rangle$       $\langle x|n\rangle = u_n(x)$

$$\text{Ergeben sich aus: } |n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n|0\rangle$$

$$\Rightarrow u_n(x) \propto \left(\sqrt{m\omega}x - \frac{\hbar}{\sqrt{m\omega}}\frac{d}{dx}\right)^n u_0(x)$$

Führt nach einigen Umformungen zu

$$\leadsto \boxed{u_n(x) \propto \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \cdot H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)}$$

Mit  $H_n(y)$ : Hermite-Polynome

- Speziell:  $H_0(y) = 1$ ,  $H_1(y) = 2y$ ,  $H_2(y) = 4y^2 - 2$

- Rekursionsformeln:  $H'_n(y) = 2nH_{n-1}(y)$

$$H_{n+1}(y) - 2yH_n(y) + 2nH_{n-1}(y) = 0$$

- Definierende Differentialgleichung:  $H''_n(y) - 2yH'_n(y) + 2nH_n(y) = 0$

### 3.3.3 Operatoren im Heisenbergbild

★ Leiteroperatoren

$$\text{Bewegungsgleichungen: } i\hbar\frac{d}{dt}a_H(t) = [a_H, H] = -\hbar\omega a_H$$

$$i\hbar\frac{d}{dt}a_H^\dagger(t) = [a_H^\dagger, H] = \hbar\omega a_H^\dagger$$

$$\leadsto \text{Lösung: } a_H(t) = a_0 \cdot e^{-i\omega t}$$

$$a_H^\dagger(t) = a_0^\dagger \cdot e^{i\omega t}$$

★ Rückschluss auf  $x_H(t)$  und  $p_H(t)$

$$x_H(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a_H^\dagger(t) + a_H(t)); \quad p_H(t) = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(a_H^\dagger(t) - a_H(t))$$

$$x_0 := \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a_0^\dagger + a_0); \quad p_0 := i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(a_0^\dagger - a_0)$$

$$\leadsto x_H(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a_0^\dagger e^{-i\omega t} + a_0 e^{i\omega t}) = x_0 \cos(\omega t) + \frac{1}{m\omega}p_0 \sin(\omega t)$$

$$p_H(t) = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(a_0^\dagger e^{-i\omega t} - a_0 e^{i\omega t}) = p_0 \cos(\omega t) - m\omega x_0 \sin(\omega t)$$

(kann auch direkt bewiesen werden, Übungsaufgabe)

### 3.4 Symmetrien

Klassische Mechanik: Zusammenhang zwischen Symmetrien und Erhaltungsgrößen ( $\leftrightarrow$  Noether-Theorem)

In diesem Kapitel wollen wir die analogen Zusammenhänge in der Quantenmechanik diskutieren.

Symmetrien spielen für die Entwicklung und Struktur von (quantenmechanischen und klassischen) Theorien eine zentrale Rolle.

#### 3.4.1 Allgemeine Vorüberlegungen

##### 3.4.1.1 Erinnerung an klassische Mechanik

(kurze Erinnerung für die, die eine solche Vorlesung gehört haben. Die anderen können diesen Abschnitt überspringen bzw. „weghören“.)

Ausgangspunkt: Lagrange-Formalismus  $\mathcal{L}(q_1, \dots, q_n, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_n, t)$   
(mit  $q_j$ : generalisierte Koordinaten)

##### \* Homogenität der Zeit

$\mathcal{L}$  unabhängig von der Zeit  $t \Rightarrow \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} = 0$

Dann ist  $\mathcal{H} = -\mathcal{L} + \sum_j \dot{q}_j \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_j}$  eine Erhaltungsgröße (Hamiltonfunktion)

NB:  $\mathcal{H}$  hat in der klassischen Mechanik eine ähnliche Bedeutung wie der Hamiltonoperator in der Quantenmechanik, da es die konkrete Dynamik eines Systems definiert. Für beliebige dynamische Größen  $f$  gilt klassisch

$$\frac{df}{dt} = \{f, \mathcal{H}\} + \frac{\partial f}{\partial t} \quad (\{\dots, \dots\} = \text{Poissonklammer})$$

(vgl. Heisenberg-Gleichung  $\frac{dO}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[O, H] + \frac{\partial O}{\partial t}$ )

##### \* Weitere Symmetrien: Noether-Theorem

Existiert eine kontinuierliche Symmetrie, d.h. ist

$\mathcal{L}(q_1, \dots, q_n, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_n, t)$  invariant unter einer Transf.  $q_j \rightarrow \tilde{q}_j(a)$ ,  
wobei  $a$  ein kontinuierlicher Parameter,  $\tilde{q}_j(a)$  stetig,  $\tilde{q}_j(0) = q_j$ ,

dann ist  $I = \sum_j \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_j} \left( \frac{d\tilde{q}_j(a)}{da} \right)_{a=0}$  eine Erhaltungsgröße. (E. Noether 1918)

Ist  $\mathcal{L}(q_1 \dots q_n, \dot{q}_1 \dots \dot{q}_n, t)$  quasi-invariant unter  $q_j \rightarrow \tilde{q}_j(a)$ , d.h.

$\mathcal{L}(\tilde{q}_1 \dots \tilde{q}_n, \dot{\tilde{q}}_1 \dots \dot{\tilde{q}}_n, t) = \mathcal{L}(q_1 \dots q_n, \dot{q}_1 \dots \dot{q}_n, t) + \frac{d}{dt} \mathcal{F}(q_1 \dots q_n, t; a)$ ,  
( $\frac{d}{dt} \mathcal{F}$  ändert als totale Zeitableitung nichts an Bewegungsgleichungen)

dann ist  $I = \sum_j \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_j} \left( \frac{d\tilde{q}_j(a)}{da} \right)_{a=0} - \left( \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial a} \right)_{a=0}$  eine Erhaltungsgröße.

(Erweitertes Noether-Theorem)

$\Rightarrow$  Homogenität des Raums

$\mathcal{L}(\vec{r}_i, \dot{\vec{r}}_i, t)$  invariant unter Translation  $\vec{r}_i \rightarrow \tilde{\vec{r}}_i = \vec{r}_i - \vec{a}$   
(bzw. in Komponenten  $r_{j\beta} \rightarrow \tilde{r}_{j\beta} = r_{j\beta} - a_\beta$ )

$$\Rightarrow \text{Erhaltungsgröße: } I_\alpha = \sum_{j\beta} \underbrace{\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}_{j\beta}}}_{p_{j\beta}} \underbrace{\left(\frac{d\tilde{r}_{j\beta}}{d\alpha}\right)}_{-\delta_{\alpha\beta}} = -\sum_j p_{j\alpha} = -P_\alpha$$

$$\text{bzw. vektoriell } \vec{I} = -\sum_j \vec{p}_j = -\vec{P}$$

$\leadsto$  Gesamtimpuls  $\vec{P}$  bleibt erhalten.

$\Rightarrow$  Isotropie des Raums

$\mathcal{L}(\vec{r}_i, \dot{\vec{r}}_i, t)$  invariant unter Drehung  $\vec{r}_i \rightarrow \tilde{\vec{r}}_i = \mathcal{D}(-\vec{\varphi})\vec{r}_i$   
wobei  $\mathcal{D}(\vec{\varphi})$ : Drehung um Winkel  $|\vec{\varphi}|$ , Drehachse  $\vec{e}_\varphi = \vec{\varphi}/|\vec{\varphi}|$

Das Noether-Theorem braucht nur die Ableitung nach  $\varphi$ , daher genügt es, infinitesimale Drehwinkel  $d\vec{\varphi}$  zu betrachten:

$$\text{Es gilt: } \mathcal{D}(-d\vec{\varphi}) = \begin{pmatrix} 1 & -d\varphi_3 & d\varphi_2 \\ d\varphi_3 & 1 & -d\varphi_1 \\ -d\varphi_2 & d\varphi_1 & 1 \end{pmatrix} = \mathbb{1} - d\vec{\varphi} \times$$

$$\text{bzw. } \vec{r}_i \rightarrow \tilde{\vec{r}}_i = \mathcal{D}(-d\vec{\varphi})\vec{r}_i = \vec{r}_i - d\vec{\varphi} \times \vec{r}_i$$

$$\text{bzw. in Komponenten } r_{j\beta} \rightarrow \tilde{r}_{j\beta} = r_{j\beta} - \sum_{\gamma\delta} \varepsilon_{\beta\gamma\delta} d\varphi_\gamma r_{j\delta}$$

$\Rightarrow$  Erhaltungsgröße:

$$I_\alpha = \sum_{j\beta} \underbrace{\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}_{j\beta}}}_{p_{j\beta}} \underbrace{\left(\frac{d\tilde{r}_{j\beta}}{d\varphi_\alpha}\right)}_{-\sum_\delta \varepsilon_{\beta\alpha\delta} r_{j\delta}} = -\sum_{j\beta\delta} p_{j\beta} \varepsilon_{\beta\alpha\delta} r_{j\delta} = -\sum_{j\beta\gamma} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} r_{j\beta} p_{j\gamma}$$

$$\text{bzw. vektoriell } \vec{I} = -\sum_j (\vec{r}_j \times \vec{p}_j) = -\vec{L}$$

$\leadsto$  Gesamtdrehimpuls  $\vec{L}$  bleibt erhalten.

$\Rightarrow$  Galilei-Invarianz

$\mathcal{L}(\vec{r}_i, \dot{\vec{r}}_i, t)$  quasi-invariant unter  $\vec{r}_i \rightarrow \vec{r}_i - \vec{v}t$

$$\Rightarrow \text{Erhaltungsgröße: } I = \sum_j \vec{p}_j t + \sum_j m_j \vec{r}_j = -\vec{P}t + M\vec{R}$$

( $\vec{P}$ =Gesamtimpuls,  $M$ =Gesamtmasse,  $\vec{R}$ =Schwerpunkt)

$$\leadsto \text{Schwerpunktssatz: } \vec{R}(t) = \vec{R}_0 + \frac{\vec{P}}{M} \cdot t$$

### 3.4.1.2 Begriffsklärung: „Symmetrie“ und „Erhaltungsgröße“ in der Quantenmechanik

- Erhaltungsgröße:

Observable  $O$ , für die in allen Zuständen  $\varrho$  gilt:  $\boxed{\frac{d}{dt}\langle O \rangle = 0}$

Wegen  $\frac{d}{dt}\langle O \rangle = \langle \frac{1}{i\hbar}[O, H] \rangle + \langle \frac{\partial O}{\partial t} \rangle$  folgt daraus:  $\boxed{[O, H] + i\hbar \frac{\partial O}{\partial t} = 0}$

Folgerungen für nicht explizit zeitabhängige Observablen  $O$  ( $\frac{\partial O}{\partial t} = 0$ ):

- Dann ist auch  $\langle f(O) \rangle = \text{const}$  für alle Funktionen  $f$
- Insbesondere ist  $P(\lambda) = \langle \delta(\lambda - O) \rangle = \text{const}$   
(Verteilung für Messwert  $\lambda$ )

Bemerkung: Beachte Unterschied zu stationärem Zustand

- Falls statistischer Operator  $\varrho = f(H)$  nur von  $H$  abhängt  
 Schrödingerbild  $\xrightarrow{\quad} \frac{d\varrho}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[H, \varrho] = 0 \Rightarrow \frac{d}{dt}\langle O \rangle = \frac{d}{dt}Sp(\varrho O) = 0$   
 für alle nicht explizit zeitabhängigen Observablen  $O$   
 $\Rightarrow$  „alle“ dynamischen Variablen sind in diesem Zustand konstant
- Dagegen Erhaltungsgröße: konstant für alle Zustände  $\varrho$

• Symmetrie

Unitäre Operation  $|\Psi\rangle \rightarrow |\tilde{\Psi}\rangle = S|\Psi\rangle$ , die die Dynamik des Systems unverändert lässt: Im Schrödingerbild wird die Dynamik für  $|\Psi\rangle$ ,  $|\tilde{\Psi}\rangle$  von demselben Hamiltonoperator bestimmt

$$\begin{aligned} \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle &= H |\Psi\rangle \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\tilde{\Psi}\rangle &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} S |\Psi\rangle = S i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle + i\hbar \left(\frac{\partial S}{\partial t}\right) |\Psi\rangle = S H |\Psi\rangle + i\hbar \left(\frac{\partial S}{\partial t}\right) |\Psi\rangle \\ &\stackrel{!}{=} H |\tilde{\Psi}\rangle = H S |\Psi\rangle \text{ für alle } |\Psi\rangle \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \boxed{[S, H] + i\hbar \frac{\partial S}{\partial t} = 0}$$

(NB: Gleichung ähnlich wie oben die für Erhaltungsgrößen. Dennoch ist  $S$  keine Erhaltungsgröße, da keine Observable!)

Gleichartige Symmetrioperationen können im Allgemeinen zu einer mathematischen Gruppe zusammengefasst werden.

(kontinuierliche Gruppen z.B. Translationen, Drehungen, diskrete Gruppe z.B. Spiegelungen (plus Identität))

Im Folgenden werden Darstellungen dieser Gruppen eine Rolle spielen: Abbildung einer Gruppe  $G$  in die linearen Abbildungen eines Vektorraums  $V$ , die die Verknüpfung erhält:

$$L : G \rightarrow GL(V) \text{ mit } L(S_1 S_2) = L(S_1) L(S_2) \quad \forall S_{1,2} \in G$$

Speziell fordern wir für kontinuierliche Gruppen, deren Elemente von kontinuierlich durchstimmbaren Parametern abhängen (z.B. Drehwinkel), dass  $L$  eine glatte Funktion dieser Parameter ist.

### 3.4.2 Homogenität von Raum und Zeit und Isotropie

#### 3.4.2.1 Homogenität der Zeit

Symmetrioperation (vgl. 3.2.2 S.60):

Verschiebung um Zeitspanne  $\tau$  mittels Zeitentwicklungsoperator:

$$\text{Schrödingerbild: } |\Psi(t)\rangle \rightarrow |\Psi(t+\tau)\rangle = U(t+\tau, t) |\Psi(t)\rangle.$$

Dynamik wird beschrieben durch Hamiltonoperator  $H$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = H U(t, t_0)$$

Homogenität der Zeit  $\rightarrow$  kein Zeitpunkt ausgezeichnet ( $U(t+\tau, t) = U(\tau) \forall t$ )

$$\leadsto H \text{ nicht explizit zeitabhängig, } \frac{\partial H}{\partial t} = 0, \quad U(\tau) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H \tau\right)$$

Dann folgt (Ehrenfest):  $\frac{d}{dt} \langle H \rangle = \left\langle \frac{i}{\hbar} [H, H] \right\rangle + \left\langle \frac{\partial H}{\partial t} \right\rangle = 0$

$\Rightarrow$  H ist Erhaltungsgröße

### 3.4.2.2 Homogenität des Raumes

Symmetrieoperation: Verschiebung aller Ortskoordinaten um  $\vec{a}$

Beispiel: Ein Teilchen in Ortsdarstellung:  $\psi(\vec{r}) \rightarrow \tilde{\Psi}(\vec{r}) = \psi(\vec{r} - \vec{a})$

Koordinatenfrei (auch viele Teilchen möglich):  $|\Psi\rangle \rightarrow |\tilde{\Psi}\rangle = T(\vec{a})|\Psi\rangle$   
mit  $T(\vec{a})$  Translationsoperator

#### \* Allgemeine Form des Translationsoperators

Eigenschaften:

(i) stetig und  $\lim_{|\vec{a}| \rightarrow 0} T(\vec{a}) = \mathbb{1}$

(ii) unitär (laut Voraussetzung)

(iii) zusammensetzbar:  $T(\vec{a}_1)T(\vec{a}_2) = T(\vec{a}_1 + \vec{a}_2)$

$\leadsto$  selbe Eigenschaften wie Zeitentwicklungsoperator (3.2.2.1 S.60)

Form von  $T(\vec{a})$  kann völlig analog hergeleitet werden

$\Rightarrow$  • Infinitesimale Translation um  $d\vec{a}$ :  $T(d\vec{a}) = \mathbb{1} - i\vec{K} d\vec{a}$ ,  
wobei  $\vec{K}$  hermitesch ist.

• Endliche Translation:

$$T(\vec{a}) = \lim_{N \rightarrow \infty} (T(\frac{\vec{a}}{N})^N) = \lim_{N \rightarrow \infty} ((\mathbb{1} - \frac{i\vec{K}\vec{a}}{N})^N) = e^{-i\vec{K}\vec{a}}$$

#### \* Erhaltungsgröße

Falls System translationsinvariant, gilt wegen 3.4.1.2:  $[T, H] + i\hbar \frac{\partial T}{\partial t} = 0$ .

Mit  $\frac{\partial T}{\partial t} = 0$  folgt  $[H, T(\vec{a})] = [H, e^{-i\vec{K}\vec{a}}] \stackrel{!}{=} 0$  für alle  $\vec{a} \Rightarrow [H, \vec{K}] = 0$

$\Rightarrow$   $\vec{K}$  ist eine Erhaltungsgröße!

( $\vec{K}$  hermitesch  $\rightarrow$  potentielle Observable)

#### \* Kommutatorrelationen für $\vec{K}$

•  $T(\vec{a})|\vec{r}_0\rangle = |\vec{r}_0 + \vec{a}\rangle$

•  $[T(\vec{a}), T(\vec{a}')] = 0 \forall \vec{a}, \vec{a}' \Rightarrow [K_\alpha, K_\beta] = 0$

• Betrachte Darstellung von  $T(\vec{a})$  im Einteilchen-Hilbertraum.  
Für Diracvektoren  $|\vec{r}_0\rangle$  gilt:

★  $T(\vec{a})|\vec{r}_0\rangle = |\vec{r}_0 + \vec{a}\rangle$

(in Ortsdarstellung:  $\langle \vec{r} | \vec{r}_0 \rangle = \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) \xrightarrow{T(\vec{a})} \delta((\vec{r} - \vec{a}) - \vec{r}_0) = \langle \vec{r} | \vec{r}_0 + \vec{a} \rangle$ )

★  $\vec{r} T(\vec{a})|\vec{r}_0\rangle = \vec{r} |\vec{r}_0 + \vec{a}\rangle = (\vec{r}_0 + \vec{a}) |\vec{r}_0 + \vec{a}\rangle$

★  $T(\vec{a}) \vec{r} |\vec{r}_0\rangle = T(\vec{a}) \vec{r}_0 |\vec{r}_0\rangle = \vec{r}_0 T(\vec{a})|\vec{r}_0\rangle = \vec{r}_0 |\vec{r}_0 + \vec{a}\rangle$

(NB:  $\vec{r}$  ist ein Operator,  $\vec{r}_0$  ist eine Zahl)

$\Rightarrow [\vec{r}, T(\vec{a})] |\vec{r}_0\rangle = \vec{a} |\vec{r}_0 + \vec{a}\rangle = \vec{a} T(\vec{a})|\vec{r}_0 + \vec{a}\rangle \quad \forall |\vec{r}_0\rangle$

$\Rightarrow [\vec{r}, T(\vec{a})] = \vec{a} T(\vec{a})$

Daraus folgt für infinitesimale Translationen  $d\vec{a}$ :

$[r_\beta, \mathbb{1} - iK_\alpha da_\alpha] = da_\beta \quad \forall d\vec{a} \Rightarrow [r_\beta, K_\alpha] = i \delta_{\alpha\beta}$

\* Konkrete Identifizierung von  $\vec{K}$

• Einteilchensystem

Kommutatorrelation  $[r_\beta, K_\alpha] = i\delta_{\alpha\beta}$  legt nahe:  $\vec{K} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$  ( $\vec{p}$  Impuls)

Nachweis in Ortsdarstellung, zunächst in 1 Dimension:

$$\tilde{\psi}(x) = \psi(x - a) = \sum_n \frac{(-a)^n}{n!} \frac{d^n}{dx^n} \psi(x) = e^{-a \frac{d}{dx}} \psi(x) = e^{-\frac{i}{\hbar} a \cdot p} \psi(x)$$

in 3 Dimensionen:

$$\tilde{\psi}(\vec{r}) = \psi(\vec{r} - \vec{a}) = \sum_n \frac{(-\vec{a} \cdot \vec{\nabla})^n}{n!} \psi(\vec{r}) = e^{-\vec{a} \cdot \vec{\nabla}} \psi(\vec{r}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \vec{p}} \psi(\vec{r})$$

~> Der Translationsoperator ist gegeben durch  $T(\vec{a}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \vec{p}}$

→ Impuls  $\vec{p}$  „erzeugt“ Translationen!

Bei Homogenität des Raums gilt:  $[\vec{p}, H] = 0$

~> Impuls ist dann eine Erhaltungsgröße

• Allgemein (z.B. Vielteilchensystem)

Definiere  $\vec{P} = \vec{K} \hbar$ : „Gesamtimpuls“

~> Gesamtimpuls  $\vec{P}$  ist definiert als die Größe, die bei der Homogenität des Raumes erhalten ist. (analog Mechanik)

**3.4.2.3 Isotropie des Raumes**

Symmetrieoperation: Drehung um Winkel  $\vec{\varphi}$

Ortsdarstellung (ein Teilchen, keine inneren Freiheitsgrade):

$$\psi(\vec{r}) \rightarrow \tilde{\psi}(\vec{r}) = \psi(\mathcal{D}(-\vec{\varphi})\vec{r})$$

Koordinatenfrei (viele Teilchen und/oder innere Freiheitsgrade möglich):

$$|\Psi\rangle \rightarrow |\tilde{\Psi}\rangle = R(\vec{\varphi})|\Psi\rangle \text{ mit } R(\vec{\varphi}) \text{ Rotationsoperator}$$

\* Allgemeine Form des Rotationsoperators

Eigenschaften wieder:

(i) stetig und  $\lim_{|\vec{\varphi}| \rightarrow 0} R(\vec{\varphi}) = \mathbb{1}$

(ii) unitär

(iii) im allgemeinen nicht zusammensetzbar, aber:

- infinitesimale Drehungen zusammensetzbar

$$R(\vec{\varphi}_1 \varepsilon) R(\vec{\varphi}_2 \varepsilon) = R((\vec{\varphi}_1 + \vec{\varphi}_2) \varepsilon) + o(\varepsilon^2) \tag{iiia}$$

- Drehungen um dieselbe Achse zusammensetzbar

$$R(\varphi_1 \vec{n}) R(\varphi_2 \vec{n}) = R((\varphi_1 + \varphi_2) \vec{n}) \tag{iiib}$$

~> Es können dieselben Überlegungen wie oben ((2) bzw. 3.2.2.1 S.60) angestellt werden, legen die Form von  $R(\vec{\varphi})$  fest.

⇒ • Infinitesimale Rotation um  $d\vec{\varphi}$ : ((i),(ii),(iiia))

$$R(d\vec{\varphi}) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \vec{J} d\vec{\varphi}, \text{ wobei } \vec{J} \text{ hermitesch ist.}$$

• Endliche Rotation um  $\vec{\varphi}$ : ((iiib))

$$R(\vec{\varphi}) = \lim_{N \rightarrow \infty} (R(\frac{\vec{\varphi}}{N})^N) = \lim_{N \rightarrow \infty} ((\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \frac{\vec{J} \vec{\varphi}}{N})^N) = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{J} \vec{\varphi}}$$

\* Erhaltungsgröße

Falls System rotationsinvariant, folgt wegen  $\frac{\partial R}{\partial t} = 0$   
 $[H, R(\vec{\varphi})] = [H, e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{J} \vec{\varphi}}] \stackrel{!}{=} 0$  für alle  $\vec{\varphi} \Rightarrow [H, \vec{J}] = 0$   
 $\Rightarrow \vec{J}$  ist eine Erhaltungsgröße!

\* Kommutatorrelationen für  $\vec{J}$ 

Ergeben sich aus Kommutatorrelationen für R (i. A.  $[R(\vec{\varphi}), R(\vec{\varphi}')] \neq 0$ )

Betrachte Darstellung der Rotationsoperatoren im  $\mathbb{R}^3$  (Drehgruppe).

Konkret infinitesimale Drehungen  $d\vec{\varphi}$  um die x-, y- oder z-Achse

$$\mathcal{D}(-d\vec{\varphi}) \approx \begin{pmatrix} 1 & -d\varphi_3 & d\varphi_2 \\ d\varphi_3 & 1 & -d\varphi_1 \\ -d\varphi_2 & d\varphi_1 & 1 \end{pmatrix} =: \mathbf{1} - i \sum_{\alpha} d\varphi_{\alpha} G_{\alpha}$$

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

Daraus folgt:  $[G_x, G_y] = iG_z$ ,  $[G_y, G_z] = iG_x$ ,  $[G_z, G_x] = iG_y$

Übertragung auf den Rotationsoperator mit  $R(d\vec{\varphi}) = \mathbf{1} - \frac{i}{\hbar} \vec{J} d\vec{\varphi}$

$$\Rightarrow [J_x, J_y] = i\hbar J_z, [J_y, J_z] = i\hbar J_x; [J_z, J_x] = i\hbar J_y$$

$$\text{also: } \boxed{[J_{\alpha}, J_{\beta}] = i\hbar \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} J_{\gamma}} \quad (\text{Summenkonvention!})$$

\* Identifizierung von  $\vec{J}$ 

- Einteilchensystem ohne innere Freiheitsgrade:

Ortsdarstellung:  $\tilde{\psi}(\vec{r}) = \psi(\mathcal{D}(-\vec{\varphi})\vec{r})$

infinitesimale Drehung um  $d\vec{\varphi}$ :  $\mathcal{D}(-d\vec{\varphi})\vec{r} \approx \vec{r} - d\vec{\varphi} \times \vec{r}$

$$\Rightarrow \tilde{\psi}(\vec{r}) \approx \psi(\vec{r} - d\vec{\varphi} \times \vec{r})$$

$$\approx (\mathbf{1} - (d\vec{\varphi} \times \vec{r}) \cdot \vec{\nabla}) \psi(\vec{r}) = (\mathbf{1} - d\vec{\varphi}(\vec{r} \times \vec{\nabla})) \psi(\vec{r})$$

$$\stackrel{!}{=} R(d\vec{\varphi}) \psi(\vec{r}) = (\mathbf{1} - \frac{i}{\hbar} d\vec{\varphi} \vec{J}) \psi(\vec{r})$$

$$\Rightarrow \boxed{\vec{J} = \frac{\hbar}{i} [\vec{r} \times \vec{\nabla}] = \vec{r} \times \vec{p}} \quad : \quad \underline{\text{Bahndrehimpuls}}$$

- Allgemein: In Systemen mit inneren Freiheitsgraden kann  $\vec{J}$  noch andere Beiträge haben  
 $\rightarrow$  Verallgemeinerter Drehimpuls (siehe Kapitel 4 S.95)

### 3.4.3 Vorläufige Zusammenfassung und Verallgemeinerung: Symmetrien und Erhaltungsgrößen

Fazit von 3.4.2 S.77 (und 3.2.2 S.60) (Schrödingerbild)

Bisher betrachtete Symmetrietransformationen:

$$\text{Zeittranslation: } |\Psi\rangle \rightarrow e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|\Psi\rangle \quad (\text{falls } H \text{ nicht explizit zeitabhängig})$$

$$\text{Ortstranslation: } |\Psi\rangle \rightarrow e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{P}\vec{a}}|\Psi\rangle$$

$$\text{Drehung: } |\Psi\rangle \rightarrow e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{J}\vec{\varphi}}|\Psi\rangle$$

$H$ ,  $\vec{P}$  und  $\vec{J}$  heißen Generatoren der entsprechenden Symmetrietransformation. In Systemen mit dieser Symmetrie sind sie Erhaltungsgrößen.

#### Verallgemeinerung

Gegeben sei eine stetige, kontinuierliche Gruppe von unitären Symmetrietransformationen, die die Identität  $\mathbb{1}$  enthält.

$$\rightarrow \text{Elemente lassen sich schreiben als } \boxed{S = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \sum_k Z_k \alpha_k\right)}$$

mit hermiteschen Generatoren  $Z_k$

und kontinuierlichen, reellen Parametern  $\alpha_k$  ( $\alpha_k=0$  eingeschlossen)

In Systemen, die invariant sind gegen diese Symmetrietransformationen,

$$\text{gilt: } [S, H] + i\hbar \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \quad \forall S \xrightarrow{\alpha_k \rightarrow 0} [Z_k, H] + i\hbar \frac{\partial Z_k}{\partial t} = 0$$

$\rightarrow$  Die Generatoren  $Z_k$  sind Erhaltungsgrößen!

#### Folgerung: Symmetrien und Entartung

Symmetrietransformationen  $S$  seien nicht explizit zeitabhängig:  $\frac{\partial S}{\partial t} = 0$

$\leadsto$  Falls  $|E_n\rangle$  Eigenvektor zu  $H$ , so auch  $S|E_n\rangle$  mit demselben Eigenwert

$$\left( \text{wegen: } HS|E_n\rangle = SH|E_n\rangle = SE_n|E_n\rangle = E_nS|E_n\rangle \quad \checkmark \right)$$

Wenn  $S|E_n\rangle$  und  $|E_n\rangle$  linear abhängig sind, ist  $E_n$  entartet.

$\leadsto$  Generatoren  $Z_k$  können zwischen entarteten Zustandsvektoren unterscheiden (z.B. als Observablen in einem VSKO)

#### Bemerkung:

Eine Symmetriegruppe, wie sie oben besprochen wurde (stetig, kontinuierlich), nennt man auch Lie-Gruppe

Die Generatoren  $Z_k$  der Gruppe bilden eine Lie-Algebra:

Der Kommutator  $[Z_k, Z_j]$  definiert Multiplikation mit Eigenschaften

$$\text{(i) } [Z_k, Z_j] = i C_{kjl} Z_l \quad (\text{abgeschlossen})$$

$$\text{(ii) } [Z_k, Z_l] = -[Z_j, Z_k] \quad (\text{antisymmetrisch})$$

$$\text{(iii) } [\alpha Z_i + \beta Z_j, Z_k] = \alpha [Z_i, Z_k] + \beta [Z_j, Z_k] \quad \text{für } \alpha, \beta \in \mathbb{C}$$

$$[Z_i, \alpha Z_j + \beta Z_k] = \alpha [Z_i, Z_j] + \beta [Z_i, Z_k] \quad (\text{bilinear})$$

(iv) Jakobi-Identität

$$[Z_i, [Z_j, Z_k]] + [Z_j, [Z_k, Z_i]] + [Z_k, [Z_i, Z_j]] = 0$$

Die Lie-Algebra wird durch die  $C_{kjl}$  charakterisiert!

(charakteristische Konstanten,  $C_{kjl} \in \mathbb{R}$ )

### 3.4.4 Invarianz unter speziellen Galilei-Transformationen

Etwas weniger „prominent“ als die bisher behandelten Symmetrien.

Aber: Symmetrieüberlegungen werden Herleitung des Ausdrucks für den

Hamiltonoperator für freie Teilchen erlauben ( $\rightarrow H = \frac{p^2}{2m}$ )

Symmetrieoperation: Transformation  $\vec{r} \rightarrow \vec{r}' - \vec{v} t$

$$\begin{aligned} \text{Ortsdarstellung, speziell } t = 0 & \quad (\text{ein Teilchen}) \\ \psi(\vec{r}, t = 0) = \int d\vec{k} e^{i\vec{k}\vec{r}} f(\vec{k}) & \rightarrow \tilde{\psi}(\vec{r}, t = 0) = \int d\vec{k} e^{i(\vec{k}-\vec{k}_0)\vec{r}} f(\vec{k}) \\ & = \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar} m \vec{v} \vec{r}}}_{\text{Phasenfaktor}} \psi(\vec{r}, t = 0) \quad (\text{wegen } \vec{k}_0 = \frac{m}{\hbar} \vec{v}) \end{aligned}$$

Koordinatenfrei:

$$|\Psi\rangle \rightarrow |\tilde{\Psi}\rangle = B(\vec{v})|\Psi\rangle \text{ mit } B(\vec{v}): \text{Galilei-Boost}$$

Soll hier einfachheitshalber nur in 1 Dimension diskutiert werden:  $x \rightarrow x - vt$

Entsprechende Überlegungen für drei Dimensionen finden sich z.B. in Ballentine.

\* Allgemeine Form des Galilei-Boosts  $B(v)$

Eigenschaften wieder: stetig, unitär, zusammensetzbar

$\Rightarrow$  Entsprechend 3.4.3 S.81 ist  $B(v) = e^{-\frac{i}{\hbar} v G}$  mit G hermitesch

\* Erhaltungsgröße

(Beachte:  $B(v)$  ist explizit zeitabhängig)

Falls Dynamik des Systems invariant gegen Boosts  $B(v)$ , gilt nach 3.4.1 S.75

$$\frac{1}{i\hbar}[B, H] + \frac{\partial B}{\partial t} = 0 \quad \xrightarrow{v \rightarrow 0} \quad \boxed{\frac{1}{i\hbar}[G, H] + \frac{\partial G}{\partial t} = 0} \quad (\text{vgl. 3.4.3 S.81})$$

Also ist G eine Erhaltungsgröße

(Beispiel für explizit zeitabhängige Erhaltungsgröße)

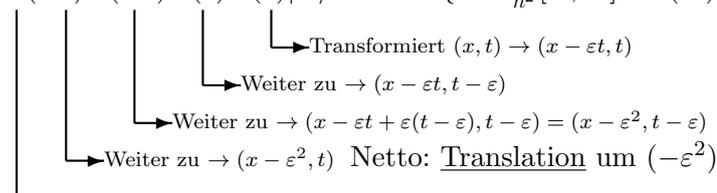
\* Kommutatorrelationen für G

- Kommutator von G und H

Betrachte Folge von infinitesimalen Boosts und Zeittranslationen:

Boost um  $\varepsilon \rightarrow$  Zeittransl. um  $\varepsilon \rightarrow$  Boost um  $(-\varepsilon) \rightarrow$  Zeittransl. um  $(-\varepsilon)$

$$\rightarrow U(-\varepsilon)B(-\varepsilon)U(\varepsilon)B(\varepsilon)|\Psi\rangle \approx \dots \approx \{\mathbf{1} + \frac{\varepsilon^2}{\hbar^2}[G, H] + o(\varepsilon^3)\}|\Psi\rangle$$



$$= \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar} \delta \varepsilon^2}}_{\text{Phasenfaktor, unbekannt}} T(-\varepsilon^2)|\Psi\rangle \approx \{\mathbf{1} + \frac{i}{\hbar}(p - \delta)\varepsilon^2 + o(\varepsilon^3)\}|\Psi\rangle$$

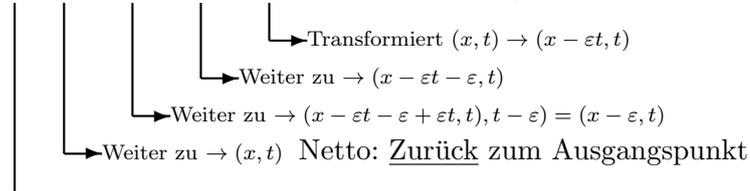
Phasenfaktor, unbekannt

Vergleich liefert (Entwicklung):  $[G, H] = i\hbar(p - \delta)$ ,  $\delta$  reell

- Kommutator von G und P

Betrachte Folge von infinitesimalen Boosts und Raumtranslationen:

Boost um  $\varepsilon \rightarrow$  Raumtransl. um  $\varepsilon \rightarrow$  Boost um  $(-\varepsilon) \rightarrow$  Raumtransl. um  $(-\varepsilon)$   
 $\rightarrow T(-\varepsilon)B(-\varepsilon)T(\varepsilon)B(\varepsilon)|\Psi\rangle \approx \dots \approx \{1 + \frac{\varepsilon^2}{\hbar^2}[G, P] + o(\varepsilon^3)\}|\Psi\rangle$



$= e^{-\frac{i}{\hbar}M\varepsilon^2}|\Psi\rangle$  : Identität bis auf Phasenfaktor

Vergleich liefert:  $[G, P] = i\hbar M$ ,  $M$  reell

- In Einteilchensystemen gilt zur Zeit  $t = 0$ :  $[G(t = 0), x] = 0$

(wegen:  $\langle x_0|B(v)|x_1\rangle \propto \delta(x_0 - x_1)$  bei  $t = 0$ )

$$\Rightarrow \langle x_0|xB(v)|x_1\rangle = x_0 \langle x_0|B(v)|x_1\rangle = x_1 \langle x_0|B(v)|x_1\rangle = \langle x_0|B(v)x_1|x_1\rangle$$

für alle Diracvektoren  $|x_0\rangle, |x_1\rangle \Rightarrow [B(v), x] = 0 \Rightarrow [G, x] = 0 \quad \checkmark$

\* Speziell: Ein Teilchen, keine inneren Freiheitsgrade

Dann muss gelten:  $G = G(x, p, t)$ ;  $H = H(x, p, t)$

- Folgerung für G(x,p,t)

$$[G, H] = i\hbar(p - \delta) \Rightarrow \frac{\partial G}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar}[G, H] = -(p - \delta)$$

$$\Rightarrow G = G_0 - pt + \Delta \quad (\Delta = \int_0^t dt' \delta(t'); \Delta(t = 0) = 0)$$

$[G(t = 0), x] = [G_0, x] = 0$  und: Eigenwerte von  $x$  nicht entartet

$\Rightarrow G_0$  diagonal in  $x$ -Darstellung  $\Rightarrow G_0 = G_0(x)$

$$[G, p] = i\hbar M \Rightarrow [G_0, p] = i\hbar M$$

$$\Rightarrow G_0 = M \cdot x + g_0 \quad (g_0 : \text{Konstante})$$

- Folgerung für H(x,p,t)

$$[G, H] = [Mx - pt, H] = i\hbar(p - \delta) \text{ für alle } t$$

$\Rightarrow [x, H] = \frac{i\hbar}{M}(p - \delta)$  (setze  $t = 0$ : Muss dann aber immer gelten.)

$$\Rightarrow [p, H] = 0 \Rightarrow H = H(p, t)$$

( $p$ -Eigenwerte nicht entartet  $\leadsto H$  diagonal in  $p$ -Darstellung)

$$H = p^2/2M - p\delta/M + E_0$$

Weitere Forderungen:

- Homogenität von Raum und Zeit  $\rightarrow E_0, \delta, M$  unabhängig von  $x$  und  $t$

- System invariant gegen Paritätstransformationen  $x \rightarrow -x$

Wegen  $[x, p] = i\hbar = const$  folgt:

Unter Paritätstransformation ist  $p \rightarrow -p$

$\Rightarrow H$  muss symmetrisch bzgl.  $p$  sein  $\Rightarrow \delta = 0$

- Konvention: Spektrum von  $H$  soll nach unten anstatt nach oben beschränkt sein  $\Rightarrow M > 0$

Fazit: 
$$\boxed{G = Mx - pt + g_0}$$
 mit  $\boxed{M > 0}$  (Masse)  

$$\boxed{H = p^2/2M + E_0}$$

Die Konstanten  $g_0, E_0$  haben keine physikalische Bedeutung ( $\leadsto$  kann man auch Null setzen)

$\Rightarrow$  Symmetrieforderungen der eindimensionalen Galilei-Gruppe

- Homogenität von Raum und Zeit
- Invarianz unter Boosts
- Invarianz unter Paritätstransformation

legen den Hamiltonoperator für ein Freies Teilchen ohne innere Freiheitsgrade fest!

NB: In drei Dimensionen wird die Forderung nach Invarianz unter Paritätstransformation durch Invarianz unter Drehung (Isotropie des Raums) ersetzt (siehe Ballentine)

### 3.4.5 Diskrete Symmetrien

Wir haben nun alle kontinuierlichen Symmetrien der Galilei-Gruppe behandelt. Darüberhinaus können aber auch diskrete Symmetrien auftreten, die (fast) genauso wichtig sind.

Ein Beispiel trat schon in 3.4.4 S.82 auf: Die Paritätstransformation bzw. Raumspiegelung  $\vec{r} \leftrightarrow -\vec{r}$ . Eine weitere wichtige Transformation ist die „Zeitumkehr“ bzw. Spiegelung der Geschwindigkeiten.

#### 3.4.5.1 Raumspiegelung und Parität

Symmetrieoperation: Transformation  $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$

Ortsdarstellung (ein Teilchen, keine inneren Freiheitsgrade)

$$\psi(\vec{r}) \rightarrow \tilde{\psi}(\vec{r}) = \psi(-\vec{r})$$

Koordinatenfrei (allgemeiner)

$$|\Psi\rangle \rightarrow |\tilde{\Psi}\rangle = \hat{\Pi}|\Psi\rangle \text{ mit } \hat{\Pi}: \underline{\text{Paritätsoperator}}$$

\* Eigenschaften des Paritätsoperators

- (i)  $\hat{\Pi}^2 = \mathbf{1} \Rightarrow \hat{\Pi}^{-1} = \hat{\Pi}$   
(strenggenommen ist  $\hat{\Pi}^2 = e^{i\delta}$ , aber der Phasenfaktor  $\delta$  ist beliebig und kann 0 gewählt werden.)
- (ii)  $\hat{\Pi}$  unitär ( $\hat{\Pi}^{-1} = \hat{\Pi}^\dagger$ )
- (iii) Daraus folgt auch:  $\hat{\Pi}$  hermitesch ( $\hat{\Pi}^\dagger = \hat{\Pi}^{-1} = \hat{\Pi}$ )  
Eigenwerte  $\lambda^2 = 1 \Rightarrow \lambda = \pm 1$

\* Kommutatorrelationen

- $[\hat{\Pi}, \vec{r}]_+ = \hat{\Pi} \vec{r} + \vec{r} \hat{\Pi} = 0$  (Antikommutator)  
(wegen:  $\langle \tilde{\Psi} | \vec{r} | \tilde{\Psi} \rangle = \langle \tilde{\Psi} | \hat{\Pi}^\dagger \vec{r} \hat{\Pi} | \tilde{\Psi} \rangle \stackrel{!}{=} -\langle \Psi | \vec{r} | \Psi \rangle \forall \Psi$   
 $\Rightarrow \hat{\Pi}^\dagger \vec{r} \hat{\Pi} = -\vec{r} \Rightarrow \vec{r} \hat{\Pi} = -\hat{\Pi} \vec{r} \quad \checkmark$ )

- $[\hat{\Pi}, \vec{p}]_+ = \hat{\Pi} \vec{p} + \vec{p} \hat{\Pi} = 0$   
(wegen:  $\hat{\Pi} T(\vec{\varepsilon}) = T(-\vec{\varepsilon}) \hat{\Pi}$  ( $T(\vec{\varepsilon}) = \text{Translation}$ )  
 $\Rightarrow \hat{\Pi} (\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{\varepsilon}) = (\mathbb{1} + \frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{\varepsilon}) \hat{\Pi} \Rightarrow -\hat{\Pi} \vec{p} = \vec{p} \hat{\Pi} \quad \checkmark$ )
- $[\hat{\Pi}, \vec{L}] = 0$  ( $\hat{\Pi}$  vertauscht mit Rotationen)
- $[\hat{\Pi}, \vec{p}^2] = 0$  ( $\hat{\Pi} \vec{p}^2 = -\vec{p} \hat{\Pi} \vec{p} = \vec{p}^2 \hat{\Pi} \quad \checkmark$ )

\* Bedeutung des Paritätsoperators

- Zum Beispiel als zusätzliche „Observable“ in einem VSKO  
Erinnerung an Wellenmechanik (Kapitel 2 S.9)  
 $\rightsquigarrow$  Sortierung von Lösungen der stationären Schrödingergleichung nach geraden und ungeraden Funktionen  
 $\hat{=}$  Eigenfunktionen des Paritätsoperators  
Speziell eindimensionale Probleme (Kapitel 2.2.2 S.31)  
 $H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$ ,  $V(x)$  symmetrisch  $\rightarrow [H, \hat{\Pi}] = 0$   
 $\rightsquigarrow$  Eigenfunktionen haben entweder definierte Parität  
(z.B. gebundene Zustände in einem Potentialtopf)  
oder die Eigenwerte sind zweifach entartet  
(z.B. freie Zustände)  
Im letzteren Fall kann  $\hat{\Pi}$  als Observable in einem VSKO mit  $H$  eingesetzt werden.
- Grundlegender: In den meisten Fällen scheint Paritätssymmetrie eine der fundamentalen Symmetrien der Natur zu sein.  
Ausnahme: Paritätsverletzung in der schwachen Wechselwirkung  
(- und dafür gab's immerhin einen Nobelpreis!)

### 3.4.5.2 Zeitumkehrinvarianz und Zeitumkehroperator

Symmetrieoperation: „Zeitumkehr“, entspricht de facto einer

Spiegelung aller Geschwindigkeiten (Zeit läuft von da an „rückwärts“)

Koordinatenfrei:  $|\Psi\rangle \rightarrow |\tilde{\Psi}\rangle = \hat{\Theta}|\Psi\rangle$  mit  $\hat{\Theta}$ : Zeitumkehroperator,

so dass im Schrödingerbild:  $U(t)\hat{\Theta}|\Psi(0)\rangle = \hat{\Theta}U(-t)|\Psi(0)\rangle = \hat{\Theta}|\Psi(-t)\rangle$

\* Eigenschaften des Zeitumkehroperators

- Wenn das Spektrum von  $H$  nach unten beschränkt sein soll (z.B. wegen 3.4.4 S.82), kann  $\hat{\Theta}$  nicht linear sein!  
(denn: OBdA seien Eigenwerte  $E$  von  $H$  positiv - sonst setze  $H \rightarrow H - E_{min}$ .  
Setze in  $U(t)\hat{\Theta}|\Psi(0)\rangle = \hat{\Theta}U(-t)|\Psi(0)\rangle$  infinitesimale Zeit  $\varepsilon$  ein.  
 $\Rightarrow (\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} H\varepsilon)\hat{\Theta}|\Psi\rangle = \hat{\Theta}(\mathbb{1} + \frac{i}{\hbar} H\varepsilon)|\Psi\rangle \Rightarrow -i\hat{\Theta}H|\Psi\rangle = \hat{\Theta}iH|\Psi\rangle$  für alle  $\Psi$   
Wäre  $\hat{\Theta}$  linear, dann folgte:  $-H\hat{\Theta}|\Psi\rangle = \hat{\Theta}H|\Psi\rangle \forall |\Psi\rangle \rightarrow -H\hat{\Theta} = \hat{\Theta}H$   
Für Eigenvektoren  $|E\rangle$  von  $H$  mit Eigenwert  $E$  würde dann gelten:  
 $H\hat{\Theta}|E\rangle = -\hat{\Theta}H|E\rangle = -E\hat{\Theta}|E\rangle \Rightarrow \hat{\Theta}|E\rangle \propto |-E\rangle$   
 $\rightsquigarrow \hat{\Theta}|e\rangle$  wäre Eigenvektor von  $H$  mit Eigenwert  $-E < 0$  Widerspruch!)
- Stattdessen ist  $\hat{\Theta}$  antilinear

Ein antilinear Operator hat die Eigenschaft

$$\hat{\Theta}(\sum_n c_n |\alpha_n\rangle) = \sum_n c_n^* \hat{\Theta} |\alpha_n\rangle$$

$\Rightarrow$  löst das obige Problem, da  $\hat{\Theta} i H |\Psi\rangle = -i \hat{\Theta} H |\Psi\rangle$ ,

$$\text{also folgt aus } U(t) \hat{\Theta} |\Psi\rangle = \hat{\Theta} U(-t) |\Psi\rangle \quad \forall |\Psi\rangle \xrightarrow{t \rightarrow 0} H \hat{\Theta} = \hat{\Theta} H$$

- $\hat{\Theta}$  ist normerhaltend  $\rightarrow$  antiunitär!

$$\text{mit } |\tilde{\Psi}\rangle = \hat{\Theta} |\Psi\rangle \text{ und } |\tilde{\varphi}\rangle = \hat{\Theta} |\varphi\rangle \text{ gilt: } \boxed{\langle \tilde{\Psi} | \tilde{\varphi} \rangle = \langle \varphi | \Psi \rangle = \langle \Psi | \varphi \rangle^*}$$

\* Wirkung auf Observablen

Eine Observable heißt gerade/ungerade unter Zeitumkehr,

$$\text{wenn } \boxed{A = \pm \hat{\Theta} A \hat{\Theta}^{-1}}$$

Dann geht  $\langle A \rangle$  unter Zeitumkehr über in  $+\langle A \rangle$  bzw.  $-\langle A \rangle$

$$(- \text{ Statistischer Operator sei } \varrho = \sum_{n,m} |n\rangle \varrho_{nm} \langle m| \quad (\text{in beliebiger Basis } |k\rangle))$$

$$\text{Zeitumkehr: } \varrho \rightarrow \tilde{\varrho} = \sum_{n,m} |\tilde{n}\rangle \varrho_{nm}^* \langle \tilde{m}| = \sum_{n,m} |\tilde{n}\rangle \varrho_{mn} \langle \tilde{m}| \quad \text{mit } |\tilde{k}\rangle = \hat{\Theta} |k\rangle$$

- Wähle als Basis Eigendarstellung von  $A$ :  $A|a\rangle = a|a\rangle$

$$\Rightarrow \varrho = \sum_{a,a'} |a\rangle \varrho_{aa'} \langle a'| \rightarrow \tilde{\varrho} = \sum_{a,a'} |\tilde{a}\rangle \varrho_{a'a} \langle \tilde{a}'|$$

$$\begin{aligned} Sp(\tilde{\varrho} A) &= \sum_{a,a',a''} \langle a'' | \tilde{a} \rangle \varrho_{a'a} \langle \tilde{a}' | A | a'' \rangle = \sum_{a,a'} \langle \tilde{a}' | A | \tilde{a} \rangle \varrho_{a'a} \\ &= \pm \sum_{a,a'} \langle \tilde{a}' | \hat{\Theta} A \hat{\Theta}^{-1} | \tilde{a} \rangle \varrho_{a'a} = \pm \sum_{a,a'} \langle \tilde{a}' | \hat{\Theta} A | a \rangle \varrho_{a'a} \quad (a \text{ reell}) \\ &= \pm \sum_{a,a'} \langle \tilde{a}' | \hat{\Theta} | a \rangle a \varrho_{a'a} = \pm \sum_{a,a'} \langle \tilde{a}' | \tilde{a} \rangle a \varrho_{a'a} \\ &= \pm \sum_{a,a'} \langle a | a' \rangle a \varrho_{a'a} = \pm \sum_{a,a'} \langle a | A \mathbb{1} | a' \rangle \varrho_{a'a} \quad \mathbb{1} = \sum_{a''} |a''\rangle \langle a''| \\ &= \pm \sum_{a,a',a''} \langle a'' | a' \rangle \varrho_{a'a} \langle a | A | a'' \rangle = \pm Sp(\varrho A) \quad \checkmark \end{aligned}$$

Zum Beispiel ist  $x$  gerade,  $p$  ungerade,  $J$  gerade.

\* Zeitumkehr der Ortsdarstellung von Einteilchenzustandsvektoren

$$\psi(\vec{r}) \xrightarrow{\text{Zeitumkehr}} \psi(\vec{r})^* e^{i\varphi} \quad (e^{i\varphi}: \text{Phasenfaktor, beliebig})$$

(denn:  $\hat{r}$  gerader Operator  $\Rightarrow \hat{\Theta} \hat{r} \hat{\Theta}^{-1} = \hat{r}$ )

$$\Rightarrow \text{Mit } |\tilde{r}_0\rangle = \hat{\Theta} |\vec{r}_0\rangle \text{ gilt: } \hat{\Theta} \hat{r} \hat{\Theta}^{-1} |\tilde{r}_0\rangle = \hat{r} |\tilde{r}_0\rangle = \hat{\Theta} \vec{r}_0 |\vec{r}_0\rangle = \vec{r}_0 \hat{\Theta} |\vec{r}_0\rangle = \vec{r}_0 |\tilde{r}_0\rangle$$

$$\Rightarrow \hat{r} |\tilde{r}_0\rangle = \vec{r}_0 |\tilde{r}_0\rangle \Rightarrow |\tilde{r}_0\rangle \propto |\vec{r}_0\rangle$$

$$\text{Also: } \hat{\Theta} |\vec{r}\rangle = |\tilde{r}\rangle \propto |\vec{r}\rangle$$

$$\text{Daraus folgt: } \tilde{\psi}(\vec{r}) = \langle \tilde{r} | \tilde{\psi} \rangle = \langle \psi | \tilde{r} \rangle \propto \langle \psi | \vec{r} \rangle = \langle \vec{r} | \psi \rangle^* \quad \checkmark$$

## 3.5 Identische Teilchen

Vorbemerkung: Allgemeines Vielteilchensystem (z.B. Proton + Elektron)

$n$  Teilchen  $\rightarrow$  Zustandsraum ist Produktraum (nach 3.1.1.5 S.51) der (ggf. erweiterten) Hilberträume für die einzelnen Teilchen.

Konkret: Einteilchenzustandsvektoren für Teilchen  $i$ :

$|\varphi_\alpha\rangle_i$ , bilden Hilbertraum  $\mathfrak{H}_i$

$\rightarrow$  Produktraum enthält Zustandsvektoren  $\sum_{\alpha_1 \dots \alpha_n} |\varphi_{\alpha_1}\rangle_1 \dots |\varphi_{\alpha_n}\rangle_n C_{\alpha_1 \dots \alpha_n}$   
 $C_{\alpha_1 \dots \alpha_n} \in \mathbb{C}$ ; Hilbertraum:  $\mathfrak{H} = \mathfrak{H}_1 \otimes \mathfrak{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathfrak{H}_n$

Nun: Identische Teilchen

Dabei definieren wir als „identisch“: Man kann kein Verfahren angeben, mit dem ein Teilchen von einem anderen unterschieden werden könnte.

(d.h. gleiche Masse, Ladung, Spin, ... Platzwechsel möglich etc.)

$\leadsto$  Eine neue Form von Symmetrie

In diesem Kapitel sollen die Auswirkungen einer solchen Symmetrie behandelt werden.

### 3.5.1 Ununterscheidbarkeit

Laut Definition kann es in einem System identischer Teilchen nur Observablen geben, die zwischen Teilchen nicht unterscheiden.

- z.B. ist in einem Zweiteilchensystem nicht erlaubt:  $x_1, x_2$ ,

aber erlaubt:  $x_1 + x_2$ ;  $|x_1 - x_2|$ ;  $W(x) = \delta(x - x_1) + \delta(x - x_2)$

#### 3.5.1.1 Folgerung für Observablen

( $N$  Teilchen, Basisvektoren des Einteilchenzustandes:  $|b_\alpha\rangle$ )

$\leadsto N$ -Teilchenbasis  $|b_{\alpha_1}\rangle_1 \dots |b_{\alpha_N}\rangle_N$ )

**Zunächst:** Gegeben sei ein Zustandsvektor  $|\Psi\rangle = \sum_{\alpha_1 \dots \alpha_N} |b_{\alpha_1}\rangle_1 \dots |b_{\alpha_N}\rangle_N C_{\alpha_1 \dots \alpha_N}$

und ein „permutierter“ Zustandsvektor  $|\Psi'\rangle = \sum_{\alpha_1 \dots \alpha_N} |b_{\alpha_{i_1}}\rangle_1 \dots |b_{\alpha_{i_N}}\rangle_N C_{\alpha_1 \dots \alpha_N}$

wobei  $(1, 2, \dots, N) \rightarrow (i_1, i_2, \dots, i_N)$  Permutation ist.

Dann müssen die Erwartungswerte aller Observablen in den Zuständen

$\varrho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$  und  $\varrho' = |\Psi'\rangle\langle\Psi'|$  gleich sein:

$$\langle A \rangle = \langle \Psi | A | \Psi \rangle = \langle \Psi' | A | \Psi' \rangle$$

**Formale Beschreibung:** Definiere Permutationsoperator  $|\Psi'\rangle = P|\Psi\rangle$

- Notation:  $P = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & N \\ i_1 & i_2 & \dots & i_N \end{pmatrix}$

- Eigenschaften:

- $P$  ist unitär
- Permutationsoperatoren bilden eine Gruppe von  $N!$  Elementen.

- Alle Permutationen lassen sich aus paarweisen Vertauschungen (Transpositionen  $T_{ij}$ ) zusammensetzen. (nicht eindeutig)
- Es existiert eine eindeutige Zuordnung: Eine Permutation lässt sich entweder nur aus einer geraden, oder nur aus einer ungeraden Anzahl Transpositionen zusammensetzen. Entsprechend nennt man eine Permutation gerade bzw. ungerade.

- Beispiele:

- Zwei Teilchen  $\rightarrow$  gerade:  $P = \begin{pmatrix} 12 \\ 12 \end{pmatrix} (= \mathbf{1})$ , ungerade:  $P = \begin{pmatrix} 12 \\ 21 \end{pmatrix}$

- Drei Teilchen  $\rightarrow$  gerade:  $P = \begin{pmatrix} 123 \\ 123 \end{pmatrix}$ ;  $P = \begin{pmatrix} 123 \\ 231 \end{pmatrix}$ ;  $P = \begin{pmatrix} 123 \\ 312 \end{pmatrix}$

ungerade:  $P = \begin{pmatrix} 123 \\ 213 \end{pmatrix}$ ;  $P = \begin{pmatrix} 123 \\ 132 \end{pmatrix}$ ;  $P = \begin{pmatrix} 123 \\ 321 \end{pmatrix}$

Damit kann die obige Forderung für Observablen folgendermaßen formuliert werden:

$$\langle P\Psi|A|P\Psi\rangle = \langle\Psi|P^\dagger AP|\Psi\rangle \stackrel{!}{=} \langle\Psi|A|\Psi\rangle \text{ für alle } P, |\Psi\rangle$$

$$\Rightarrow P^\dagger AP = A \text{ bzw. mit } P^\dagger = P^{-1}: AP = PA \text{ für alle } P$$

$\Rightarrow$  In einem System identischer Teilchen sind nur Observablen zulässig, die mit allen Permutationen kommutieren:

$$\boxed{[A, P] = 0 \text{ für alle } P}$$

Beispiele: Gesamtimpuls, Gesamtdrehimpuls, Schwerpunkt, ...

### 3.5.1.2 Folgerung für Zustandsvektoren

Wenn  $|\Psi\rangle$  Eigenvektor ist zur Observablen  $A$  mit Eigenwert  $a$ , dann ist auch  $P|\Psi\rangle$  Eigenvektor mit demselben Eigenwert. Das muss für alle (zulässigen) Observablen und alle Permutationen gelten.

$\Rightarrow$  Austauschentartung: Jeder Eigenwert ist  $N!$ -fach entartet.

Entartung kann prinzipiell durch keine Observable aufgehoben werden.

$\rightarrow$  Widerspricht dem Postulat II (in 3.2.1 S.56)

(Zustandsraum wird von Eigenvektoren eines VSKO aufgespannt, keine überflüssigen Freiheitsgrade)

Grundlegender: Kann etwas prinzipiell nicht Messbares einen „physikalischen Gehalt“ haben?

$\rightarrow$  Problem!

Ausweg der Natur: Symmetrisierungspostulat, nächstes Kapitel

### 3.5.2 Symmetrisierungspostulat

Problem (siehe 3.5.1 S.87): Austauschentartung

Ausweg der Natur: Zusätzliches Postulat (empirisch festgestellt)

Symmetrisierungspostulat, erste Formulierung

Der Zustandsraum ist reduziert: Er enthält nur Zustandsvektoren, die simultane Eigenvektoren aller Permutationsoperatoren sind.

#### 3.5.2.1 Konstruktion des reduzierten Zustandsraums

- Es genügt, simultane Eigenvektoren aller Transpositionen zu suchen, da man aus ihnen beliebige Permutationen zusammensetzen kann.
- Es gilt:  $T_{ij}^2 = 1 \Rightarrow$  Eigenwerte von  $T_{ij}$  sind  $\pm 1$   
Für einen vorgegebenen simultanen Eigenvektor  $|\Psi\rangle$  müssen die Eigenwerte aller Transpositionen dasselbe Vorzeichen haben

$$\begin{aligned} (\text{da: } T_{kl} &= T_{ik}T_{jl}T_{ij}T_{ik}T_{jl}) \\ \Rightarrow \lambda_{kl}|\Psi\rangle &= T_{kl}|\Psi\rangle = \lambda_{ik}\lambda_{jl}\lambda_{ij}\lambda_{ik}\lambda_{jl}|\Psi\rangle = \underbrace{\lambda_{ik}^2}_1 \underbrace{\lambda_{jl}^2}_1 \lambda_{ij}|\Psi\rangle = \lambda_{ij}|\Psi\rangle = T_{ij}|\Psi\rangle \quad \checkmark \end{aligned}$$

$\leadsto$  Zwei Möglichkeiten

Eigenwert  $+1$  ( $T_{ij}|\Psi\rangle = |\Psi\rangle$ )  $\rightarrow$  Zustandsvektor total symmetrisch  
 $P|\Psi^S\rangle = |\Psi^S\rangle$  für alle  $P$

Eigenwert  $-1$  ( $T_{ij}|\Psi\rangle = -|\Psi\rangle$ )  $\rightarrow$  Zustandsvektor total antisymmetrisch  
 $P|\Psi^A\rangle = (-1)^P|\Psi^A\rangle$  mit  $(-1)^P = \begin{cases} 1 & : P \text{ gerade Permutation} \\ -1 & : P \text{ ungerade Permutation} \end{cases}$

Symmetrische und antisymmetrische Zustandsvektoren bilden jeweils Unterräume des (N-Teilchen)-Hilbertraums

Konstruktion von symmetrischen/antisymmetrischen Zustandsvektoren  $\rightarrow$  z.B. über Projektion eines allgemeinen Vektors in entsprechenden Unterraum

Projektionsoperatoren:

$$\begin{aligned} \text{Symmetrischer Unterraum: } S &= \frac{1}{N!} \sum_{\text{alle Permutationen } \alpha} P_\alpha \\ (|\Psi^S\rangle = S|\Psi\rangle \Rightarrow P_\beta|\Psi^S\rangle &= \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \underbrace{P_\beta P_\alpha}_{P_\gamma} |\Psi\rangle = \frac{1}{N!} \sum_{\gamma} P_\gamma |\Psi\rangle = S|\Psi\rangle = |\Psi^S\rangle \quad \checkmark \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Antisymmetrischer Unterraum: } A &= \frac{1}{N!} \sum_{\text{alle Permutationen } \alpha} (-1)^{P_\alpha} P_\alpha \\ (|\Psi^A\rangle = A|\Psi\rangle \Rightarrow P_\beta|\Psi^A\rangle &= \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} (-1)^{P_\alpha} \underbrace{P_\beta P_\alpha}_{P_\gamma} |\Psi\rangle = \frac{1}{N!} \sum_{\gamma} (-1)^{P_\gamma - P_\beta} P_\gamma |\Psi\rangle \\ &= (-1)^{P_\beta} \frac{1}{N!} \sum_{\gamma} (-1)^{P_\gamma} P_\gamma |\Psi\rangle = (-1)^{P_\beta} A|\Psi\rangle = (-1)^{P_\beta} |\Psi^A\rangle \quad \checkmark \end{aligned}$$

Beispiele:

- Zwei Teilchen, Einteilchenbasis  $|b_\alpha\rangle$

Basisvektoren des Produktraums:  $|b_{\alpha_1}\rangle_1 |b_{\alpha_2}\rangle_2$

Projektion der Basisvektoren

Symmetrisch:  $|\Psi_{\alpha_1\alpha_2}^S\rangle \propto (|b_{\alpha_1}\rangle_1 |b_{\alpha_2}\rangle_2 + |b_{\alpha_2}\rangle_1 |b_{\alpha_1}\rangle_2)$

Antisymmetrisch:  $|\Psi_{\alpha_1\alpha_2}^A\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|b_{\alpha_1}\rangle_1 |b_{\alpha_2}\rangle_2 - |b_{\alpha_2}\rangle_1 |b_{\alpha_1}\rangle_2)$

- N Teilchen, Einteilchenvektoren  $|b_\alpha\rangle_1, \dots, |b_\alpha\rangle_N$

Basisvektoren des Produktraums:  $|b_{\alpha_1}\rangle_1 |b_{\alpha_2}\rangle_2 \cdots |b_{\alpha_N}\rangle_N$

Projektion der Basisvektoren

Symmetrisch:  $|\Psi_{\alpha_1 \dots \alpha_N}^S\rangle \propto \{ |b_{\alpha_1}\rangle_1 \cdots |b_{\alpha_N}\rangle_N + \text{alle Permutationen} \}$

Antisymmetrisch:  $|\Psi_{\alpha_1 \dots \alpha_N}^A\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} |b_{\alpha_1}\rangle_1 & \cdots & |b_{\alpha_1}\rangle_N \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ |b_{\alpha_N}\rangle_1 & & |b_{\alpha_N}\rangle_N \end{vmatrix}$

( $1/\sqrt{N!}$  ist Normierungsfaktor)

Slater-Determinante

### 3.5.2.2 Zusammenfassung und Spin-Statistik Theorem

Symmetrisierungspostulat, zweite Formulierung

Der Zustandsraum eines Systems von  $N$  identischen Teilchen ist entweder vollständig symmetrisch oder vollständig antisymmetrisch. Im ersten Fall spricht man von Bosonen, im zweiten von Fermionen. Gemischte Zustandsvektoren gibt es nicht.

→ Damit ist die Austauschentartung aufgehoben.

Bemerkung: Symmetrische und antisymmetrische Zustandsvektoren können dynamisch nicht ineinander übergehen.

(Andernfalls wäre ein Zeitentwicklungsoperator  $U(t)$  möglich

mit  $|\Psi_2^S\rangle = U(t)|\Psi_1^A\rangle \Rightarrow \langle \Psi_2^S | U(t) | \Psi_1^A \rangle \neq 0$

Da  $U$  nur von  $H$  abhängt, gilt mit  $[H, T_{ij}] = 0$  auch  $[U, T_{ij}] = 0$

Weiterhin:  $T_{ij}|\Psi_2^S\rangle = |\Psi_2^S\rangle$ ;  $T_{ij}|\Psi_1^A\rangle = -|\Psi_1^A\rangle$ ;  $T_{ij}^{-1} = T_{ij}^\dagger = T_{ij}$

$\Rightarrow \langle \Psi_2^S | U(t) | \Psi_1^A \rangle = \langle T_{ij} \Psi_2^S | U(t) | \Psi_1^A \rangle = \langle \Psi_2^S | T_{ij}^\dagger U(t) | \Psi_1^A \rangle = \langle \Psi_2^S | T_{ij} U(t) | \Psi_1^A \rangle$

$= \langle \Psi_2^S | U(t) T_{ij} | \Psi_1^A \rangle = -\langle \Psi_2^S | U(t) | \Psi_1^A \rangle$

$\Rightarrow \langle \Psi_2^S | U(t) | \Psi_1^A \rangle = 0$  für alle  $U(t)$  Widerspruch!

Frage: Wann sind Teilchen Bosonen oder Fermionen?

Antwort: Spin-Statistik-Theorem

(Spin → siehe Kapitel 4 S.95)

In der relativistischen Quantenfeldtheorie kann man zeigen, dass Teilchen mit ganzzahligem Spin keine Fermionen sein können, und Teilchen mit halbzahligem Spin keine Bosonen.

Fermionen: Halbzahliger Spin (z.B. Elektronen,  $He^3$ )

Bosonen: Ganzzahliger Spin (z.B. Photonen,  $He^4$ )

(Bemerkung: In zwei Dimensionen sind Ausnahmen möglich

↪ Anyonen und Zopfgruppen)

### 3.5.2.3 Folgerungen aus dem Symmetrisierungspostulat

\* Pauliprinzip: Zwei Elektronen können nicht exakt den gleichen Einteilchenzustand einnehmen.

→ Sehr grundlegend: Verantwortlich dafür, dass die Materie trotz elektrostatischer Kräfte nicht kollabiert.

\* Statistik:

Beispiel: Zwei Teilchen in einem Zwei-Niveau-System (+, -)

Basisvektoren des Zustandsraums für

- Unterscheidbare Teilchen:

$$|v_1\rangle = |+\rangle_1|+\rangle_2;$$

$$|v_2\rangle = |+\rangle_1|-\rangle_2;$$

$$|v_3\rangle = |-\rangle_1|+\rangle_2;$$

$$|v_4\rangle = |-\rangle_1|-\rangle_2;$$

- Bosonen:

$$|v_1\rangle = |+\rangle_1|+\rangle_2;$$

$$|v_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle_1|-\rangle_2 + |-\rangle_1|+\rangle_2);$$

$$|v_3\rangle = |-\rangle_1|-\rangle_2;$$

- Fermionen:

$$|v\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle_1|-\rangle_2 - |-\rangle_1|+\rangle_2);$$

→ Im Vergleich zu unterscheidbaren Teilchen haben bei Bosonen Zustände, in denen beide Teilchen im gleichen Einteilchenzustand sind, ein höheres Gewicht, und treten bei Fermionen dafür gar nicht auf. (Statistischer Operator:  $\varrho = \sum_{mn} \varrho_{nm} |b_n\rangle \langle b_m|$ )

Salopp:

Fermionen meiden einander (Pauli-Abstoßung)

Kennzeichen der Fermi-Dirac-Statistik

Bosonen suchen einander (Bose-Anziehung)

Kennzeichen der Bose-Einstein-Statistik

Mehr dazu in der Vorlesung „Statistische Mechanik“

### 3.6 Wissensfragen

57. Was ist ein Hilbertraum?
58. Wie lautet die Cauchy-Schwarzsche Ungleichung und wann gilt sie?
59. Was ist eine Basis?
60. Was versteht man unter “Zerlegung der Eins” in einer Basis?
61. Wie werden Vektoren in einer Basis dargestellt?
62. Wie werden Operatoren in einer Basis dargestellt?
63. Was transformieren sich Darstellungen eines Vektors bei Basiswechsel?
64. Was ist ein unitärer Operator?
65. Was ist ein hermitescher, was ein selbstadjungierter Operator?
66. Was versteht man unter einem Projektionsoperator?
67. Erläutern Sie die Eigenwertgleichung eines Operators  $O$ .
68. Welche Eigenschaften haben die Eigenwerte und Eigenvektoren von hermiteschen Operatoren? von selbstadjungierten Operatoren?
69. Wie lautet die Spektraldarstellung eines selbstadjungierten Operators?
70. Wie lautet die Spektraldarstellung einer Funktion  $f(O)$  eines selbstadjungierten Operators  $O$ ?
71. Welche Grundkonzepte (“Postulate”) liegen der Quantenmechanik zugrunde?
72. Was ist ein quantenmechanischer Zustandsvektor? Wie wird er mathematisch beschrieben?
73. Wie werden dynamische Größen mathematisch beschrieben?
74. Was versteht man unter einem vollständigen Satz kommutierender Observablen?
75. Was ist der statistische Operator?
76. Wie berechnet man den Erwartungswert einer dynamischen Größe in einem quantenmechanischen System?
77. Welche Messwerte können bei der Messung einer dynamischen Größe auftreten? Welche nicht? Warum nicht?
78. Mit welcher Wahrscheinlichkeit tritt ein konkreter Messwert auf?
79. Was versteht man unter einem “reinen” System?
80. Wie lautet die allgemeine Version der Unschärferelation?
81. Was versteht man unter einem Zeitentwicklungsoperator?
82. Welche Eigenschaften muß der Zeitentwicklungsoperator haben und warum?
83. Erläutern Sie den Unterschied zwischen dem Schrödingerbild und dem Heisenbergbild.
84. Wie entwickeln sich Zustände, Observablen, statistische Operatoren zeitlich im Schrödingerbild und im Heisenbergbild?
85. Wie hängen die Ausdrücke für Zustände, Observablen, statistische Operatoren im Heisenbergbild und im Schrödingerbild zusammen? Was passiert konkret, wenn der Hamiltonoperator nicht explizit zeitabhängig ist?
86. Was bedeutet “explizit zeitabhängig”? Nennen Sie Beispiele für explizit zeitabhängige und nicht explizit zeitabhängige Observablen.

87. Wie lautet die von-Neumann-Gleichung und wann wird sie angewendet?
88. Wie lautet die Heisenberg-Gleichung und wann wird sie angewendet?
89. Wie entwickeln sich Erwartungswerte zeitlich im Schrödingerbild und im Heisenbergbild?
90. Was versteht man unter einem “trunkierten statistischen Operator”? Welcher Zusammenhang besteht zwischen einem trunkierten statistischen Operator und dem vollen statistischen Operator? In welchem Kontext werden trunkierte Operatoren eingeführt und wofür können sie verwendet werden?
91. Was ist eine unitäre Zeitentwicklung? Entwickelt sich der statistische Operator unitär? Wie sieht es bei trunkierten statistischen Operatoren aus?
92. Erläutern Sie den Vorgang der Dekohärenz.
93. Was geschieht nach dem Reduktionspostulat bei einer Messung? Wie hängen Reduktionspostulat und Dekohärenz miteinander zusammen?
94. Wie lautet der Hamiltonoperator des eindimensionalen harmonischen Oszillators? Welche Eigenwerte hat er?
95. Was sind Aufsteige- und Absteigeoperatoren?
96. Was versteht man in der Quantenmechanik unter einer Erhaltungsgröße? Wie lautet die Bedingung dafür, daß eine Observable eine Erhaltungsgröße ist?
97. Was versteht man unter einer Symmetrieoperation? Wie lautet die Bedingung dafür, daß ein System eine bestimmte Symmetrie aufweist?
98. Was versteht man unter dem Generator einer kontinuierlichen Symmetriegruppe?
99. Welche physikalische Bedeutung haben die Generatoren der Translationsgruppe und der Rotationsgruppe?
100. Wie kommutieren die Generatoren der Translationsgruppe untereinander? Wie die Generatoren der Rotationsgruppe? Warum ist die Antwort verschieden?
101. In welchem konkreten Fall sind die Generatoren der Rotationsgruppe gerade die Komponenten des Bahndrehimpulses?
102. Erläutern Sie den Zusammenhang zwischen Symmetrien und Erhaltungsgrößen in der Quantenmechanik.
103. Nennen und erklären Sie speziell die Erhaltungsgrößen, die aus der Homogenität der Zeit, der Homogenität des Raums, und der Isotropie des Raums folgen.
104. Wann gelten Teilchen als ununterscheidbar?
105. Welche Forderung müssen die Observablen in einem System ununterscheidbarer Teilchen erfüllen?
106. Welche Eigenschaft hat nach dem Symmetrisierungspostulat der Zustandsraum eines Systems identischer Teilchen?
107. Worin besteht der Unterschied zwischen Bosonen und Fermionen?
108. Was versteht man unter einer Slater-Determinante und wozu kann man sie brauchen?
109. Was besagt das Spin-Statistik Theorem?



# Kapitel 4

## Quantenmechanik des Drehimpulses

© Copyright 2020 Friederike Schmid<sup>1</sup>

Wir haben in den Kapiteln 2 S.9 und 3 S.47 bereits einige wesentliche Aspekte des Drehimpulses kennengelernt.

In diesem Kapitel: Systematische Gesamtdarstellung  
- Wiederholung, Erweiterung, Ergänzungen (insbesondere: Spin)

### 4.1 Wiederholung: Bahndrehimpuls

#### 4.1.1 Definition

Operator:  $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$

Ortsdarstellung:  $\vec{L} = \frac{\hbar}{i} \vec{r} \times \vec{\nabla}$

Kommutatorrelationen:  $[L_j, L_k] = i\hbar \varepsilon_{jkl} L_l$ ;  $[\vec{L}^2, L_k] = 0 \quad \forall k = x, y, z$

#### 4.1.2 Eigenwerte und Eigenfunktionen

Gemeinsame Eigenvektoren z.B. von  $\vec{L}^2$  und  $L_z$ :  $|lm\rangle$

$$\begin{aligned}\vec{L}^2 |lm\rangle &= \hbar^2 l(l+1) |lm\rangle \\ L_z |lm\rangle &= \hbar m |lm\rangle\end{aligned}$$

mit  $l \geq 0$  ganzzahlig;  $m$  ganzzahlig,  $m \in [-l : l]$

---

<sup>1</sup>Prof. Dr. Friederike Schmid, Vorlesung Quantenmechanik (I), Universität Mainz, SS 2023.  
Letzte Änderung der PDF-Datei am 31.05.2023.

## 4.1.3 Darstellung in Polarkoordinaten

$$\begin{aligned}
L_x &= \frac{\hbar}{i} \left( -\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \cot \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\
L_y &= \frac{\hbar}{i} \left( -\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \cot \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\
L_z &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\
\vec{L}^2 &= -\frac{\hbar^2}{\sin^2 \vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
|lm\rangle &\rightarrow Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad \text{Kugelflächenfunktionen} \\
\text{mit } Y_{lm}(\vartheta, \varphi) &= \mathcal{N} e^{im\varphi} \sin^m \vartheta \frac{d^m}{d \cos \vartheta^m} \underbrace{P_l(\cos \vartheta)}_{\text{Legendre-P.}} \quad (m \geq 0) \\
Y_{l-m}(\vartheta, \varphi) &= (-1)^m Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi)
\end{aligned}$$

Konkret:

$$\begin{aligned}
Y_{00} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\
Y_{10} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta \\
Y_{1\pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}
\end{aligned}$$

Kugelflächenfunktionen bilden ein vollständiges und orthogonales Funktionensystem  
( $\leadsto \vec{L}^2, L_z$  selbstadjungierte Operatoren)

## 4.2 Allgemeiner Drehimpuls

### 4.2.1 Definition

Drehimpuls  $\leftrightarrow$  Generator einer Drehung (Kapitel 3.4.2.3 S.79)  
(eines Systems oder eines Teils eines Systems)

Drehung um Winkel  $\varphi$ , Drehachse  $\vec{\varphi}/\varphi$ :

$$|\Psi\rangle \rightarrow |\tilde{\Psi}\rangle = R(\vec{\varphi})|\Psi\rangle \text{ mit } \boxed{R(\vec{\varphi}) = \exp(-\frac{i}{\hbar}\vec{\varphi}\vec{J})}$$

$\leadsto$  Definiert Drehimpuls  $\vec{J}$

Konkrete Form hängt vom Zustandsraum  $\{|\Psi\rangle\}$  ab.

Kommutatorrelationen:  $\boxed{[J_j, J_k] = i\hbar\varepsilon_{jkl}J_l}$  (gezeigt in 3.4.2.3 S.79)

Folgerungen: Für  $\vec{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$  gilt:

-  $[\vec{J}^2, J_k] = 0$  für alle  $k = x, y, z$

$$\begin{aligned} (\text{z.B. } [\vec{J}^2, J_x] &= [J_y^2, J_x] + [J_z^2, J_x] = J_y[J_y, J_x] + J_z[J_z, J_x] + [J_y, J_x]J_y + [J_z, J_x]J_z \\ &= -i\hbar(J_yJ_z + J_zJ_y) + i\hbar(J_zJ_y + J_yJ_z) = 0 \quad \checkmark) \end{aligned}$$

-  $\vec{J}^2$  positiv  $(\langle\Psi|\vec{J}^2|\Psi\rangle = \|J_x|\Psi\rangle\|^2 + \|J_y|\Psi\rangle\|^2 + \|J_z|\Psi\rangle\|^2 \geq 0)$

### 4.2.2 Eigenwerte und Eigenvektoren

Suche gemeinsame Eigenvektoren von  $\vec{J}^2$  und  $J_z$

$\rightarrow$  „Standarddarstellung“  $|jm\rangle$

Motiviert durch 4.1 S.95, schreibe Eigenwertgleichung in der Form:

$$\vec{J}^2|jm\rangle = \hbar^2j(j+1)|jm\rangle \text{ mit } j > 0 \quad (\text{da } \vec{J}^2 \text{ positiv})$$

$$J_z|jm\rangle = \hbar m|jm\rangle$$

Lösungsweg: ähnlich wie harmonischer Oszillator in 3.3 S.72, gestützt auf Kommutatoren: „Algebraische“ Lösung

Hauptergebnisse

Eigenvektoren von  $\vec{J}^2, J_z$ :  $|jm\rangle$

$$\text{erfüllen } \boxed{\begin{aligned} \vec{J}^2|jm\rangle &= \hbar^2j(j+1)|jm\rangle \\ J_z|jm\rangle &= \hbar m|jm\rangle \end{aligned}}$$

wobei:  $j$  ist positiv und halbzahlig oder ganzzahlig

$$m \in [-j, -j+1, \dots, j-1, j] \quad ((2j+1) \text{ mögliche Einstellungen})$$

$$\text{Es gilt: } \boxed{\begin{aligned} J_+|jm\rangle &= \hbar\sqrt{(j-m)(j+m+1)}|j \ m+1\rangle \\ J_-|jm\rangle &= \hbar\sqrt{(j+m)(j-m+1)}|j \ m-1\rangle \end{aligned}}$$

(modulo Phasenfaktor)

$$\text{mit } \boxed{J_{\pm} = J_x \pm i J_y}$$

Weitere Ergebnisse und algebraische Herleitung im Vergleich mit Kapitel 3.3 S.72  
siehe große Tabelle auf der folgenden Seite

	Harmonischer Oszillator	Drehimpuls
<u>Ausgangspunkt:</u>	$H = \frac{\omega}{2}(\tilde{p}^2 + \tilde{x}^2)$ $[\tilde{x}, \tilde{p}] = i\hbar$ (reskalierte Einheiten)	$\vec{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$ $[J_x, J_y] = i\hbar J_z$ (Im Eigensystem von $\hat{J}_z$ ist $J_z$ eine Zahl!)
Leiteroperatoren $\Rightarrow$	$a = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(\tilde{x} + i\tilde{p})$ $a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(\tilde{x} - i\tilde{p})$ $H = \frac{1}{2}\hbar\omega(a^\dagger a + aa^\dagger)$	$J_\pm = J_x \pm i J_y$ $\vec{J}^2 = (J_+ J_- + J_- J_+)/2 + J_z^2$
Kommutatoren	$[a, a^\dagger] = 1$ $[N, a] = -a$ $[N, a^\dagger] = a^\dagger$ mit $N = a^\dagger a$	$[J_+, J_-] = 2\hbar J_z$ $[\vec{J}^2, J_\pm] = 0$ $[J_z, J_\pm] = \pm\hbar J_\pm$ (da $[J_z, J_x \pm iJ_y] = [J_z, J_x] \pm i[J_z, J_y] = i\hbar J_y \pm \hbar J_x$ )
Positive Operatoren	$N = a^\dagger a$ $N + 1 = aa^\dagger$	$\vec{J}^2$ $J_+ J_- = J_x^2 + J_y^2 + \hbar J_z = \vec{J}^2 - J_z^2 + \hbar J_z$ $J_- J_+ = J_x^2 + J_y^2 - \hbar J_z = \vec{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z$
<u>Lösung:</u>	Sei $ n\rangle$ Eigenvektor zu $N$ , Eigenwert $n$	Sei $ jm\rangle$ Eigenvektor zu $\vec{J}^2, J_z$ , Eigenwerte $\hbar^2 j(j+1)$ und $\hbar m$ mit $j \geq 0$ (Da $\vec{J}^2$ positiv ist, hat es nur positive Eigenwerte $\leadsto$ lassen sich schreiben als $\hbar^2 j(j+1)$ mit $j > 0$ .)
Wirkung der Leiteroperatoren $\Rightarrow$	$Na n\rangle = (n-1)a n\rangle$ $Na^\dagger n\rangle = (n+1)a^\dagger n\rangle$ $a n\rangle \propto  n-1\rangle$ $a^\dagger n\rangle \propto  n+1\rangle$	$J_z J_\pm  jm\rangle = J_\pm (J_z \pm \hbar)  jm\rangle$ $= \hbar(m \pm 1) J_\pm  jm\rangle$ $\vec{J}^2 J_\pm  jm\rangle = J_\pm \vec{J}^2  jm\rangle$ $= \hbar^2 j(j+1) J_\pm  jm\rangle$ $J_\pm  jm\rangle \propto  j, m \pm 1\rangle$
Normierung $\Rightarrow$	$\ a n\rangle\ ^2 = \langle n a^\dagger a n\rangle = n$ $\ a^\dagger n\rangle\ ^2 = \langle n aa^\dagger n\rangle = n+1$ $a n\rangle = \sqrt{n} n-1\rangle$ $a^\dagger n\rangle = \sqrt{n+1} n+1\rangle$	$\ J_\pm  jm\rangle\ ^2 = \langle jm J_\mp J_\pm  jm\rangle$ $= \langle jm \vec{J}^2 - J_z^2 \mp \hbar J_z jm\rangle$ $= \hbar^2(j(j+1) - m(m \pm 1))$ $= \hbar^2(j \mp m)(j \pm m + 1)$ $J_\pm  jm\rangle = \hbar\sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}  j, m \pm 1\rangle$
Positivität $\Rightarrow$	$N$ positiv $n \geq 0$	$J_+ J_-$ bzw. $J_+ J_+$ positiv $\Rightarrow j(j+1) - m(m \mp 1)$ $= (j \pm m)(j \mp m + 1) \geq 0$ $-j \leq m \leq j$
Abbruchbedingung $\Rightarrow$	$\exists$ minimales $n = n_{\min}$ $\Rightarrow a n_{\min}\rangle \stackrel{!}{=} 0$ $\Rightarrow \sqrt{n_{\min}} = 0$ (wegen $a n\rangle = \sqrt{n} n-1\rangle$ ) $n_{\min} = 0$ Übrige Eigenvektoren: $ 1\rangle,  2\rangle,  3\rangle, \dots$	$\exists$ maximales $m = m_{\max}$ , minimales $m = m_{\min}$ $\Rightarrow J_+  jm_{\max}\rangle \stackrel{!}{=} 0, \quad J_-  jm_{\min}\rangle \stackrel{!}{=} 0$ $\Rightarrow \sqrt{(j \mp m_{\min})(j \pm m_{\min} + 1)} = 0$ (wegen $J_\pm  jm\rangle = \hbar\sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}  j, m \pm 1\rangle$ ) $m_{\max} = j, \quad m_{\min} = -j$ Übrige Eigenvektoren: $ j, j-1\rangle,  j, j-2\rangle, \dots$ bzw. $ j, -j+1\rangle,  j, -j+2\rangle \dots$ Damit es aufgeht: $\exists k \in \mathbb{N}_0 : j - k = -j$ $\Rightarrow 2j = k$ für ein $k \in \mathbb{N}_0$ $\Rightarrow j$ ganz- oder halbzahlig

## 4.3 Der Spin

Wir haben gesehen: Bahndrehimpulsquantenzahlen sind ganzzahlig, aber prinzipiell wären ganzzahlige oder halbzahlige Quantenzahlen möglich.

Frage: Treten halbzahlige Quantenzahlen in der Natur auf?

z.B. einfachster Fall  $j = \frac{1}{2} \Rightarrow m = \pm \frac{1}{2}$  (zwei Einstellungen)  $\rightarrow$  gibt es das?

Antwort: Ja - Spin !

### 4.3.1 Experimenteller Hinweis: Der Stern-Gerlach-Versuch

Idee: Direkte Sichtbarmachung der Quantelung von  $J_z$  (Quantenzahl  $m$ ).

Drehimpuls erzeugt magnetisches Moment

$$\text{(z.B. Bahndrehimpuls } \vec{\mu} = \frac{e}{2mc} \vec{L})$$

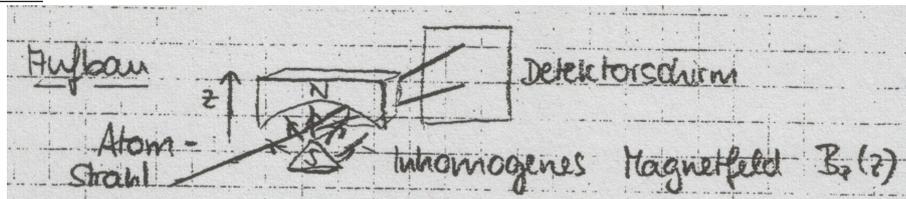
$\leadsto$  Beitrag zum Hamiltonoperator:  $H_{\text{magn}} = -\vec{\mu} \vec{B}$

Für ungeladene freie Teilchen im Magnetfeld gilt:

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{p} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\vec{p}, H] \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\vec{p}, H_{\text{magn}}] \rangle = \vec{\nabla} (\vec{\mu} \vec{B})$$

$\Rightarrow$  Um die Quantelung von  $\mu_z$  ( $\leftrightarrow J_z$ ) sichtbar zu machen, muss man Teilchen durch ein inhomogenes Magnetfeld in z-Richtung schicken.

Aufbau



Ursprüngliche Erwartung: Aufspaltung in 1, 3, 5, ... Strahlen je nach Bahndrehimpuls.

Beobachtung (Stern, Gerlach 1921): Aufspaltung in zwei Strahlen !

Atome: Silber  $\rightarrow$  sollten eigentlich gar keinen Bahndrehimpuls haben.

Wiederholung mit Wasserstoff im Grundzustand (1927)  $\rightarrow$  wieder zwei Strahlen.

Folgerung: Es gibt einen intrinsischen Drehimpuls mit zwei möglichen Einstellungen: Den Spin!  $\rightarrow$  zusätzliche Eigenschaft der Elektronen.

### 4.3.2 Beschreibung von Teilchen mit Spin

#### 4.3.2.1 Ein Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$

Spin: Zusätzlicher Freiheitsgrad

$\leadsto$  Erweiterung des Zustandsraums

$$\mathfrak{H} = \mathfrak{H}^{(0)} \otimes \mathfrak{H}^{(\text{Spin})} \quad (\text{Produktraum})$$

mit  $\mathfrak{H}^{(0)}$  = Zustandsraum eines spinlosen Teilchens  
 und  $\mathfrak{H}^{(Spin)}$  = Spin-Zustandsraum

Spinobservable: Operator  $S$

Eigenwerte  $\vec{S}^2|\Psi\rangle = \hbar^2 s(s+1)|\Psi\rangle = \hbar^2 \frac{3}{4}|\Psi\rangle$  für alle  $|\Psi\rangle \in \mathfrak{H}$

$S_z|\Psi_{\pm}\rangle = \pm\hbar\frac{1}{2}|\Psi_{\pm}\rangle$  für Eigenvektoren  $|\Psi_{\pm}\rangle$

$\vec{S}^2$  und  $S_z$  kommutieren mit allen bisher bekannten Observablen

→  $S_z$  vervollständigt VSKO im erweiterten Zustandsraum

Konstruktion des Raums  $\mathfrak{H}^{(Spin)}$  der Spinzustandsvektoren

$\mathfrak{H}^{(Spin)}$ : Raum, in dem der Operator  $\vec{S}$  wirkt

Basisvektoren: z.B. Eigenvektoren von  $S_z$ :  $|+\rangle, |-\rangle$

mit  $S_z|+\rangle = \frac{\hbar}{2}|+\rangle$ ;  $S_z|-\rangle = -\frac{\hbar}{2}|-\rangle$

→ Spannen  $\mathfrak{H}^{(Spin)}$  auf →  $\mathfrak{H}^{(Spin)}$  hat zwei Dimensionen

Allgemeiner Vektor:  $|\chi\rangle = a|+\rangle + b|-\rangle$

Gesamter Zustandsraum:  $|\Psi\rangle = |\psi_+^{(0)}\rangle|+\rangle + |\psi_-^{(0)}\rangle|-\rangle$

#### 4.3.2.2 Konkret: $S_z$ -Darstellung von Spinzuständen und Spinoperatoren - Paulische Spinor-Schreibweise

Zustandsvektoren:

Kets:  $|+\rangle \hat{=} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ ;  $|-\rangle \hat{=} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ ; allgemein  $|\chi\rangle = a|+\rangle + b|-\rangle \hat{=} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$

Bras entsprechend:  $\langle\chi| \hat{=} (a^* \quad b^*)$

Spinoperatoren:

$$\vec{S}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2\mathbf{1}$$

(da  $\vec{S}^2|\chi\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\chi\rangle$  für alle  $|\chi\rangle$ )

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$$

mit  $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ : Paulimatrizen

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

(Rechnung:

$$S_{\alpha} \hat{=} \begin{pmatrix} \langle +|S_{\alpha}|+\rangle & \langle +|S_{\alpha}|-\rangle \\ \langle -|S_{\alpha}|+\rangle & \langle -|S_{\alpha}|-\rangle \end{pmatrix} \text{ für } \alpha = x, y, z$$

$$S_z: S_z|+\rangle = \frac{\hbar}{2}|+\rangle; S_z|-\rangle = -\frac{\hbar}{2}|-\rangle; \Rightarrow S_z \hat{=} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$S_x, S_y$ : aus  $S_{\pm} = S_x \pm iS_y$  mit  $S_+|+\rangle = 0, S_-|-\rangle = 0$  und

$$S_+|-\rangle = \hbar\sqrt{(j-m)(j+m+1)}|+\rangle = \hbar|+\rangle \quad (\text{denn } j = \frac{1}{2}, m = -\frac{1}{2})$$

$$S_-|+\rangle = \hbar\sqrt{(j+m)(j-m+1)}|-\rangle = \hbar|-\rangle \quad (\text{denn } j = \frac{1}{2}, m = \frac{1}{2})$$

$$\Rightarrow S_x|+\rangle = \frac{1}{2}(S_+ + S_-)|+\rangle = \frac{\hbar}{2}|-\rangle; S_x|-\rangle = \dots = \frac{\hbar}{2}|+\rangle$$

$$S_y|+\rangle = \frac{1}{2i}(S_+ - S_-)|+\rangle = i\frac{\hbar}{2}|-\rangle; S_y|-\rangle = \dots = -i\frac{\hbar}{2}|+\rangle$$

$$\Rightarrow S_x \hat{=} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \text{ und } S_y \hat{=} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \checkmark$$

Eigenschaften der Pauli-Matrizen:

- $\vec{\sigma} \cdot \vec{a} = \sum_i \sigma_i a_i = \begin{pmatrix} a_3 & a_1 - ia_2 \\ a_1 + ia_2 & -a_3 \end{pmatrix}$  für beliebige Vektoren  $\vec{a} \in \mathbb{C}^3$
- $\sigma_i^\dagger = \sigma_i$ ;  $\det(\sigma_i) = -1$ ;  $Sp(\sigma_i) = 0$
- $\sigma_i^2 = 1$ ;  $[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k$ ;  $[\sigma_i, \sigma_j]_+ = \sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = 2\delta_{ij}$   
 $\Rightarrow \sigma_i\sigma_j = \delta_{ij} \cdot \mathbb{1} + i \cdot \varepsilon_{ijk}\sigma_k$   
 $(\vec{\sigma} \cdot \vec{a})(\vec{\sigma} \cdot \vec{b}) = \vec{a} \cdot \vec{b} \mathbb{1} + i \vec{\sigma} (\vec{a} \times \vec{b})$

#### 4.3.2.3 Identische Spin $\frac{1}{2}$ -Teilchen

Spin  $\frac{1}{2}$ -Teilchen sind nach dem Spin-Statistik-Theorem Fermionen

$\leadsto$  Gesamtzustandsvektor muss antisymmetrisch sein

Beachte aber: Gesamtzustandsvektor beinhaltet Bahn- und Spinanteil

Beispiel: Betrachte zwei identische Teilchen  $a, b$

Setze Gesamtzustandsvektoren zusammen aus Einteilchen-Bahnvektoren  $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$  und Einteilchen-Spinvektoren  $|+\rangle, |-\rangle$ .

Möglichkeiten:

$$|\Psi\rangle \propto |\psi_1\rangle_a |\psi_2\rangle_b |+\rangle_a |-\rangle_b - |\psi_2\rangle_a |\psi_1\rangle_b |-\rangle_a |+\rangle_b$$

aber auch:	antisymmetrischer Bahnanteil	symmetrischer Spinanteil
	$ \Psi\rangle \propto ( \psi_1\rangle_a  \psi_2\rangle_b -  \psi_2\rangle_a  \psi_1\rangle_b)$	$ +\rangle_a  +\rangle_b$
	$ \Psi\rangle \propto ( \psi_1\rangle_a  \psi_2\rangle_b -  \psi_2\rangle_a  \psi_1\rangle_b)$	$( +\rangle_a  -\rangle_b +  -\rangle_a  +\rangle_b)$
oder:	symmetrischer Bahnanteil	antisymmetrischer Spinanteil
	$ \Psi\rangle \propto ( \psi_1\rangle_a  \psi_2\rangle_b +  \psi_2\rangle_a  \psi_1\rangle_b)$	$( +\rangle_a  -\rangle_b -  -\rangle_a  +\rangle_b)$
	$ \Psi\rangle \propto  \psi_1\rangle_a  \psi_1\rangle_b$	$( +\rangle_a  -\rangle_b -  -\rangle_a  +\rangle_b)$

#### 4.3.3 Nichtrelativistischer Spin im elektromagnetischen Feld - Pauligleichung

Stern-Gerlach-Versuch:

Spin wird dann messbar, wenn Magnetfeld eingeschaltet wird.

Generell gilt für

Geladene Teilchen ohne Spin im elektromagnetischen Feld

$$\text{Hamiltonoperator: } H_0 = \frac{1}{2m} (\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A})^2 - q\phi \quad (q=\text{Ladung})$$

Teilchen mit Spin

$$\rightarrow \text{magnetisches Moment: } \vec{\mu} =: g \frac{q}{2mc} \vec{S} =: \pm \frac{g}{2} \mu_0 \vec{\sigma}$$

mit  $\mu_0 = \frac{|q|\hbar}{2mc}$ : Magneton,  $g$ : gyromagnetischer Faktor

Konvention für neutrale Teilchen (Neutronen): Setze  $q = +e$  ein

$$\rightarrow \text{zusätzlicher Beitrag zum Hamiltonoperator: } -\vec{\mu} \vec{B}$$

Speziell Elektronen:

$$q = -e, m = m_e, \mu_0 = \frac{e\hbar}{2m_e c} =: \mu_B \text{ (Bohrsches Magneton)}$$

Relativistische Quantenmechanik (Diracgleichung)  $\rightarrow g = 2$

Quantenelektrodynamik: Korrekturen wegen Wechselwirkung mit elektromagnetischem Feld  $\rightarrow g \approx 2$  ( $g = 2.002319304718$ )

Schrödingergleichung nimmt die Form an

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = \left[ \frac{1}{2m} (\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A})^2 + e\phi + \frac{g}{2} \mu_B \vec{\sigma} \cdot \vec{B} \right] |\Psi\rangle} \quad \text{Pauli-Gleichung}$$

#### 4.3.4 Wirkung von Drehungen auf Spinzustände

##### 4.3.4.1 Rotationsoperator im Spin-Zustandsraum

$$R(\vec{\varphi}) = \exp(-\frac{i}{\hbar} \vec{\varphi} \cdot \vec{S}) = \exp(-\frac{i}{2} \vec{\varphi} \cdot \vec{\sigma}) = \underbrace{\cos\left(\frac{\vec{\varphi} \cdot \vec{\sigma}}{2}\right)}_{\text{gerade}} - i \underbrace{\sin\left(\frac{\vec{\varphi} \cdot \vec{\sigma}}{2}\right)}_{\text{ungerade}}$$

Potenzen von  $\vec{\varphi} \cdot \vec{\sigma}$

$$\text{Es gilt: } (\vec{\varphi} \cdot \vec{\sigma})^2 = \varphi^2 \mathbb{1} + i\vec{\sigma}(\vec{\varphi} \times \vec{\varphi}) = \varphi^2 \mathbb{1}$$

$$\leadsto (\vec{\varphi} \cdot w\vec{\sigma})^k = \varphi^k \begin{cases} \mathbb{1} & k \text{ gerade} \\ \vec{\varphi}/\varphi \cdot \vec{\sigma} & k \text{ ungerade} \end{cases}$$

$$\Rightarrow \boxed{R(\vec{\varphi}) = \cos \frac{\varphi}{2} \cdot \mathbb{1} - i(\vec{\sigma} \cdot \vec{\varphi}/\varphi) \sin \frac{\varphi}{2}}$$

##### 4.3.4.2 Wirkung auf Spin-Erwartungswerte

Generell: Wirkung einer Drehung auf statistischen Operator  $\varrho$

$$\boxed{\varrho \rightarrow \tilde{\varrho} = R(\vec{\varphi}) \varrho R(\vec{\varphi})^\dagger}$$

( da:  $\varrho = \sum_{nm} |n\rangle \varrho_{nm} \langle m| \rightarrow \sum_{nm} |\tilde{n}\rangle \varrho_{nm} \langle \tilde{m}|$  mit  $|\tilde{n}\rangle = R(\vec{\varphi})|n\rangle$  )

Hier: Betrachte oBdA speziell Drehung um z-Achse:  $R(\vec{\varphi}) = e^{-\frac{i}{2} \sigma_z \varphi}$

Berechne Wirkung auf  $\langle S_\alpha \rangle$ :  $Sp(\varrho S_\alpha) \rightarrow Sp(\tilde{\varrho} S_\alpha)$

$$\Rightarrow \text{Man erhält: } \begin{pmatrix} \langle S_x \rangle \\ \langle S_y \rangle \\ \langle S_z \rangle \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \langle S_x \rangle \cos \varphi - \langle S_y \rangle \sin \varphi \\ \langle S_y \rangle \cos \varphi + \langle S_x \rangle \sin \varphi \\ \langle S_z \rangle \end{pmatrix}$$

Spin-Erwartungswerte drehen sich wie gewöhnliche Vektoren

(Rechnung dazu:  $Sp(\tilde{\varrho} S_\alpha) = Sp(R(\vec{\varphi}) \varrho R(\vec{\varphi})^\dagger S_\alpha) = Sp(\varrho R(\vec{\varphi})^\dagger S_\alpha R(\vec{\varphi}))$ )

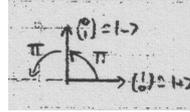
$$\begin{aligned} R(\vec{\varphi})^\dagger S_\alpha R(\vec{\varphi}) &= e^{\frac{i}{2} \sigma_z \varphi} S_k e^{-\frac{i}{2} \sigma_z \varphi} = (\cos \frac{\varphi}{2} + i \sigma_z \sin \frac{\varphi}{2}) S_k (\cos \frac{\varphi}{2} - i \sigma_z \sin \frac{\varphi}{2}) \\ &= \frac{\hbar}{2} (\cos^2 \frac{\varphi}{2} \sigma_k + \sin^2 \frac{\varphi}{2} \sigma_z \sigma_k \sigma_z + i \sin \frac{\varphi}{2} \cos \frac{\varphi}{2} [\sigma_z, \sigma_k]) \\ &\quad \left| \begin{array}{l} [\sigma_z, \sigma_k] = 2i \varepsilon_{zkl} \sigma_l; \quad \sigma_z \sigma_k = \delta_{zk} \cdot \mathbb{1} + i \cdot \varepsilon_{zkl} \sigma_l \\ \Rightarrow \sigma_z \sigma_k \sigma_z = \sigma_z \delta_{zk} + i \varepsilon_{zkl} \sigma_l \sigma_z = \sigma_z \delta_{zk} - \underbrace{\varepsilon_{zkl} \varepsilon_{lzm}}_{\delta_{km}(1-\delta_{zk})} \sigma_m = 2\sigma_z \delta_{zk} - \sigma_k \end{array} \right. \\ &= \frac{\hbar}{2} (\cos^2 \frac{\varphi}{2} \sigma_k + \sin^2 \frac{\varphi}{2} (2\sigma_z \delta_{zk} - \sigma_k)) - 2 \sin \frac{\varphi}{2} \cos \frac{\varphi}{2} \varepsilon_{zkl} \sigma_l \\ &\quad \left| \begin{array}{l} 2 \sin \frac{\varphi}{2} \cos \frac{\varphi}{2} = \sin \varphi; \quad \cos^2 \frac{\varphi}{2} - \sin^2 \frac{\varphi}{2} = \cos \varphi; \quad \sin^2 \frac{\varphi}{2} = \frac{1}{2}(1 - \cos \varphi) \end{array} \right. \\ &= (\cos \varphi S_k + \delta_{zk} S_z (1 - \cos \varphi) - \sin \varphi \varepsilon_{zkl} S_l) \quad \checkmark \end{aligned}$$

4.3.4.3 Wirkung auf Spinzustandsvektoren

$$R(\vec{\varphi}) |\chi\rangle = \cos \frac{\varphi}{2} |\chi\rangle - i(\vec{\sigma} \cdot \vec{\varphi}/\varphi) \sin \frac{\varphi}{2} |\chi\rangle$$

Speziell: Drehung um  $\varphi = 2\pi$

$$|\chi\rangle \xrightarrow{2\pi} R |\chi\rangle = -|\chi\rangle : \text{Vorzeichenwechsel !}$$



„Anschaulich“ im Spinor-Raum:

Vorzeichenwechsel hat keine Auswirkung auf Erwartungswerte, kann aber einen Effekt machen, wenn es gelingt, Interferenzen zwischen „gedrehten“ und „ungedrehten“ Zuständen herbeizuführen.

Experimentelle Realisierung (Rauch et al. 1975, Werner et al. 1975)

Neutronen im Magnetfeld  $\vec{B} || z$

Neutronen neutral:  $H = \frac{p^2}{2m} - \vec{\mu} \vec{B} := \frac{p^2}{2m} + \omega S_z$   
( $\frac{p^2}{2m}$  koppelt nur an Bahn,  $\vec{\mu} \vec{B}$  koppelt an Spin)

mit  $\omega = -\frac{g_n eB}{2 m_p c}$  Larmor-Frequenz,  $m_p$ : Masse des Protons  
 $g_n \approx -3.82$  für Neutronen

→ Zeitentwicklung der Zustandsvektoren beschrieben durch:

$$U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \underbrace{\quad}_{\text{Spinanteil}} e^{-\frac{i}{\hbar} \omega t S_z}$$

→ entspricht genau einer Drehung um z-Achse, Winkel  $\varphi = \omega t$

Wirkung auf Erwartungswerte:

$$\begin{pmatrix} \langle S_x \rangle \\ \langle S_y \rangle \\ \langle S_z \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle S_x \rangle \cos \omega t - \langle S_y \rangle \sin \omega t \\ \langle S_y \rangle \cos \omega t + \langle S_x \rangle \sin \omega t \\ \langle S_z \rangle \end{pmatrix} \quad \text{„Larmorpräzession“ mit Frequenz } \omega$$

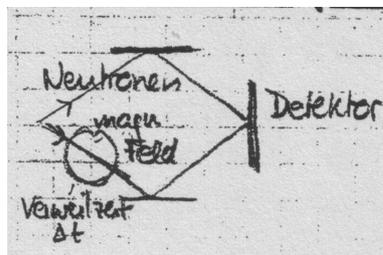


Wirkung auf Zustandsvektoren:

$$|\chi(t + \frac{2\pi}{\omega})\rangle = -|\chi(t)\rangle:$$

Periode für Zustand ist doppelt so lang wie für Präzession

Experimenteller Aufbau:



→ Konstruktive und destruktive Interferenz, abhängig vom Magnetfeld.

konstruktiv:  $\omega \Delta t = 2\pi \cdot 2n$

destruktiv:  $\omega \Delta t = 2\pi \cdot (2n + 1)$

### 4.3.5 Drehgruppe und spezielle unitäre Gruppe

Ausgangspunkt: Gruppe der Rotationsoperatoren  $R(\vec{\varphi})$

Gruppe  $G$  von Symmetrieoperationen im Sinne von Kapitel 3.4,  
Lie-Gruppe mit drei Parametern ( $\vec{\varphi}$ )

Darstellungen dieser Gruppe (vgl. 3.4.1):

Abbildungen  $L : G \rightarrow \text{GL}(V)$  in die linearen Operatoren eines Vektorraums (z.B. die invertierbaren  $n \times n$ -Matrizen in  $V = \mathbb{R}^n$  oder  $\mathbb{C}^n$ ), die die Verknüpfung erhalten und als Funktion der Parameter glatt sind.

#### 4.3.5.1 Darstellung im $\mathbb{R}^3$ : Spezielle orthogonale Gruppe $\text{SO}(3)$

Entspricht den Drehmatrizen  $\mathcal{D}(\vec{\varphi})$  im  $\mathbb{R}^3$

Eigenschaften: (reelle  $3 \times 3$ -Matrizen)

- Normerhaltend:  $\|\mathcal{D}a\|^2 = \|a\|^2$  für alle  $a \in \mathbb{R}^3 \Rightarrow \mathcal{D}^T \mathcal{D} = \mathbf{1}$
- Determinante  $\det(\mathcal{D}) = 1$   
(  $\det(\mathcal{D}^T \mathcal{D}) = \det(\mathcal{D}^T) \det(\mathcal{D}) = \det(\mathcal{D})^2 = \mathbf{1} \rightarrow \det(\mathcal{D}) = \pm 1$   
Vorzeichen „+“ folgt daraus, dass Drehungen kontinuierlich ineinander überführt
- 3 Parameter ( $\vec{\varphi}$ )
- Infinitesimale Erzeugende (siehe 3.4.2.3)

$$\underline{\underline{\mathcal{D}}} = e^{i \underline{\underline{G}} \vec{\varphi}} \quad \text{mit } G_x = i \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, G_y = i \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, G_z = i \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

#### 4.3.5.2 Darstellung im $\mathbb{C}^2$ : Spezielle unitäre Gruppe $\text{SU}(2)$

Entspricht Rotationen im Spin  $\frac{1}{2}$ -Zustandsraum

Allgemeine Form:  $R(\vec{\varphi}) = e^{-\frac{i}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{\varphi}} = \cos \frac{\varphi}{2} \mathbf{1} - (\vec{\sigma} \cdot \overbrace{\vec{\varphi}/\varphi}^{\vec{n}}) \sin \frac{\varphi}{2}$

$$\Rightarrow R = \begin{pmatrix} \cos \frac{\varphi}{2} - i n_z \sin \frac{\varphi}{2} & (-i n_x - n_y) \sin \frac{\varphi}{2} \\ (-i n_x + n_y) \sin \frac{\varphi}{2} & \cos \frac{\varphi}{2} + i n_z \sin \frac{\varphi}{2} \end{pmatrix} =: \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} =: U(a, b)$$

mit  $|a|^2 + |b|^2 = 1$ . (da  $(|a|^2 + |b|^2) = \cos^2 \frac{\varphi}{2} + \sin^2 \frac{\varphi}{2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$ )

Eigenschaften: (komplexe  $2 \times 2$ -Matrizen)

- Unitär:  $U^{*T} = U^{-1}$
- Unimodular:  $\det(U) = 1$  (  $\det(U) = |a|^2 + |b|^2 = 1$  )
- Wieder 3 Parameter
- Zuordnung  $\text{SO}(3) \rightarrow \text{SU}(2)$ : lokal isomorph, aber nicht global:  
Zu jeder Drehung  $\mathcal{D} \in \text{SO}(3)$  gehören zwei Elemente der  $\text{SU}(2)$   
( $U(a, b)$  und  $U(-a, -b)$ )  
Hintergrund: Drehung um  $2\pi$  dreht Vorzeichen um
- Parameter  $a, b$  heißen auch Cayley-Klein-Parameter

## 4.4 Addition von Drehimpulsen

### 4.4.1 Problemstellung

Gegeben sei ein System mit zwei Drehimpulsen  $\vec{J}^{(1)}, \vec{J}^{(2)}$ ,

so dass  $[J_i^{(1)}, J_j^{(2)}] = 0$  für alle  $i, j$ .

z.B. Elektron mit Bahndrehimpuls  $\vec{L}$  und Spin  $\vec{S}$

Zweiteilchensystem mit je einem Spin  $S_i$

Bei Isotropie des Raums ist der Gesamtdrehimpuls die Erhaltungsgröße, Einzeldrehimpulse nicht mehr notwendig erhalten.

Beispiel: Wasserstoffatom mit Spin-Bahn-Kopplung.

Hamiltonoperator hat Zusatzterm  $\propto \vec{L} \cdot \vec{S}$ .

$\Rightarrow [H, \vec{L}] \neq 0, [H, \vec{S}] \neq 0$ , aber  $[H, \vec{L} + \vec{S}] = 0$ .

Gesamtdrehimpuls:  $\vec{J} = \vec{J}^{(1)} + \vec{J}^{(2)}$

· Drehimpuls, denn:  $[J_i, J_j] = [J_i^{(1)}, J_j^{(1)}] + [J_i^{(2)}, J_j^{(2)}] = i\hbar \varepsilon_{ijk} J_k$

· Kommutatoren:

$[J_i, (\vec{J}^{(\alpha)})^2] = 0; [\vec{J}^2, (\vec{J}^{(\alpha)})^2] = 0$ , aber  $[\vec{J}^2, J_i^{(\alpha)}] \neq 0$

(Check: Übungsaufgabe).

Mögliche Darstellungen (Basissysteme):

(i) Naheliegend: Eigenvektoren von  $((\vec{J}^{(1)})^2, (\vec{J}^{(2)})^2, J_z^{(1)}, J_z^{(2)})$

(z.B. beim Elektron:  $|lm\rangle \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  und  $|lm\rangle \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ )

$\rightarrow$  Notation  $|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle$

(ii) Andererseits Eigensystem zu  $J_z^{(\alpha)}$  unbrauchbar für Lösung der Schrödingergleichung, wenn  $[H, J_z^{(\alpha)}] \neq 0$ .

$\rightsquigarrow$  Günstiger wäre häufig Eigensystem zu  $\vec{J}^2, J_z$  statt  $J_z^{(\alpha)}$

$\rightsquigarrow$  Alternative Basis: Eigenvektoren von  $((\vec{J}^{(1)})^2, (\vec{J}^{(2)})^2, \vec{J}^2, J_z)$

$\rightarrow$  Notation  $|j_1 j_2; j m\rangle$

Basiswechsel von (i) nach (ii)

$\rightsquigarrow$  „Addition von Drehimpulsen“

### 4.4.2 Additionstheorem

Erste Frage: Welches sind die möglichen Eigenwerte von  $\vec{J}^2, J_z$  bei vorgegebenen Eigenwerten zu  $(\vec{J}^{(\alpha)})^2$  (vorgegebene Quantenzahlen  $j_1, j_2$ ) ?

Vorbemerkung: Zustandsvektoren  $|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle$  sind Eigenvektoren zu  $J_z$ .

$(J_z |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle = (J_z^{(1)} + J_z^{(2)}) |\dots\rangle = \hbar(m_1 + m_2) |\dots\rangle =: \hbar m |\dots\rangle)$

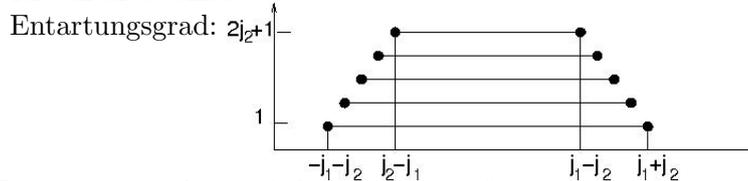
Also können sie zur Bestimmung möglicher  $m$ -Werte genutzt werden.

OBdA sei  $j_1 > j_2$ . Mit  $m_\alpha \in [-j_\alpha, j_\alpha]$  folgt für die Werte von  $m$ :

	$-j_1$		$j_1$		
$-j_2$	$-j_1 - j_2$	$\cdots$		$j_1 - j_2$	
	$\vdots$			$\vdots$	
			$j_1 + j_2 - 2$	$j_1 + j_2 - 1$	
$j_2$	$j_2 - j_1$	$\cdots$	$j_1 + j_2 - 2$	$j_1 + j_2 - 1$	$j_1 + j_2$

Folgerung:

- (i)  $m_{\max} = j_1 + j_2 \Rightarrow j_{\max} = m_{\max} = j_1 + j_2$ .
- (ii) Übrige Werte von  $m$  unterscheiden sich von  $m_{\max}$  ganzzahlig.  
 $\Rightarrow j \in [j_{\min}, j_{\min} + 1, \dots, j_{\max} - 1, j_{\max}]$  mit  $j_{\max} = j_1 + j_2$   
 $\leadsto$  Frage: Was ist die Untergrenze  $j_{\min}$ ?
- (iii) Gesamtzahl der möglichen Kombinationen von  $m$ :  $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ , wobei viele entartet sind.



Diese Entartungsstruktur wird reproduziert für  $j_{\min} = j_1 - j_2$ .

$\Rightarrow$  Additionstheorem:  $|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$

Anschaulich: Dreiecksungleichung.

NB: Damit ist auch gezeigt, dass der Satz Operatoren  $(\{\vec{J}^{(1)}\}^2, \{\vec{J}^{(2)}\}^2, \vec{J}^2, J_z)$  tatsächlich ein VSKO ist (gleiche Anzahl Basisvektoren wie im ursprünglichen System).

### 4.4.3 Lösung des Problems: Clebsch-Gordan-Koeffizienten

Formal:  $|j_1 j_2; j m\rangle = \sum_{m_1, m_2} |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle \underbrace{\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m \rangle}_{\text{Clebsch-Gordan-Koeffizienten}}$

NB: Notation in jedem Buch anders; hier: Sakurai

#### Eigenschaften der Clebsch-Gordan-Koeffizienten

- (i)  $\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m \rangle = 0$  für  $m \neq m_1 + m_2$   
 (denn:  $\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | \underbrace{J_z - J_z^{(1)} - J_z^{(2)}}_0 | j_1 j_2; j m \rangle = \hbar(m - m_1 - m_2) \langle \dots | \dots \rangle = 0$ )
- (ii)  $\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m \rangle = 0$ , falls nicht gilt:  $|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$   
 (wegen Additionstheorem)
- (iii) Clebsch-Gordan-Koeffizienten können reell gewählt werden.  
 (Wegen (v, vi): Konstruktion aus Rekursionsrelationen mit reellen Koeffizienten)

(iv) Definieren unitäre Matrix (da Basistransformation)

da sie noch dazu reell sind: orthogonale Matrix  $(C^T C = \mathbb{1})$

$$\Rightarrow \begin{cases} \sum_{jm} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle \langle j_1 j_2; m'_1 m'_2 | j_1 j_2; jm \rangle = \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2} \\ \sum_{m_1 m_2} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j' m' \rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'} \end{cases}$$

Speziell  $j = j'$ ,  $m = m'$

$$\rightarrow \left[ \sum_{m_1 m_2} |\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle|^2 = 1 \right] : \quad \underline{\text{Normierung}}$$

Beziehungen zwischen Clebsch-Gordan-Koeffizienten (Rekursionsrelationen)

(v) Rekursionsrelationen für festes  $j_1, j_2, j$

$$\text{Aus } \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | J_{\pm} - J_{\pm}^{(1)} - J_{\pm}^{(2)} | j_1 j_2; j m \rangle = 0$$

und  $J_{\pm} | j m \rangle = \hbar \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} | j m \pm 1 \rangle$  folgt:

$$\begin{aligned} & \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m \pm 1 \rangle \\ &= \sqrt{(j_1 \pm m_1)(j_1 \mp m_1 + 1)} \langle j_1 j_2; m_1 \mp 1 m_2 | j_1 j_2; j m \rangle \\ & \quad + \sqrt{(j_2 \pm m_2)(j_2 \mp m_2 + 1)} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 \mp 1 | j_1 j_2; j m \rangle \end{aligned}$$

$\leadsto$  Daraus können z.B. ausgehend von  $\langle j_1 j_2; -j_1 j_2 | j_1 j_2; j (j_2 - j_1) \rangle$  alle anderen Koeffizienten rekursiv bestimmt werden.

$\leadsto$  Liefert alle Koeffizienten bis auf konstanten Faktor.

Dieser ergibt sich aus der Normierungsbedingung (iv) mit der Condon-Shortley Konvention  $\langle j_1 j_2; j_1 (j - j_1) | j_1 j_2; j j \rangle \geq 0$

$\leadsto$  In der Praxis relativ aufwändig!

(vi) Rekursionsrelationen für festes  $j_1, j_2, j$  und  $m$

$$\begin{aligned} \text{Es gilt: } \vec{J}^2 &= (\vec{J}^{(1)} + \vec{J}^{(2)})^2 \\ &= (\vec{J}^{(1)})^2 + (\vec{J}^{(2)})^2 + J_+^{(1)} J_-^{(2)} + J_-^{(1)} J_+^{(2)} + 2J_z^{(1)} J_z^{(2)} \end{aligned}$$

$$(J_{\pm}^{(\alpha)} = J_x^{(\alpha)} \pm iJ_y^{(\alpha)})$$

$$\text{Sei } \Gamma = \vec{J}^2 - (\vec{J}^{(1)})^2 - (\vec{J}^{(2)})^2 - J_+^{(1)} J_-^{(2)} - J_-^{(1)} J_+^{(2)} - 2J_z^{(1)} J_z^{(2)}$$

$$\text{Aus } \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | \Gamma | j_1 j_2; j m \rangle = 0$$

und  $J_{\pm} | j m \rangle = \hbar \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} | j m \pm 1 \rangle$  folgt:

$$\begin{aligned} 0 &= [j(j+1) - j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1) - 2m_1 m_2] \\ & \quad \cdot \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m \rangle \\ & \quad - \sqrt{(j_1 + m_1)(j_1 - m_1 + 1)(j_2 - m_2)(j_2 + m_2 + 1)} \\ & \quad \quad \cdot \langle j_1 j_2; (m_1 - 1) (m_2 + 1) | j_1 j_2; j m \rangle \\ & \quad - \sqrt{(j_1 + m_1 + 1)(j_1 - m_1)(j_2 - m_2 + 1)(j_2 + m_2)} \\ & \quad \quad \cdot \langle j_1 j_2; (m_1 + 1) (m_2 - 1) | j_1 j_2; j m \rangle \end{aligned}$$

$\leadsto$  Zusammen mit der Bedingung  $m_2 = m - m_1$  erhält man ein homogenes Gleichungssystem für  $\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m \rangle$ .

$\leadsto$  Einfacher zu handhaben als (v)

Bestimmt wieder die Koeffizienten bis auf konstanten Faktor, der sich aus der Normierungsbedingung (iv) ergibt. Die Vorzeichen folgen aus (v) und der Condon-Shortley Konvention.

#### 4.4.4 Beispiele

##### 4.4.4.1 Elektronen mit Bahndrehimpuls (und Spin)

$$\vec{J}^{(1)} = \vec{S}, \quad \vec{J}^{(2)} = \vec{L}$$

$$\text{Gesamtdrehimpuls: } \vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

Für die Quantenzahl  $j$  muss gelten:  $j = l \pm \frac{1}{2}$  (wegen (iii))

Rechnung (z.B. über (vi)) (Übungsaufgabe).

$$\Rightarrow \begin{array}{l} \langle \frac{1}{2} \ l; \pm \frac{1}{2} \ m \mp \frac{1}{2} \mid \frac{1}{2} \ l; \ l + \frac{1}{2} \ m \rangle = \sqrt{\frac{l \pm m + \frac{1}{2}}{2l+1}} \\ \langle \frac{1}{2} \ l; \pm \frac{1}{2} \ m \mp \frac{1}{2} \mid \frac{1}{2} \ l; \ l - \frac{1}{2} \ m \rangle = \pm \sqrt{\frac{l \mp m + \frac{1}{2}}{2l+1}} \end{array}$$

z.B. sind Eigenfunktionen zu  $j = l + \frac{1}{2}$  gegeben durch:

$$\mid \frac{1}{2} \ l; \ l + \frac{1}{2} \ m \rangle = \sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}} \underbrace{\mid \Psi_{l, m-\frac{1}{2}} \rangle}_{(*)} \mid + \rangle + \sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}} \underbrace{\mid \Psi_{l, m+\frac{1}{2}} \rangle}_{(*)} \mid - \rangle$$

(\*) = Bahndrehimpuls-Eigenfunktion

##### 4.4.4.2 Zwei Spin $\frac{1}{2}$ -Teilchen

$$\vec{J}^{(1)} = \vec{S}_1, \quad \vec{J}^{(2)} = \vec{S}_2$$

$$\text{Gesamtspin: } \vec{J} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$$

Gesamtspinquantenzahl:  $j = 0$  oder  $j = 1$

Lösung kann von 4.4.4.1 übernommen werden.

$$\begin{array}{l} j=1: \langle \frac{1}{2} \ \frac{1}{2}; +\frac{1}{2} \ +\frac{1}{2} \mid \frac{1}{2} \ \frac{1}{2}; 1 \ 1 \rangle = 1 \quad \rightarrow \mid 1 \ 1 \rangle = \mid + \rangle \mid + \rangle \\ \langle \frac{1}{2} \ \frac{1}{2}; \pm \frac{1}{2} \ \mp \frac{1}{2} \mid \frac{1}{2} \ \frac{1}{2}; 1 \ 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad \rightarrow \mid 1 \ 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mid + \rangle \mid - \rangle + \mid - \rangle \mid + \rangle) \\ \langle \frac{1}{2} \ \frac{1}{2}; -\frac{1}{2} \ -\frac{1}{2} \mid \frac{1}{2} \ \frac{1}{2}; 1 \ -1 \rangle = 1 \quad \rightarrow \mid 1 \ -1 \rangle = \mid - \rangle \mid - \rangle \\ j=0: \langle \frac{1}{2} \ \frac{1}{2}; \pm \frac{1}{2} \ \mp \frac{1}{2} \mid \frac{1}{2} \ \frac{1}{2}; 0 \ 0 \rangle = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} \quad \rightarrow \mid 0 \ 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mid + \rangle \mid - \rangle - \mid - \rangle \mid + \rangle) \end{array}$$

↪ Zustandsvektoren zum Gesamtspin  $j = 1$  („parallele Spins“)

bilden Triplet:  $\mid 1 \ 1 \rangle, \mid 1 \ 0 \rangle, \mid 1 \ -1 \rangle$

Tripletzustandsvektoren sind symmetrisch

↪ Zustandsvektor zum Gesamtspin  $j = 0$  („antiparallele Spins“)

bildet Singulett  $\mid 0 \ 0 \rangle$

Singulettzustandsvektor ist antisymmetrisch!

## 4.5 Tensoren und Wigner-Eckart Theorem

Wigner-Eckart Theorem: Wichtige Anwendung der Clebsch-Gordan Koeffizienten. Hilfsmittel im Umgang mit einer großen Klasse physikalisch relevanter tensorieller Observablen

”One of the most important theorems in quantum mechanics” (Sakurai)

### 4.5.1 Sphärische Tensoroperatoren

#### 4.5.1.1 Motivation: Tensoren in der Multipolentwicklung

Erinnerung an Elektrodynamik (Theorie 2):

Entwicklung des Potentials  $\Phi(\vec{r})$  einer räumlich begrenzten Ladungsverteilung nach Potenzen von  $1/r$

Zwei Varianten: (mit  $\hat{r} = \vec{r}/r$ : Einheitsvektor Richtung  $\vec{r}$ )

- Kartesisch:  $\Phi(\vec{r}) = \frac{1}{r} q_{\text{Monopol}} + \frac{1}{r^2} \hat{r}^T \vec{p}_{\text{Dipol}} + \frac{1}{r^3} \hat{r}^T \overset{\leftrightarrow}{Q}_{\text{Quadrupol}} \hat{r}$   
(in Tensor-Notation)

- Sphärisch:  $\Phi(\vec{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{4\pi}{2l+1} \frac{1}{r^{l+1}} \sum_{m=-l}^l q_{lm} Y_{lm}(\hat{r})$   
Multipolmomente

Verhalten unter Drehung:  $\Phi(\vec{r}) \rightarrow \Phi(\mathcal{D}^{-1} \vec{r}) = \Phi(\mathcal{D}^T \vec{r})$  (mit  $\mathcal{D} := \mathcal{D}(\vec{\varphi})$ )

- Kartesisch:  $q \rightarrow \tilde{q} = q$  (Skalar)  
 $\vec{p} \rightarrow \tilde{\vec{p}} = \mathcal{D} \vec{p}$  (Vektor) ( $\Leftrightarrow \hat{r}^T \vec{p} \rightarrow (\mathcal{D}^T \hat{r})^T \vec{p} = \hat{r}^T \mathcal{D} \vec{p} = \hat{r}^T \tilde{\vec{p}}$  ✓)  
 $\overset{\leftrightarrow}{Q} \rightarrow \tilde{\overset{\leftrightarrow}{Q}} = \mathcal{D} \overset{\leftrightarrow}{Q} \mathcal{D}^T$  (Tensor 2. Stufe)  
( $\Leftrightarrow \hat{r}^T \overset{\leftrightarrow}{Q} \hat{r} \rightarrow (\mathcal{D}^T \hat{r})^T \tilde{\overset{\leftrightarrow}{Q}} (\mathcal{D}^T \hat{r}) = \hat{r}^T \mathcal{D} \overset{\leftrightarrow}{Q} \mathcal{D}^T \hat{r} = \hat{r}^T \tilde{\overset{\leftrightarrow}{Q}} \hat{r}$  ✓)
- Sphärisch:  $q_{lm} \rightarrow \tilde{q}_{lm} = \sum_{m'} \mathcal{D}_{mm'}^{(l)}(\vec{\varphi}) q_{lm'}$  mit  $\mathcal{D}_{mm'}^{(l)}(\vec{\varphi}) = \langle lm | \mathcal{D} | lm' \rangle$

(Rechnung dazu:  $\sum_m q_{lm} Y_{lm}(\hat{r}) \rightarrow \sum_m q_{lm} Y_{lm}(\mathcal{D}^T \hat{r})$ )

mit  $Y_{lm}(\mathcal{D}^T \hat{r}) = \langle \mathcal{D}^T \hat{r} | lm \rangle = \langle \hat{r} | \mathcal{D} | lm \rangle = \sum_{l'm'} \langle \hat{r} | l'm' \rangle \langle l'm' | \mathcal{D} | lm \rangle$

wobei  $\langle l'm' | \mathcal{D} | lm \rangle = \langle l'm' | e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{J} \cdot \vec{\varphi}} | lm \rangle \propto \delta_{l,l'}$ , da  $[\vec{J}, \vec{J}^2] = 0$ .

$\Rightarrow Y_{lm}(\mathcal{D}^T \hat{r}) = \sum_{m'} \mathcal{D}_{m'm}^{(l)}(\vec{\varphi}) Y_{lm'}(\hat{r})$

$\Rightarrow \sum_m q_{lm} Y_{lm}(\mathcal{D}^T \hat{r}) = \sum_{mm'} q_{lm} Y_{lm'}(\hat{r}) \mathcal{D}_{m'm}^{(l)}(\vec{\varphi}) = \sum_{mm'} q_{lm'} Y_{lm}(\hat{r}) \mathcal{D}_{mm'}^{(l)}(\vec{\varphi})$   
 $= \sum_m \tilde{q}_{lm} Y_{lm}(\hat{r})$  ✓

Entsprechend gilt  $q_{lm}^* \rightarrow \tilde{q}_{lm}^* = \sum_{m'} [\mathcal{D}_{mm'}^{(l)}(\vec{\varphi})]^* q_{lm'}^* = \sum_{m'} \mathcal{D}_{m'm}^{(l)}(-\vec{\varphi}) q_{lm'}^*$

(da  $[\mathcal{D}_{mm'}^{(l)}(\vec{\varphi})]^* = \langle lm | \mathcal{D} | lm' \rangle^* = \langle lm' | \mathcal{D}^T | lm \rangle = \langle lm' | \mathcal{D}^{-1} | lm \rangle = \mathcal{D}_{m'm}^{(l)}(-\vec{\varphi})$ )

$\leadsto$  Charakterisiert Transformationsverhalten sphärischer Tensoren

4.5.1.2 Definition von sphärische Tensoroperatoren

Wir definieren zunächst  $\mathcal{D}_{mm'}^{(l)}(\vec{\varphi}) = \langle lm | \mathcal{D}(\vec{\varphi}) | lm' \rangle$

Definition: Ein sphärischer Tensoroperator ist eine Größe  $T_q^{(k)}$ , deren Erwartungswert sich unter Drehung gemäß

$$\langle T_q^{(k)} \rangle \rightarrow \sum_{q'=-k}^k \mathcal{D}_{q'q}^{(k)}(-\vec{\varphi}) \langle T_{q'}^{(k)} \rangle \text{ transformiert.}$$

Mit  $\rho \rightarrow \bar{\rho} = R(\varphi)\rho R(\varphi)^\dagger$  (vgl. 4.3.4.2 S.102) folgt:

$$\begin{aligned} \Leftrightarrow \langle T_q^{(k)} \rangle &= \text{Sp}(T_q^{(k)} \rho) \rightarrow \text{Sp}(T_q^{(k)} \bar{\rho}) = \text{Sp}(T_q^{(k)} R(\vec{\varphi}) \rho R(\vec{\varphi})^\dagger) = \text{Sp}(R(\vec{\varphi})^\dagger T_q^{(k)} R(\vec{\varphi}) \rho) \\ &\stackrel{!}{=} \sum_{q'=-k}^k \mathcal{D}_{q'q}^{(k)}(-\vec{\varphi}) \langle T_{q'}^{(k)} \rangle = \text{Sp}(\sum_{q'=-k}^k \mathcal{D}_{q'q}^{(k)}(-\vec{\varphi}) T_{q'}^{(k)} \rho) \quad \forall \rho \\ \Leftrightarrow R(\vec{\varphi})^\dagger T_q^{(k)} R(\vec{\varphi}) &= \sum_{q'=-k}^k \mathcal{D}_{q'q}^{(k)}(-\vec{\varphi}) T_{q'}^{(k)} \Rightarrow R(-\vec{\varphi})^\dagger T_q^{(k)} R(-\vec{\varphi}) = \sum_{q'=-k}^k \mathcal{D}_{q'q}^{(k)}(\vec{\varphi}) T_{q'}^{(k)} \end{aligned}$$

Verwende noch  $R(\vec{\varphi})^\dagger = R(-\vec{\varphi})$ ,  $R(\vec{\varphi}) = R(-\vec{\varphi})^\dagger$

$$\Leftrightarrow \boxed{R(\vec{\varphi}) T_q^{(k)} R^\dagger(\vec{\varphi}) = \sum_{q'=-k}^k \mathcal{D}_{q'q}^{(k)}(\vec{\varphi}) T_{q'}^{(k)}}$$

Folgerung bzw. äquivalente Definition

$$\boxed{\begin{aligned} [J_z, T_q^{(k)}] &= \hbar q T_q^{(k)} \\ [J_\pm, T_q^{(k)}] &= \hbar \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} T_{q\pm 1} \end{aligned}}$$

(Rechnung dazu: Betrachte infinitesimale Drehung  $R(\vec{\varphi}) = \exp(-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \vec{J} \cdot \vec{\varphi}) \approx \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \vec{J} \cdot \vec{\varphi}$

$$\begin{aligned} \Rightarrow (\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \vec{J} \cdot \vec{\varphi}) T_q^{(k)} (\mathbb{1} + \frac{i}{\hbar} \varepsilon \vec{J} \cdot \vec{\varphi}) &= \sum_{q'} \langle kq' | \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \vec{J} \cdot \vec{\varphi} | kq \rangle T_{q'}^{(k)} \\ \Rightarrow T_q^{(k)} - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \vec{\varphi} \cdot [\vec{J}, T_q^{(k)}] &= T_q^{(k)} - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \vec{\varphi} \cdot \sum_{q'} \langle kq' | \vec{J} | kq \rangle T_{q'}^{(k)} \\ \Rightarrow [\vec{J}, T_q^{(k)}] &= \sum_{q'} \langle kq' | \vec{J} | kq \rangle T_{q'}^{(k)} \end{aligned}$$

Benutze:  $\langle kq' | J_z | kq \rangle = \delta_{qq'} \hbar q$   
 $\langle kq' | J_x \pm i J_y | kq \rangle = \langle kq' | J_\pm | kq \rangle = \hbar \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} \delta_{q', q\pm 1} \quad \checkmark$

Beispiele (vergleiche Elektrodynamik)

- Skalärer kartesischer Tensor  $\leftrightarrow T_0^{(0)}$
- Vektorielle kartesische Größe  $\leftrightarrow (T_0^{(1)}, T_{\pm 1}^{(1)})$   
(z.B. Multipolentwicklung:  $q_{1,0}^* \sim p_z$ ,  $q_{1,\pm 1}^* \sim (p_x \pm ip_y)$ )
- Kartesischer Tensor 2. Stufe  $M$ : Zerlegung in  $M = M_0 + M_1 + M_2$   
 $M_0 = \text{Sp}(M) \mathbb{1}$ : Transformiert wie Skalar  $\rightarrow T_0^{(0)}$ : Ein Koeffizient  
 $M_1 = \frac{1}{2}(M - M^T) = \begin{pmatrix} 0 & m_3 & -m_2 \\ -m_3 & 0 & m_1 \\ m_2 & -m_1 & 0 \end{pmatrix} \hat{=} \vec{m} \times \dots$   
 Transformiert wie Vektor  $\rightarrow T_q^{(1)}$ : Drei Koeffizienten  
 $M_2 = \frac{1}{2}(M + M^T) - M_0$ : Symmetrisch und spurlos  
 Transformiert wie Quadrupoltensor  $\rightarrow T_q^{(2)}$ : Fünf Koeffizienten  
 $\rightsquigarrow$  Aufspaltung in sphärische Tensoren
- Kartesische Tensoren höherer Stufe: Zerlegung generell nicht mehr möglich, aber praktisch auftretende Tensoren haben trotzdem oft die Symmetrie von Kombinationen sphärischer Tensoren.

### 4.5.2 Wigner-Eckart Theorem

Satz: In der Eigenbasis von  $(\vec{J}^2, J_z)$  haben Matrixelemente von sphärischen Tensoroperatoren die folgende einfache Form:

$$\langle j'm'; \alpha' | T_q^{(k)} | jm; \alpha \rangle = \langle jk; mq | jk; j'm' \rangle \frac{1}{\sqrt{2j+1}} \langle j'; \alpha' || T^{(k)} || j; \alpha \rangle$$

Clebsch-Gordan-  
Koeffizienten

Unabhängig von  $m, m', q$   
hängt nur von  $j, j', k$  ab

Dabei steht  $\alpha, \alpha'$  für weitere mögliche Quantenzahlen und  $\langle j'; \alpha' || T^{(k)} || j; \alpha \rangle$  für einen noch zu bestimmenden globalen Faktor, der von  $m, q, k$  nicht abhängt.

Beweis: Fällt uns auf Basis der bisherigen Kapitel quasi in den Schoß

Betrachte die Gleichung

$$\langle j'm'; \alpha' | [J_{\pm}, T_q^{(k)}] | jm; \alpha \rangle = \hbar \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} \langle j'm'; \alpha' | T_{q \pm 1}^{(k)} | jm; \alpha \rangle$$

Einsetzen und Auswerten gibt:

$$\begin{aligned} & \hbar \langle j', m' \mp 1; \alpha' | T_q^{(k)} | j, m; \alpha \rangle \sqrt{(j' \pm m')(j' \mp m' + 1)} \\ & - \hbar \langle j', m'; \alpha' | T_q^{(k)} | j, m \pm 1; \alpha \rangle \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \\ & = \hbar \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} \langle j'm'; \alpha' | T_{q \pm 1}^{(k)} | jm; \alpha \rangle \end{aligned}$$

Umsortieren und  $\pm$  Umdrehen gibt

$$\begin{aligned} & \langle j', m' \pm 1; \alpha' | T_q^{(k)} | j, m; \alpha \rangle \sqrt{(j' \mp m')(j' \pm m' + 1)} \\ & = \langle j', m'; \alpha' | T_q^{(k)} | j, m \mp 1; \alpha \rangle \sqrt{(j \pm m)(j \mp m + 1)} \\ & + \langle j', m'; \alpha' | T_{q \mp 1}^{(k)} | j, m; \alpha \rangle \sqrt{(k \pm q)(k \mp q + 1)} \end{aligned}$$

$\Rightarrow$  Man erhält Rekursionsgleichungen von der exakt selben Struktur wie in 4.4.3(v) für die Clebsch-Gordan-Koeffizienten  $\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle$  mit  $(j'm') \hat{=} (jm)$ ,  $(jm) \hat{=} (j_1 m_1)$ ,  $(kq) \hat{=} (j_2 m_2)$

$\Rightarrow$  Lösung ist dieselbe bis auf freien Vorfaktor.

(*"The same equations have the same solutions."*)

Den Vorfaktor nennen wir  $\frac{1}{\sqrt{2j+1}} \langle j'; \alpha' || T^{(k)} || j; \alpha \rangle \quad \checkmark$

Anwendungen: Allgemein: Streuung und Störungstheorie

Matrixelemente spielen dort eine wichtige Rolle. Mit Hilfe des Wigner-Eckart Theorems kann man sie oft signifikant vereinfachen!

Beispiel: Auswahlregeln bei Strahlungsübergängen (Kapitel 5)

## 4.6 Anwendungsbeispiele

Beispiele für die Bedeutung des Spins und der Addition von Drehimpulsen in der Atom- und Molekülphysik

### 4.6.1 Helium-Atom

System: Kern (zweifach geladen) und zwei Elektronen 1,2.

(Annahme: Kern sehr viel schwerer als Elektronen  
 $\leadsto$  effektiv zwei Teilchen im Zentralpotential).

Hamiltonoperator  $H = H_1 + H_2 + H_{12}$   
 mit  $H_i = \vec{p}_i^2/2m - 2e^2/r$ ,  $H_{12} = e^2/|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ .

Suche Grundzustand.

Wegen  $[H, \vec{S}] = 0$  (Gesamtspin) gilt: Eigenzustand zu  $\vec{S}^2$ .

$\leadsto$  Strategie: Suche Zustand niedrigster Energie zu vorgegebenem Gesamtspin, optimiere dann den Gesamtspin.

- (i) Vorab: Zustandsvektoren für Einteilchen-System ohne Spin (nur Bahn) mit Hamiltonoperator  $H_i$ :  
 $\rightarrow$  im Prinzip wie Wasserstoffatom, reskalierte Ladung ( $e^2 \rightarrow 2e^2$ ).  
 $\rightarrow$  gebundene Zustände mit Energie-Eigenwerten  $E_n = -\frac{(2e^2)^2 m}{2\hbar^2 n^2}$  (vgl. 2.3)  
 und zugehörigen Eigenvektoren  $|\Phi_n\rangle$

- (ii) Zweiteilchensystem ohne Elektronen-Wechselwirkung:  $H_{12} = 0$ .

Gesamtspin  $S = 0$  (Singulett)

$\rightarrow$  Spinanteil des Gesamtzustands antisymmetrisch.

$\rightarrow$  Bahnanteil symmetrisch:

Niedrigste Energie:  $|\psi_0\rangle = |\Phi_1\rangle|\Phi_1\rangle$  mit  $E = 2E_1$ .

Gesamtspin  $S = 1$  (Triplett)

$\rightarrow$  Spinanteil des Gesamtzustands symmetrisch.

$\rightarrow$  Bahnanteil antisymmetrisch.

$\leadsto$  Kombination  $|\psi_0\rangle = |\Phi_1\rangle|\Phi_1\rangle$  nicht erlaubt.

$\leadsto$  Zustand niedrigster Energie:  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\Phi_1\rangle|\Phi_2\rangle - |\Phi_2\rangle|\Phi_1\rangle)$

mit Energie  $E = E_1 + E_2$ .

$\Rightarrow$  Singulettzustand günstiger!

- (iii) Beitrag der Elektronen-Wechselwirkung

Abschätzung: Energie-Eigenvektoren bleiben ungefähr gleich.

Energie  $\langle H \rangle = \langle \psi_0 | H | \psi_0 \rangle = 2E_0 + \langle \psi_0 | H_{12} | \psi_0 \rangle$

Konkrete Berechnung:

Einteilchen-Wellenfunktion  $\Phi_1(\vec{r}) = \mathcal{N} e^{-2r/a_0}$  ( $a_0 = \hbar^2/mc^2$ ).

Zwei Teilchen:  $\psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Phi_1(\vec{r}_1)\Phi_1(\vec{r}_2) = \mathcal{N}^2 e^{-2(r_1+r_2)/a_0}$

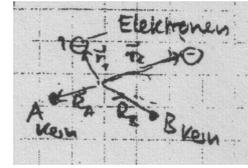
$\Rightarrow \Delta E \approx \langle \psi_0 | H_{12} | \psi_0 \rangle = \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 H_{12} \psi_0^2 = \dots = \frac{5}{4} m e^4 / \hbar^2$ .

Vergleiche mit  $E = 2E_1 \Rightarrow \Delta E/E \approx 5/16 = 0.31$

(experimentell  $\Delta E/E = 0.274$ ).

### 4.6.2 Wasserstoffmolekül und Austauschwechselwirkung

Hier: In sogenannter Heitler-London-Näherung



System: Zwei Kerne A,B und 2 Elektronen 1,2

Hamiltonoperator  $H = H_A(\vec{r}_1, \vec{p}_1) + H_B(\vec{r}_2, \vec{p}_2) + H_{AB}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$

$$\text{mit } H_{A,B}(\vec{r}_i, \vec{p}_i) = \frac{\vec{p}_i^2}{2m} - \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_{A,B}|}$$

$$H_{AB}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{R}_B|} - \frac{e^2}{|\vec{r}_2 - \vec{R}_A|} + \frac{e^2}{|\vec{R}_A - \vec{R}_B|} + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

(Zuordnung Kern A  $\leftrightarrow$  Elektron 1; Kern B  $\leftrightarrow$  Elektron 2 willkürlich, beliebig)

$H$  vertauscht mit Gesamtspin  $\vec{S}$  ( $[H, \vec{S}] = 0$ ).

→ Suche Eigenvektoren mit definiertem Gesamtspin  $\vec{S}$ .

→ Eigenvektoren faktorisieren nach Spin- und Bahnanteil.

#### Heitler-London-Ansatz

(i) Betrachte zuerst den Fall  $|\vec{R}_A - \vec{R}_B| \rightarrow \infty$

Konstruiere Energie-Eigenvektoren zu niedrigsten Energie-Eigenwerten

- Bahnanteil setzt sich aus Einteilchen- Grundzustandsvektoren  $|\varphi_A\rangle, |\varphi_B\rangle$  von  $H_A, H_B$  zusammen. Es gilt  $\langle \varphi_A | \varphi_B \rangle = 0$  (Zugehörige Wellenfunktionen überlappen nicht).
- Nur ein Elektron pro Kern (wg Elektronenabstoßung)
- Zustandsvektor insgesamt muss antisymmetrisch sein.

Gesamtspin  $S = 0$

→ Spinanteil: Singulett  $|\chi_{\text{sing}}\rangle$ , antisymmetrisch

~> Bahnanteil muss symmetrisch sein

$$\rightarrow |\Psi_s\rangle = |\chi_{\text{sing}}\rangle \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}(|\varphi_A\rangle_1 |\varphi_B\rangle_2 + |\varphi_B\rangle_1 |\varphi_A\rangle_2)$$

Gesamtspin  $S = 1$

→ Spinanteil: Im Triplet  $|\chi_{\text{trip}}\rangle$ , symmetrisch

~> Bahnanteil muss antisymmetrisch sein

$$\rightarrow |\Psi_t\rangle = |\chi_{\text{trip}}\rangle \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}(|\varphi_A\rangle_1 |\varphi_B\rangle_2 - |\varphi_B\rangle_1 |\varphi_A\rangle_2)$$

Zustandsvektoren  $|\Psi_s\rangle, |\Psi_t\rangle$  sind wegen  $\langle \varphi_A | \varphi_B \rangle = 0$  normiert und entartet bzgl.  $H \Rightarrow$  haben alle die Energie  $2E_1$  mit  $E_1 =$  Grundzustandsenergie des Wasserstoffatoms

(ii) Bringe nun Kerne näher zusammen:  $|\vec{R}_A - \vec{R}_B| < \infty$

Näherung:  $|\Psi_s\rangle$  und  $|\Psi_t\rangle$  beschreiben die Zustände niedrigster Energie nach wie vor in guter Näherung.

Aber:  $\langle \varphi_A | \varphi_B \rangle \neq 0 \Rightarrow |\Psi_{t,s}\rangle$  nicht mehr normiert.

Abschätzung der Energie:  $E_{t,s} = \frac{\langle \Psi_{t,s} | H | \Psi_{t,s} \rangle}{\langle \Psi_{t,s} | \Psi_{t,s} \rangle}$

Konkret in Ortsdarstellung:

Einteilchenwellenfunktion:  $\varphi_{A,B}(\vec{r}) = \mathcal{N} \exp(-\frac{1}{a_0}|\vec{r} - \vec{R}_{A,B}|)$

Zweiteilchenwellenfunktion (Bahnanteil):

$$\psi_{t,s}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_A(\vec{r}_1)\varphi_B(\vec{r}_2) \pm \varphi_A(\vec{r}_2)\varphi_B(\vec{r}_1))$$

(... Zwischenrechnung ...)

$$\langle \Psi_{t,s} | \Psi_{t,s} \rangle = 1 \pm S^2 \text{ mit } S = \int d\vec{r} \varphi_A(\vec{r}) \varphi_B(\vec{r})$$

$$\langle \Psi_{t,s} | H | \Psi_{t,s} \rangle = \underbrace{\langle \Psi_{t,s} | H_A + H_B | \Psi_{t,s} \rangle}_{2E_1(1 \pm S^2)} + \underbrace{\langle \Psi_{t,s} | H_{AB} | \Psi_{t,s} \rangle}_{Q \pm A}$$

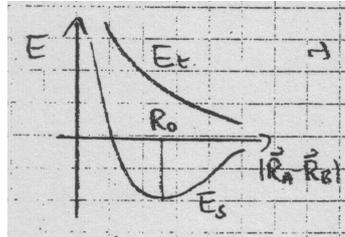
mit  $Q$ : „Coulombenergie“ und  $A$ : „Austauschenergie“

$$Q = \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \varphi_A(\vec{r}_1)^2 \varphi_B(\vec{r}_2)^2 H_{AB}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

$$A = \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \varphi_A(\vec{r}_1) \varphi_B(\vec{r}_1) \varphi_A(\vec{r}_2) \varphi_B(\vec{r}_2) H_{AB}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

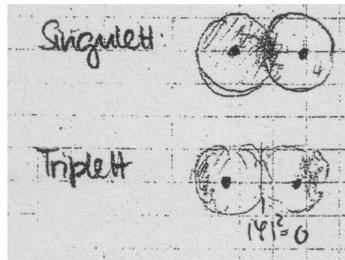
$$\Rightarrow E_{t,s} = 2E_1 + \frac{Q \pm A}{1 \pm S^2}$$

Nach Auswertung der Integrale erhält man netto:



~ Singulettzustand ist immer günstiger als Triplettzustand!

Anschaulich:



Singulett: Elektronendichte hat Maximum zwischen Kernen

~ Elektronen profitieren von beiden Kernen.

Triplett: Elektronendichte hat Minimum zwischen Kernen

~ Elektronen sehen je nur einen Kern ~ ungünstiger!

Fazit: Zwei wichtige quantenmechanische Phänomene!

### (1) Austauschwechselwirkung

$E_t - E_s > 0$ , begünstigt Singulettzustand (Spins  $\uparrow\downarrow$ )

⇒ Effektive Wechselwirkung zwischen Spins, erzeugt von

- Pauli-Prinzip (Symmetrisierungspostulat)
- Coulomb-Wechselwirkung

Keine magnetische Wechselwirkung

(wird nicht über magnetische Momente vermittelt).

Nach demselben Prinzip funktionieren auch alle ferromagnetische Wechselwirkungen in Materie. Mechanismen im Detail unterschiedlich, im Prinzip gleich.

### (2) Chemische Bindung

Im Singulettzustand wird  $E_s$  negativ und nimmt bei einem Abstand  $R_0$  ein Minimum an.

⇒ Elektronen binden Kerne aneinander. Molekülbindung

## 4.7 Wissensfragen

110. Wodurch ist ein Drehimpulsoperator  $\vec{J}$  definiert?
111. Welche Bedeutung haben die Drehimpulsquantenzahlen  $j$  und  $m$ ? Welche Werte können sie annehmen?
112. Was versteht man unter einem Spin?
113. Erklären Sie den Stern-Gerlach Versuch.
114. Was ist die Spinorschreibweise? Welche Form hat der Spinoperator zum Spin 1/2 in der Spinorschreibweise?
115. Welche Form haben die Pauli-Matrizen?
116. Wie lautet die Pauli-Gleichung?
117. Wie verhält sich der Erwartungswert  $\langle \vec{S} \rangle$  eines Spins unter Drehung?
118. Wie verhält sich ein Spinzustandsvektor unter Drehung, z.B. unter einer Drehung um 180 Grad? 360 Grad?
119. Was versteht man unter "Addition von Drehimpulsen"? Wozu braucht man sie?
120. Was sind Clebsch-Gordan-Koeffizienten?
121. Welche Werte kann die Quantenzahl  $j$  des Gesamtdrehimpulses in einem System aus zwei gekoppelten Drehimpulsen mit Quantenzahlen  $j_1$  und  $j_2$  annehmen? Wie kann man die Antwort anschaulich interpretieren?
122. Wie sehen die Eigenzustände zum Gesamtspin in einem System zweier gekoppelter Spin 1/2 aus?
123. Erklären Sie die Begriffe Singulett und Triplett und diskutieren Sie die Symmetrieeigenschaften.
124. Was versteht man unter einem sphärischen Tensoroperator?
125. Erläutern Sie das Wigner-Eckart Theorem.
126. Erklären Sie Ursprung und Wirkung der Austauschwechselwirkung im Wasserstoffmolekül.
127. Erklären Sie Ursprung und Wirkungsweise der chemischen Bindung im Wasserstoffmolekül.



# Kapitel 5

## Näherungsverfahren

© Copyright 2020 Friederike Schmid<sup>1</sup>

Problem: Exakte Lösung der Schrödingergleichung oft nicht möglich

→ Entwicklung von Näherungsverfahren notwendig

- Ermöglichen analytische Behandlung von Näherungslösungen
- Ausgangspunkt für numerische Behandlung

(Beispiel: Kapitel 4.6.2 S.113 - Heitler-London-Näherung)

- Abschätzung der Grundzustandsenergie über  $\langle \tilde{\Psi} | H | \tilde{\Psi} \rangle$ , wobei  $|\tilde{\Psi}\rangle$  ein Näherungsansatz für Grundzustand ist
- Näherungsverfahren, bislang aber sehr unsystematisch )

In diesem Kapitel sollen verschiedene Näherungsverfahren eingeführt werden:

- 5.1 S.117, 5.2 S.126: Störungsrechnung (“perturbative,, Ansätze)  
Systematischer Zugang für den Fall, dass das betrachtete System einem exakt lösbaren System zumindest ähnlich ist.
- 5.3 S.133: Nichtperturbative Ansätze
  - 5.3.1 S.133: Variationsrechnung (Heitler-London Ansatz verfeinert)  
Grundzustand wird erraten und dann noch optimiert
  - 5.3.2 S.134: Adiabatische Näherung  
Näherung für langsam variierendes zeitabhängiges Potential  
→ Geometrische Phasenfaktoren (Berry-Phase)

### 5.1 Stationäre Störungsrechnung

Systematisches Näherungsverfahren für den Fall, dass das betrachtete System einem exakt lösbaren System mit Hamiltonoperator  $H_0$  sehr ähnlich ist.

$$\boxed{H = H_0 + \varepsilon V} \quad \|\varepsilon V\| \text{ klein}$$

Fragestellung hier: Wie verschieben sich Eigenwerte und Eigenvektoren?

<sup>1</sup>Prof. Dr. Friederike Schmid, Vorlesung Quantenmechanik (I), Universität Mainz, SS 2023.  
Letzte Änderung der PDF-Datei am 31.05.2023.

Beispiele: Wasserstoffatom mit ZusatztermenVorab: Erinnerungen und Ergänzungen zum Wasserstoffatom

## • Kapitel 2.3 S.38

→ Eigenwertproblem des Hamiltonoperators  $H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r}$   
 exakt gelöst: Eigenvektoren  $|\Psi_{nlm_l(m_s)}\rangle$ ; Eigenwerte  $E_n$   
 Energieniveaus entartet bzgl. Quantenzahlen  $l, m_l$   
 (und  $m_s$ : Spin kommt noch dazu)

## • Kapitel 4.4 S.105

→ Alternative Eigenvektoren  $|\Psi_{nljm}\rangle$   
 zu  $(H_0, \vec{L}^2, \vec{J}^2, J_z)$  mit  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$

## • Kapitel 3.4.3 S.81

Isotropie des Raums → Entartung bzgl. Quantenzahl m

( denn: Sei  $|\Psi_{nljm}\rangle$  Eigenvektor zu  $H_0$  mit Eigenwert  $E_n$ .

Isotropie des Raums →  $[H_0, \vec{J}] = 0 \Rightarrow [H_0, J_{\pm}] = 0$

$\Rightarrow J_{\pm}|\Psi_{nljm}\rangle \propto |\Psi_{nlj, m\pm 1}\rangle$  Eigenvektor zu  $H_0$  mit demselben  $E_n$  )

↪ m-Entartung kann nur aufgehoben werden, wenn Isotropie des Raums gebrochen ist.

Entartung bzgl.  $j$  und  $l$  weniger zwingend

(i) Stark-Effekt

Wasserstoff im elektromagnetischen Feld  $\vec{E} = \text{const}$

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi \Rightarrow \phi = -\vec{E}\vec{r} \Rightarrow H = H_0 - e\phi = H_0 + e\vec{E}\vec{r}$$

NB:  $\vec{E}$ -Feld bricht Isotropie des Raums

→ m-Entartung kann aufgehoben werden

Experimentelle Beobachtung

$n = 1$ : Verschiebung des Energieniveaus um Betrag  $\propto |E|^2$   
 (quadratischer Stark-Effekt)

$n > 1$ : i.A. Verschiebung des Energieniveaus um Betrag  $\propto |E|$   
 (linearer Stark-Effekt)

(ii) Feinstruktur der Wasserstoffspektren

Experimentelle Beobachtung: Auch ohne elektrisches Feld sind Energieniveaus zu gleichem  $n$  nicht völlig entartet.

Aufspaltung  $\leftrightarrow$  Feinstruktur

Grund: „Spin-Bahn-Kopplung“: Relativistischer Effekt

Bahndrehimpuls des Elektrons erzeugt am Ort des Elektrons ein magnetisches Moment, das mit dem magnetischen Moment des Spins wechselwirkt.

↪ Zusatzterm im Hamiltonoperator:

$$\begin{aligned} H &= H_0 + g \frac{e^2}{(2mc)^2} \cdot \frac{1}{r^3} \cdot \vec{L}\vec{S} \\ &= H_0 + g \frac{e^2}{(2mc)^2} \cdot \frac{1}{r^3} \cdot \frac{1}{2}(\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2) \end{aligned}$$

NB: Isotropie des Raums bleibt natürlich bestehen

$\Rightarrow [H, \vec{J}] = 0$ ; m-Entartung bleibt.

Frage: Wie kann man mit solchen Situationen systematisch umgehen?

Abstrakte Formulierung des Problems

Gegeben ein Hamiltonoperator  $H_0$

mit bekannten Eigenvektoren  $|k\rangle$  und Eigenwerten  $E_k^0$   
 („ $k$ “ kann auch „multidimensionale“ Quantenzahl sein,  
 z.B.  $k = (nljm)$ )

→ In  $H_0$ -Darstellung können beliebige Matrixelemente  
 von beliebigen Operatoren berechnet werden.

Frage: Wie wirkt sich eine kleine Störung  $\varepsilon V$  des Hamiltonoperators auf  
 Eigenvektoren und Eigenwerte aus?

Ansatz: Entwicklung nach Potenzen von  $\varepsilon$  bzw.  $\|\varepsilon V\|$

Konkret:

Gestörter Hamiltonoperator:  $H = H_0 + \varepsilon V$

Betrachte Zustandsvektor  $|n\rangle$ , Eigenwert  $E_n^0$  mit  $H_0|n\rangle = E_n^0|n\rangle$

Störung führt das über in:  $\begin{matrix} |n\rangle & \rightarrow & |\Psi\rangle \\ E_n^0 & \rightarrow & E \end{matrix}$  mit  $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$

Behandlung hängt davon ab, ob Eigenwert  $E_n^0$  entartet ist

### 5.1.1 Nichtentarteter Fall: Eigenwert $E_n^0$ nicht entartet

Konkret fordern wir:  $\langle n|\varepsilon V|n\rangle \ll |E_{n\pm 1}^0 - E_n^0|$  und  $\frac{\langle k|\varepsilon V|n\rangle}{|E_n^0 - E_k^0|} \ll 1 \quad \forall k \neq n$

Verfahren:

- Konstruiere geeignete Rekursionsgleichungen für  $|\Psi\rangle$  und  $E$

Normiere  $\langle n|\Psi\rangle = 1$  (aus praktischen Gründen)  $\rightarrow \langle \Psi|\Psi\rangle \neq 1$

$$\leadsto \begin{cases} |\Psi\rangle = |n\rangle + \varepsilon \sum_{k \neq n} |k\rangle \frac{\langle k|V|\Psi\rangle}{E - E_k^0} \\ E = E_n^0 + \varepsilon \langle n|V|\Psi\rangle \end{cases}$$

(Herleitung:  $|\Psi\rangle = \sum_k |k\rangle \langle k|\Psi\rangle = |n\rangle \underbrace{\langle n|\Psi\rangle}_1 + \sum_{k \neq n} |k\rangle \langle k|\Psi\rangle$ )

$$\begin{aligned} \text{Es gilt: } \langle k|H|\Psi\rangle &= E \langle k|\Psi\rangle = \langle k|H_0|\Psi\rangle + \varepsilon \langle k|V|\Psi\rangle = E_k^0 \langle k|\Psi\rangle + \varepsilon \langle k|V|\Psi\rangle \\ \Rightarrow \langle k|\Psi\rangle &= \varepsilon \frac{\langle k|V|\Psi\rangle}{E - E_k^0} \quad \checkmark \quad \xrightarrow{k \neq n} \underbrace{\langle n|\Psi\rangle}_1 = \varepsilon \frac{\langle n|V|\Psi\rangle}{E - E_n^0} \quad \checkmark \end{aligned}$$

- Sukzessive Anwendung liefert Entwicklung nach  $\varepsilon$  !

$\Rightarrow$  Ordnungen:

$$\underline{\text{Null:}} \quad |\Psi^{(0)}\rangle = |n\rangle; \quad E^{(0)} = E_n^0 \quad (\text{Fall } \varepsilon = 0)$$

$$\begin{aligned} \underline{\text{Eins:}} \quad |\Psi^{(1)}\rangle &= |n\rangle + \varepsilon \sum_{k \neq n} |k\rangle \frac{\langle k|V|\Psi^{(0)}\rangle}{E^{(0)} - E_k^0} = |n\rangle + \varepsilon \sum_{k \neq n} |k\rangle \frac{\langle k|V|n\rangle}{E_n^0 - E_k^0} \\ E^{(1)} &= E_n^0 + \varepsilon \langle n|V|\Psi^{(0)}\rangle = E_n^0 + \varepsilon \langle n|V|n\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{Zwei: } |\Psi^{(2)}\rangle &= |n\rangle + \varepsilon \sum_{k \neq n} |k\rangle \frac{\langle k|V|\Psi^{(1)}\rangle}{E^{(1)} - E_k^0} && \text{(bis Ordnung } \varepsilon^2) \\
&= |\Psi^{(1)}\rangle + \varepsilon^2 \sum_{k \neq n} |k\rangle \left( \sum_{k' \neq n} \frac{\langle k|V|k'\rangle \langle k'|V|n\rangle}{(E_n^0 - E_k^0)(E_n^0 - E_{k'}^0)} - \frac{\langle k|V|n\rangle \langle n|V|n\rangle}{E_n^0 - E_k^0} \right) \\
E^{(2)} &= E_n^0 + \varepsilon \langle n|V|\Psi^{(1)}\rangle && = E^{(1)} + \varepsilon^2 \sum_{k \neq n} \frac{\langle n|V|k\rangle \langle k|V|n\rangle}{E_n^0 - E_k^0} \\
\text{N: } |\Psi^{(N)}\rangle &= |n\rangle + \varepsilon \sum_{k \neq n} |k\rangle \frac{\langle k|V|\Psi^{(N-1)}\rangle}{E^{(N-1)} - E_k^0} && \text{(bis Ordnung } \varepsilon^N) \\
E^{(N)} &= E_n^0 + \varepsilon \langle n|V|\Psi^{(N-1)}\rangle
\end{aligned}$$

Abschließend: Normierung des Zustandsvektors  $|\Psi^{(N)}\rangle \rightarrow |\tilde{\Psi}\rangle = \frac{|\Psi^{(N)}\rangle}{\sqrt{\langle \Psi^{(N)}|\Psi^{(N)}\rangle}}$

Bemerkung: Wichtigstes Ergebnis für die Praxis

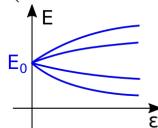
$$\rightarrow \text{Energiekorrektur erster Ordnung: } E^{(1)} = \langle n|H|n\rangle$$

### 5.1.2 Entarteter Fall

$E_n^0$  sei nun  $g$ -fach entartet  $\rightarrow$  Eigenraum der Dimension  $g$

Störung hebt Entartung im allgemeinen auf

(es sei denn, Symmetriegründe sprechen dagegen)



$\Rightarrow$  Aus dem Eigenraum werden  $g$  orthogonale Zustandsvektoren  $|n_i\rangle$  „ausgewählt“, die sich bei Einschalten der Störung zu neuen Eigenvektoren  $|\Psi_i\rangle$  von  $H$  entwickeln

$$\begin{pmatrix} |n_i\rangle \\ E_n^0 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} |\Psi_i\rangle \\ E_i \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad H|\Psi_i\rangle = E_i|\Psi_i\rangle$$

$\Rightarrow$  Diese Zustandsvektoren  $|n_i\rangle$  müssen Ausgangspunkt der Störungsreihe sein.

Fragen:

- Wie ermittelt man die Zustandsvektoren  $|n_i\rangle$  ?
- Wie entwickelt man danach die Störungsreihe?

Antwort: Hängt davon ab, in welcher Ordnung von  $\varepsilon$  Entartung aufgehoben wird.

(0) Vorbemerkung: Wenn der Übergang  $|n_i\rangle \rightarrow |\Psi_i\rangle$  stetig sein soll, dann müssen die Matrixelemente der Störung,  $\langle n_i|V|n_j\rangle$ , im Eigenraum von  $E_n^0$  diagonal sein:  $\langle n_i|V|n_j\rangle = V_i\delta_{ij}$

$$\text{(denn: } \langle n_j|H|\Psi_i\rangle = E_i\langle n_j|\Psi_i\rangle = E_n^0\langle n_j|\Psi_i\rangle + \varepsilon\langle n_j|V|\Psi_i\rangle$$

$$\Rightarrow (E_i - E_n^0)\langle n_j|\Psi_i\rangle = \varepsilon\langle n_j|V|\Psi_i\rangle$$

Im Grenzfall  $\varepsilon \rightarrow 0$  ist  $\frac{E_i - E_n^0}{\varepsilon} \rightarrow V_i$  (Zahl);  $|\Psi_i\rangle \rightarrow |n_i\rangle$  lt. Voraussetzung

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} \frac{E_i - E_n^0}{\varepsilon} \langle n_j|\Psi_i\rangle \\ \langle n_j|V|\Psi_i\rangle \end{pmatrix} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \begin{pmatrix} V_i \langle n_j|n_i\rangle = V_i\delta_{ij} \\ \langle n_j|V|n_i\rangle \end{pmatrix} \Rightarrow \langle n_i|V|n_j\rangle = V_i\delta_{ij} \quad \checkmark$$

- (i) Falls  $V_i \neq V_j$  für alle  $i, j$ , sind damit alle Zustandsvektoren  $|n_i\rangle$  eindeutig bestimmt. In diesem Fall ist Entartung in Ordnung  $\varepsilon$  aufgehoben

$$\frac{E_i - E_n^0}{\varepsilon} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} V_i \quad \Rightarrow \quad E_i = E_n^0 + \varepsilon V_i$$

- (ii) Anderenfalls müssen weitere Bedingungen an  $|n_i\rangle$  gestellt werden.

Betrachte hier ausführlich nur Fall (i)

### Verfahren

- Bestimme zuerst  $|n_i\rangle$  so, dass  $\langle n_i|V|n_j\rangle = V_i\delta_{ij}$

Matrixelemente  $V_{lm} = \langle \nu_l|V|\nu_l\rangle$  seien in einer Basis  $|\nu_l\rangle$  des Eigenraums von  $E_n^0$  bekannt ( $l = 1, \dots, g$ )

Diagonalisiere  $g \times g$  Matrix  $\mathbf{V}$

$$(\text{Eigenwertgleichung: } \sum_{l=1}^g (\langle \nu_l|V|\nu_l\rangle - V\delta_{ml})\langle \nu_l|n\rangle = 0)$$

→ Eigenwerte  $V_i$  und Eigenvektoren  $\langle \nu_l|n_i\rangle$

⇒ Neue Basis  $|n_i\rangle = \sum_{l=1}^g |\nu_l\rangle\langle \nu_l|n_i\rangle$ . Für diese gilt:  $\langle n_i|V|n_j\rangle = V_i\delta_{ij}$

- Konstruiere dann wieder Rekursionsgleichung für  $|\Psi_i\rangle$ ,  $E_i$

Normierung wieder  $\langle n_i|\Psi_i\rangle = 1$

$$\begin{aligned} E_i &= E_n^0 + \varepsilon \langle n_i|V|\Psi_i\rangle \\ |\Psi_i\rangle &= |n_i\rangle + \varepsilon \sum_{n_j \neq n_i} |n_j\rangle f_{ij} + \varepsilon \sum_{k \notin \{n_1 \dots n_g\}} |k\rangle \frac{\langle k|V|\Psi_i\rangle}{E_i - E_k^0} \\ \text{mit } f_{ij} &= \frac{1}{(V_i - V_j)} \sum_{k \notin \{n_1 \dots n_g\}} \frac{\langle k|V|\Psi_i\rangle}{E_i - E_k^0} (\langle n_j|V|k\rangle - \langle n_i|V|k\rangle \langle n_j|\Psi_i\rangle) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (\text{Herleitung: } |\Psi_i\rangle = |n_i\rangle + &\underbrace{\sum_{n_j \neq n_i} |n_j\rangle \langle n_j|\Psi_i\rangle}_{\text{Zustandsvektoren im Eigenraum}} + \underbrace{\sum_{k \notin \{n_1 \dots n_g\}} |k\rangle \langle k|\Psi_i\rangle}_{\text{andere Zustandsvektoren}} \end{aligned}$$

Es gilt:  $\langle m|H|\Psi_i\rangle = E_i \langle m|\Psi_i\rangle = E_m^0 \langle m|\Psi_i\rangle + \varepsilon \langle m|V|\Psi_i\rangle$

⇒ (i)  $m = n_i$ :  $E_i = E_n^0 + \varepsilon \langle n_i|V|\Psi_i\rangle$  ✓ (wegen Normierung)

(ii)  $m = k \notin \{n_1 \dots n_g\}$ :  $\varepsilon \langle k|V|\Psi_i\rangle = (E_i - E_k^0) \langle k|\Psi_i\rangle \Rightarrow \langle k|\Psi_i\rangle = \varepsilon \frac{\langle k|V|\Psi_i\rangle}{(E_i - E_k^0)}$

(iii)  $m = n_j \neq n_i$ :  $\varepsilon \langle n_j|V|\Psi_i\rangle = (E_i - E_n^0) \langle n_j|\Psi_i\rangle = \varepsilon \langle n_i|V|\Psi_i\rangle \langle n_j|\Psi_i\rangle$  (\*)  
 $\varepsilon$  kürzt sich heraus ⇒ Weitere Entwicklung nötig!

$$\langle n_j|V|\Psi_i\rangle = \underbrace{\sum_{l=1}^g \langle n_j|V|n_l\rangle \langle n_l|\Psi_i\rangle}_{V_j \langle n_j|\Psi_i\rangle} + \sum_{k \notin \{n_1 \dots n_g\}} \langle n_j|V|k\rangle \langle k|\Psi_i\rangle$$

$$\langle n_i|V|\Psi_i\rangle = V_i \underbrace{\langle n_i|\Psi_i\rangle}_1 + \sum_{k \notin \{n_1 \dots n_g\}} \langle n_i|V|k\rangle \langle k|\Psi_i\rangle$$

in (\*) einsetzen

$$\Rightarrow \langle n_j|\Psi_i\rangle (V_i - V_j) = \sum_{k \notin \{n_1 \dots n_g\}} (\langle n_j|V|k\rangle - \langle n_i|V|k\rangle \langle n_j|\Psi_i\rangle) \underbrace{\langle k|\Psi_i\rangle}_{(ii)}$$

$$\stackrel{(ii)}{\Rightarrow} \langle n_j|\Psi_i\rangle = \frac{\varepsilon}{V_i - V_j} \sum_{k \notin \{n_1 \dots n_g\}} \frac{\langle k|V|\Psi_i\rangle}{E_i - E_k^0} (\langle n_j|V|k\rangle - \langle n_i|V|k\rangle \langle n_j|\Psi_i\rangle) \quad \checkmark$$

$O(\varepsilon)$

- Sukzessive Anwendung der Rekursionsgleichungen erzeugt wieder eine Störungsreihe

⇒ Ordnungen

$$\text{Null: } |\Psi_i^{(0)}\rangle = |n_i\rangle; \quad E_i^{(0)} = E_n^0 \quad (\text{Fall } \varepsilon = 0)$$

$$\begin{aligned} \text{Eins: } E_i^{(1)} &= E_n^0 + \varepsilon \langle n_i | V | n_i \rangle = E_n^0 + \varepsilon V_i \\ |\Psi_i^{(1)}\rangle &= |n_i\rangle + \varepsilon \sum_{n_j \neq n_i} |n_j\rangle \frac{1}{V_i - V_j} \sum_{k \notin \{n_1, \dots, n_g\}} \frac{\langle n_j | V | k \rangle \langle k | V | \Psi_i \rangle}{E_n^0 - E_k^0} \\ &\quad + \varepsilon \sum_{k \notin \{n_1, \dots, n_g\}} |k\rangle \frac{\langle k | V | n_i \rangle}{E_n^0 - E_k^0} \end{aligned}$$

Abschließend: Wieder Normierung von  $|\Psi^{(N)}\rangle$  notwendig

Dies gilt für den Fall (i), dass die Entartung in Ordnung  $\varepsilon$  aufgehoben wird bzw.  $V_i \neq V_j$  für alle  $i, j$ . Falls das nicht der Fall ist, müssen mit Hilfe analoger Überlegungen zusätzliche Bedingungen an  $|n_i\rangle$  und neue Rekursionsgleichungen ermittelt werden.

Bemerkung zu Fall (ii): Falls z.B. Entartung in Ordnung  $\varepsilon^2$  aufgehoben wird, lautet die Bedingung an  $|n_i\rangle$ , dass  $\sum_k \frac{\langle n_j | V | k \rangle \langle k | V | \Psi_i \rangle}{E_n^0 - E_k^0}$  diagonal sein muss.

$$\begin{aligned} (\text{denn: } (E_i - E_n^0) \langle n_j | \Psi_i \rangle &= \langle n_j | V | \Psi_i \rangle \varepsilon \\ &= \varepsilon \underbrace{\langle n_j | V | n_i \rangle}_{V_i \delta_{ij}} + \underbrace{\sum_{l=1}^g \langle n_j | V | n_l \rangle \langle n_l | \Psi_i \rangle}_{V_j \langle n_j | \Psi_i \rangle} + \varepsilon \sum_{k \notin \{n_1, \dots, n_g\}} \frac{\langle n_j | V | k \rangle \langle k | V | \Psi_i \rangle}{E_i - E_k^0} \\ \Rightarrow \frac{1}{\varepsilon} (E_i - E_n^0 - \varepsilon V_i) \langle n_j | \Psi_i \rangle &= \underbrace{V_i \delta_{ij}}_{0 \text{ für } i \neq j} + \underbrace{(V_i - V_j)}_{0 \text{ lt. Voraussetzung}} \langle n_j | \Psi_i \rangle + \varepsilon \sum_k \frac{\langle n_j | V | k \rangle \langle k | V | \Psi_i \rangle}{E_i - E_k^0} \\ \Rightarrow (i \neq j) \quad \frac{1}{\varepsilon^2} (E_i - E_n^0 - \varepsilon V_i) \langle n_j | \Psi_i \rangle &= \sum_k \frac{\langle n_j | V | k \rangle \langle k | V | \Psi_i \rangle}{E_i - E_k^0} \\ \varepsilon \rightarrow 0 \quad \frac{1}{\varepsilon^2} (E_i - E_n^0 - \varepsilon V_i) \rightarrow C_i \text{ (Zahl); } \langle n_j | \Psi_i \rangle &\rightarrow \delta_{ij}; \quad |\Psi_i \rangle \rightarrow |n_i\rangle; \quad E_i \rightarrow E_n^0 \\ &\Rightarrow \sum_k \frac{\langle n_j | V | k \rangle \langle k | V | n_i \rangle}{E_n^0 - E_k^0} = C_i \delta_{ij} \text{ diagonal} \quad \checkmark \end{aligned}$$

Bemerkung wieder: Wichtigstes Ergebnis für die Praxis (gilt generell)

$$\rightarrow \text{Energiekorrektur erster Ordnung: } E_i^{(1)} = \langle n_i | H | n_i \rangle$$

mit  $\langle n_i | H | n_i \rangle \leftrightarrow$  Eigenwerte der  $g \times g$  Matrix für  $H$  im Eigenraum (bzgl.  $H_0$ ) von  $E_n^0$ .

### 5.1.3 Quasientarteter Fall

Angenommen, die Energieniveaus in einem System sind nicht entartet, aber

$$|\langle n | \varepsilon V | n \rangle| \geq \simeq |E_{n\pm 1}^0 - E_n^0|$$

↪ Störungsentwicklung kann so nicht durchgeführt werden.

Ausweg (Trick):

Konstruiere alternativen, exakt lösbaren Hamiltonoperator  $H'_0$ , in dem Energieniveaus echt entartet sind. Verfahre dann weiter nach 5.1.2 S.120.

Beispiel:  $H_0$  habe quasientartete Eigenwerte  $\{E_{n_1} \cdots E_{n_g}\}$   
und zugehörige Eigenvektoren  $|n_1\rangle \cdots |n_g\rangle$

$$\text{Entwickle } H_0 = \sum_{j=1}^g |n_j\rangle\langle n_j| \cdot E_{n_j} + \sum_{k \notin \{n_1 \cdots n_g\}} |k\rangle\langle k| \cdot E_k$$

$$\text{Definiere } H'_0 = \bar{E}_n \sum_{j=1}^g |n_j\rangle\langle n_j| + \sum_{k \notin \{n_1 \cdots n_g\}} |k\rangle\langle k| \cdot E_k$$

wobei  $\bar{E}_n$  beliebig (z.B. Mittelwert von  $\{E_{n_1} \cdots E_{n_g}\}$ )

$\Rightarrow H'_0$  ist exakt lösbar

- hat dieselben Eigenvektoren wie  $H_0$

- Eigenwert  $\bar{E}_n$  ist  $g$ -fach entartet.

## 5.1.4 Anwendungsbeispiele

### 5.1.4.1 Anharmonischer Oszillator

Harmonischer Oszillator mit Zusatztermen

Ausgangspunkt: Eindimensionaler harmonischer Oszillator  $H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ .

(1) Kubischer Zusatzterm:  $H = H_0 + \epsilon V$  mit  $V = \hbar\omega(\sqrt{m\omega/2\hbar} x)^3$

Trick: Drücke Störung durch Leiteroperatoren aus:  $V = \frac{1}{8}\hbar\omega (a + a^\dagger)^3$ .

Störungstheorie nullter Ordnung:  $E^{(0)} = E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ ,  $|\psi^{(0)}\rangle = |n\rangle$

Störungstheorie erster Ordnung:

$$E^{(1)} - E^{(0)} = \epsilon \langle n|V|n\rangle = 0.$$

$\leadsto$  Keine Energieverschiebung in der Ordnung  $\epsilon$ .

(Grund: Symmetrie  $-\int dx x |\phi_n(x)|^2 = 0 \quad \forall \phi(x)$ .)

$$\begin{aligned} |\psi^{(1)}\rangle - |\psi^{(0)}\rangle &= \epsilon \sum_{k \neq n} |k\rangle \frac{\langle k|V|n\rangle}{E_n - E_k} \\ &= \dots = \frac{\epsilon}{8} \left( \frac{1}{3}|n-3\rangle \sqrt{n}\sqrt{n-1}\sqrt{n-2} + 3|n-1\rangle \sqrt{n^3} \right. \\ &\quad \left. - 3|n+1\rangle \sqrt{n+1}^3 - \frac{1}{3}|n+3\rangle \sqrt{n+1}\sqrt{n+2}\sqrt{n+3} \right) \end{aligned}$$

Störungstheorie zweiter Ordnung:

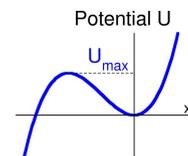
$$E^{(2)} - E^{(0)} = \epsilon \langle n|V|\psi^{(1)}\rangle = \dots = -\frac{1}{64}\hbar\omega\epsilon^2(11 + 30n(1+n)).$$

$\leadsto$  Verschiebung der Niveaus in der Ordnung  $\epsilon^2$ .

Aber: Das Potentialminimum bei  $x = 0$  ist nach Einschalten der Störung

nur noch ein lokales Minimum. Nach langer Zeit tunnelt das Teilchen aus dem Minimum heraus.

$\leadsto$  Die Störungstheorie gibt allenfalls Auskunft über metastabile Zustände, nicht über die echten stationären Zustände (die in diesem Potential gar nicht definiert sind).



$\leadsto$  Die Störungsreihe konvergiert mit Sicherheit nicht.

NB: Für Energiezustände oberhalb des Potentialmaximums muss Störungstheorie schon in den unteren Ordnungen zusammenbrechen.

(Konkret:  $V_{\max} = \frac{4}{27\epsilon^2}\hbar\omega$ , entspricht Quantenzahlen  $n \sim 4/27\epsilon^2$ . Für diese Quantenzahlen ist die Energieverschiebung  $E^{(2)} - E^{(0)} \sim -\epsilon^2 \frac{\hbar\omega}{64} 30n^2 \sim -\frac{5}{486} \frac{\hbar\omega}{\epsilon^2}$ , also von der gleichen Größenordnung wie  $V_{\max}$ ).

(2) Zusatzterm vierter Ordnung:  $H = H_0 + \epsilon V$  mit  $V = \hbar\omega(\sqrt{m\omega/2\hbar} x)^4$ .

Ausgedrückt in Leiteroperatoren:  $V = \frac{1}{16}\hbar\omega(a + a^\dagger)^4$ .

Störungstheorie erster Ordnung:

$$E^{(1)} - E^{(0)} = \epsilon \langle n | V | n \rangle = \dots = \hbar\omega \frac{3\epsilon}{16} (1 + 2n(1+n)).$$

↪ Energieverschiebung in der Ordnung  $\epsilon$ .

Aber:  $x = 0$  ist nur für  $\epsilon > 0$  totales Minimum. Für  $\epsilon < 0$  nur lokal.

Störungsreihe ist Potenzreihe in  $\epsilon$ , muss bei  $\epsilon < 0$  zusammenbrechen.

↪ Konvergenzradius muss Null sein, Störungsreihe divergiert!

Konkret: Höhere Ordnungen (nur Grundzustand, ohne Beweis):

$$E_0^{(m)} - E_0^{(m-1)} = -\epsilon^m \hbar\omega \sqrt{\frac{6}{\pi^3}} 3^m \Gamma(m + \frac{1}{2}) (1 - \frac{95}{72} \frac{1}{m} + \mathcal{O}(1/m^2)).$$

↪ Konvergenzradius der Reihe:  $\lim_{m \rightarrow \infty} 1/3(m + 1/2) = 0$ .

↪ Heisst das, die Störungsreihe taugt überhaupt nicht ???

Doch: Glücklicherweise gilt für  $\epsilon > 0$  immer noch "asymptotische Konvergenz": Für die Differenz zwischen der tatsächlichen Lösung  $E(\epsilon)$  und der Störungsreihe  $E^{(m)} = \sum_{k=0}^m c_k \epsilon^k$  gilt:

$$|E - E^{(m)}| \leq c_{m+1} \epsilon^{m+1} \forall m \text{ mit } \lim_{m \rightarrow \infty} c_{m+1} \epsilon^m \rightarrow \infty:$$

Reihenentwicklung OK bis zu einem  $m_{\max}(\epsilon)$ , wird danach schlechter.  
(deshalb: asymptotische Reihe).

Verhalten typisch für Störungsreihen in der Physik: Selten wirklich konvergent, häufig nur asymptotisch konvergent.

↪ Naive Anwendung nur bei niedrigen Ordnungen sinnvoll. Darüber hinaus ist mathematische Analyse notwendig!

Als nächstes: Physikalische Anwendungen: Greife auf Beispiele vom Anfang des Kapitels zurück.

#### 5.1.4.2 Stark-Effekt

Wasserstoff im elektrischen Feld  $\vec{E}$ , Störung  $\epsilon V \hat{=} e\vec{E}\vec{r}$

- Grundzustand:  $n = 1, l = m = 0 \rightarrow$  nicht entarteter Fall  
(Spin-Entartung spielt hier keine Rolle!)

Störungstheorie erster Ordnung liefert:

$$\Delta E = E - E_0 = \langle \psi_{nlm} | (e\vec{E}\vec{r}) | \psi_{nlm} \rangle = \int d\vec{r} (e\vec{E}\vec{r}) |\psi_{nlm}(\vec{r})|^2 = 0$$

(aus Symmetriegründen:  $\vec{r}$  geht ungerade in Integral ein)

$\Rightarrow$  Führende Korrektur zur Grundzustandsenergie ist zweiter Ordnung

$\Rightarrow$  Quadratischer Stark-Effekt:  $\Delta E \propto |\vec{E}|^2$

- Angeregte Zustände: Entartung bzgl.  $l, m \rightarrow$  entarteter Fall  
(zusätzlich zur Spin-Entartung, die hier keine Rolle spielt!)

Störungstheorie erster Ordnung: Diagonalisiere Matrixelemente im Eigenraum des Operators  $H_0$  zum Eigenwert  $E_n^0$

$$\langle \psi_{nlm} | (e\vec{E}\vec{r}) | \psi_{n'l'm'} \rangle = \int d\vec{r} (e\vec{E}\vec{r}) \psi_{nlm}^*(\vec{r}) \psi_{n'l'm'}(\vec{r})$$

Kapitel 2.3 S.38:  $\psi_{nlm}(\vec{r}) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$   
 Nimm OBdA an, dass  $\vec{E} || z \Rightarrow \vec{E} \cdot \vec{r} = |\vec{E}| r \cos(\theta)$

$$= e|\vec{E}| \int_0^\infty dr r^3 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta \cos \vartheta R_{nl}(r) R_{n'l'}(r) Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi) Y_{l'm'}(\vartheta, \varphi)$$

$$\begin{cases} = 0 : & m \neq m' & (Y_{lm} \propto e^{im\varphi} \Rightarrow \int d\varphi Y_{lm}^* Y_{l'm'} = 0) \\ = 0 : & l = l', m = m' & (\text{wie oben: Integral ungerade in } \vec{r}) \\ \neq 0 : & l \neq l', m = m' \end{cases}$$

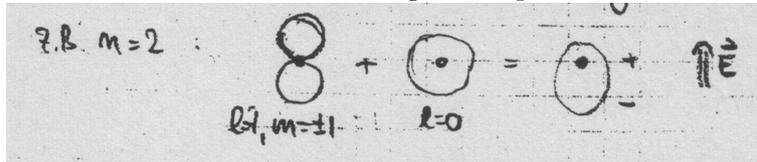
⇒ Es gibt Matrixelemente, die nicht Null sind, demnach hat Matrix auch nichtverschwindende Eigenwerte.

⇒ Führende Korrektur zu Energieeigenwerten ist erster Ordnung

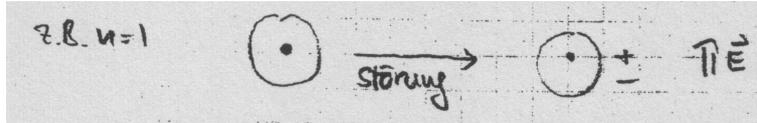
⇒ Linearer Stark-Effekt:  $\Delta E \propto |\vec{E}|$  (für die meisten Niveaus)

Anschauliche Interpretation des Stark-Effekts

- Linearer Stark-Effekt: Ausrichtung von Dipolmomenten



- Quadratischer Stark-Effekt: Induziertes Dipolmoment



**5.1.4.3 Feinstruktur der Wasserstoffspektren**

Wasserstoff mit Spin-Bahn-Kopplung

→ Störung „ $\varepsilon V$ “  $\hat{=} \frac{g}{2} \frac{e^2}{(2mc)^2} \cdot \frac{1}{r^3} (\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2)$

Störungstheorie erster Ordnung - entarteter Fall

(Entartung bzgl. Spin muss hier natürlich berücksichtigt werden)

→ Die Zustandsvektoren, bzgl. derer die Matrixelemente von  $\varepsilon V$  im Eigenraum von  $E_n^0$  diagonal sind, sind gerade die  $|\Psi_{nljm}\rangle$  aus Kapitel 4 S.95:

$$|\Psi_{nljm}\rangle \hat{=} \psi_{nlm+\frac{1}{2}}(\vec{r}) \cdot |-\rangle \sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}} + \psi_{nlm-\frac{1}{2}}(\vec{r}) \cdot |+\rangle \sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}} \text{ für } j = l + \frac{1}{2}$$

$$|\Psi_{nljm}\rangle \hat{=} \psi_{nlm+\frac{1}{2}}(\vec{r}) \cdot |-\rangle \sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}} - \psi_{nlm-\frac{1}{2}}(\vec{r}) \cdot |+\rangle \sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}} \text{ für } j = l - \frac{1}{2}$$

→ Einsetzen und Ausrechnen liefert:

$$\langle \Psi_{nljm} | \varepsilon V | \Psi_{nljm} \rangle = \frac{g}{2} \frac{e^2}{(2mc)^2} \cdot \langle \frac{1}{r^3} \rangle_{nl} (j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4})$$

mit  $\langle \frac{1}{r^3} \rangle_{nl} = \int dr \frac{1}{r} R_{nl}(r)^2$

## 5.2 Zeitabhängige Störungsrechnung

Betrachte nun den Fall einer zeitabhängigen Störung:  $H = H_0 + V(t)$

Typische Anwendung:

Wechselwirkung von Atomelektronen mit elektromagnetischem Feld  
 → Übergänge zwischen Energieniveaus

↪ geeigneter Rahmen für Beschreibung: Wechselwirkungsbild (3.2.2.4 S.65)

Schrödingerbild: Zustandsvektoren  $|\Psi_S(t)\rangle$  zeitabhängig

Heisenbergbild: Zustandsvektoren  $|\Psi_H\rangle$  fest

Hier → langsame Übergänge zwischen Energieniveaus  $|k\rangle$  (fest)

Dynamik von  $|\Psi_W(t)\rangle$  reflektiert Übergänge

### 5.2.1 Wechselwirkungsbild (vergl. 3.2.2.4 S.65)

- Zusammenhang mit dem Schrödingerbild

Zustandsvektoren:  $|\Psi_W(t)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} |\Psi_S(t)\rangle$

Operatoren:  $O_W(t) = e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} O_S e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}$

Speziell:  $H_W(t) = H_0 + e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} V_S(t) e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t} = H_0 + V_W(t)$

Statistischer Operator:  $\rho_W(t) = e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} \rho_S e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}$

- Dynamische Entwicklung: Zeitentwicklungsoperator  $U_W(t, t_0)$

definiert über:  $|\Psi_W(t)\rangle = U_W(t, t_0) |\Psi_W(t_0)\rangle$

erfüllt Bewegungsgleichung:  $i\hbar \frac{d}{dt} U_W(t, t_0) = V_W(t) U_W(t, t_0)$

Interpretation: Übergangswahrscheinlichkeiten

Wahrscheinlichkeit, bei einer Messung eines VSKO als Messwerte die Eigenwerte zum Zustandsvektor  $|k\rangle$  zu messen, ist generell gegeben durch  $\langle k | \rho_W | k \rangle$  (siehe 3.2.1.3 S.58)

Hier: Setze zur Zeit  $t_0$  reinen Zustand  $\rho_W(t_0) = |i\rangle\langle i|$  auf.

Zeitentwicklung:  $|i\rangle \rightarrow U_W(t, t_0)|i\rangle \Rightarrow \rho_W(t) = U_W(t, t_0)|i\rangle\langle i|U_W^\dagger(t, t_0)$

↪ Wahrscheinlichkeit, in diesem System zur Zeit  $t$  Eigenwerte zu  $|f\rangle$  zu messen, ist  $P_{fi} = \langle f | \rho_W(t) | f \rangle = \langle f | U_W(t, t_0) | i \rangle \langle i | U_W^\dagger(t, t_0) | f \rangle$

⇒  $P_{fi} = |\langle f | U_W(t, t_0) | i \rangle|^2$

### 5.2.2 Dyson-Reihe

Ausgangspunkt:  $i\hbar \frac{d}{dt} U_W(t, t_0) = V_W(t) U_W(t, t_0)$

⇒ Formale Integration liefert Integralgleichung

$$U_W(t, t_0) = \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t V_W(t') U_W(t', t_0) dt'$$

→ Kann als Rekursionsgleichung verwendet werden  
(ähnlich den Rekursionsgleichungen in 5.1 S.117)  
Iterative Anwendung generiert Störungsreihe

Konkret:

$$\begin{aligned}
 U_W^{(0)}(t, t_0) &= \mathbb{1} \\
 U_W^{(1)}(t, t_0) &= \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_W(t') U_W^{(0)}(t', t_0) = \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_W(t') \\
 U_W^{(2)}(t, t_0) &= \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_W(t') U_W^{(1)}(t', t_0) \\
 &= \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_W(t') + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t'} dt' dt'' V_W(t') V_W(t'') \\
 &\dots \\
 U_W^{(n)}(t, t_0) &= \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_W(t') U_W^{(n-1)}(t', t_0) \\
 &= U_W^{(n-1)}(t, t_0) + \underbrace{\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt' dt'' \dots dt^{(n)} V_W(t') V_W(t'') \dots V_W(t^{(n)})}_{t > t' > t'' \dots > t^{(n)} > t_0}
 \end{aligned}$$

Beachte Zeitordnung:  $V_W(t')$  und  $V_W(t'')$  dürfen nicht vertauscht werden, da im allgemeinen  $[V_W(t'), V_W(t'')] \neq 0$

### 5.2.3 Anwendung: Störungstheorie erster Ordnung

Betrachte reines System, das zur Zeit  $t \rightarrow -\infty$  im reinen Zustand mit Zustandsvektor  $|i\rangle$  („initial“) ist:  $\rho(t \rightarrow -\infty) = |i\rangle\langle i|$

Dann wird Störung  $V(t)$  eingeschaltet:  $H = H_0 + V(t)$   
Störung ermöglicht Übergänge in  $|f\rangle$  („final“):

Suche Übergangswahrscheinlichkeit  $P_{fi}(t) = |\langle f|U_W(t, -\infty)|i\rangle|^2$  (vgl. 5.1.1 S.119).

Störungstheorie erster Ordnung:

$$\begin{aligned}
 \langle f|U_W(t, -\infty)|i\rangle &= \langle f|\mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' V_W(t')|i\rangle \\
 &= \delta_{fi} + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \langle f|e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t'} V(t') e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t'}|i\rangle \\
 &= \delta_{fi} + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' e^{\frac{i}{\hbar}(E_f - E_i)t'} \langle f|V(t')|i\rangle
 \end{aligned}$$

Definiere  $\omega_{fi} = \frac{1}{\hbar}(E_f - E_i)$  charakteristische Frequenz des Übergangs

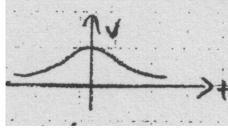
Dann folgt für  $f \neq i$

$$P_{fi}(t) = \left| \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' e^{i\omega_{fi}t'} \langle f|V(t')|i\rangle \right|^2$$

Das soll nun für verschiedene Situationen berechnet werden.

5.2.3.1 Zeitlich begrenzte Störung

$V(t) \rightarrow 0$  für  $t \rightarrow \pm\infty$



⇒ Totale Übergangswahrscheinlichkeit (nach unendlicher Zeit) ist:

$$P_{fi}(\infty) = \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega_{fi}t} |\langle f|V(t)|i\rangle|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |V_{fi}(\omega)|^2$$

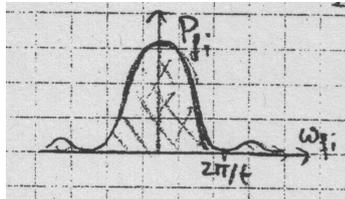
⇒ Ergibt sich aus der Fouriertransformierten des Matrixelements  $\langle f|V(t)|i\rangle$  der Störung !

5.2.3.2 Plötzlich eingeschaltete konstante Störung

$$V(t) = \begin{cases} 0 & : t \leq 0 \\ V & : t > 0 \end{cases}$$

⇒ Übergangswahrscheinlichkeit

$$P_{fi}(t) = \frac{1}{\hbar^2} |\langle f|V|i\rangle|^2 \underbrace{\int_0^t dt' e^{i\omega_{fi}t'}}_{2i e^{i\omega_{fi}t/2} \frac{\sin(\omega_{fi}t/2)}{\omega_{fi}}} = |\langle f|V|i\rangle|^2 4 \frac{\sin^2(\omega_{fi}t/2)}{|\hbar\omega_{fi}|^2}$$



NB: Energie-Zeit-Unschärfe:  
Energieänderung  $\Delta E$  nur möglich  
für Zeiten  $t \cdot \Delta E \lesssim \hbar$

Speziell lange Zeiten  $t \rightarrow \infty$ :  $\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2 \omega t/2}{\omega^2 t/2} = \pi \delta(\omega)$  (Kapitel 2.1.2 S.15)

$$\Rightarrow P_{fi}(t) \stackrel{t \text{ groß}}{\approx} |\langle f|V|i\rangle|^2 \frac{2\pi}{\hbar^2} t \delta(\omega_{fi}) = |\langle f|V|i\rangle|^2 \frac{2\pi}{\hbar} t \delta(E_f - E_i) \quad (*)$$

Bemerkung: Grenzwert  $t \rightarrow \infty$  problematisch, da dann  $P_{fi} \propto t > 1$  wird!

→ Für sehr große Zeiten reicht Störungstheorie erster Ordnung nicht aus, Terme höherer Ordnung müssen berücksichtigt werden!

Aber: Näherung (\*) zulässig für  $\hbar/|E_f - E_i| \ll t \ll \hbar/|\langle f|V|i\rangle|$ .

⇒ In diesem Bereich kann Übergangsrate  $W_{i \rightarrow f} := \frac{d}{dt} P_{fi}(t)$  bestimmt werden:

$$W_{i \rightarrow f} \stackrel{t \rightarrow \infty}{=} \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f|V|i\rangle|^2 \delta(E_f - E_i) \quad \text{Fermis goldene Regel}$$

→ Energieerhaltung: Übergänge nur zwischen Zuständen gleicher Energie

Formulierung für kontinuierliches Energiespektrum:

$$W_{i \rightarrow f} \stackrel{t \rightarrow \infty}{=} \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f|V|i\rangle|^2 \varrho(E_f)|_{E_f \approx E_i} \quad \varrho(E) \text{ Zustandsdichte}$$

## 5.2.3.3 Plötzlich eingeschaltete harmonische Störung

$$V(t) = \begin{cases} 0 & : t \leq 0 \\ v \exp(i\Omega t) + v^\dagger \exp(-i\Omega t) & : t > 0 \end{cases} \quad (v \text{ konstanter Operator})$$

⇒ Übergangswahrscheinlichkeit

$$\begin{aligned} P_{fi}(t) &= \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t dt' e^{i\omega_{fi} t'} \langle f|V(t')|i \rangle \right|^2 \\ &= \frac{1}{\hbar^2} \left| \langle f|v|i \rangle \int_0^t dt' e^{i(\omega_{fi}+\Omega)t'} + \langle f|v^\dagger|i \rangle \int_0^t dt' e^{i(\omega_{fi}-\Omega)t'} \right|^2 \\ &= \frac{4}{\hbar^2} \left| \langle f|v|i \rangle e^{i(\omega_{fi}+\Omega)t/2} \frac{\sin((\omega_{fi}+\Omega)t/2)}{\omega_{fi}+\Omega} \right. \\ &\quad \left. + \langle f|v^\dagger|i \rangle e^{i(\omega_{fi}-\Omega)t/2} \frac{\sin((\omega_{fi}-\Omega)t/2)}{\omega_{fi}-\Omega} \right|^2 \\ &= \underbrace{|\langle f|v|i \rangle|^2 \frac{\sin^2(\omega_{fi}+\Omega)\frac{t}{2}}{(\omega_{fi}+\Omega)^2}}_{\xrightarrow{t \rightarrow \infty} t\pi\delta(\omega_{fi}+\Omega)} + \underbrace{|\langle f|v^\dagger|i \rangle|^2 \frac{\sin^2(\omega_{fi}-\Omega)\frac{t}{2}}{(\omega_{fi}-\Omega)^2}}_{\xrightarrow{t \rightarrow \infty} t\pi\delta(\omega_{fi}-\Omega)} \\ &\quad + 2\Re \left( \langle f|v|i \rangle \langle f|v^\dagger|i \rangle e^{i\Omega t} \right) \underbrace{\frac{\sin(\omega_{fi}+\Omega)\frac{t}{2}}{(\omega_{fi}+\Omega)}}_{\xrightarrow{t \rightarrow \infty} \pi\delta(\omega_{fi}+\Omega)} \underbrace{\frac{\sin(\omega_{fi}-\Omega)\frac{t}{2}}{(\omega_{fi}-\Omega)}}_{\xrightarrow{t \rightarrow \infty} \pi\delta(\omega_{fi}-\Omega)} \\ &\xrightarrow{t \rightarrow \infty} \frac{2\pi}{\hbar^2} t \{ |\langle f|v|i \rangle|^2 \delta(\omega_{fi} + \Omega) + |\langle f|v^\dagger|i \rangle|^2 \delta(\omega_{fi} - \Omega) \} \end{aligned}$$

⇒ Übergangsrate  $W_{i \rightarrow f} := \frac{d}{dt} P_{fi}(t)$

$$W_{i \rightarrow f} \underset{t \rightarrow \infty}{=} \frac{2\pi}{\hbar^2} (|\langle f|v|i \rangle|^2 \delta(\omega_{fi} + \Omega) + |\langle f|v^\dagger|i \rangle|^2 \delta(\omega_{fi} - \Omega))$$

Interpretation:

1. Term  $\delta(\omega + \Omega)$ : stimulierte Emission eines Energiequants
  2. Term  $\delta(\omega - \Omega)$ : Absorption eines Energiequants
- keine Energieerhaltung (Störfeld muss in Bilanz einbezogen werden)

Formulierung für kontinuierliches Energiespektrum:

$$\text{Stimulierte Emission: } W_{i \rightarrow f}^{StE} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f|v|i \rangle|^2 \varrho(E_f)|_{E_f=E_i-\hbar\Omega}$$

$$\text{Absorption: } W_{i \rightarrow f}^A = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f|v^\dagger|i \rangle|^2 \varrho(E_f)|_{E_f=E_i+\hbar\Omega}$$

Wegen  $|\langle f|v|i \rangle|^2 = |\langle i|v^\dagger|f \rangle|^2$  gilt zwischen Absorption (Elektron  $0 \rightarrow 1$ ) und stimulierter Emission (Elektron  $1 \rightarrow 0$ ) die Beziehung:

$$W_{1 \rightarrow 0}^{StE} / W_{0 \rightarrow 1}^A = \varrho(E_0) / \varrho(E_1): \text{„detailliertes Gleichgewicht“}$$

### 5.2.4 Beispiel: Wechselwirkung von Atomen mit klassischem elektromagnetischem Feld

Einzelnes Atomelektron im elektromagnetischen Feld

Polarisation  $\vec{\varepsilon}$  senkrecht zur Ausbreitungsrichtung  $\vec{n}$

Vektorpotential:  $\vec{A} = 2A_0\vec{\varepsilon} \cdot \cos(\frac{\Omega}{c}\vec{n}\vec{r} - \Omega t)$

$$\Rightarrow H = \frac{1}{2m}(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})^2 + e\phi = \underbrace{\frac{\vec{p}^2}{2m}}_{H_0} + e\phi - \underbrace{\frac{e}{mc}\vec{A}\vec{p}}_{V(t)} - \underbrace{\frac{e}{2mc}[\vec{p}, \vec{A}]}_{=0, \text{ da } \vec{\varepsilon} \perp \vec{n}} + \underbrace{\frac{e^2|\vec{A}|^2}{2mc^2}}_{\text{vernachlässigt (2. Ordnung in } A_0\text{)}}$$

$\Rightarrow$  Harmonische Störung  $H = H_0 + V(t)$

mit  $V(t) = v e^{i\Omega t} + v^\dagger e^{-i\Omega t}$

entsprechend 5.2.3.3 S.129

wobei  $v = -\frac{e}{mc}A_0 \exp(i\frac{\Omega}{c}\vec{n} \cdot \vec{r}) \vec{\varepsilon} \cdot \vec{p}$

$\Rightarrow$  Übergangsrate (einsetzen)

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar^2} \frac{e^2}{m^2 c^2} |A_0|^2 |\langle f | e^{i\frac{\Omega}{c}\vec{n} \cdot \vec{r}} \vec{\varepsilon} \cdot \vec{p} | i \rangle|^2 \left\{ \underbrace{\delta(\omega_{fi} - \Omega)}_{\text{Absorption}} + \underbrace{\delta(\omega_{fi} + \Omega)}_{\text{Emission}} \right\}$$

$\Rightarrow$  Absorptionsspektrum

$$\sigma_{\text{Abs}} = \frac{\text{Absorbierte Energie/Zeit}}{\text{Energiefluss}} = \frac{W_{i \rightarrow f} \cdot \hbar \Omega}{\frac{1}{2\pi} |A_0|^2 \frac{\Omega^2}{c}} \quad (\text{„Energiefluss“ siehe E-Dynamik})$$

$$= 4\pi^2 \frac{e^2}{\hbar c} \frac{1}{m^2 \Omega} |\langle f | e^{i\frac{\Omega}{c}\vec{n} \cdot \vec{r}} \vec{\varepsilon} \cdot \vec{p} | i \rangle|^2 \delta(\omega_{fi} - \Omega)$$

Dipolnäherung: in der Praxis oft angewandte wichtige weitere Näherung.

Im Allgemeinen ist die Wellenlänge groß gegen die Atomgröße:

$$\Rightarrow \frac{c}{\Omega} \gg \sqrt{\langle \vec{r}^2 \rangle} \Rightarrow \boxed{e^{i\frac{\Omega}{c}\vec{n} \cdot \vec{r}} \approx 1}$$

$$\Rightarrow \langle f | e^{i\frac{\Omega}{c}\vec{n} \cdot \vec{r}} \vec{\varepsilon} \cdot \vec{p} | i \rangle \approx \langle f | \vec{\varepsilon} \cdot \vec{p} | i \rangle = i m \vec{\varepsilon} \omega_{fi} \langle f | \vec{r} | i \rangle$$

$$(\text{denn: } \vec{p}/m = \frac{1}{i\hbar} [\vec{r}, H_0] \rightarrow \langle f | \vec{p} | i \rangle = \frac{m}{i\hbar} \langle f | \vec{r} H_0 - H_0 \vec{r} | i \rangle = -\frac{m}{i} \omega_{fi} \langle f | \vec{r} | i \rangle \quad \checkmark)$$

$$\Rightarrow \boxed{\sigma_{\text{Abs}} = 4\pi^2 \frac{e^2}{\hbar c} \omega_{fi} |\langle f | \vec{\varepsilon} \cdot \vec{r} | i \rangle|^2 \delta(\omega_{fi} - \Omega)}$$

Folgerungen: Auswahlregeln für Dipolübergänge („E1“-Übergänge)

– Drücke Störung in sphärische Tensoroperatoren  $T_q^k$  aus (vgl. 4.5.1.2)

$$\text{Vektoroperator } \vec{r} \leftrightarrow T_0^1 = r_z, T_{\pm 1}^1 = \mp(r_x \pm ir_y)/\sqrt{2}$$

$$\Rightarrow \vec{\varepsilon} \cdot \vec{r} = \sum_q \tilde{\varepsilon}_q^* T_q^1 \text{ mit } \tilde{\varepsilon}_0 = \varepsilon_z, \tilde{\varepsilon}_{\pm} = (\varepsilon_x \pm i\varepsilon_y)/\sqrt{2}$$

– Es gilt:  $|f\rangle, |i\rangle$  sind Eigenvektoren von  $(\vec{J}^2, J_z)$

$$\Rightarrow |f\rangle = |j'm'; \alpha'\rangle, |i\rangle = |jm; \alpha\rangle, (\text{mit } \alpha: \text{weitere Quantenzahlen})$$

– Verwende Wigner-Eckart Theorem (4.5.2)

$$\Rightarrow \langle f | T_q^1 | i \rangle \propto \langle j'1; mq | j1; j'm' \rangle \text{ (Clebsch-Gordan Koeffizienten)}$$

$\leadsto$  Aus den Eigenschaften der Clebsch-Gordan-Koeffizienten folgt:

Übergänge sind nur möglich (d.h.  $\langle f | \vec{\varepsilon} \cdot \vec{r} | i \rangle \neq 0$ ) für:

- $(j - j') = \pm 1, 0$ ; außer  $j = j' = 0$ , das geht nicht!
- $m = m'$ , falls  $\vec{\varepsilon} \parallel z$ ;  $m = m' \pm 1$ , falls  $\vec{\varepsilon} \perp z$

Wenn die Spin-Bahn-Kopplung vernachlässigt werden kann, gilt entsprechendes für Übergänge von Bahndrehimpuls-Quantenzahlen  $(l, m_l)$

### 5.2.5 Störungstheorie zweiter Ordnung für konstante Störung: Lebensdauer und Linienbreite

Betrachte nun Verweildauer in einem Zustand  $i$  in Gegenwart einer konstanten Störung (d.h. Lebensdauer).

Definiere  $C_i(t) := \langle i|U_W(t, -\infty)|i\rangle$ ; Analysiere  $P_{ii}(t) = |C_i(t)|^2$  bzw.  $\frac{d}{dt}P_{ii}(t)$

#### \* Vorbemerkungen

Es gilt:  $\sum_f P_{fi} = 1 \Rightarrow \frac{d}{dt} \sum_f P_{fi} = 0 \Rightarrow \frac{d}{dt} P_{ii}(t) = -\frac{d}{dt} \sum_{f \neq i} P_{fi}$

$\leadsto$  Mit den Ergebnissen von 5.2.3.2 folgt:

$$\frac{d}{dt} P_{ii}(t) = -\frac{2\pi}{\hbar} \sum_{f \neq i} |\langle f|V|i\rangle|^2 \delta(E_f - E_i) < 0$$

Andererseits: Direkte Anwendung von 5.2.3 für plötzlich eingeschaltete konstante Störung liefert  $C_i(t) = 1 + \frac{1}{i\hbar} \langle i|V|i\rangle t$  ( $\langle i|V|i\rangle$  reell)

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} P_{ii}(t) = \frac{d}{dt} |C_i(t)|^2 = \frac{2}{\hbar^2} \langle i|V|i\rangle^2 t > 0: \text{Widerspruch!}$$

Fehlerquelle: Terme in  $C_i(t)$ , die zweiter Ordnung in  $V$  sind, tragen zu  $\frac{d}{dt} P_{ii}$  mit derselben Ordnung von  $V$  bei wie  $\frac{2}{\hbar^2} \langle i|V|i\rangle^2 t$

$\leadsto$  Systematische Berechnung von Verweildauern und Zerfallszeiten erfordert Störungstheorie zweiter Ordnung.

\* Ansatz: Wir betrachten konstante Störung  $V$ , die aus „technischen“ Gründen nicht plötzlich, sondern adiabatisch eingeschaltet wird:

$$V(t) = \begin{cases} V e^{\eta t} & : t \leq 0 \\ V & : t > 0 \end{cases} \text{ mit } \eta \rightarrow 0^+$$

Zeit  $t$  sei im Folgenden  $t < 0$

\* Überprüfe zunächst Übergänge  $i \rightarrow f \neq i$

Übergangswahrscheinlichkeit:

$$P_{fi}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^t dt' e^{i\omega_{fi}t'} e^{\eta t'} \langle f|V|i\rangle \right|^2 = |\langle f|V|i\rangle|^2 \frac{e^{2\eta t}}{\hbar^2(\omega_{fi}^2 + \eta^2)}$$

Übergangsrate:

$$(\eta \rightarrow 0, \frac{\eta}{\omega^2 + \eta^2} \rightarrow \pi \delta(\omega))$$

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{d}{dt} P_{fi}(t) \xrightarrow{\eta \rightarrow 0} |\langle f|V|i\rangle|^2 \frac{2}{\hbar^2} \pi \delta(\omega_{fi}) = |\langle f|V|i\rangle|^2 \frac{2\pi}{\hbar} \delta(\omega_{E_i - E_f})$$

$\Rightarrow$  man erhält wieder Fermis goldene Regel wie in 5.2.3 S.127

\* Betrachte nun „Verweildauer“ im Zustand  $|i\rangle$

Wir zeigen im Grenzwert  $\eta \rightarrow 0^+$ :  $C_i(t) \sim \exp(-\frac{i}{\hbar} \Delta_i t)$  mit

$$\begin{aligned} \text{Re}(\Delta_i) &= \langle i|V|i\rangle + \sum_{k \neq i} \frac{|\langle i|V|k\rangle|^2}{E_i - E_k} \\ \text{Im}(\Delta_i) &= -\pi \sum_{k \neq i} |\langle i|V|k\rangle|^2 \delta(E_i - E_k) \end{aligned}$$

(Rechnung:

$$C_i(t) \underset{t < 0}{=} \mathbb{1} + \underbrace{\frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' e^{\eta t'} \langle i|V_W(t')|i \rangle}_{\text{1. Ordnung Störungstheorie}} + \underbrace{\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_{-\infty}^t dt' \int_{-\infty}^{t'} dt'' e^{\eta t'} e^{\eta t''} \sum_k \langle i|V_W(t')|k \rangle \langle k|V_W(t'')|i \rangle}_{\text{2. Ordnung Störungstheorie}}$$

$$\text{Benutze: } V_W(t) = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} V e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t}$$

$$= \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar} \langle i|V|i \rangle \int_{-\infty}^t dt' e^{\eta t'} + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_{-\infty}^t dt' \int_{-\infty}^{t'} dt'' \sum_k e^{(i\omega_{ki} + \eta)t'} e^{(-i\omega_{ki} + \eta)t''} \langle i|V|k \rangle \langle k|V|i \rangle$$

$$= \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar} \langle i|V|i \rangle \frac{e^{\eta t}}{\eta} + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \frac{e^{2\eta t}}{2\eta} \left( \frac{1}{\eta} |\langle i|V|i \rangle|^2 + \sum_{k \neq i} \frac{1}{\eta - i\omega_{ki}} |\langle i|V|k \rangle|^2 \right)$$

$$\Rightarrow \frac{dC_i(t)}{dt} / C_i(t) = \dots \text{ (Berechnung und Entwicklung nach Potenzen von } e^{\eta t} \text{)}$$

$$= -\frac{i}{\hbar} \langle i|V|i \rangle e^{\eta t} - \frac{i}{\hbar} \sum_{k \neq i} \frac{1}{E_i - E_k + i\hbar\eta} |\langle i|V|k \rangle|^2 e^{2\eta t} + \dots$$

$$\text{Benutze: } \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{x + i\eta} = P\left(\frac{1}{x}\right) - i\pi\delta(x) \quad (P = \text{Principal Value} = \text{Hauptwert})$$

$$\Rightarrow \frac{dC_i(t)}{dt} / C_i(t) \xrightarrow{\eta \rightarrow 0^+} -\frac{i}{\hbar} \Delta_i$$

$$\text{mit } \Delta_i = \langle i|V|i \rangle + \sum_{k \neq i} |\langle i|V|k \rangle|^2 \left( \frac{1}{E_i - E_k} - i\pi\delta(E_i - E_k) \right)$$

$$\text{Lösung dieser Differentialgleichung } \rightarrow C_i(t) \sim \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \Delta_i t\right) \quad \checkmark$$

$$\text{Es folgt: } \boxed{C_i(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \text{Re}(\Delta_i) t} e^{+\frac{1}{\hbar} \text{Im}(\Delta_i) t}}$$

Interpretation:

$\text{Re}(\Delta_i)$ : Verschiebung der Energieniveaus

(gleicher Ausdruck wie 5.1.1 S.119)

$\text{Im}(\Delta_i)$ : „Zerfall“ des Zustandes  $\leftrightarrow$  Linienbreite

$$P_{ii}(t) = e^{-t/\tau_i} \text{ mit } \tau_i = -\hbar / (2\text{Im}(\Delta_i))$$

Bemerkung: Für kleine  $t$  ist  $\frac{d}{dt} \sum_f P_{fi}(t) = 0$  erfüllt.  $\checkmark$

### 5.3 Nichtperturbative Näherungsverfahren

Wir kommen zu Näherungsverfahren, die nicht auf einer Entwicklung nach kleinen Parametern beruhen.

#### 5.3.1 Variationsverfahren

Ausgangspunkt: Hamiltonoperator  $H$ , beliebiger Zustandsvektor  $|\phi\rangle$

Definiere Funktional  $I[\phi] = \frac{\langle \phi | H | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle}$

Dann gilt:

(i)  $I[\phi] \geq E_0$  (Grundzustandsenergie) für alle  $|\phi\rangle$

(denn:

$$\langle \phi | H | \phi \rangle = \sum_n \underbrace{\langle \phi | H | n \rangle \langle n | \phi \rangle}_{\text{Eigenvektoren von } H} = \sum_n E_n \langle \phi | n \rangle \langle n | \phi \rangle \geq E_0 \sum_n \langle \phi | n \rangle \langle n | \phi \rangle = E_0 \langle \phi | \phi \rangle \quad \checkmark)$$

(ii) Allgemeiner: Eigenvektoren von  $H$  machen  $I[\phi]$  extremal.

(Beweis: Betrachte  $|\phi\rangle = |k\rangle + \varepsilon|\eta\rangle$ , wobei  $|k\rangle$  Eigenvektor von  $H$  und  $\varepsilon|\eta\rangle$  eine

$$\begin{aligned} \text{kleine Abweichung. } I[\phi] &= \frac{\langle \phi | H | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} = \frac{E_k \langle k | k \rangle + E_k (\langle k | \eta \rangle \varepsilon + \langle \eta | k \rangle \varepsilon^*) + |\varepsilon|^2 \langle \eta | H | \eta \rangle}{\langle k | k \rangle + (\langle k | \eta \rangle \varepsilon + \langle \eta | k \rangle \varepsilon^*) + |\varepsilon|^2 \langle \eta | \eta \rangle} \\ &= E_k \frac{1 + (\langle k | \eta \rangle \varepsilon + \langle \eta | k \rangle \varepsilon^*) + |\varepsilon|^2 \langle \eta | H | \eta \rangle / E_k}{1 + (\langle k | \eta \rangle \varepsilon + \langle \eta | k \rangle \varepsilon^*) + |\varepsilon|^2 \langle \eta | \eta \rangle} \\ &= E_k + |\varepsilon|^2 \frac{\langle \eta | H | \eta \rangle - E_k \langle \eta | \eta \rangle}{1 + (\langle k | \eta \rangle \varepsilon + \langle \eta | k \rangle \varepsilon^*) + |\varepsilon|^2 \langle \eta | \eta \rangle} = E_k + O(\varepsilon^2) \quad \checkmark) \end{aligned}$$

$\leadsto$  Legt Lösungsverfahren nahe:

„Rate“ Testfunktion  $|\phi\rangle$ , die von Parametern  $\lambda_1, \dots, \lambda_n$  abhängt

Berechne  $I[\phi] = J(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$  und minimiere

Beispiel: Variationsverfahren für Grundzustand von Wasserstoff

$$\text{Rate } |\phi\rangle \propto e^{-r/\lambda}; \text{ Minimiere } J(\lambda); \rightarrow \lambda = \frac{\hbar^2}{me^2} \quad (\text{vgl. 2.3.4 S.43})$$

Anwendung: Vor allem Vielteilchensysteme

$|\phi\rangle$  wird als Produkt von Einteilchenzustandsvektoren angesetzt

Einfaches Produkt  $\rightarrow$  Hartree-Verfahren  $|\Psi\rangle \propto |\varphi_1\rangle_1 \cdots |\varphi_N\rangle_N$

Antisymmetrisches Produkt (Vielelektronensysteme)

$$\rightarrow \text{Hartree-Fock-Verfahren} \quad |\Psi\rangle \propto \begin{vmatrix} |\varphi_1\rangle_1 & \cdots & |\varphi_1\rangle_N \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ |\varphi_N\rangle_1 & \cdots & |\varphi_N\rangle_N \end{vmatrix}$$

$I[\phi]$  wird minimiert bzgl. Einteilchenwellenfunktionen  $\varphi_j(\vec{r})$

### 5.3.2 Adiabatische Näherung und Berry-Phase

#### 5.3.2.1 Adiabatische Näherung

Die adiabatische Näherung kommt zum Einsatz, wenn der Hamiltonoperator als Funktion einer kontinuierlichen Variable  $\vec{R}(t)$  langsam variiert.

Ausgangspunkt: Hamiltonoperator hängt von einer (i.A. mehrdimensionalen) Variablen  $\vec{R}$  kontinuierlich ab, d.h.  $H = H(\vec{R})$ .

↪ Als Funktion von  $\vec{R}$  variieren auch Energie-Eigenwerte und Eigenvektoren,  $E_n(\vec{R})$  und  $|n(\vec{R})\rangle$ .

Einfachheitshalber betrachten wir hier nur den Fall, dass die Eigenwerte für kein  $\vec{R}$  entartet sind.

↪ Die Eigenwerte  $E_n(\vec{R})$  und Eigenvektoren  $|n(\vec{R})\rangle$  entwickeln sich als Funktion von  $\vec{R}$  dann kontinuierlich, aber getrennt voneinander.

↪ Zu jeder Zeit  $t$  kann man  $H(\vec{R}(t))$  einen Satz Eigenwerte  $E_n(\vec{R}(t))$  und zugehöriger Eigenvektoren  $|n(\vec{R}(t))\rangle$  zuordnen. Die Ordnung der Eigenwerte  $E_0(\vec{R}(t)) < E_1(\vec{R}(t)) < \dots$  bleibt erhalten.

In diesem Kapitel verwenden wir das Schrödingerbild.

Adiabatische Näherung:

Betrachte Vektor  $|\psi_n(t)\rangle$  mit Anfangsbedingung  $|\psi_n(0)\rangle = |n(\vec{R}(0))\rangle$

Wenn  $\vec{R}(t)$  hinreichend langsam variiert, folgt  $|\psi_n(t)\rangle$  dem Vektor  $|n(\vec{R}(t))\rangle$  adiabatisch, d.h.  $|\psi_n(t)\rangle \approx e^{i\Phi_n(t)} |n(\vec{R}(t))\rangle$  mit noch zu bestimmender Phase  $\Phi_n(t)$  (↪ keine Übergänge  $n \rightarrow m$  zwischen Energieniveaus).

(vgl. Fermi's goldene Regel, 5.2.3.2 S.128: „Konstante“ Störungen induzieren keine Übergänge zwischen Niveaus verschiedener Energie)

⇒ Dann gilt (Schrödingerbild):  $\Phi_n(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t dt' E_n(\vec{R}(t')) + \gamma_n(t)$   
 „Triviale Phase“    Zusatzphase

– Triviale Phase: Entspricht Phasenfaktor  $e^{-\frac{i}{\hbar} E_n(\vec{R})t}$ , falls  $\vec{R}(t)$  konstant.

– Zusatzphase:  $\gamma_n(t) = i \int_0^t dt' \langle n(\vec{R}(t')) | \frac{d}{dt'} n(\vec{R}(t')) \rangle$

(Rechnung: Verwende  $\psi_n(t) = e^{i\Phi_n(t)} |n(\vec{R}(t))\rangle$ )

Es gilt  $i\hbar \partial_t |\psi_n(t)\rangle = H(\vec{R}(t)) |\psi_n(t)\rangle$ ,  $H(\vec{R}(t)) |n(\vec{R}(t))\rangle = E_n(\vec{R}(t)) |n(\vec{R}(t))\rangle$

⇒  $H(\vec{R}(t)) |\psi_n(t)\rangle = e^{i\Phi_n(t)} H(\vec{R}(t)) |n(\vec{R}(t))\rangle = e^{i\Phi_n(t)} E_n(\vec{R}(t)) |n(\vec{R}(t))\rangle$

$= i\hbar \partial_t |\psi_n(t)\rangle = i\hbar \partial_t [e^{i\Phi_n(t)} |n(\vec{R}(t))\rangle]$

$= i\hbar e^{i\Phi_n(t)} [(i\partial_t \Phi_n(t)) |n(\vec{R}(t))\rangle + \frac{d}{dt} |n(\vec{R}(t))\rangle]$

    | mit  $\partial_t \Phi_n(t) = -\frac{1}{\hbar} E_n(\vec{R}(t)) + \partial_t \gamma_n(t)$

$= e^{i\Phi_n(t)} (E_n(\vec{R}(t)) - \hbar \partial_t \gamma_n(t)) |n(\vec{R}(t))\rangle + i\hbar e^{i\Phi_n(t)} \frac{d}{dt} |n(\vec{R}(t))\rangle$

⇒  $\partial_t \gamma_n(t) |n(\vec{R}(t))\rangle = i \frac{d}{dt} |n(\vec{R}(t))\rangle$

Multipliziere von links mit  $\langle n(\vec{R}(t)) |$

⇒  $\partial_t \gamma_n(t) = i \langle n(\vec{R}(t)) | \frac{d}{dt} |n(\vec{R}(t))\rangle$

⇒  $\gamma_n(t) = \int_0^t dt' i \langle n(\vec{R}(t')) | \frac{d}{dt'} |n(\vec{R}(t'))\rangle$     ✓)

„Geometrische“ Interpretation der Zusatzphase:

Definiere  $\vec{A}_n(\vec{R}) := -\text{Im}\langle n(\vec{R}) | \nabla_{\vec{R}} n(\vec{R}) \rangle$  Berry-Potential  
 (mit  $\nabla_{\vec{R}} = (\frac{\partial}{\partial R_1}, \frac{\partial}{\partial R_2}, \dots)$ )

$\leadsto$  Alternativer Ausdruck für  $\gamma_n(t)$  als Wegintegral

$$\gamma_n(t) = \int_{\vec{R}(0)}^{\vec{R}(t)} d\vec{R} \cdot \vec{A}_n(\vec{R})$$

$\leadsto$  Hängt nur noch vom zurückgelegten Weg im Parameterraum  $\{\vec{R}\}$  ab, nicht mehr von der genauen Zeitentwicklung  $\vec{R}(t)$  entlang des Pfades. Daher oft auch „geometrische Phase“ genannt

(Rechnung:

- $\frac{d}{dt} |n(\vec{R}(t))\rangle = \frac{d\vec{R}}{dt} \cdot |\nabla_{\vec{R}} n(\vec{R}(t))\rangle$   
 $\Rightarrow \gamma_n(t) = i \int_0^t dt' \langle n(\vec{R}(t)) | \frac{d}{dt} n(\vec{R}(t)) \rangle = i \int_0^t dt' \frac{d}{dt'} \vec{R} \cdot \langle n(\vec{R}(t)) | \nabla_{\vec{R}} n(\vec{R}(t)) \rangle$   
 $= i \int d\vec{R} \cdot \langle n(\vec{R}) | \nabla_{\vec{R}} n(\vec{R}) \rangle$
- Es gilt  $\langle n(\vec{R}) | n(\vec{R}) \rangle \equiv 1$   
 $\Rightarrow \nabla_{\vec{R}} \langle n(\vec{R}) | n(\vec{R}) \rangle = \langle \nabla_{\vec{R}} n(\vec{R}) | n(\vec{R}) \rangle + \langle n(\vec{R}) | \nabla_{\vec{R}} n(\vec{R}) \rangle$   
 $= \langle n(\vec{R}) | \nabla_{\vec{R}} n(\vec{R}) \rangle^* + \langle n(\vec{R}) | \nabla_{\vec{R}} n(\vec{R}) \rangle = 2\text{Re}\langle n(\vec{R}) | \nabla_{\vec{R}} n(\vec{R}) \rangle = 0$   
 $\Rightarrow \langle n(\vec{R}) | \nabla_{\vec{R}} n(\vec{R}) \rangle$  ist rein imaginär  
 $\Rightarrow i \langle n(\vec{R}) | \nabla_{\vec{R}} n(\vec{R}) \rangle = -\text{Im}\langle n(\vec{R}) | \nabla_{\vec{R}} n(\vec{R}) \rangle \quad \checkmark$

Fazit: Adiabatische Näherung für langsam variierenden Hamiltonoperator

- Übergänge zwischen Energie-Eigenzuständen werden vernachlässigt.
- $\leadsto$  Zustandsvektoren drehen sich mit Energie-Eigenvektoren dynamisch mit, bekommen aber einen zusätzlichen nichttrivialen Phasenfaktor (gilt allgemein).  
 Falls die zeitliche Änderung durch Kopplung an einen langsam variierenden Parameter  $\vec{R}(t)$  erzeugt wird, dann hängt dieser nur vom zurückgelegten Weg im Parameterraum  $\vec{R}$  ab.
- Bemerkung: Im allgemeinen Fall hängt dieser von der (willkürlichen) Festlegung der Phase von  $|n(\vec{R})\rangle$  ab.

### 5.3.2.2 Berry-Phase und Berry-Krümmung

Wir interessieren uns nun speziell für den Fall, dass  $\vec{R}(t)$  einen Zyklus durchläuft,  $\vec{R}(T) = \vec{R}(0)$  (Berry, 1983).

\* Berry-Phase: Geometrischer Phasenfaktor für geschlossene Wege in  $\{\vec{R}\}$

$\leadsto$  Gleichung:  $\gamma_n(C) = \oint_C d\vec{R} \cdot \vec{A}_n(\vec{R})$   $C(t)$ : geschlossener Weg

Anmerkung: Die Berry-Phase  $\gamma_n(C)$  hängt natürlich noch vom Weg  $C$  ab, aber nicht mehr von der willkürlichen Wahl der Phase von  $|n(\vec{R})\rangle$  ab. Wähle z.B.  $|\tilde{n}(\vec{R})\rangle = e^{i\Lambda(\vec{R})} |n(\vec{R})\rangle$ .

$$\Rightarrow \vec{A}_n(\vec{R}) = -\text{Im}\langle \tilde{n}(\vec{R}) | \nabla_{\vec{R}} \tilde{n}(\vec{R}) \rangle = \vec{A}_n(\vec{R}) - \nabla_{\vec{R}} \Lambda \text{ ändert sich.}$$

Aber:  $\gamma_n(C)$  bleibt gleich für geschlossene Wege.

$\leadsto$  Die Berry-Phase ist eichinvariant!

\* Berry-Feldstärke  $\vec{\Omega}_n$ : Spezialfall, dass  $\vec{R}$  dreidimensional ist

$\leadsto$  Anwendung des Stokeschen Satzes

$$\Rightarrow \boxed{\gamma_n(C) = \int_{S(C)} d\vec{S} \cdot \vec{\Omega}_n(\vec{R})} \quad \text{mit} \quad \boxed{\vec{\Omega}_n(\vec{R}) := \nabla_{\vec{R}} \times \vec{A}_n(\vec{R})}$$

und  $S(C)$  eine von  $C$  umrandete Fläche

Alternativer Ausdruck für  $\vec{\Omega}_n$  ohne Vektoren  $|\nabla_{\vec{R}} n\rangle$

$$\boxed{\vec{\Omega}_n(\vec{R}) = -\text{Im} \sum_{n' \neq n} \frac{\langle n(\vec{R}) | [\nabla_{\vec{R}} H(\vec{R})] | n'(\vec{R}) \rangle \langle n'(\vec{R}) | [\nabla_{\vec{R}} H(\vec{R})] | n(\vec{R}) \rangle}{(E_n(\vec{R}) - E_{n'}(\vec{R}))^2}}$$

(Rechnung: Lasse zur besseren Lesbarkeit Argumente  $(\vec{R})$  weg und notiere  $\nabla \hat{=} \nabla_{\vec{R}}$ )

- Zeige erst  $\vec{\Omega}_n = -\text{Im} \sum_{n' \neq n} \langle \nabla n | n' \rangle \times \langle n' | \nabla n \rangle$   

$$[\nabla \times n | \nabla | n]_l = \sum_{j,k} \epsilon_{jkl} \partial_j \langle n | \partial_k n \rangle = \sum_{j,k} \epsilon_{jkl} \langle \partial_j n | \partial_k n \rangle + \underbrace{\sum_{j,k} \epsilon_{jkl} \langle n | \partial_j \partial_k n \rangle}_0$$

$$= \sum_{j,k} \epsilon_{jkl} \sum_{n'} \langle \partial_j n | n' \rangle \langle n' | \partial_k n \rangle$$

$$\Rightarrow \nabla \times \langle n | \nabla n \rangle = \sum_{n'} \langle \nabla n | n' \rangle \times \langle n' | \nabla n \rangle$$
 Weiterhin gilt:  $\langle \nabla n | n \rangle \times \langle n | \nabla n \rangle = \langle n | \nabla n \rangle^* \times \langle n | \nabla n \rangle = -\langle n | \nabla n \rangle \times \langle n | \nabla n \rangle$ ,  
 da  $\langle n | \nabla n \rangle$  rein imaginär (siehe zweite Rechnung in 5.3.2)  
 $\Rightarrow$  Term  $\langle \nabla n | n \rangle \times \langle n | \nabla n \rangle = 0$  kann weggelassen werden.
- Schreibe  $\langle n' | \nabla n \rangle$  bzw.  $\langle \nabla n | n' \rangle$  um.  

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle \Rightarrow \nabla[H|n\rangle] = \nabla[E_n|n\rangle]$$

$$\Rightarrow [\nabla H]|n\rangle + H\nabla|n\rangle = [\nabla E_n]|n\rangle + E_n\nabla|n\rangle$$

$$\Rightarrow \underbrace{\langle n' | H - E_n | \nabla n \rangle}_{(E_{n'} - E_n)\langle n' | \nabla n \rangle} + \langle n' | \nabla H | n \rangle = \nabla \underbrace{\langle n' | n \rangle}_0$$

$$\Rightarrow \langle n' | \nabla n \rangle = \frac{\langle n' | \nabla H | n \rangle}{E_n - E_{n'}}, \quad \langle \nabla n | n' \rangle = \langle n' | \nabla n \rangle^* = \frac{\langle n | \nabla H | n' \rangle}{E_n - E_{n'}}, \quad \checkmark$$

\* Anmerkungen

–  $\vec{\Omega}_n(\vec{R})$  ist eichinvariant.

(Im Ausdruck für  $\vec{\Omega}_n(\vec{R})$  kürzen sich zusätzliche Phasenfaktoren in  $|n\rangle, |n'\rangle$  heraus.)

–  $\sum_n \vec{\Omega}_n(\vec{R}) = 0$  („Wie man leicht sieht ...“ – Übungsaufgabe)

– Die geometrische Phase ist besonders prominent, falls irgendwo im Parameterraum  $\{\vec{R}\}$  Eigenwerte entartet sind,  $E_{n'}(\vec{R}^*) = E_n(\vec{R}^*)$  für ein  $\vec{R}^*$ . (Der Pfad  $\vec{R}(t)$  sollte  $\vec{R}^*$  laut Voraussetzung nicht enthalten, aber die Fläche  $S(C)$  kann durch die Umgebung von  $\vec{R}^*$  gelegt werden.)

– Es gibt eine Analogie in der Differentialgeometrie (zyklischer Paralleltransport von Vektoren auf gekrümmten Oberflächen). Dies ist ein zweiter Grund, warum man von einer „geometrischen“ Phase spricht. Die Analogie motiviert die Einführung der

$$\text{Berry-Krümmung: } \boxed{\Omega_{n,\mu\nu} = \partial_{R_\mu} A_\nu - \partial_{R_\nu} A_\mu},$$

die eng mit der Berry-Feldstärke verknüpft ist ( $\Omega_{n,\mu\nu} = \sum_k \epsilon_{\mu\nu k} [\vec{\Omega}_n]_k$ )

– Mit Hilfe dieser Analogie können die obigen Überlegungen auch für höherdimensionale Parameter  $\vec{R}$  verallgemeinert werden.

### 5.3.2.3 Anwendungen

\* Beispiel: Neutron im langsam veränderlichen Magnetfeld, d.h.  $\vec{R} \hat{=} \vec{B}$

– Relevanter Teil des Hamiltonoperators (vgl. 4.3.3 und 4.3.4.3):

$$H_{\vec{B}} = -\frac{g_n}{\hbar} \mu_N \vec{S} \cdot \vec{B} \quad \text{mit } \mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p c}: \text{ Kernmagneton}$$

$$\Rightarrow \text{Eigenwerte: } E = -g_n \mu_N m B \quad \text{mit } m = \pm \frac{1}{2}, \quad \nabla_{\vec{B}} H = -\frac{g_n}{\hbar} \mu_N \vec{S}$$

– Berechnung der Berry-Feldstärke

Zunächst betrachte den Fall, dass  $\vec{B}$  parallel zur  $z$ -Achse ist

$$\Rightarrow \left| \frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \left| -\frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\text{und } \langle m | \vec{S} | m' \rangle = \frac{\hbar}{2} \langle m | \vec{\sigma} | m' \rangle$$

$$\Rightarrow \vec{\Omega}_m(\vec{B}) = -\text{Im} \left( \sum_{m \neq m'} \frac{1}{4B^2} \frac{\langle m' | \vec{\sigma} | m \rangle \times \langle m | \vec{\sigma} | m' \rangle}{(m-m')^2} \right)$$

$$\text{mit } (m-m')^2 \equiv 1 \quad \text{und } \langle \frac{1}{2} | \vec{\sigma} | -\frac{1}{2} \rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \langle -\frac{1}{2} | \vec{\sigma} | \frac{1}{2} \rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \langle \frac{1}{2} | \vec{\sigma} | -\frac{1}{2} \rangle \times \langle -\frac{1}{2} | \vec{\sigma} | \frac{1}{2} \rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 2i \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \vec{\Omega}_{\pm \frac{1}{2}} = \mp \frac{1}{2B^2} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\text{Verallgemeinert: } \vec{\Omega}_{\pm \frac{1}{2}} = \mp \frac{1}{2B^2} \hat{B} \quad (\text{mit } \hat{B} = \vec{B}/B)$$

– Berechnung der Berry-Phase

$$\gamma_{\pm \frac{1}{2}} = \int_{S(C)} d\vec{S} \cdot \vec{\Omega}_{\pm \frac{1}{2}} \Rightarrow \gamma_{\pm \frac{1}{2}}(C) = \mp \frac{1}{2} \int_{S(C)} d\vec{S} \cdot \hat{B} \frac{1}{B^2} = \mp \frac{1}{2} \angle(C)$$

$\angle(C)$  entspricht dem Raumwinkel der von  $C$  eingeschlossenen Kurve.

\* Weitere Anwendungen

Born-Oppenheimer-Näherung: Elektronenzustände entwickeln sich im langsam variierenden Potential der Kerne mit  $\vec{R}(t)$ .

(Dieses Beispiel motiviert auch die gängige Notation  $\vec{R}(t)$  für die langsam variierende kontinuierliche Variable.)

Berry-Phasen in anderen Kontexten

z.B. Festkörperphysik und Bandstruktur

( $\vec{R} \leftrightarrow \vec{k}$ : Wellenvektor des Bandes)

## 5.4 Wissensfragen

128. Erklären Sie die Grundidee der stationären Störungsrechnung. Unter welchen Umständen kommt sie als Lösungsmethode in Frage?
129. Wie lautet der Ausdruck für die Verschiebung der Energieniveaus in erster Ordnung Störungsrechnung?
130. Welches Problem tritt bei der Anwendung dieses Ausdrucks auf, wenn die Energieniveaus des ungestörten Systems entartet sind? Skizzieren Sie den Ansatz zur Lösung dieses Problems.
131. Diskutieren Sie die Konvergenzeigenschaften typischer Störungsreihen in der Physik. Konvergieren sie? Begründen Sie Ihre Antwort.
132. Erklären Sie den Begriff der asymptotischen Konvergenz.
133. Erklären Sie den Stark-Effekt.
134. Erklären Sie den Zusammenhang zwischen der Spin-Bahn-Kopplung und der Feinstruktur des Spektrums von Wasserstoff.
135. Was ist das Wechselwirkungsbild? Wie hängt es mit dem Schrödingerbild zusammen?
136. Welcher Bewegungsgleichung genügen Zustandsvektoren im Wechselwirkungsbild?
137. Welcher dynamischen Gleichung genügt der Zeitentwicklungsoperator in diesem Bild?
138. Wie hängen die Zeitentwicklungsoperatoren des Wechselwirkungsbildes und des Schrödingerbildes miteinander zusammen?
139. Warum eignet sich das Wechselwirkungsbild zur Beschreibung eines Systems mit einer zeitabhängigen Störung ?
140. Welche Größe muß man berechnen, um die Übergangsamplitude und die Übergangswahrscheinlichkeit von einem Zustand in einen anderen zu bestimmen?
141. Welche Gleichung liegt der Dyson-Reihe zugrunde? Leiten Sie daraus den Ausdruck für den Zeitentwicklungsoperator in nullter, erster, und zweiter Ordnung Störungstheorie her.
142. Wie lautet Fermis goldene Regel und für welche Art von Störungen gilt sie?
143. Erläutern Sie die Phänomene der stimulierten Emission oder Absorption von Energiequanten. Durch welche Art von Störungen kann so etwas induziert werden? Gilt in diesem Fall Energieerhaltung?
144. Was versteht man unter der Dipolnäherung?
145. Was ist ein Dipolübergang? Welche Auswahlregeln gelten für Dipolübergänge?
146. Erklären Sie die Grundidee des Variationsverfahrens zur näherungsweise Lösung eines quantenmechanischen Problems.
147. Erklären Sie den Ansatz der adiabatischen Näherung zur näherungsweise Lösung zeitabhängiger Probleme.
148. Was versteht man unter der Berry-Phase?

# Kapitel 6

## Die Pfadintegralformulierung der Quantenmechanik

© Copyright 2020 Friederike Schmid<sup>1</sup>

Alternativer Zugang zur Quantenmechanik, R. Feynman

- In mancher Hinsicht anschaulicher als bisheriger Zugang
- Eröffnet elegante Lösungswege für manche Probleme
- Formalismus hat auch Anwendungen außerhalb der W.M. (z.B. stochastische Prozesse, Polymere)

### 6.1 Pfadintegral und Propagator

Ausgangspunkt: Wellenmechanik

- Teilchen werden durch Wellenfunktionen  $\psi(\vec{r}, t)$  beschrieben
- Für deren zeitliche Entwicklung gilt das Superpositionsprinzip  
     $\leadsto$  linearer Zusammenhang:  $\psi(\vec{r}_1, t_1) = \int d\vec{r}_0 G(\vec{r}_1, t_1; \vec{r}_0, t_0) \psi(\vec{r}_0, t_0)$ ,  
    wobei Propagator  $G$  unabhängig von  $\psi$  ist.

Bemerkungen dazu:

- $G$  entspricht dem Zeitentwicklungsoperator in Ortsdarstellung

$$\begin{aligned}\psi(\vec{r}_1, t_1) &= \langle \vec{r}_1 | \psi(t_1) \rangle = \langle \vec{r}_1 | U(t_1, t_0) | \psi(t_0) \rangle \\ &= \int d\vec{r}_0 \langle \vec{r}_1 | U(t_1, t_0) | \vec{r}_0 \rangle \underbrace{\langle \vec{r}_0 | \psi(t_0) \rangle}_{\psi(\vec{r}_0, t_0)}\end{aligned}$$

$$\stackrel{!}{=} \int d\vec{r}_0 G(\vec{r}_1, t_1; \vec{r}_0, t_0) \psi(\vec{r}_0, t_0)$$

$$\Rightarrow G(\vec{r}_1, t_1; \vec{r}_0, t_0) = \langle \vec{r}_1 | U(t_1, t_0) | \vec{r}_0 \rangle$$

- Interpretation: Ein Teilchen sei zur Zeit  $t_0$  am Ort  $\vec{r}_0$

$$\Rightarrow \psi(\vec{r}, t_0) = \delta(\vec{r} - \vec{r}_0)$$

$$\Rightarrow \psi(\vec{r}_1, t_1) = \int d\vec{r}' G(\vec{r}_1, t_1; \vec{r}', t_0) \psi(\vec{r}', t_0) = G(\vec{r}_1, t_1; \vec{r}_0, t_0)$$

<sup>1</sup>Prof. Dr. Friederike Schmid, Vorlesung Quantenmechanik (I), Universität Mainz, SS 2023.  
Letzte Änderung der PDF-Datei am 31.05.2023.

$\rightsquigarrow G(\vec{r}_1, t_1; \vec{r}_0, t_0)$  liefert Wahrscheinlichkeitsamplitude dafür, dass ein Teilchen, welches zur Zeit  $t_0$  am Ort  $\vec{r}_0$  war, zur Zeit  $t_1$  am Ort  $\vec{r}_1$  ist („Übergangsamplitude“)

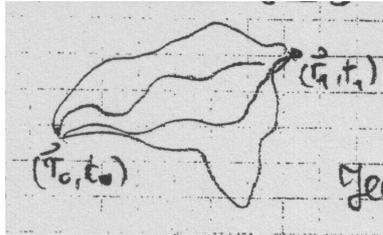
Zentrale Frage dieses Kapitels: Wie bestimmt man  $G$ ?

- „Traditionelle“ Antwort (Kapitel 2.1.3 S.19)  
→ Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} G(\vec{r}, t; \vec{r}_0, t_0) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r})\right) G(\vec{r}, t; \vec{r}_0, t_0)$$

mit Anfangsbedingung  $G(\vec{r}, t_0; \vec{r}_0, t_0) = \delta(\vec{r} - \vec{r}_0)$

- Feynmans Zugang



Teilchen können auf verschiedenen Pfaden von  $\vec{r}_0$  nach  $\vec{r}_1$  gelangen. Jeder Pfad trägt mit einem eigenen, noch zu bestimmenden Gewicht zur Übergangsamplitude bei.

Speziell im klassischen Limes  $\hbar \rightarrow 0$  muss gelten:

In diesem Grenzfall dominiert der klassische Pfad, d.h. der, der die klassische Wirkung  $\mathcal{S}$  extremal macht

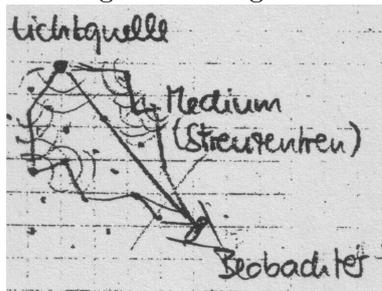
$$\text{mit } \mathcal{S}\{\vec{r}(t)\} = \int_{t_0}^t dt' \mathcal{L}(\vec{r}, \dot{\vec{r}}, t') \quad ; \quad \mathcal{L} = \frac{1}{2} m \dot{\vec{r}}^2 - V(\vec{r})$$

Bei endlichem  $\hbar$  tragen andere Pfade zunehmend bei.

Frage: Wie kann ein solches Szenario realisiert werden?

Analogie: Fermatsches Prinzip

Ausbreitung elektromagnetischer Wellen in einem Medium



Das Licht kann viele Wege nehmen: De facto dominiert aber ein Lichtstrahl, der den optischen Weg  $l$  extremal macht (optischer Weg = geometrischer Weg  $\times$  Brechungsindex)  
→ Fermatsches Prinzip

Grund: Optischer Weg  $l \leftrightarrow$  Phase  $\varphi \sim e^{i2\pi l/\lambda}$

Falls  $\lambda \ll l$ : Viele Oszillationen, benachbarte Pfade interferieren destruktiv miteinander

Ausnahme:  $l$  Extremum  $\rightarrow$  konstruktive Interferenz

Übertragung auf unser Problem

Hier sollen im Grenzfall  $\hbar \rightarrow 0$  die Wege mit einer extremalen Wirkung  $\mathcal{S}$  dominieren.

→ Ansatz (Feynman): Wirkung geht in einen Phasenfaktor ein. Jeder Pfad trägt mit Phase  $e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{S}\{\vec{r}(t)\}}$  zum Propagator bei.

⇒ Pfadintegral:

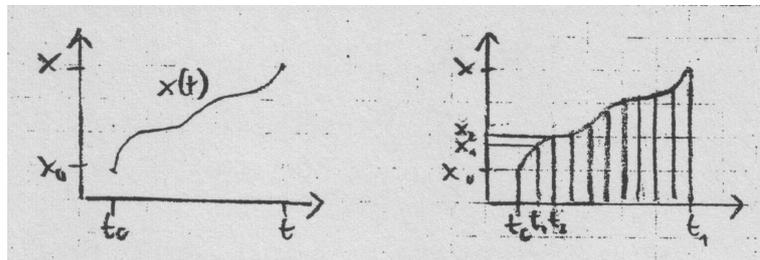
$$G(\vec{r}_1, t_1; \vec{r}_0, t_0) = \int \mathcal{D}\{\vec{r}(t)\} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_1} dt' \mathcal{L}(\vec{r}, \dot{\vec{r}}, t')} \Big|_{\substack{\vec{r}(t_0) = \vec{r}_0 \\ \vec{r}(t_1) = \vec{r}_1}}$$

wobei  $\int \mathcal{D}\{\vec{r}(t)\}$  = Summe über alle möglichen Pfade,  
und  $\mathcal{L}(\vec{r}, \dot{\vec{r}}, t)$  = klassische Lagrange-Funktion

Konkret: Was bedeutet  $\int \mathcal{D}\{\vec{r}(t)\}$  bzw. wie kann man es berechnen?

Erläuterung für den Fall einer Dimension:  $\int \mathcal{D}\{x(t)\}$

Diskretisierung



Zeitschritte:  $\Delta t = (t - t_0)/n$  ( $n \rightarrow \infty$ )

Pfad  $x(t) \rightarrow$  Folge  $(x_0, x_1, \dots, x_n = x)$  mit  $x_j = x(t_0 + j\Delta t)$

Wirkung  $\mathcal{S}\{x(t)\} = \int_{t_0}^t dt' \mathcal{L}(x, \dot{x}, t') = \int_{t_0}^t dt' (\frac{m}{2}\dot{x}^2 - V(x))$

$$\rightarrow \sum_{j=1}^n (\frac{m}{2} \frac{(x_j - x_{j-1})^2}{\Delta t} - V(x_j)\Delta t)$$

⇒ Pfadintegral:

$$\int \mathcal{D}\{x(t)\} e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{S}\{x(t)\}} = \lim_{n \rightarrow \infty} \int dx_1 \dots dx_{n-1} e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^n (\frac{m}{2} \frac{(x_j - x_{j-1})^2}{\Delta t} - V(x_j)\Delta t)} \mathcal{N}^{n-1}$$

( $\Delta t = (t - t_0)/n$ )

mit  $\mathcal{N}$ : Normierungsfaktor:  $\mathcal{N} = \sqrt{m/2\pi i \hbar \Delta t}$  (siehe unten)

Verallgemeinerung auf 3 Dimensionen offensichtlich.

(nur schlechter zu zeichnen)

Äquivalenz des Pfadintegralansatzes zur Schrödingergleichung

Zu zeigen:  $G(\vec{r}, t; \vec{r}_0, t_0)$  erfüllt die Schrödingergleichung

Hier wieder: für den Fall einer Dimension.

$$\begin{aligned} G(x, t + \Delta t; x_0, t_0) &= \mathcal{N} \int_{-\infty}^{\infty} dx_n e^{\frac{i}{\hbar} (\frac{m}{2} \frac{(x - x_n)^2}{\Delta t} - V(x)\Delta t)} G(x_n, t; x_0, t_0) \\ &\quad \xi = x - x_n \\ &= \mathcal{N} e^{-\frac{i}{\hbar} V(x)\Delta t} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{\xi^2}{\Delta t}} G(x - \xi, t; x_0, t_0) \end{aligned}$$

Im Grenzfall  $\Delta t \rightarrow 0$  oszilliert Integrand sehr stark

Hauptbeitrag zum Integral kommt von  $\xi \approx 0$

$\leadsto$  Taylorentwicklung von  $G$  um  $\xi \approx 0$  sinnvoll!

$$G(x - \xi, t; x_0, t_0) \approx G(x, t; x_0, t_0) - \xi \frac{\partial}{\partial x} G + \frac{\xi^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} G$$

Einsetzen:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi \xi^k e^{\frac{im}{2\hbar} \frac{\xi^2}{\Delta t}} = \begin{cases} 0 & : k \text{ ungerade} \\ \sqrt{2\pi} (k-1)!! \sqrt{\frac{i\hbar\Delta t}{m}}^{k+1} & : k \text{ gerade} \end{cases}$$

$((k-1)!! = 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (k-1))$

$$\Rightarrow G(x, t + \Delta t; x_0, t_0)$$

$$\approx \mathcal{N} \left(1 - \frac{i}{\hbar} V(x) \Delta t\right) \left(1 + \frac{i\hbar}{2m} \Delta t \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) G(x, t; x_0, t_0) \sqrt{\frac{2\pi i\hbar\Delta t}{m}}$$

$$\approx \mathcal{N} \sqrt{\frac{2\pi i\hbar\Delta t}{m}} \left(1 + \Delta t \left(-\frac{i}{\hbar} V(x) + \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\right) G(x, t; x_0, t_0)$$

Speziell  $\Delta t \rightarrow 0^+$ : Linke Seite  $\rightarrow G(x, t; x_0, t_0)$

$$\Rightarrow \mathcal{N} = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}}$$

Nächste Ordnung in  $\Delta t$ :

$$\underbrace{G(x, t + \Delta t; x_0, t_0) - G(x, t; x_0, t_0)}_{\Delta t \frac{\partial}{\partial t} G(x, t; x_0, t_0)}$$

$$= \left(-\frac{i}{\hbar} V(x) + \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) G(x, t; x_0, t_0) \cdot \Delta t$$

$$\Rightarrow \boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} G(x, t; x_0, t_0) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right] G(x, t; x_0, t_0)}$$

$\leadsto$  Schrödingergleichung  $\quad \checkmark$

## 6.2 Eichinvarianz

### 6.2.1 Allgemeine Eichtransformationen

Klassisch gilt: Der Lagrangefunktion  $\mathcal{L}(\vec{r}, \dot{\vec{r}}, t)$  kann eine beliebige totale Zeitableitung  $\frac{d}{dt} \Lambda(\vec{r}, t)$  hinzugefügt werden, ohne dass dies die Bewegungsgleichungen ändert

$$\mathcal{L}'(\vec{r}, \dot{\vec{r}}, t) = \mathcal{L}(\vec{r}, \dot{\vec{r}}, t) + \frac{d}{dt} \Lambda(\vec{r}, t) = \mathcal{L}(\vec{r}, \dot{\vec{r}}, t) + \frac{\partial}{\partial t} \Lambda + \dot{\vec{r}} \cdot \vec{\nabla} \Lambda$$

Frage: Wie wirkt sich eine solche Transformation hier aus

- auf Propagator und Wellenfunktion?
- auf Hamiltonoperator und Schrödingergleichung?

\* Propagator und Wellenfunktion (Zur Zeit  $t \rightarrow -\infty$  sei  $\Lambda(\vec{r}, t) = 0$ )

$$G'(\vec{r}_1, t_1; \vec{r}_0, t_0) = \int \mathcal{D}\{\vec{r}(t)\} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_1} \mathcal{L}'(\vec{r}, \dot{\vec{r}}, t) dt} = \int \mathcal{D}\{\vec{r}(t)\} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_1} \mathcal{L} dt} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_1} dt \frac{d\Lambda}{dt}}$$

$$= e^{\frac{i}{\hbar} (\Lambda(\vec{r}_1, t_1) - \Lambda(\vec{r}_0, t_0))} G(\vec{r}_1, t_1; \vec{r}_0, t_0)$$

$$\psi'(\vec{r}, t) = \int d\vec{r}_0 G'(\vec{r}, t; \vec{r}_0, -\infty) \psi(\vec{r}_0, -\infty) = e^{\frac{i}{\hbar} \Lambda(\vec{r}, t)} \psi(\vec{r}, t)$$

$\rightarrow$  Die Funktion  $\frac{\hbar}{i} \Lambda(\vec{r}, t)$  geht als ortsabhängiger Phasenfaktor in den transformierten Propagator bzw. den Zustandsvektor ein.

\* Schrödingergleichung und Hamiltonoperator

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi' = H' \psi' \text{ mit } H' = e^{\frac{i}{\hbar} \Lambda} H e^{-\frac{i}{\hbar} \Lambda} - \frac{\partial \Lambda}{\partial t} = H(\vec{r}, \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \vec{\nabla} \Lambda) - \frac{\partial \Lambda}{\partial t}$$

$$\begin{aligned} \text{(denn: } i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi' &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (e^{\frac{i}{\hbar} \Lambda} \psi) = i\hbar (\frac{i}{\hbar} \frac{\partial \Lambda}{\partial t} e^{\frac{i}{\hbar} \Lambda} \psi) + e^{\frac{i}{\hbar} \Lambda} (i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi) \\ &= -\frac{\partial \Lambda}{\partial t} \psi' + e^{\frac{i}{\hbar} \Lambda} H e^{-\frac{i}{\hbar} \Lambda} \psi' \end{aligned}$$

Es gilt:  $e^{\frac{i}{\hbar} \Lambda} f(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} \Lambda} = f(\vec{r})$  für alle Funktionen  $f(\vec{r})$

$$e^{\frac{i}{\hbar} \Lambda} (\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}) e^{-\frac{i}{\hbar} \Lambda} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \vec{\nabla} \Lambda \rightarrow e^{\frac{i}{\hbar} \Lambda} \vec{p} e^{-\frac{i}{\hbar} \Lambda} = \vec{p} - \vec{\nabla} \Lambda =: \vec{q}$$

$$e^{\frac{i}{\hbar} \Lambda} p_{\alpha_1}^{k_1} \dots p_{\alpha_n}^{k_n} e^{-\frac{i}{\hbar} \Lambda} = (e^{\frac{i}{\hbar} \Lambda} p_{\alpha_1} e^{-\frac{i}{\hbar} \Lambda})^{k_1} \dots (e^{\frac{i}{\hbar} \Lambda} p_{\alpha_n} e^{-\frac{i}{\hbar} \Lambda})^{k_n} = q_{\alpha_1}^{k_1} \dots q_{\alpha_n}^{k_n}$$

$$\Rightarrow e^{\frac{i}{\hbar} \Lambda} H(\vec{r}, \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}) e^{-\frac{i}{\hbar} \Lambda} = H(\vec{r}, \vec{q}) = H(\vec{r}, \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \vec{\nabla} \Lambda) \quad \checkmark$$

NB: Vergleiche klassische Mechanik:  $\mathcal{L}'(\vec{r}, \dot{\vec{r}}, t) = \mathcal{L}(\vec{r}, \dot{\vec{r}}, t) + \frac{\partial}{\partial t} \Lambda + \vec{r} \cdot \vec{\nabla} \Lambda$

$$\rightarrow \text{kanonischer Impuls: } \vec{p}' = \frac{\partial \mathcal{L}'}{\partial \dot{\vec{r}}} = \vec{p} + \vec{\nabla} \Lambda$$

$$\rightarrow \text{Hamiltonfunktion: } \mathcal{H}'(\vec{r}, \vec{p}') = \vec{p}' \dot{\vec{r}} - \mathcal{L}' = \vec{p}' \dot{\vec{r}} + \dot{\vec{r}} \vec{\nabla} \Lambda - \mathcal{L} - \frac{\partial}{\partial t} \Lambda - \vec{p}' \dot{\vec{r}}$$

$$\Rightarrow \mathcal{H}'(\vec{r}, \vec{p}') = \mathcal{H}(\vec{r}, \vec{p}) - \frac{\partial}{\partial t} \Lambda = \mathcal{H}(\vec{r}, \vec{p}' - \vec{\nabla} \Lambda) - \frac{\partial}{\partial t} \Lambda$$

$\Rightarrow$  Passt zu obigem Ergebnis, wenn  $\vec{p}'$  mit  $\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$  identifiziert wird!

\* Fazit: Wellenfunktion kann mit beliebigem orts- und zeitabhängigem Phasenfaktor  $\exp(-\frac{i}{\hbar} \Lambda(\vec{r}, t))$  multipliziert werden, wenn gleichzeitig der Hamiltonoperator umgeechet wird, d.h.:

$$\text{- Ursprüngliche Schrödingergleichung: } i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = H(\vec{r}, \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}) \psi(\vec{r}, t)$$

$$\text{- Formale Ersetzung: } \psi \rightarrow \psi' = e^{\frac{i}{\hbar} \Lambda(\vec{r}, t)} \psi$$

$$\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \vec{\nabla} \Lambda$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial \Lambda}{\partial t}$$

$$\rightarrow \text{Neue Schrödingergleichung: } i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi' = H' \psi'$$

$$\text{mit } H' = H(\vec{r}, \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \vec{\nabla} \Lambda) - \frac{\partial \Lambda}{\partial t}$$

## 6.2.2 Eichinvarianz und elektromagnetische Felder

Betrachte speziell freies Teilchen

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} \rightarrow \left( \begin{array}{c} \text{Umeichung} \\ \psi \rightarrow \psi' \exp(\frac{i}{\hbar} \Lambda) \end{array} \right) \rightarrow H' = \frac{1}{2m} (\vec{p} - \vec{\nabla} \Lambda)^2 - \frac{\partial \Lambda}{\partial t} \quad (*)$$

„Verallgemeinere“ nun: Hamiltonoperator soll die Form (\*) haben, aber ersetze  $\vec{\nabla} \Lambda$  und  $\frac{\partial \Lambda}{\partial t}$  durch allgemeinere Felder  $\frac{e}{c} \vec{A}$ ,  $-e\Phi$ : „Eichfelder“

$$\text{Man erhält: } \boxed{H = \frac{1}{2m} (\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A})^2 + e\Phi}$$

$\leadsto$  Hamiltonoperator eines Teilchens im elektromagnetischen Feld

Bemerkungen

- Einfachste Möglichkeit, einen Hamiltonoperator zu konstruieren, der bei einer Phasentransformation  $\psi \rightarrow \psi' = e^{\frac{i}{\hbar} \Lambda(\vec{r}, t)} \psi$  nicht die Form ändert.

- Die Eichtransformation der Elektrodynamik:

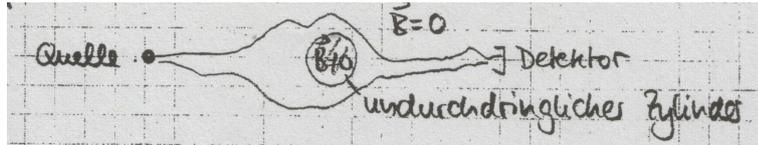
$$\vec{A} \rightarrow \vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla}\varphi; \quad \Phi \rightarrow \Phi' = \Phi - \frac{1}{c} \frac{\partial\varphi}{\partial t}$$

entspricht einer Phasentransformation nach (a)

$$\text{mit } \psi \rightarrow \psi' = e^{\frac{i}{\hbar} \frac{e}{c} \varphi(\vec{r}, t)} \psi$$

### 6.3 Anwendung: Der Aharonov-Bohm Effekt

Setup:



Magnetfeld ist nur im Zylinder eingeschaltet. In diesen können die Teilchen aber nicht eindringen. Aufbau spiegelsymmetrisch bzgl. der Achse Quelle-Detektor.

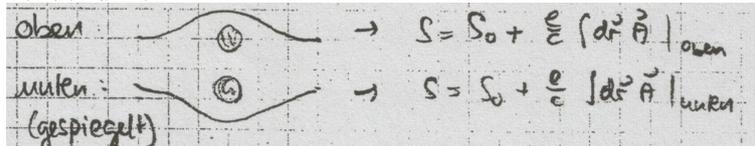
Analyse:

$$\text{Klassische Lagrange-Funktion: } \mathcal{L}(\vec{r}, \dot{\vec{r}}) = \mathcal{L}_0(\vec{r}, \dot{\vec{r}}) + \frac{e}{c} \dot{\vec{r}} \cdot \vec{A}$$

$$\text{Wirkung: } \mathcal{S} = \mathcal{S}_0 + \frac{e}{c} \int dt \dot{\vec{r}} \cdot \vec{A} = \mathcal{S}_0 + \frac{e}{c} \underbrace{\int d\vec{r} \cdot \vec{A}}_{\text{Wegintegral}}$$

$$\text{Pfadintegral: } \int \mathcal{D}\{\vec{r}(t)\} e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{S}} = \int \mathcal{D}\{\vec{r}(t)\} e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{S}_0} \exp\left(\frac{ie}{\hbar c} \int d\vec{r} \cdot \vec{A}\right)$$

Fasse Wege in Paare zusammen: Pfade, die oben und unten am Zylinder vorbeiführen:



$$\text{oben: } \rightarrow \mathcal{S} = \mathcal{S}_0 + \frac{e}{c} \int d\vec{r} \cdot \vec{A} |_{\text{oben}}$$

$$\text{unten: } \rightarrow \mathcal{S} = \mathcal{S}_0 + \frac{e}{c} \int d\vec{r} \cdot \vec{A} |_{\text{unten}}$$

$$\text{Differenz: } \Delta \mathcal{S} = \frac{e}{c} \oint d\vec{r} \cdot \vec{A} = \frac{e}{c} \Phi_0$$

mit  $\Phi_0$ : magnetischer Fluß durch Zylinder

(NB: Im Prinzip können sich Wege auch um Zylinder herumwinden, z.B. wie in Abb.



↪ Komplikation, Paare müssen dann etwas anders gewählt werden, aber  $\Delta \mathcal{S}$  bleibt gleich.)

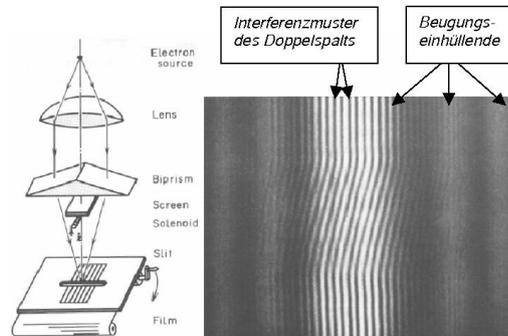
$$\text{Zusammengefasst: } G = \int \mathcal{D}\{\vec{r}(t)\} e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{S}} \propto (1 + e^{\frac{i}{\hbar} \Delta \mathcal{S}}) = \cos\left(\frac{e}{2\hbar c} \Phi_0\right)$$

Fazit: Interferenzeffekte als Funktion des magnetischen Flusses  $\Phi_0$

Experimenteller Nachweis:

Erster Nachweis: R.G. Chambers, 1960.

Beispiel hier: G. Möllenstedt, W. Bayh, 1962. (Physik. Blätter 18, 299)



(Beweglicher Film; Interferenz abhängig vom Spulenstrom).

## 6.4 Pfadintegral und Störungstheorie

Pfadintegrale liefern auch ein Anschauung für zeitabhängige Störungsentwicklungen, speziell im Fall von Streuprozessen

Sei  $H = H_0 + V(\vec{r}, t)$ ,  $H_0$  exakt lösbar,  $V(\vec{r}, t)$  Störung

$\leadsto$  entspricht klassischer Lagrangefunktion  $\mathcal{L} = \mathcal{L}_0 - V(\vec{r}, t)$

★ Propagator

$$\begin{aligned} G(\vec{r}_f, t_f; \vec{r}_0, t_0) &= \langle \vec{r}_f | U(t_f, t_0) | \vec{r}_0 \rangle = \int \mathcal{D}\{\vec{r}(t)\} e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{L}} \\ &= \int \mathcal{D}\{\vec{r}(t)\} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_f} dt' \mathcal{L}_0} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_f} dt' V(\vec{r}(t'), t')} \end{aligned}$$

★ Störungstheorie

$$\text{Entwickle } e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_f} dt' V(\vec{r}(t'), t')} \approx 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_f} dt' V + \frac{1}{2} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \left(\int_{t_0}^{t_f} dt' V\right)^2 + \dots$$

$$\Rightarrow G = G^{(0)} + G^{(1)} + G^{(2)} + \dots$$

$$\text{mit } G^{(0)} = \int \mathcal{D}\{\vec{r}(t)\} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_f} dt' \mathcal{L}_0}$$

$$G^{(1)} = -\frac{i}{\hbar} \int \mathcal{D}\{\vec{r}(t)\} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_f} dt' \mathcal{L}_0} \int_{t_0}^{t_f} dt' V(\vec{r}(t'), t')$$

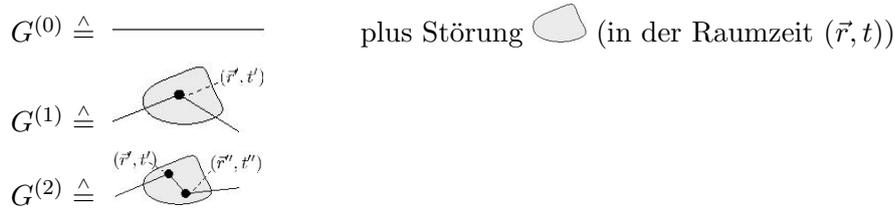
$$G^{(2)} = \frac{1}{2} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int \mathcal{D}\{\vec{r}(t)\} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_f} dt' \mathcal{L}_0} \int_{t_0}^{t_f} dt' \int_{t_0}^{t_f} dt'' V(\vec{r}(t'), t') V(\vec{r}(t''), t'')$$

Forme um:

$$\begin{aligned}
 G^{(1)} &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_f} dt' \int d\vec{r}' V(\vec{r}', t') \int \mathcal{D}\{\vec{r}(t)\} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_f} dt' \mathcal{L}_0} \delta(\vec{r}' - \vec{r}(t')) \\
 &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_f} dt' \int d\vec{r}' G^{(0)}(\vec{r}_f, t_f; \vec{r}', t') V(\vec{r}', t') G^{(0)}(\vec{r}', t'; \vec{r}_0, t_0) \\
 G^{(2)} &= \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \iint_{t_0 < t' < t'' < t_f} dt' dt'' \iint d\vec{r}' d\vec{r}'' V(\vec{r}', t') V(\vec{r}'', t'') \\
 &\quad \times \int \mathcal{D}\{\vec{r}(t)\} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_f} dt' \mathcal{L}_0} \delta(\vec{r}' - \vec{r}(t')) \delta(\vec{r}'' - \vec{r}(t'')) \\
 &= -\frac{1}{\hbar^2} \iint_{t_0 < t' < t'' < t_f} dt dt' \iint d\vec{r}' d\vec{r}'' G^{(0)}(\vec{r}_f, t_f; \vec{r}'', t'') V(\vec{r}'', t'') \\
 &\quad \times G^{(0)}(\vec{r}'', t''; \vec{r}', t') V(\vec{r}', t') G^{(0)}(\vec{r}', t'; \vec{r}_0, t_0) \\
 &\quad \text{(Zeitordnung ersetzt Faktor } 1/2)
 \end{aligned}$$

★ Anschauliche Interpretation

Anschauung funktioniert am besten, wenn das ungestörte System einem freien Teilchen entspricht (z.B. Streuprozess an einer Störung)



~> Jede Ordnung Störungstheorie entspricht einem Streuprozess

★ Integralgleichung

Für  $G = G^{(0)} + G^{(1)} + G^{(2)} + \dots \triangleq$  + + + ... folgt:

$$\begin{aligned}
 G(\vec{r}_f, t_f; \vec{r}_0, t_0) &= G^{(0)}(\vec{r}_f, t_f; \vec{r}_0, t_0) - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_f} dt' \int d\vec{r}' G^{(0)}(\vec{r}_f, t_f; \vec{r}', t') V(\vec{r}', t') G(\vec{r}', t'; \vec{r}_0, t_0) \\
 \text{---} &= \text{---} + \text{---} \cdot \text{---}
 \end{aligned}$$

~> Dyson-Gleichung (im Schrödingerbild und Ortsdarstellung)

# Kapitel 7

## Verschränkte Zustände

© Copyright 2020 Friederike Schmid<sup>1</sup>

Wir haben in dieser Vorlesung gesehen, dass die Quantenmechanik eine sehr mächtige Theorie ist, mit der man vieles beschreiben und vorhersagen kann.

Jetzt, zum Abschluss: Ein Kapitel, das daran erinnern soll, wie merkwürdig sie trotz allem ist.

„Verschränkte“ Zustände sind zusammengesetzte, nicht faktorisierebare Vielteilchenzustände.

→ z.B. Zweiteilchensystem  $|\psi_a\rangle_1|\psi_b\rangle_2$  → faktorisierbar  
 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_a\rangle_1|\psi_b\rangle_2 - |\psi_a\rangle_2|\psi_b\rangle_1)$  → verschränkt

Verschränkung führt zu „Quantenkorrelationen“.

→ Operationen an *einem* Teilchen beeinflussen das andere.

Bedeutung:

- Diskussion grundlegender Fragen der Quantenmechanik
  - EPR Paradox
  - Bellsche Ungleichung
- Praktische Anwendungen
  - Quantenteleportation
  - Quantenkryptographie
  - Quantencomputer

---

<sup>1</sup>Prof. Dr. Friederike Schmid, Vorlesung Quantenmechanik (I), Universität Mainz, SS 2023.  
Letzte Änderung der PDF-Datei am 31.05.2023.

## 7.1 Das EPR-Paradox und die Bellsche Ungleichung

### 7.1.1 EPR-Paradox

Argumentation geht zurück auf Einstein, Podolsky und Rosen (1935) - Auseinandersetzung mit Bohr über die innere Konsistenz der Quantentheorie.

Hier: modernere Version des Arguments.

Gedankenexperiment:

Betrachte eine Quelle, die Paare von Spin $\frac{1}{2}$ -Teilchen emittiert, die im Singulett-Zustand  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle|-\rangle - |-\rangle|+\rangle)$  sind.



Angenommen, der Beobachter A misst  $S_z$  am Teilchen 1, er erhält z.B.  $\frac{\hbar}{2}$ .  
Dann steht fest, dass B bei einer Messung von  $S_z$  am Teilchen 2 den Wert  $-\frac{\hbar}{2}$  erhalten würde, auch ohne dass B die Messung durchführt.  
Wie kann das sein?

Quantenmechanische Erklärung: „Fernwirkung“ von A nach B.  
Selbst dann, wenn sie beliebig auseinander sind.

Klassische Erklärung: Fast trivial - Messwert ( $-\frac{\hbar}{2}$ ) steht von vornherein fest, intrinsische Eigenschaft von Teilchen 2. (Würde die Quelle z.B. Paare von weißen und schwarzen Bällen emittieren, und A misst weiß, dann steht damit auch fest, dass B schwarz messen würde.)

Klassische Erklärung wirkt viel vernünftiger als die quantenmechanische.  
~> Essenz des EPR-Arguments

Basiert auf zwei vernünftigen Forderungen:

- (i) Das Teilchen 2 kann nicht davon beeinflusst werden, was dem Teilchen 1 widerfährt, wenn die beiden räumlich getrennt sind (Lokalitätsprinzip)
- (ii) Wenn man eine Eigenschaft eines Objekts sicher vorhersagen kann, ohne das Objekt zu beeinflussen, dann hat das Objekt diese Eigenschaft.

Folgerung: In dem obigen Gedankenexperiment muss  $S_z$  eine Eigenschaft der Teilchen sein. Analoges gilt für  $S_x, S_y$ .

Aber: In der Quantentheorie können  $S_x, S_y, S_z$  nicht gleichzeitig scharf bestimmt sein. Deshalb ist nach EPR die Quantentheorie inkonsistent oder zumindest unvollständig.

Frage: Könnte man die Quantentheorie eventuell „vervollständigen“? Angenommen, die Quantenmechanik „stimmt“ (sie ist ja sehr erfolgreich und bislang unwiderlegt): Kann es eine Theorie geben, die die gleichen Vorhersagen wie die Quantenmechanik macht, aber in der die Messwerte vorherbestimmte, intrinsische Eigenschaften der Messobjekte sind?

Antwort: Nein und Ja

Nein - Bellsche Ungleichung

Ja (doch) - Wenn man Lokalitätsprinzip aufgibt, z.B. Bohmsche Mechanik.

### 7.1.2 Bellsche Ungleichung (1964)

Ausgangspunkt: Dasselbe Gedankenexperiment wie bei 7.1.1 S.148. Es sollen die beiden Annahmen von EPR gelten:

- (i) Eine Messung von Teilchen 1 beeinflusst Teilchen 2 nicht.
- (ii) Die Werte des Spins in eine beliebige Richtung  $\vec{e}$  ( $\hat{=}$  die voraussichtlichen Messergebnisse einer Messung von  $\vec{S}\vec{e}$ ) sind prädeternierte, intrinsische Eigenschaften eines Teilchens. (NB: Das schließt nicht aus, dass man sie möglicherweise nicht gleichzeitig messen kann.)

Wähle nun drei Spinrichtungen  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$  (Einheitsvektoren)

Statistik der möglichen Zustände

Teilchen 1 $\vec{a} \vec{b} \vec{c}$	Teilchen 2 $\vec{a} \vec{b} \vec{c}$	Wahrscheinlichkeiten
+ + +	- - -	$P_1$
+ + -	- - +	$P_2$
+ - +	- + -	$P_3$
+ - -	- + +	$P_4$
- + +	+ - -	$P_5$
- + -	+ - +	$P_6$
- - +	+ + -	$P_7$
- - -	+ + +	$P_8$

mit  
 $P_i \geq 0$   
 $\sum_i P_i = 1$   
 sonst beliebig

$\Rightarrow$  Gekoppelte Wahrscheinlichkeit  $P_{\vec{e}_1 \vec{e}_2}$ , dass  $A$  in Richtung  $\vec{e}_1$  und  $B$  in Richtung  $\vec{e}_2$  beide  $\frac{\hbar}{2}$  messen:  $P_{\vec{a}\vec{b}} = P_3 + P_4, P_{\vec{c}\vec{b}} = P_3 + P_7, P_{\vec{a}\vec{c}} = P_2 + P_4$

$\rightarrow$  zusammengefasst:  $P_{\vec{a}\vec{c}} + P_{\vec{c}\vec{b}} = P_2 + P_3 + P_4 + P_7 \geq P_3 + P_4 = P_{\vec{a}\vec{b}}$

$\Rightarrow$  Bellsche Ungleichung: Unter den eingangs erwähnten Annahmen (i) und (ii) muss gelten:

$$P_{\vec{a}\vec{c}} + P_{\vec{c}\vec{b}} \geq P_{\vec{a}\vec{b}}$$

Berechne diese gekoppelten Wahrscheinlichkeiten nun in der Quantentheorie

oBdA sei  $\vec{a} = e_z$  ( $\vec{a}$  zeige in  $z$ -Richtung)

- A misst den Wert  $\frac{\hbar}{2}$  mit Wahrscheinlichkeit  $\frac{1}{2}$ . Danach hat das Teilchen 2 den Zustand  $|-\rangle$ .
- B misst in Richtung  $\vec{b}$ . Der Erwartungswert seines Ergebnisses ist:  $\langle \vec{S}\vec{b} \rangle = \langle -|\vec{S}\vec{b}|-\rangle = -b_z \frac{\hbar}{2} = -\frac{\hbar}{2}(\vec{a}\vec{b})$   
 $\leadsto$  Wahrscheinlichkeit  $P_+$ , Messwert ( $\frac{\hbar}{2}$ ) zu messen, folgt aus  
 $\langle \vec{S}\vec{b} \rangle = (P_+)(\frac{\hbar}{2}) + (1 - P_+)(-\frac{\hbar}{2}) = \hbar(P_+ - \frac{1}{2})$   
 $P_+ = \frac{\langle \vec{S}\vec{b} \rangle}{\hbar} + \frac{1}{2} = \frac{1}{2}(1 - \vec{a}\vec{b})$

$\Rightarrow$  Zusammengefasst:  $P_{\vec{a}\vec{b}} = \frac{1}{4}(1 - \vec{a}\vec{b})$

Analog:  $P_{\vec{c}\vec{b}} = \frac{1}{4}(1 - \vec{c}\vec{b})$ ,  $P_{\vec{a}\vec{c}} = \frac{1}{4}(1 - \vec{a}\vec{c})$

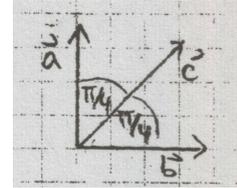
Betrachte nun speziell den Fall  $\vec{c} \propto (\vec{a} + \vec{b})$

und  $\vec{a}\vec{b}=0$ :

$$\rightarrow P_{\vec{a}\vec{b}} = \frac{1}{4}(1 - \vec{a}\vec{b}) = \frac{1}{4} = 0.25$$

$$P_{\vec{c}\vec{b}} = P_{\vec{a}\vec{c}} = \frac{1}{4}(1 - \cos \frac{\pi}{4}) \approx 0.07$$

$$\rightarrow P_{\vec{a}\vec{c}} + P_{\vec{c}\vec{b}} \approx 0.14 < P_{\vec{a}\vec{b}} = 0.25 !$$



$\Rightarrow$  Laut Quantenmechanik kann die Bellsche Ungleichung verletzt sein.  
Diese Vorhersage lässt sich experimentell überprüfen.

### Experimente zur Bellschen Ungleichung

Meistens mit Photonenpaaren (analoge theoretische Behandlung)

aber auch mit Protonenpaaren

$\leadsto$  ergaben immer eine Bestätigung der Quantenmechanik und eine Verletzung der Bellschen Ungleichung.

Damit kann eine Theorie, die gleichzeitig Messergebnisse auf intrinsische Eigenschaften der Messobjekte zurückführt und das Lokalitätsprinzip erfüllt, nicht korrekt sein.

Aber: Deterministische Theorie wird möglich, wenn man die Lokalität aufgibt  
- z.B. Bohmsche Mechanik.

### 7.1.3 Bohmsche Mechanik

Zustand eines Systems wird beschrieben durch:

- Wellenfunktion  $\psi$
- Konfiguration  $\vec{r}_1 \cdots \vec{r}_N$

Dynamische Gleichungen:

- Schrödingergleichung für  $\psi$
- $\frac{d\vec{r}_k}{dt} = \frac{\hbar}{m_k} \text{Im} \left( \frac{\psi^* \vec{\nabla}_k \psi}{\psi^* \psi} \right)$

$\leadsto$  In dieser Form absolut äquivalent zur Quantenmechanik.  
Deterministisch, aber nichtlokal.

## 7.2 Praktische Anwendung für Verschränkung: Quanteninformatik

Moderne Anwendungen

Ausnützen von verschränkten Zuständen für

- Quantenkryptographie (funktioniert im Prinzip schon)
- Quantenteleportation (etwas esoterisch)
- Quantencomputer (wird z.Zt. intensiv erforscht, möglicherweise großes technologisches Potential)

### 7.2.1 Quanteninformation

- Basiseinheit: 1 qubit

Zwei-Zustandssystem mit Zuständen  $|0\rangle, |1\rangle$   
 $\hat{=}$  zweidimensionaler Hilbertraum

entsprechend n qubits: Produktraum von n qubits,  
 aufgespannt von Zuständen  $|0 \dots 0\rangle, |0 \dots 1\rangle, \dots, |1 \dots 1\rangle$

- Experimentelle Realisierungsmöglichkeiten

- Linear polarisierte Photonen:  $|0\rangle = \uparrow; |1\rangle = \leftrightarrow$
- Zirkular polarisierte Photonen:  $|0\rangle = \odot; |1\rangle = \ominus$
- Spin  $\frac{1}{2}$ -Teilchen:  $|0\rangle = |+\rangle; |1\rangle = |-\rangle$
- Quantendots mit zwei Zuständen
- ...

- No Cloning Theorem (Wootters, 1982)

Ein unbekanntes qubit kann nicht geklont werden.

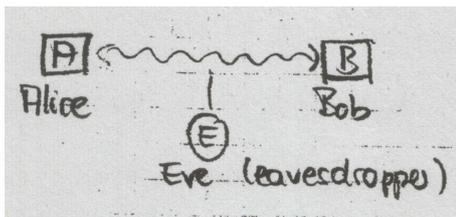
(Beweis: Andernfalls gäbe es unitären Operator  $U$ , der jeden Zustand

$|\alpha\rangle|0\rangle$  in  $|\alpha\rangle|\alpha\rangle$  überführt:  $U|\alpha\rangle|0\rangle = |\alpha\rangle|\alpha\rangle; U|\beta\rangle|0\rangle = |\beta\rangle|\beta\rangle$ .

Aber:  $U(|\alpha\rangle + |\beta\rangle)|0\rangle = |\alpha\rangle|\alpha\rangle + |\beta\rangle|\beta\rangle \neq (|\alpha\rangle + |\beta\rangle)(|\alpha\rangle + |\beta\rangle)$  Widerspruch! )

### 7.2.2 Quantenkryptographie

Herausforderung der Kryptographie:



A (Alice) und B (Bob) wollen eine Bitfolge derart austauschen, dass sie mit Sicherheit von keinem Dritten E (Eve) abgehört werden kann. Bitfolge darf zufällig sein. Sie wird später als Schlüssel verwendet, wenn die echte Nachricht übermittelt wird.

Idee: Verwende qubits.

Da qubits nicht geklont werden können, kann E sie nicht alle abfangen und weiterschicken, ohne dass A und B es merken.

Konkrete Strategien

1) A sendet qubits an B

- A präpariert qubits zufällig in zwei möglichen Basissystemen (z.B. Spins  $\rightarrow$  Eigenzustände von  $S_x$  und  $S_z$ )
- B misst zugesandte qubits in zufällig gewählter Basis (z.B. Spins  $\rightarrow$  zufällige Messung von  $S_x$  oder  $S_z$ )
- A und B verständigen sich öffentlich, wann sie welche Basis benutzt haben. War es die gleiche, so kennen beide das Messergebnis und können es für eine Bitfolge verwenden. Der Rest wird verworfen.
- Um Abhörern E auf die Spur zu kommen, vergleichen A und B noch öffentlich einige Testbits (die danach verworfen werden). Falls E mitgehört hat, musste sie eine Messung machen. In der Hälfte der Fälle hat sie dabei die falsche Basis erwischt und das qubit gestört.

2) Ausnützen verschränkter Zustände

- Zentrale Quelle Q sendet qubit-Paare im Singulett-Zustand  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle|1\rangle - |1\rangle|0\rangle)$  an A und B.
- A und B messen ihr qubit in einem zufällig gewählten Basissystem. Dieses wird ausgewählt aus drei möglichen Systemen  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ , die so beschaffen sind, dass die Wahrscheinlichkeiten  $P_{\vec{a}\vec{b}}(1, 1)$ ,  $P_{\vec{a}\vec{c}}(1, 1)$ ,  $P_{\vec{b}\vec{c}}(1, 1)$  die Bellsche Ungleichung verletzen.
- A und B tauschen sich öffentlich darüber aus, wann sie welches Basissystem benutzt haben.  
Falls es dasselbe war - benutze Ergebnisse für den Schlüssel  
Falls es verschieden war - werte Ergebnisse öffentlich aus:
  - Überprüfe Bellsche Ungleichung
  - $\rightarrow$  verletzt: OK
  - erfüllt: E hat mitgehört.

Experimentelle Realisierung (Praktisch vor allem Verfahren 1)

Zbinden et al. 1997

Schlüsselübertragung über 23 km, quer durch den Genfer See, über Standard-Glasfaserleitung der Swisscom (qubits hier: Polarisationszustände von Laserpulsen, im Mittel  $\sim 0.1$  Photonen pro Puls)

Weinfurter et al. 2007

144 km durch die Luft auf den kanarischen Inseln, 13 bit/Sekunde, allerdings nur nachts.

Ziel: Satellitenübertragung (Übermittlung durch Atmosphäre an Satelliten und zurück).

Praktisches Problem: Manchmal (selten) sind auch zwei Photonen in einem Puls  $\rightarrow$  Sicherheitslücke.

Ausweg: Köderbits, um Abhörer abzufangen.

”Akademische” Realisierungen auch von Verfahren 2