

Vorlesung theoretische Physik C

Prof. Dr. Wolf Gero Schmidt

WS 07/08

Inhaltsverzeichnis

1	Experimentelle Befunde	3
1.1	Quanteneigenschaften des Strahlungsfeldes	3
1.1.1	Strahlung eines schwarzen Körpers	3
1.1.2	Photoeffekt	6
1.1.3	Compton-Effekt (1922)	6
1.2	Welleneigenschaften der Materie	8
2	Grundbegriffe der Quantenmechanik (heuristisch)	10
2.1	Erwartungswerte	10
2.2	Impulsdarstellung	12
2.3	Unbestimmtheitsrelation	13
2.4	Vertauschungsrelationen	14
2.5	Operatoren und Observable	14
2.6	3 Dimensional	16
3	Schrödinger-Gleichung	17
3.1	Heuristische Begründung	17
3.2	Stationäre Lösungen	18
3.3	Kontinuitätsgleichung	19
3.4	Einfache 1D-Beispiele	20
3.4.1	Vorbetrachtungen	20
3.4.2	Beispiele	25
4	Einführung in die Axiomatik der Quantenmechanik	36
4.1	Der Hilbert-Raum	36
4.2	Operatoren im Hilbert-Raum	38
4.3	Dirac-Schreibweise	42
4.4	Darstellungstheorie	45

4.5	Meßprozeß in der Quantenmechanik	51
4.6	Zeitliche Evolution	53
4.6.1	Zeitentwicklungsoperatoren und Bilder	53
4.7	Unschärferelation	57
4.7.1	Vertauschbare Operatoren	57
4.7.2	Nichtvertauschbare Operatoren	57
5	Harmonischer Oszillator	59
5.1	Schrödingergleichung	59
5.2	Grundzustand	60
5.3	Eigenwertspektrum	61
5.4	Eigenfunktionen	63
6	Zentralfeld	67
6.1	Erinnerung: klassisch	67
6.2	Drehimpulsoperator	68
6.3	Das Wasserstoffproblem	78
7	Implikationen der QM	83
7.1	Determinismus und Lokalität	83
7.2	Theorie verborgener Parameter	86
7.3	Realitätsproblem	89
8	Näherungsmethoden	90
8.1	Zeitunabhängige Störungstheorie	90
8.1.1	Störungstheorie 1. Ordnung	92
8.1.2	Störungstheorie 2. Ordnung	94
8.1.3	Störungstheorie mit Entartung	94
8.1.4	Beispiel: Starkeffekt	96
8.2	Zeitabhängige Störungstheorie	99
8.2.1	Beispiel: "Fermi's golden rule"	101

Einführung in die Quantenmechanik

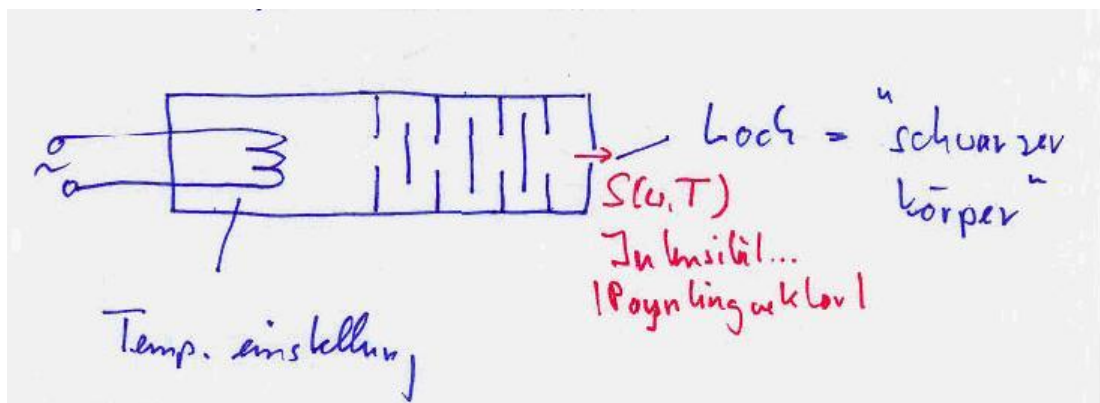
1 Experimentelle Befunde

1.1 Quanteneigenschaften des Strahlungsfeldes

1.1.1 Strahlung eines schwarzen Körpers

Definition: Ein schwarzer Körper absorbiert die gesamte, auf ihn einfallende elektromagnetische Strahlung.

Nährungsweise Realisierung: Hohlkörper mit Loch



Wir stellen die Temperatur T ein und messen für feste Frequenz die aus dem Loch abgestrahlte Intensität.

plausibel: $S(\omega, T) \propto w(\omega, T)$.. Energiedichte des e.m. Feldes im Hohlraum

allgemein gilt: $w(\omega, T) = n(\omega, T) \cdot \epsilon(\omega, T)$

mit n =Dichte der Eigenschwingungen bezogen auf ein Frequenzintervall, $dN = n(\omega) \cdot d\omega$

.. Anzahl der Schwingungen in $(\omega, \omega + d\omega)$, gilt: $n(\omega) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}$

und mit ϵ =mittlere Energie der Eigenschwingung ω bei Temperatur T

$$\epsilon = \int_{-\infty}^{\infty} dE p(E) E$$

mit $p(E)$ = Wahrscheinlichkeit, daß die Mode ω angeregt ist

E = Energie einer Mode ω (Eigenschwingung des Kastens)

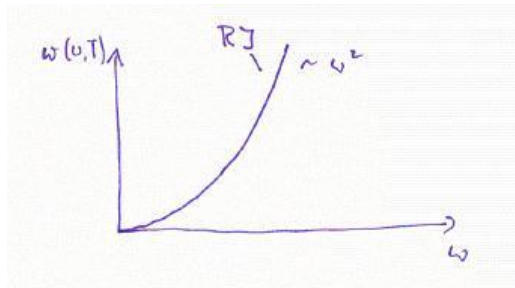
$$p(E) = \frac{\overbrace{e^{-\beta E}}^{\text{anschaulich klar}}}{\underbrace{\int_0^\infty e^{-\beta E'} dE'}_{\text{Normierung auf 1}}} \quad \text{mit } \beta = \frac{1}{kT}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \epsilon(\omega, T) &= \frac{\int E e^{-\beta E} dE}{\int e^{-\beta E'} dE'} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \int_0^\infty e^{-\beta E} dE \quad (\text{Kettenregel}) \\ &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \frac{1}{\beta} = \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \beta = \frac{1}{\beta} = kT \end{aligned}$$

D.h. im Mittel trägt jede Mode ω mit kT zur Gesamtenergie bei. (Analogie zur mittleren Energie pro mech. Freiheitsgrad, Gleichverteilungssatz, IX.3 in Physik A) Damit:

$$w(\omega, T) = n(\omega) \cdot \epsilon(\omega, T) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} kT$$

Strahlungsformel von Rayleigh-Jeans



Ist das Ergebnis sinnvoll? Nein! Die Gesamtenergie des Strahlungsfeldes im Hohlkörper divergiert!

$$W(T) = \int dV \int d\omega w(\omega T) = V \cdot \frac{kT}{\pi^2 c^3} \underbrace{\int_0^\infty \omega^2 d\omega}_\infty$$

Das heißt, wir müssen jedem Hohlkörper mit endlichem Volumen V eine unendlich große Energie zuführen, um ihn um eine endliche Temperatur ΔT zu erwärmen.

\Rightarrow Widerspricht der Alltagserfahrung und dem experimentellem Befund! $\hat{=}$ "Ultraviolett-Katastrophe"

Lösung: Planck'sche Quantenhypothese (um 1900)

Energie einer Eigenschwingung im Hohlraum kann nur diskrete Werte annehmen.

$$\epsilon \rightarrow \epsilon_n = n\hbar\omega \quad \text{mit } n \in \mathbb{N} \text{ und } \hbar = \frac{1}{2\pi} \cdot 4,13 \cdot 10^{-15} \text{ eVs}$$

Wahrscheinlichkeit, daß im Hohlraum bei der Temperatur T die Mode mit der Frequenz ω die Energie $\epsilon_n = n\hbar\omega$ hat:

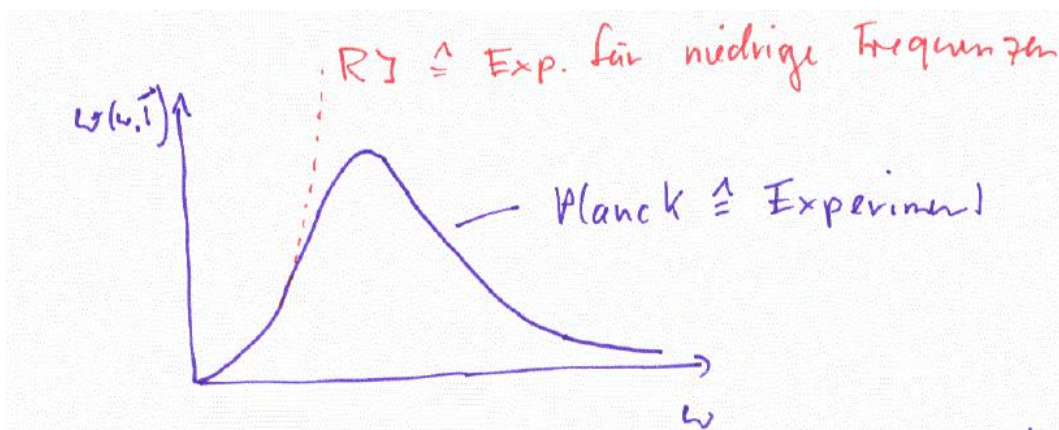
$$p(\epsilon_n) = \frac{e^{-\beta\epsilon_n}}{\underbrace{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\epsilon_n}}_{\text{sinnvolle Normierung}}} \quad \text{mit } \beta = \frac{1}{kT}$$

mittlere Energie einer Mode mit der Frequenz ω

$$\begin{aligned} \epsilon(\omega, T) &= \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \epsilon_n e^{-\beta\epsilon_n}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\epsilon_n}} = -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln \left(\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\epsilon_n} \right) = -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln \left(\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega n} \right) \\ &= -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln \frac{1}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} = \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \end{aligned}$$

$$w(\omega, T) = n(\omega) \cdot \epsilon(\omega, T) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}$$

Planck'sche Strahlungsformel



Das heißt, wir können Experimente beschreiben, wenn wir annehmen, daß die Energie einer Eigenschwingung ω nur diskrete Werte annehmen kann. $\epsilon_n = n\hbar\omega$, Widerspruch zur klassischen Elektrodynamik (Physik B), wo wir $\epsilon \propto |E|^2 \propto |B|^2$ hatten, also kontinuierliche Werte.

1.1.2 Photoeffekt

Wie bestrahlen eine Metallplatte mit UV-Licht und messen dann die kinetische Energie der austretenden Elektronen; experimentelle Befunde (Hertz 1887):

1. Nur für $\omega \geq \omega_0$ werden Elektronen emittiert. ω_0 hängt nicht von der Intensität der Strahlung des Lichts I ab, aber vom Material der Platte.
2. Für $\omega \geq \omega_0$ gilt, daß die Anzahl der Elektronen proportional zur Intensität des Lichts I ist.
3. Für $\omega \geq \omega_0$ ist E_{kin} proportional zu ω und nicht proportional zur Intensität des Lichts I .

klassische Elektrodynamik: $E_{kin} \propto I$

Einstein: Lichtquantenhypothese (1905)

Strahlungsfeld der Frequenz ω besteht aus Lichtquanten (Photonen) der Energie $\hbar\omega$. Die Absorption eines Lichtquants erhöht die Energie der Metallelektronen um $\hbar\omega$, wird teilweise benötigt um die Austrittsarbeit aufzubringen. Der Rest geht in die kinetische Energie:

$$E_{kin} = T = \hbar\omega - W_A \quad \text{mit } W_A = \text{materialspezifische Austrittsarbeit}$$

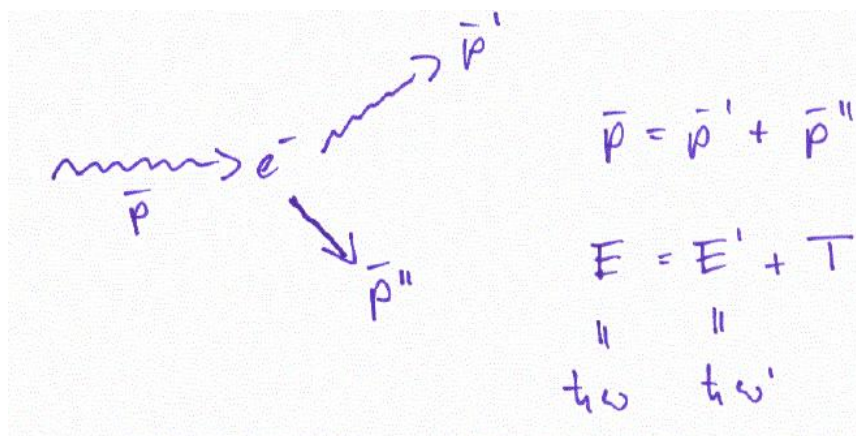
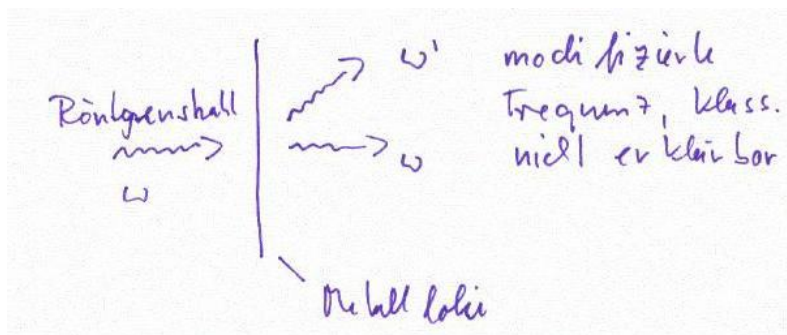
Anzahl $e^- \propto$ Anzahl Photonen $\hat{=}$ Intensität

\Rightarrow das erklärt 1., 2. und 3.!

1.1.3 Compton-Effekt (1922)

Erklärung durch Existenz von Lichtquanten, die elastisch mit den Elektronen des Metalls wechselwirken. Es gelten Energie- und Impulserhaltung.

\Rightarrow Frequenzänderung zwanglos erklärt!



Impuls der Photonen? (Physik A, VIII.3.2.)

$$E = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad \text{mit } v = c, E \text{ endlich}$$

$$\Rightarrow m_0 = 0 \quad \text{keine Ruhemasse}$$

$$E = \sqrt{m_0^2 c^4 + p^2 c^2} \quad \text{hier speziell } m_0 = 0 \Rightarrow p = \frac{E}{c} = \frac{\hbar \omega}{c}$$

Elektrodynamik (Physik B, V.2.2) Dispersionsrelation für em. Wellen im Vakuum

$\omega = ck$ mit $k = \frac{2\pi}{\lambda}$...Wellenzahl, Strahlrichtung fällt mit Wellenvektor zusammen

$$\Rightarrow \vec{p} = \hbar \vec{k}$$

Der Compton-Effekt zeigt also, daß das Strahlungsfeld nicht nur quantisiert Energie aufnimmt oder abgibt, sondern daß die Lichtquanten selbst Teilchencharakter (wie Impulse) haben.

1.2 Welleneigenschaften der Materie

Exp.: Elektronenstrahlen werden am Gitter gebeugt, das heißt, die Elektronen zeigen Wellencharakter

⇒ De Broglies Materiewellen (1925) verallgemeinern die Ausdrücke für das Photon aus 1.1.3 und ordnen jedem Teilchen mit der Energie E und Impuls \vec{p} eine Welle mit Frequenz ω und Wellenvektor \vec{k} zu:

$$\omega = \frac{E}{\hbar}, \vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$$

Zunächst schematisch, eindimensional; früher: ebene Welle mit Frequenz ω und Wellenzahl k

$$\Psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)} \quad A \in \mathbb{C}$$

↓

$$= Ae^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)}$$

Intensität: $I = \Psi^* \Psi \rightarrow |A|^2$

räumlich und zeitlich konstant, schwer mit Teilchen zu assoziieren

⇒ betrachten Wellenpaket

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(p) e^{\frac{i}{\hbar}(ex - Et)} dp$$

$$\text{mit } \varphi(p) = \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}} e^{-\alpha(p-p_0)^2}$$

Das bedeutet eine Überlagerung von ebenen Wellen mit ähnlichen Impulsen $p \approx p_0$, daher auch ähnliche Energien, entwickelbar in Taylor-Reihe

$$E = E(p_0) + E'(p_0)(p - p_0) + \frac{1}{2}E''(p_0)(p - p_0)^2 + \dots$$

oben einsetzen und integrieren ($\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}$) ergibt:

$$\Psi(x, t) = \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}(p_0x - E(p_0)t)}}_{\text{ebene Welle}} \cdot \underbrace{\sqrt{\frac{\alpha}{2\pi\hbar^2}} \sqrt{\frac{1}{\alpha + \frac{i}{2\hbar}E''(p_0)t}}}_{\text{zeit- und ortabhängiger Amplitudenfaktor}} + e^{-\frac{(x - E'(p_0)t)^2}{4\hbar^2(\alpha + \frac{i}{2\hbar}E''(p_0)t)}}$$

Intensität des Wellenpakets

$$I(x, t) = \frac{\alpha}{2\pi\hbar^2(\alpha^2 + (\frac{1}{2}\hbar E''(p_0)t)^2)} \cdot e^{-\frac{(x-E'(p_0)t)^2}{2\hbar^2(\alpha + \frac{1}{\alpha})(\frac{1}{2}\hbar E''(p_0)t)^2}}$$

↓

Maximum bewegt sich mit $E'(p_0)$ nach rechts

$$E'(p_0) = \left. \frac{dE}{dp} \right|_{p_0} = \left. \frac{d\hbar\omega}{d\hbar k} \right|_{k_0} = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} = v_g \quad \text{.. Gruppengeschwindigkeit (Physik A, IX.2)}$$

nichtrelativistisches, freies Teilchen hat

$$E = E_0 + \frac{p^2}{2m} \rightarrow E' = \frac{p_0}{m}$$

das heißt, Gruppengeschwindigkeit $\hat{=}$ Teilchengeschwindigkeit

Damit scheint Wellenfunktion zur Beschreibung von Teilchen zunächst geeignet! Problem: Breite des Wellenpakets!

$$\text{mit } I(x, t) = c(t)e^{-\frac{(x-E(p_0)t)^2}{2\Delta x^2}}$$

mit $\Delta x = \sqrt{\frac{1}{2\alpha}(4\hbar^2\alpha^2 + E(p_0)''^2 t^2)}$.. zeitabhängige Breite des Wellenpakets

mit $\Delta x_0 = \Delta x(t=0) = \sqrt{2\hbar^2\alpha}$ folgt:

$$\frac{\Delta x(t)}{\Delta x_0} = \sqrt{1 + \frac{E''(p_0)^2 t^2}{2\alpha\Delta x_0^2}}$$

$$\text{speziell: } E = E_0 + \frac{p^2}{2m} \rightarrow E''(p_0) = \frac{1}{m}$$

$$\Rightarrow \frac{\Delta x(t)}{\Delta x_0} = \sqrt{1 + \frac{t^2}{2m^2\alpha\Delta x_0^2}}$$

Das bedeutet ein sehr schnelles Zerfließen von leichten ($m \rightarrow 0$) Teilchen! \Rightarrow Wellenpaket kaum als (mikroskopisches) Teilchen interpretierbar!

Ausweg: Born'sche Wahrscheinlichkeitsinterpretation (1925)

bisher: $I(x, t) = \Psi^*(x, t)\Psi(x, t)$.. Intensität, wenig plausibel

jetzt: $\Psi(x, t)$ ist "Führungsfeld" für die Teilchen, bestimmt die Wahrscheinlichkeit zum Zeitpunkt t das Teilchen in $[x, x + dx]$ zu finden:

$$dW(x, t) = \Psi^*(x, t)\Psi(x, t)dx = |\Psi(x, t)|^2 dx = \omega(x, t)dx$$

mit ω .. Wahrscheinlichkeitsdichte

Teilchen muß irgendwo sein \rightarrow Normierungsbedingung

$$\int dW(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) = 1$$

2 Grundbegriffe der Quantenmechanik (heuristisch)

2.1 Erwartungswerte

Führungsfeld $\Psi(x, t)$ erlaubt nur Wahrscheinlichkeitsaussagen, bzw. Aussagen über den Mittelwert vieler gleichartiger Experimente.

\downarrow Anzahl der Experimente $\rightarrow \infty$

Erwartungswert berechnet aus $\Psi(x, t)$

Bsp.:

- Erwartungswert des Ortes x eines Teilchens

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} dx x |\Psi(x, t)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x, t) x \Psi(x, t)$$

- Erwartungswert einer beliebigen Funktion $f(x)$

$$\bar{f} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x, t) f(x) \Psi(x, t)$$

Zeitliche Änderung des Ortserwartungswertes?

$$\dot{\bar{x}} = \int dx \dot{\Psi}^*(x, t) x \Psi(x, t) + \int dx \Psi^*(x, t) x \dot{\Psi}(x, t)$$

jetzt speziell Wellenpaket

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(p) e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} dp$$

$$\dot{\Psi}(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp \varphi(p) \left(-\frac{i}{\hbar} E \right) e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)}$$

für freies, nichtrelativistisches Teilchen: $E = \frac{p^2}{2m} + \underbrace{E_0}_{=0}$ o.v.a.A.

$$\begin{aligned}\dot{\Psi}(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp \varphi(p) \left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} \right) e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{i\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \int_{-\infty}^{\infty} dp \varphi(p) e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)} \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x, t)\end{aligned}$$

damit:

$$m\dot{\hat{x}} = -\frac{i\hbar}{2} \int dx \left(\frac{d^2}{dx^2} \Psi^*(x, t) \right) x \Psi(x, t) + \frac{i\hbar}{2} \int dx \Psi^* x \left(\frac{d^2}{dx^2} \Psi(x, t) \right)$$

Überwälzen des Differentialoperators:

$$\begin{aligned}\int dx \Psi^{*''} x \Psi &= \underbrace{\left[\Psi^{*'} x \Psi \right]_{-\infty}^{\infty}}_{=0 \text{ (Normierbarkeit)}} - \int dx \Psi^{*'} (x \Psi)' \\ &= \underbrace{\left[-\Psi^* (x \Psi)' \right]_{-\infty}^{\infty}}_{=0} + \int dx \Psi^* (x \Psi)'' \\ &= \int dx \Psi^* (\Psi + x \Psi')' = \int dx \Psi^* (\Psi' + \Psi' + x \Psi'')\end{aligned}$$

Oben einsetzen \rightarrow 2.Abl. heben sich auf; damit:

$$\begin{aligned}m\dot{\bar{x}} = \bar{p} &= -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x, t) \frac{d}{dx} \Psi(x, t) \\ \text{d.h. } \bar{p} &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x, t) \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \Psi(x, t) \\ \text{vorhin } \bar{x} &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x, t) x \Psi(x, t)\end{aligned}$$

Ähnliche Struktur, falls wir $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ als Impulsoperator definieren; entsprechend ist:

$\hat{x} = x$ der Ortsoperator

Allgemein werden Erwartungswerte einer physikalischen Größe A in der QM als

$$\bar{A} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x, t) \hat{A} \Psi(x, t)$$

berechnet, wobei \hat{A} der der Größe A zugeordnete Operator ist.

Bemerkung: Die Übersetzung von physikalischen Größen in Operator ist oft nichttrivial!

2.2 Impulsdarstellung

$$(2.1) \quad \bar{p} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x, t) \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \Psi(x, t)$$

gehen jetzt zur Fouriertransformation von $\Psi(x, t)$ über:

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp \varphi(p, t) e^{\frac{i}{\hbar} px}$$

einsetzen liefert:

$$\begin{aligned} \bar{p} &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dx \int dp \int dp' \varphi^*(p, t) e^{-\frac{i}{\hbar} px} \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \varphi(p', t) e^{\frac{i}{\hbar} p' x} \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dx \int dp \int dp' \varphi^* e^{-\frac{i}{\hbar} px} p' \varphi e^{\frac{i}{\hbar} p' x} \\ &= \int dp \int dp' \varphi^*(p, t) p' \varphi(p', t) \underbrace{\frac{1}{2\pi} \int \frac{dx}{\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} (p'-p)x}}_{\delta(p-p')} \end{aligned}$$

damit

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{\infty} dp \varphi^*(p, t) p \varphi(p, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dp |\varphi(p, t)|^2 p$$

vgl mit

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x, t) x \Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi(x, t)|^2 x$$

legt die Interpretation von $\varphi(p, t)$ als Wahrscheinlichkeitsamplitude im Impulsraum nahe.

Das heißt die Wahrscheinlichkeit, daß ein Teilchen einen Impuls aus $[p, p + dp]$ hat, ist $|\varphi(p, t)|^2 dp$.

Bezeichnungen:

- $\Psi(x, t)$.. Zustandsfunktion in Ortsdarstellung
- $\varphi(p, t)$.. Zustandsfunktion in Impulsdarstellung
- $\hat{p} = p$.. Impulsoperator in Impulsdarstellung
- $\hat{x} = x$.. Ortsoperator in Ortsdarstellung
- $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$.. Impulsoperator in Ortsdarstellung
- $\hat{x} = -\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dp}$.. Ortsoperator in Impulsdarstellung \rightarrow (Übung)

2.3 Unbestimmtheitsrelation

$$(1.2) \text{ Wellenpaket } \Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \varphi(p) e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} dp$$

mit Gaußförmiger Impulsverteilung

$$\varphi(p) = \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}} e^{-\alpha(p-p_0)^2}$$

$$\Rightarrow \varphi^*(p) \varphi(p) = \frac{2\alpha}{\pi} e^{-2\alpha(p-p_0)^2}$$

Wahrscheinlichkeitsverteilung symmetrisch um $p = p_0$ zentriert!



Varianz

$$\overline{(\Delta p)^2} = \overline{(p - p_0)^2} = \frac{1}{4\alpha}$$

für diese Impulsverteilung, früher (1.2) die Ortswellenfunktion berechnet, gilt:

$$\Psi^*(x, 0)\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar^2\alpha}} e^{-\frac{x^2}{2\hbar^2\alpha}}$$

d.h Gaußverteilung im Ortsraum mit Mittelwert $\bar{x} = 0$ und der Varianz

$$\overline{(\Delta x)^2} = \overline{(x - \bar{x})^2} = \hbar^2\alpha$$

Das heißt durch Variation von α können wir entweder $\overline{(\Delta x)^2}$ oder $\overline{(\Delta p)^2}$ minimieren, jedoch nicht beide. Es gilt also:

$$\boxed{\overline{(\Delta x)^2} \cdot \overline{(\Delta p)^2} = \frac{\hbar^2}{4}}$$

Demnach können wir nicht gleichzeitig Ort und Impuls des Wellenpakets messen. Mit der Zeit ($t > 0$) fließt das Wellenpaket (im Ort) auseinander, während die Impulsverteilung konstant bleibt (vgl. 1.2), demnach gilt

$$\overline{(\Delta x)^2} \cdot \overline{(\Delta p)^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

Heisenbergsche
Unbestimmtheitsrelation(HUR)

Damit verliert der klassische Bahnbegriff in der Quantenmechanik seinen Sinn!

Bem.:

- HUR hier speziell für gaußförmige Wellenpakete gezeigt, sie gilt jedoch allgemein
- hier speziell für Unbestimmtheit von Ort und Impuls, aber analoge Beziehungen für alle physikalischen Größen A, B deren zugeordnete Operatoren \hat{A}, \hat{B} nicht vertauschen. (Vertauschen heißt $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$)

2.4 Vertauschungsrelationen

Ortsdarstellung $\rightarrow \hat{x} = x; \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$

$[\hat{p}, \hat{x}] := \hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p}$.. Kommutator

Berechnung durch Anwendung auf beliebige Funktion $h(x)$:

$$\begin{aligned} [\hat{p}, \hat{x}] h(x) &= \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} (xh(x)) - x \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} h(x) \\ &= \frac{\hbar}{i} \{h + xh' - xh'\} \\ &= \frac{\hbar}{i} h(x) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow [\hat{p}, \hat{x}] = \frac{\hbar}{i} \hat{1} \neq 0, \text{ Orts-und Impulsoperator vertauschen nicht}$$

2.5 Operatoren und Observable

(früher, 2.1):

$$\begin{aligned} \bar{x} &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x, t) \underbrace{x}_{=\hat{x}} \Psi(x, t) \\ \bar{p} &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x, t) \underbrace{\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}}_{=\hat{p}} \Psi(x, t) \end{aligned}$$

verallgemeinert auf beliebige Potenzen von \hat{x} und \hat{p} , d.h.

$$\bar{x}^n = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x, t) \hat{x}^n \Psi(x, t)$$

$$\bar{p}^n = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x, t) \hat{p}^n \Psi(x, t)$$

Jede beliebige analytische Funktion $f(x)$ bzw. $g(x)$ kann in eine Taylorreihe entwickelt werden:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n x^n$$

\Rightarrow Erwartungswerte von $f(\hat{x})$ bzw. $g(\hat{p})$ gegeben durch

$$\bar{f} = \int dx \Psi^*(x, t) f(\hat{x}) \Psi(x, t)$$

$$\bar{g} = \int dx \Psi^*(x, t) f(\hat{p}) \Psi(x, t)$$

Bsp.: Gesamtenergie eines konservativen Systems

$$E = \underbrace{T}_{=\frac{p^2}{2m}} + \underbrace{V}_{=V(x)} = const.$$

Operator der Gesamtenergie (Hamiltonoperator) gegeben durch:

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

speziell in Ortsdarstellung

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

oder in Impulsdarstellung

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + V\left(-\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dp}\right)$$

Jeder meßbarer, physikalischer Größe (d.h. Observablen) A entspricht ein Operator \hat{A} in der Quantenmechanik.

Bem.:

- einfacher Fall (s.oben): $A(x, p) = f(x) + g(p) \rightarrow \hat{A} = f(\hat{x}) + g(\hat{p})$

- komplizierter: $f(x) \cdot g(p)$

$$\text{Bsp.: } xp \rightarrow \frac{\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}}{2}$$

Operator wird so gewählt, daß er konsistent mit Theorie und verfügbaren Experimenten ist.

2.6 3 Dimensional

für 3D-Probleme

- Ortsdarstellung

$$\vec{x} \rightarrow \hat{x} = \vec{x}; \quad \vec{p} \rightarrow \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_x$$

- Impulsdarstellung

$$\vec{x} \rightarrow \hat{x} = -\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_p; \quad \vec{p} \rightarrow \hat{p} = \vec{p}$$

Zusammenhang zwischen Zustandsfunktion im Orts- und Impulsdarstellung durch 3D-FT:

$$\Psi(\vec{x}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int \int \int d^3 \vec{p} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \varphi(\vec{p}, t)$$

$$\varphi(\vec{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int \int \int d^3 \vec{x} e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \Psi(\vec{x}, t)$$

Erwartungswerte

$$\bar{f} = \int d^3 \vec{x} \Psi^*(\vec{x}, t) f(\vec{x}) \Psi(\vec{x}, t)$$

$$= \int d^3 \vec{p} \varphi^*(\vec{p}, t) f(\hat{x}) \varphi(\vec{p}, t)$$

Vertauschungsrelationen

$$[\hat{p}_\alpha, \hat{x}_\beta] = \frac{\hbar}{i} \delta_{\alpha\beta} \quad \text{mit } \alpha, \beta = x, y, z$$

3 Schrödinger-Gleichung

3.1 Heuristische Begründung

bisher:

- in manchen Experimenten (Elektronen-Beugung) scheint Materie Wellencharakter zu haben
- Zuordnung von Welleneigenschaften durch die de Broglie-Relation

$$\omega = \frac{E}{\hbar}, \quad \bar{k} = \frac{\bar{p}}{\hbar} \quad (\text{Compton-Experiment})$$

- zunächst Partikelwelle $\Psi(x, t) = A e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)}$ eingeführt, später interpretiert als Zustandsfunktion mit Wahrscheinlichkeitsamplitude. Das bedeutet $|\Psi(\bar{x}, t)|^2 dx$ ist die Wahrscheinlichkeit, daß das Teilchen zur Zeit t in $[x, x + dx]$ ist.

Problem: Bestimmung von $\Psi(x, t)$!

starten von

$$\Psi(x, t) = A e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} \quad \left| \frac{\partial}{\partial t} \right.$$

$$\dot{\Psi}(x, t) = -\frac{i}{\hbar} E A e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)}$$

$$\text{d.h. } i\hbar \dot{\Psi}(x, t) = E \Psi(x, t)$$

ersetzen jetzt E durch Operator der Gesamtenergie, d.h. Hamiltonoperator

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

damit

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\bar{x}, t) = \hat{H}(\hat{p}, \hat{x}) \Psi(\bar{x}, t)$$

Schrödingergleichung

Bem.:

- Die partielle Differentialgleichung 1. Ordnung in der Zeit bestimmt die zeitliche Entwicklung von $\Psi(x, t)$, wenn $\Psi(x, t = t_0)$ bekannt ist

- Für nichtrelativistische Teilchen durch zahlreiche Experimente bestätigt
- Relativistische Verallgemeinerung: Dirac-Gleichung, Klein-Gordon-Gleichung

3.2 Stationäre Lösungen

SG:

$$i\hbar\dot{\Psi}(\bar{x}, t) = \hat{H}\Psi(\bar{x}, t) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(\bar{x}, t) \right\}$$

↓ \hat{H} nicht zeitabhängig + Ortsdarstellung

Ansatz:

$$\Psi(\bar{x}, t) = f(t)\varphi(x) \text{ in SG}$$

$$i\hbar\dot{f}\varphi = f\hat{H}\varphi$$

$$\underbrace{i\hbar \frac{\dot{f}(t)}{f(t)}}_{\text{hängt nur von t ab}} = \underbrace{\frac{\hat{H}(\hat{p}, \hat{x})\varphi(\bar{x})}{\varphi(\bar{x})}}_{\text{hängt nur von x ab}} = \underbrace{E}_{\text{muss konstant sein}}$$

$$\Rightarrow i\hbar\dot{f}(t) = Ef(t) \Rightarrow f(t) = Ce^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

$$\Psi(\bar{x}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\varphi(\bar{x})$$

stationäre Lösung der Schrödingergleichung

Warum "stationär"?

- Wahrscheinlichkeit Teilchen in $[x, x + dx]$ in t zu finden
 $\Psi^*(\bar{x}, t)\Psi(\bar{x}, t)dx = \varphi^*(\bar{x})\varphi(\bar{x})dx$ ist zeitunabhängig
- Erwartungswerte beliebiger Operatoren $\hat{A}(\hat{x}, \hat{p})$

$$\bar{A} = \int d^3\bar{x}\Psi^*(\bar{x}, t)A(\hat{x}, \hat{p})\Psi(\bar{x}, t)$$

$$= \int d^3\bar{x}\varphi^*(\bar{x}, t)A(\hat{x}, \hat{p})\varphi(\bar{x})$$

sind zeitunabhängig

Bestimmung von $\varphi(\bar{x})$ aus $\hat{H}\varphi(\bar{x}) = E\varphi(\bar{x})$

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\bar{x}) \right\} \varphi(\bar{x}) = E\varphi(\bar{x})$$

zeitunabhängige Schrödingergleichung
(Eigenwertproblem(EWP))

Bem.: Überlagerung aller speziellen stationären Lösungen $\Psi(\bar{x}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\varphi(\bar{x})$ ist die allgemeine Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung.

3.3 Kontinuitätsgleichung

$w(\bar{x}, t) = \Psi^*(\bar{x}, t)\Psi(\bar{x}, t)$..Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\begin{aligned} \frac{\partial w}{\partial t} &= \underbrace{\dot{\Psi}^*\Psi}_{(-\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\Psi^*)\Psi} + \underbrace{\Psi^*\dot{\Psi}}_{\Psi^*\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\Psi} \\ &= \left(-\frac{1}{i\hbar} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\bar{x}) \right\} \Psi^* \right) \Psi + \Psi^* \left(\frac{1}{i\hbar} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\bar{x}) \right\} \Psi \right) \\ &= \frac{\hbar}{2mi} \{ (\Delta\Psi^*) \Psi - \Psi^* (\Delta\Psi) \} \\ &= \frac{\hbar}{2mi} \bar{\nabla} \{ (\bar{\nabla}\Psi^*) \Psi - \Psi^* (\bar{\nabla}\Psi) \} \end{aligned}$$

Erinnerung E-Dynamik: $\dot{\zeta} + \text{div } \bar{j} = 0$; Kontinuitätsgleichung für Ladungsdichte

Definieren in Analogie zur elektrischen Stromdichte \bar{j} einen Wahrscheinlichkeitsstrom \bar{S}

$$\bar{S} := \frac{\hbar}{2mi} \{ \Psi^* (\bar{\nabla}\Psi) - (\bar{\nabla}\Psi^*) \Psi \}$$

$$\dot{w}(\bar{x}, t) + \text{div } \bar{S}(\bar{x}, t) = 0$$

Kontinuitätsgleichung für Wahrscheinlichkeit

Volumenintegration über Gebiet G

$$\begin{aligned} \int_G d^3\bar{x} \dot{w}(\bar{x}, t) &= \int_G d^3\bar{x} \text{div } \bar{S} \\ &\quad \parallel \quad \parallel \\ \underbrace{\frac{\partial}{\partial t} \int_G d^3\bar{x} w(\bar{x}, t)}_{\text{Wahrscheinlichkeit, daß Teilchen in } G} &= \underbrace{\oint_G d\bar{A} \bar{S}}_{\text{ändert sich zeitlich eventuell durch } S} \end{aligned}$$

speziell: $G \rightarrow \infty \Rightarrow \oint d\vec{A} \vec{S} = 0$ (Normierung), $\Psi(\infty) = 0$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \underbrace{\int d^3\vec{x} w(\vec{x}, t)}_1 = 0$$

Gesamtwahrscheinlichkeit bleibt erhalten

3.4 Einfache 1D-Beispiele

3.4.1 Vorbetrachtungen

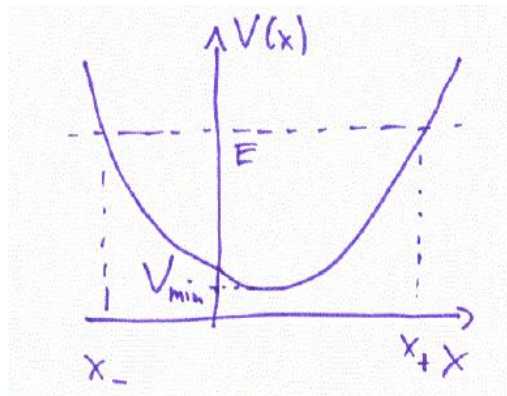
Suche Lösung von $i\hbar \dot{\Psi}(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \Psi(x, t)$ bzw. der stationären SG

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

mathematisch für beliebiges E lösbar, aber nicht alle Lösungen sind physikalisch sinnvoll (z.B. Normierbarkeit) \Rightarrow oft diskretes Eigenwertspektrum

typische Probleme:

a) $V \xrightarrow{|x| \rightarrow \infty} \infty$ (gebundenes Teilchen)



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

I) $E < V_{min}$

$$\Rightarrow \varphi''(x) = \alpha(x)\varphi(x) \text{ mit } \alpha > 0$$

falls $\varphi(x) > 0$ für einen x-Wert

$\Rightarrow \varphi''(x) > 0$, d.h. pos. Krümmung

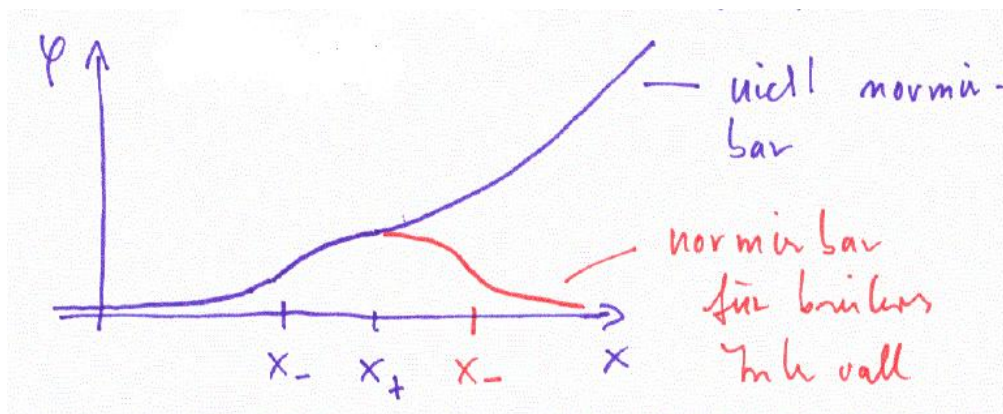
$\Rightarrow \varphi(x)$ bleibt positiv für mind. eine Richtung

$\Rightarrow \varphi$ ist nicht normierbar

\Rightarrow keine physikalisch zulässige Lösung für $E < V_{min}$!

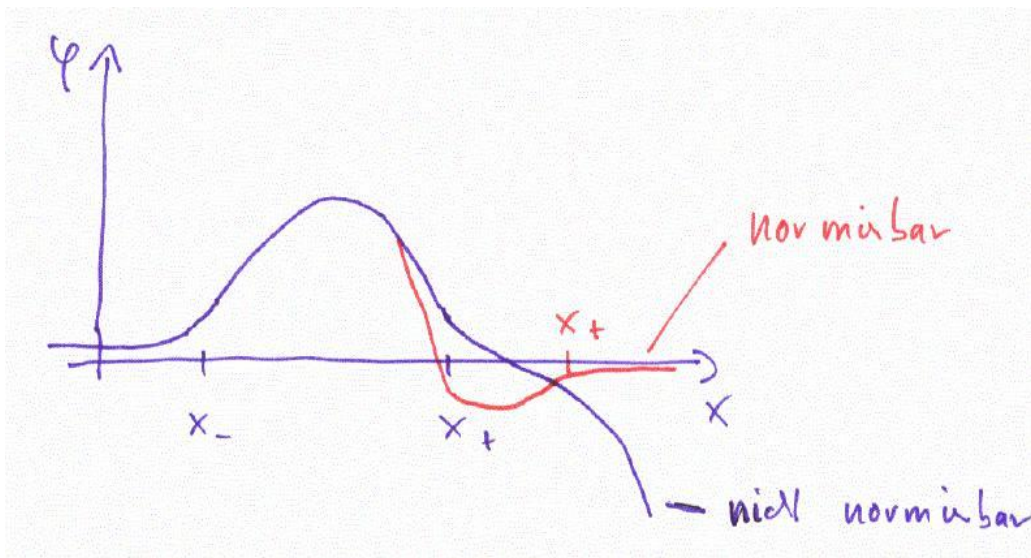
II) $E > V_{min}$

- Normierbarkeit $\Rightarrow \varphi(x) \xrightarrow{x \rightarrow \pm\infty} 0$
- in $[-\infty, x_-]$: $E < V$, d.h. φ ändert Vorzeichen nicht (analog zu Fall I))
- o.v.a.A. $\varphi(x) > 0$ in $[-\infty, x_-] \Rightarrow \varphi''(x) > 0$ in $[-\infty, x_-]$
- $\varphi''(x) < 0$ in $[x_-, x_+]$ wegen $E > V$
- weiterer Kurvenverlauf von Intervallbreite abhängig



- Intervallbreite durch Verhältnis von E zu $V(x)$ bestimmt; es gibt einen Energiewert $E = E_0$, der gerade zu einer quadratintegrierbaren Funktion $\varphi(x)$ führt
 E_0 .. niedrigster Energieeigenwert des Problems
 φ_0 .. zugehörige Funktion $\hat{=}$ Grundzustand
- $E > E_0 \Rightarrow$ Vorzeichenwechsel der Funktion (damit ändert sich die Krümmung)

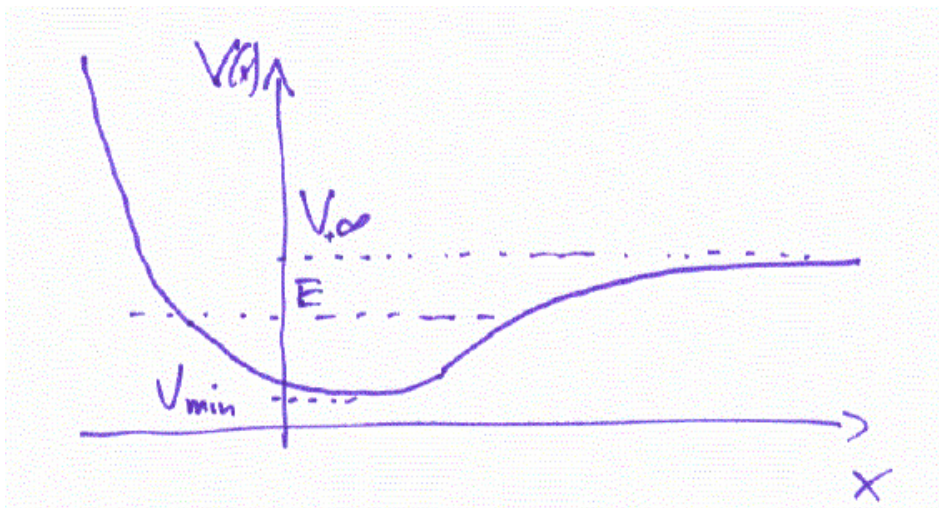
- Es gibt ein $E_1 > E_0$, das wieder zu einer quadratintegrablen Funktion führt:



- ... \Rightarrow Eigenfunktionen $\varphi_0, \varphi_1, \varphi_2$ mit Energiewerten E_0, E_1, E_2 wobei φ_n n Nullstellen (Knoten) besitzt, die im Intervall $[x_-, x_+]$ liegen, also dort, wo $E_n > V(x)$ gilt.
- Wichtiger Unterschied zum klassischen Verhalten:

$$|\varphi(x)|^2 \geq 0 \text{ für } E < V(x)$$

b)ungebundenen Teilchen



$$\text{I) } \underline{V_{min} < E < V_{+\infty}}$$

analog zu a)I)

möglicherweise ein oder mehrere normierbare φ_n mit E_n , φ_n lokalisiert bei V_{min}

$$\text{II) } \underline{V_{+\infty} < E}$$

$\Rightarrow \varphi''(x) = -\alpha(x)\varphi(x)$ mit $\alpha(x) > 0$ für unendlich großes Intervall (rechts von x_-)

o.v.a.A. $\varphi(x) \Rightarrow \varphi''(x) < 0$

$\Rightarrow \varphi(x)$ schneidet Achse

$\Rightarrow \varphi < 0 \Rightarrow \varphi''(x) > 0$

$\Rightarrow \varphi(x)$ schneidet Achse

... $\Rightarrow \varphi(x)$ oszilliert

$\Rightarrow \int_{x_-}^{\infty} |\varphi(x)|^2 dx \rightarrow \infty$

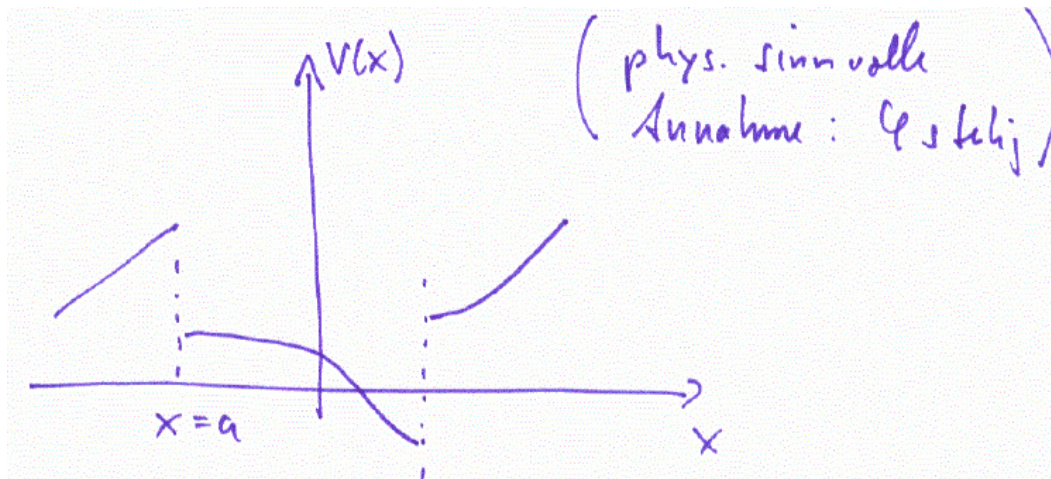
Das bedeutet, daß die Wellenfunktion im herkömmlichen Sinne nicht normierbar ist.

Interpretation: Ein Teilchen im unendlich großen Intervall

Lösung: Betrachten $N(N \rightarrow \infty)$ nicht wechselwirkender Teilchen, dann

$$|\varphi(x)|^2 \hat{=} \text{Teilchendichte}$$

c)endlicher Potentialsprung

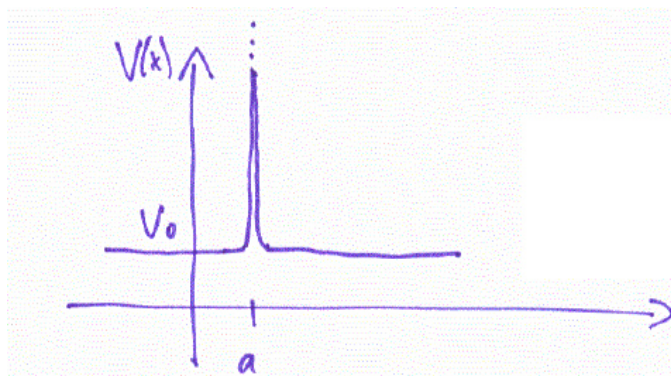


Untersuchen $\varphi'(x = a)$

$$\begin{aligned} \text{SG: } \varphi''(x) &= -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\varphi(x) \Big|_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} dx \\ \varphi'(a+\epsilon) - \varphi'(a-\epsilon) &= \frac{2m}{\hbar^2} \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} dx (V(x) - E)\varphi(x) \\ |\varphi'(a+\epsilon) - \varphi'(a-\epsilon)| &\leq \underbrace{\frac{2m}{\hbar^2} |V(x) - E|_{\max} \cdot |\varphi(x)|_{\max}}_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ \rightarrow 0}} \cdot 2\epsilon \\ &\Rightarrow \varphi'(a+\epsilon) = \varphi'(a-\epsilon) \\ \varphi(a+\epsilon) &= \varphi(a-\epsilon) \text{ (nach Voraussetzung)} \end{aligned}$$

Das heißt, daß für endliche Potentialsprünge Wellenfunktion und 1. Ableitung stetig sind.

d) δ - förmige Singularität



$$V(x) = V_0 + A\delta(x - a) \quad (\varphi \text{ stetig})$$

wie c)

$$\begin{aligned} \varphi'(a+\epsilon) - \varphi'(a-\epsilon) &= \frac{2m}{\hbar^2} \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} \{A\delta(x-a) + V_0 - E\}\varphi(x) dx \\ &= \frac{2m}{\hbar^2} A\varphi(a) + \underbrace{\frac{2m}{\hbar^2} \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} (V_0 - E)\varphi(x) dx}_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ \rightarrow 0}} \end{aligned}$$

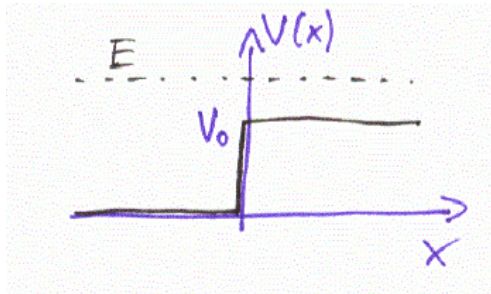
$$\Rightarrow \varphi'(a+\epsilon) = \varphi'(a-\epsilon) + \frac{2m}{\hbar^2} A\varphi(a)$$

1. Ableitung springt

$$\varphi(a+\epsilon) = \varphi(a-\epsilon) \text{ (nach Voraussetzung)}$$

3.4.2 Beispiele

3.4.2.1 Potentialstufe



$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < 0 \\ V_0 & \text{für } x > 0 \end{cases}$$

$$\text{SG: } \varphi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] \varphi(x) = 0$$

mit Abkürzungen: $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$; $q^2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}$ folgt:

$$\varphi''(x) + k^2 \varphi(x) = 0 \quad \text{für } x < 0$$

$$\varphi''(x) + q^2 \varphi(x) = 0 \quad \text{für } x > 0$$

früher (3.4.1):

- physikalische Lösungen nur für $E > V_{\min} = 0$
- ungebundenes Teilchen, kontinuierliches Spektrum, oszillierende Wellenfunktion

allgemeine Lösung

- für $x < 0$

$$\varphi^<(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (\text{klar durch Einsetzen})$$

- für $x > 0, E > V_0, q^2 > 0$

$$\varphi^>(x) = Ce^{iqx} + De^{-iqx}$$

- für $x > 0, E < V_0, q^2 < 0$

$$\varphi^>(x) = Ce^{-|q|x} + De^{|q|x}$$

Betrachten den letzten Fall später, zunächst $E > V_0$, d.h. $q^2 > 0$

In beiden Teilgebieten Superposition von links- und rechtslaufenden Wellen

Annahme einer speziellen Lösung: Teilchenstrom läuft von links auf Potentialstufe zu, also $D = 0$

o.v.a.a $A = 1$, Amplitude der einlaufenden Welle,

damit verbleibt:

$$\varphi^<(x) = e^{ikx} + Be^{-ikx}$$

$$\varphi^>(x) = Ce^{iqx}$$

Stetigkeit der Wellenfunktion:

$$\underbrace{\varphi^<(0)}_{1+B} = \underbrace{\varphi^>(0)}_C \quad (*)$$

Stetigkeit der 1. Ableitung

$$\underbrace{\varphi'^<(0)}_{ik(1+B)} = \underbrace{\varphi'^>(0)}_{iqC} \quad (**)$$

$$C = * 1 + B = ** \frac{k}{q}(1 - B)$$

$$\Rightarrow B = \frac{k - q}{k + q},$$

$$\Rightarrow C = \frac{2k}{k + q}$$

Damit Wellenfunktion bestimmt. Interpretation? Untersuchen Wahrscheinlichkeitsstrom (3.3):

$$S = \frac{\hbar}{2mi} \{\varphi^* \varphi' - \varphi'^* \varphi\}$$

für eine ebene Welle $\varphi(x) = Ae^{ikx}$ gilt allgemein:

$$S_A = \frac{\hbar}{2mi} A^* A \{e^{-ik}(ik)e^{ikx} - (-ik)\}$$

$$S_A = \frac{\hbar k}{m} A^* A$$

speziell für Potentialstufe:

einfallender Strom ($A = 1$): $S_e = \frac{\hbar k}{m}$

reflektierter Strom: $S_r = -\frac{\hbar k}{m} B^* B = -\frac{\hbar k}{m} \left(\frac{k-q}{k+q} \right)^2$

transmittierter Strom: $S_t = \frac{\hbar q}{m} C^* C = \frac{\hbar q}{m} \left(\frac{2k}{k+q} \right)^2 = \frac{\hbar q}{m} \frac{4k^2}{(k+q)^2}$

Gesamtstrom für $x < 0$:

$$S^< = S_e + S_r = \frac{\hbar k}{m} \left\{ 1 - \frac{(k-q)^2}{(k+q)^2} \right\} = \frac{\hbar k}{m} \frac{4kq}{(k+q)^2} = S^> \equiv S_t$$

Inhaltlich klar wegen Kontinuitätsgleichung für Wahrscheinlichkeit: An der Stelle der Potentialstufe wird keine Wahrscheinlichkeit erzeugt oder vernichtet (Stationarität).

Verhalten für $E \gg V_0$?

$$\begin{aligned} \frac{q^2}{k^2} &= \frac{E - V_0}{E} \xrightarrow{E \gg V_0} 1 \\ \Rightarrow S_r &= -\frac{\hbar k}{m} \left(\frac{k-q}{k+q} \right)^2 \xrightarrow{E \gg V_0} 0 \\ S_t &= \frac{\hbar k}{m} \frac{4kq}{(k+q)^2} \rightarrow \frac{\hbar k}{m} = S_e \end{aligned}$$

Das heißt für $E \gg V_0$ verhält sich das quantenmechanische Teilchen wie ein klassisches Teilchen, welches für alle $E > V_0$ reflexionsfrei transmittiert wird.

jetzt: $0 < E < V_0$

$$\varphi^>(x) = C e^{-|q|x} + \underbrace{D e^{|q|x}}_{\text{nicht normierbar für } x \rightarrow \infty \Rightarrow \text{keine phys. Lösung}} \quad (q^2 < 0)$$

$$\text{D.h. } \varphi^>(x) = C e^{-iKx} \quad \text{mit } K^2 = -\frac{2m}{\hbar^2} [V_0 - E]$$

damit analoge Stetigkeitsbedingung wie vorhin mit $q \rightarrow iK$

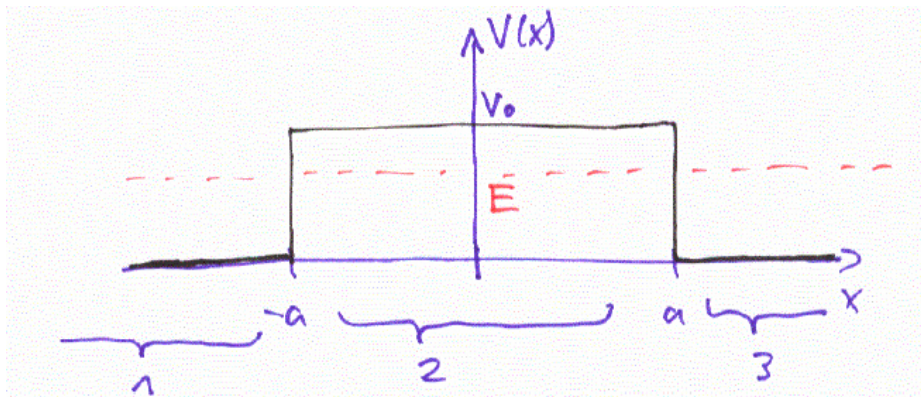
$$\text{d.h. } B = \frac{k - iK}{k + iK}; \quad C = \frac{2k}{k + iK}$$

$$B^* B = \frac{k - iK}{k + iK} \cdot \frac{k + iK}{k - iK} = 1 = A^* A$$

Das heißt, daß der Teilchenstrom vollständig reflektiert wird, also wie im klassischen Fall für $E < V_0$.

Exponentieller Abfall der Wellenfunktion im Bereich der Potentialstufe \rightarrow Unterschied zum klassischen Verhalten, analog zu evaneszenten Wellen in der Optik.

3.4.2.2 Potentialwall



$$V(x) = 0 \quad x < -a$$

$$V(x) = V_0 \quad -a < x < a$$

$$V(x) = 0 \quad x > a$$

früher (3.4.1)

- physikalische Lösung für $E > 0$
- kontinuierliches Spektrum

hier zunächst $0 < E < V_0$ (Übung: $E > V_0$)

$$\text{SG: } \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right\} \varphi(x) = E\varphi(x)$$

V stückweise konstant \Rightarrow drei allgemeine Lösungen für drei Bereiche

$$\varphi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

$$\varphi_2(x) = Ce^{Kx} + De^{-Kx}$$

$$\varphi_3(x) = Ge^{ikx} + Je^{-ikx}$$

$$\text{mit } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \text{und} \quad K^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$$

Stetigkeit der Wellenfunktion bei $x = -a$

$$Ae^{-ika} + Be^{ika} = Ce^{-Ka} + De^{Ka}$$

bei $x = a$

$$Ce^{Ka} + De^{-Ka} = Ge^{ika} + Je^{-ika}$$

Stetigkeit der 1. Ableitung bei $x = -a$

$$ik(Ae^{-ika} - Be^{ika}) = K(Ce^{-Ka} - De^{Ka})$$

bei $x = a$

$$K(Ce^{Ka} - De^{-Ka}) = ik(Ge^{-ika} - Je^{ika})$$

Annahme: Teilchenstrom von links

$\Rightarrow J = 0$, o.v.a.A. $A = 1$

\Rightarrow 4 Gleichungen für 4 Unbekannte (Übung), speziell folgt:

$$|B|^2 = \frac{\left(\frac{k}{K} + \frac{K}{k}\right)^2 \sinh^2 2Ka}{4 + \left(\frac{k}{K} + \frac{K}{k}\right)^2 \sinh^2 2ka}$$

$$|G|^2 = \frac{4}{4 + \left(\frac{k}{K} + \frac{K}{k}\right)^2 \sinh^2 2ka}$$

$$\text{d.h. } |B|^2 + |G|^2 = 1 \quad (*)$$

$$\text{Stromdichten: } S_1 = \frac{\hbar k}{m} (1 - |B|^2) = S_e - S_r$$

$$S_2 = \frac{\hbar k}{im} (CD^* - DC^*)$$

$$S_3 = \frac{\hbar k}{m} |G|^2 = S_t$$

wegen $(*) \Rightarrow S_1 = S_3$

außerdem $S_1 = S_2$ (wegen Kontinuitätsgleichung für Wahrscheinlichkeit)

$$\Rightarrow \underbrace{S_e - S_r}_{S_1} = \underbrace{S_t}_{S_3}$$

$$\text{Reflexionskoeffizient } R := \frac{S_r}{S_e} = |B|^2$$

$$\text{Transmissionskoeffizient } T := \frac{S_t}{S_e} = |G|^2$$

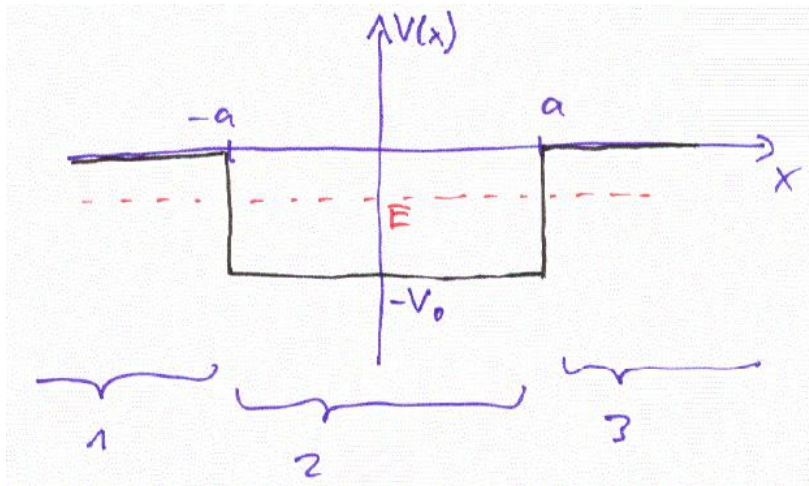
$$= \frac{4}{4 + \left(\frac{k}{K} + \frac{K}{k}\right)^2 \sinh^2 2ka}$$

Also gelangen Teilchen für $E < V_0$ auf die andere Seite der Barriere! Klarer Unterschied zum klassischen Verhalten, dort $T = 0, R = 1$ für $E < V_0$

⇒ quantenmechanischer Tunneleffekt

Beispiel: Leckströme in integrierten Schaltkreisen

3.4.2.3 Potentialgraben



$$V(x) = 0 \quad \text{für } x < -a$$

$$V(x) = V_0 \quad \text{für } -a < x < a$$

$$V(x) = 0 \quad \text{für } x > a$$

allgemeine Überlegungen aus 3.4.1

- $-V_0 < E < 0$ diskretes Spektrum
- $0 < E$ kontinuierliches Spektrum

$$\text{SG in 1,3: } \varphi''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} \varphi(x) = 0$$

$$\text{SG in 2: } \varphi''(x) + \frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2} \varphi(x) = 0$$

zunächst $E > 0$, kontinuierliches Spektrum

$$\text{mit } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad q^2 = \frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}$$

folgt für von links einfallende Welle:

$$\varphi_1(x) = e^{ikx} + De^{-ikx}$$

$$\varphi_2(x) = Ae^{iqx} + Be^{-iqx}$$

$$\varphi_3(x) = Ge^{ikx}$$

mit Stromdichten:

$$S_1 = \frac{\hbar k}{m} (1 - |D|^2)$$

$$S_2 = \frac{\hbar q}{m} (|A|^2 - |B|^2)$$

$$S_3 = \frac{\hbar k}{m} (|G|^2)$$

Kontinuitätsgleichung: $\Rightarrow S_1 = S_2 = S_3$

$$\text{d.h. } k(1 - |D|^2) = q(|A|^2 - |B|^2) = k|G|^2$$

Stetigkeit für Wellenfunktion:

$$e^{-ika} + De^{ika} = Ae^{-iqa} + Be^{iqa}$$

$$Ae^{iqa} + Be^{-iqa} = Ge^{ika}$$

...und der 1. Ableitung der Wellenfunktion:

$$k(e^{-ika} - De^{ika}) = q(Ae^{-iqa} - Be^{iqa})$$

$$q(Ae^{iqa} + Be^{-iqa}) = kGe^{ika}$$

\Rightarrow 4 Gleichungen für 4 Unbekannte

$$\Rightarrow \text{Reflexionskoeffizient: } R = |D|^2 = \frac{(q^2 - k^2)^2 \sin^2 2qa}{4k^2 q^2 \cos^2 2qa + (k^2 + q^2)^2 \sin^2 2qa}$$

$$\Rightarrow \text{Transmissionskoeffizient: } T = |G|^2 = \frac{4k^2 q^2}{4k^2 q^2 \cos^2 2qa + (k^2 + q^2)^2 \sin^2 2qa}$$

wegen

$$\begin{aligned} & (q^4 - 2q^2 k^2 + k^4) \sin^2 2qa \\ &= (q^2 + k^2)^2 \sin^2 2qa - 4q^2 k^2 \sin^2 2qa \\ &= (q^2 + k^2)^2 \sin^2 2qa - 4q^2 k^2 (1 - \cos^2 2qa) \end{aligned}$$

folgt $\Rightarrow R + T = 1$ (wie erwartet)

klassisch: $E > 0 \Rightarrow T = 1, R = 0$

quantenmechanisch: $E > 0 \Rightarrow R > 0$ für fast alle E (drastischer Unterschied zum klassischen Verhalten!)

- $E \gg V_0 \Rightarrow q \approx k \Rightarrow R \rightarrow 0$ (ähnlich klassisch)
- $E \rightarrow 0 \Rightarrow k \rightarrow 0 \Rightarrow T \rightarrow 0$ Das heißt, daß der Strom (fast) völlig reflektiert wird, der Potentialgraben ist also für niederenergetische Teilchen fast nicht zu passieren!
- $R \propto \sin^2 2qa \Rightarrow R = 0$ für $q = q_n = \frac{n\pi}{2a}$ Das heißt, daß es bestimmte Energien gibt, bei denen Totaltransmission auftritt. Interpretation: auslöschende Interferenzen der an vorderer und hinterer Wand des Potentialgrabens reflektierten Wellen. Es gibt also keine reflektierten Wellen!

jetzt: $-V_0 < E < 0$, diskretes Spektrum:

mit $K^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} > 0$, $q^2 = \frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2} > 0$ folgen:

$$\varphi_1''(x) - K^2 \varphi_1(x) = 0 \Rightarrow \varphi_1(x) = C_1 e^{Kx}$$

$$\varphi_2''(x) + q^2 \varphi_2(x) = 0 \Rightarrow \varphi_2(x) = A \cos qx + B \sin qx$$

$$\varphi_3''(x) - K^2 \varphi_3(x) = 0 \Rightarrow \varphi_3(x) = C_2 e^{-Kx}$$

(in φ_1 und φ_2 wurde die Normierung bereits vorausgesetzt)

Stetigkeit der Wellenfunktion und der 1. Ableitung:

$$C_1 e^{-Ka} = A \cos qa - B \sin qa \quad (I)$$

$$C_2 e^{-Ka} = A \cos qa + B \sin qa \quad (II)$$

$$KC_1 e^{-Ka} = q(A \sin qa + B \cos qa) \quad (III)$$

$$-KC_2 e^{-Ka} = q(-A \sin qa + B \cos qa) \quad (IV)$$

$$III/I \Rightarrow K = q \frac{A \sin qa + B \cos qa}{A \cos qa - B \sin qa} \quad (*)$$

$$IV/II \Rightarrow K = q \frac{A \sin qa - B \cos qa}{A \cos qa + B \sin qa} \quad (**)$$

$$* = ** \Rightarrow (A \sin qa + B \cos qa)(A \cos qa + B \sin qa) = (A \sin qa - B \cos qa)(A \cos qa - B \sin qa)$$

$$AB \underbrace{(\sin^2 qa + \cos^2 qa)}_1 = -AB \underbrace{(\sin^2 qa + \cos^2 qa)}_1$$

$$\Rightarrow 2AB = 0 \text{ d.h. } A = 0 \text{ oder } B = 0$$

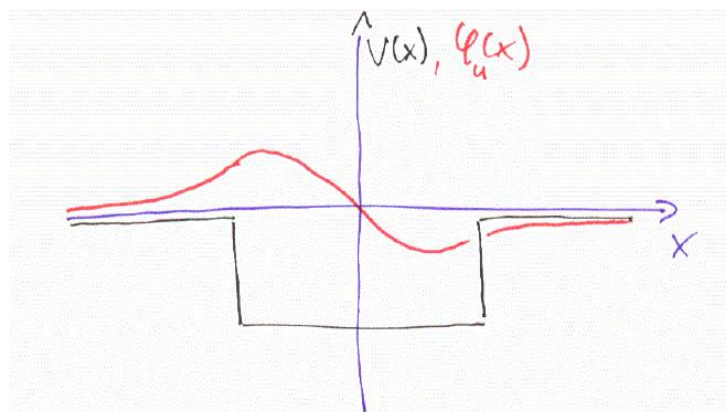
1. Fall $A = 0$

$$I/II \Rightarrow C_1 e^{-Ka} = -B \sin qa$$

$$C_2 e^{-Ka} = B \sin qa$$

$$\Rightarrow C_1 = -C_2$$

ungerade bzw. antisymmetrische Lösung: $\varphi(-x) = -\varphi(x)$



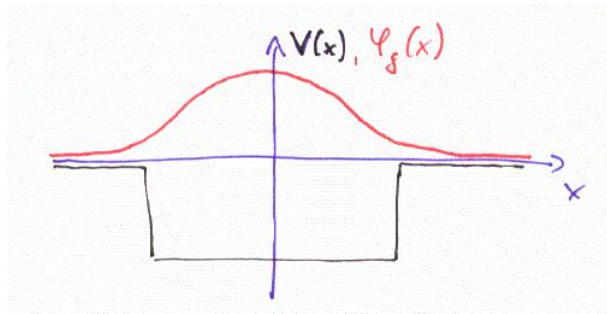
2. Fall $B = 0$

$$I/II \Rightarrow C_1 e^{-Ka} = A \cos qa$$

$$C_2 e^{-Ka} = A \cos qa$$

$$\Rightarrow C_1 = C_2$$

gerade bzw. symmetrische Lösung: $\varphi(-x) = \varphi(x)$



jetzt symmetrische Lösung:

$$\varphi_1(x) = C_1 e^{Kx} \quad x < -a$$

$$\varphi_2(x) = A \cos qx \quad -a < x < a$$

$$\varphi_3(x) = C_1 e^{-Kx} \quad x > a$$

mit $K > 0$, $C_1 e^{-Ka} = A \cos qa$ (I) A bzw. C_1 durch Normierung festzulegen

$$III/I \Rightarrow \frac{K}{q} = \tan(qa) \quad (*)$$

weitere Bedingung an Wellenfunktion, jetzt auswerten:

mit $k_0^2 = \frac{2m}{\hbar^2} V_0$ folgt aus Definition von k und q :

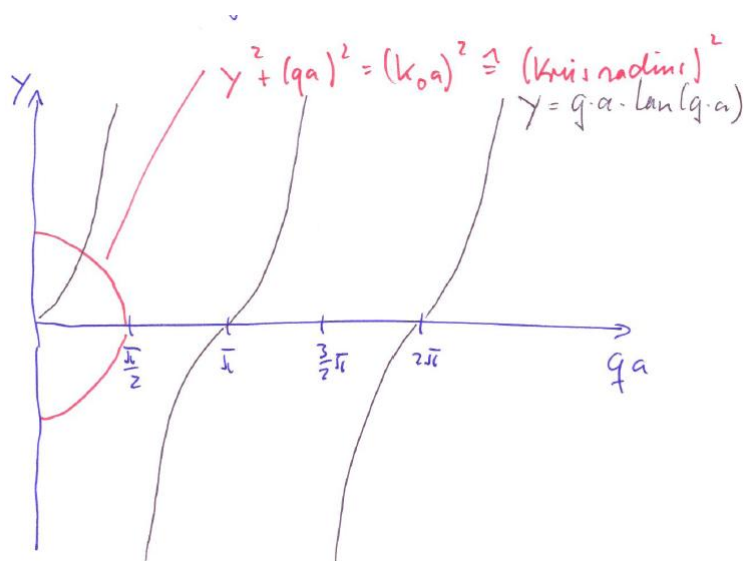
$$q^2 = k_0^2 - K^2$$

$$(*) \cdot a \Rightarrow K \cdot a = qa \tan(qa)$$

$$\sqrt{(k_0 a)^2 - (qa)^2} = \underbrace{qa \tan(qa)}_y$$

$$\Rightarrow (qa)^2 + y^2 = (k_0 a)^2$$

graphische Lösung:



Offensichtlich wächst die Anzahl der Lösungen mit der Tiefe des Potentialgrabens. Es gibt mindestens eine symmetrische Lösung!

Jetzt antisymmetrische Lösung

$$\varphi_1 = C_1 e^{Kx} \quad x < -a$$

$$\varphi_2 = B \sin qx \quad -a < x < a$$

$$\varphi_3 = -C_1 e^{Ka} \quad x > a$$

mit $K > 0, C_1 e^{-Ka} = -B \sin qa$ (I)

durch Normierung festzulegen

$$III/I \Rightarrow \frac{K}{q} = -\cot(qa) \quad (*)$$

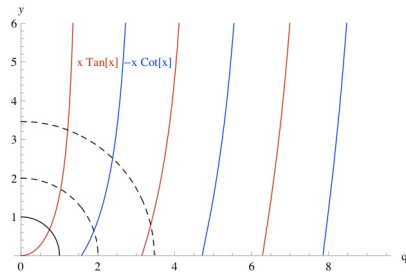
weitere Bedingung an WF, jetzt auszuwerten:

$$(*) \cdot a \Rightarrow \underbrace{K \cdot a}_{=\sqrt{(k_0 a)^2 - (qa)^2}} = - \underbrace{qa \cot(qa)}_y$$

$$\text{mit } k_0^2 = \frac{2m}{\hbar^2} V_0$$

$$y^2 + (qa)^2 = (k_0 a)^2$$

graphische Lösung (hier zusammen mit dem vorigen Fall, man sieht das sich gerade und ungerade Zustände abwechseln):



Anzahl der Lösungen wächst wieder mit Tiefe des Potentialgrabends. Allerdings kann auch keine antisymmetrische Lösung existieren! (Übung: unendlich tiefer Potentialtopf)

4 Einführung in die Axiomatik der Quantenmechanik

4.1 Der Hilbert-Raum

1. Axiom der Quantenmechanik:

Physikalische Zustände quantenmechanischer Systeme werden durch 1D-Unterräume eines separablen Hilbert-Raums dargestellt, d.h. durch sogenannte Zustandsvektoren $|\Psi\rangle$. Der auf 1 normierte Zustandsvektor ist im allg. der Repräsentant des jeweiligen Quantenzustands.

Bem.:

- Zustandsvektoren $\alpha |\Psi\rangle$ mit $\alpha \neq 0$ phys. gleichwertig
- $\Psi(x)$ bzw. $\varphi(p)$ sind spezielle Darstellungen des Quantenzustands, die sich aus $|\Psi\rangle$ gewinnen lassen

Der Hilbert-Raum \mathbb{H} ist ein linearer, separabler und vollständiger komplexer Vektorraum, in dem ein Skalarprodukt definiert ist.

Linearität:

- $|\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle \in \mathbb{H} \implies |\Psi_1\rangle + |\Psi_2\rangle \in \mathbb{H}$

- $|\Psi\rangle \in \mathbb{H} \Rightarrow \alpha |\Psi\rangle \in \mathbb{H}$ mit $\alpha \in \mathbb{C}$

insbesondere gilt:

- $|\Psi_1\rangle + |\Psi_2\rangle = |\Psi_2\rangle + |\Psi_1\rangle$
- $|\Psi_1\rangle + \{|\Psi_2\rangle + |\Psi_3\rangle\} = \{|\Psi_1\rangle + |\Psi_2\rangle\} + |\Psi_3\rangle$
- $a(b|\Psi\rangle) = (ab)|\Psi\rangle$
- $a(|\Psi_1\rangle + |\Psi_2\rangle) = a|\Psi_1\rangle + a|\Psi_2\rangle$

$$\Rightarrow |\Psi\rangle \in \mathbb{H} \Rightarrow -|\Psi\rangle \in \mathbb{H}$$

$$|\Psi\rangle + (-|\Psi\rangle) = |0\rangle \quad \text{.. Nullelement von } \mathbb{H}$$

$$\text{gilt: } |\Psi\rangle + |0\rangle = |\Psi\rangle ; 0|\Psi\rangle = |0\rangle$$

Skalarprodukt: Ist eine Abbildung, die $|\Psi\rangle, |\varphi\rangle \in \mathbb{H}$ eine komplexe Zahl $\langle \varphi | \Psi \rangle$ zuordnet, wobei gilt: $\langle \varphi | \Psi \rangle = \langle \Psi | \varphi \rangle^*$

für alle $a \in \mathbb{C}$: $\langle \varphi | a\Psi \rangle = a \langle \varphi | \Psi \rangle$

Skalarprodukt linear: $\langle \varphi | \Psi_1 + \Psi_2 \rangle = \langle \varphi | \Psi_1 \rangle + \langle \varphi | \Psi_2 \rangle$

wegen Definition: $\langle \Psi | \Psi \rangle \in \mathbb{R}$

über Skalarprodukt läßt sich Norm $\|\Psi\|$ eines Vektors $|\Psi\rangle$ definieren:

$$\|\Psi\|^2 = \langle \Psi | \Psi \rangle$$

- $|\Psi\rangle$ heißt normiert, wenn gilt $\|\Psi\| = \sqrt{\langle \Psi | \Psi \rangle} = 1$
- Normierungsvorschrift $|\Psi\rangle \rightarrow \frac{|\Psi\rangle}{\|\Psi\|}$
- Ein Satz von normierten (vom Nullvektor verschiedenen) Zustandsvektoren $|\Psi_1\rangle$
... $|\Psi_n\rangle$ heißt orthonormal, wenn für zwei beliebige Elemente $|\Psi_i\rangle$ und $|\Psi_j\rangle$ gilt:

$$\langle \Psi_i | \Psi_j \rangle = \delta_{ij}$$

Seperabilität: Ein Raum heißt seperabel, wenn in ihm eine abzählbare dichte Teilmenge existiert.

\Rightarrow können zu jedem $|\Psi\rangle \in \mathbb{H}$ eine Folge $|\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle$ konstruieren, die $\lim_{n \rightarrow \infty} |\Psi_n\rangle = |\Psi\rangle$ erfüllt. (Bem.: Rationale Zahlen sind abzählbar dichte Teilmenge der reellen Zahlen)

\Rightarrow In jedem Hilbert-Raum existiert eine Menge von Basisvektoren $|\alpha_1\rangle, |\alpha_2\rangle, \dots$, die den ganzen Raum aufspannen. Jeder Zustand $|\Psi\rangle \in \mathbb{H}$ ist durch Basiselemente darstellbar:

$$|\Psi\rangle = \sum_{k=1}^{\infty} a_k |\alpha_k\rangle$$

i.allg.ONB: $\langle \alpha_k | \alpha_l \rangle = \delta_{kl}$

Komponenten a_k aus Skalarproduktbildung

$$\langle \alpha_k | \Psi \rangle = \sum_{l=1}^{\infty} a_l \underbrace{\langle \alpha_k | \alpha_l \rangle}_{\delta_{kl}} = a_k$$

jetzt Komponenten einsetzen

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= \sum_{k=1}^{\infty} a_k |\alpha_k\rangle = \sum_k \langle \alpha_k | \Psi \rangle |\alpha_k\rangle \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} |\alpha_k\rangle \langle \alpha_k | \Psi \rangle \\ &\Rightarrow \sum_k |\alpha_k\rangle \langle \alpha_k| = \hat{I} \text{..Identitätsoperator} \end{aligned}$$

Bem.: Damit diese Darstellung des Identitätsoperators in jeder Basis existiert, muß die Vollständigkeit des Hilbertraums vorausgesetzt sein. D.h. der Raum darf keine "Löcher" haben, wie z.B. $\sqrt{2}$ in der Menge der rationalen Zahlen.

Skalarprodukt in Komponentendarstellung:

$$\begin{aligned} |\varphi\rangle &= \sum_k a_k |\alpha_k\rangle; |\Psi\rangle = \sum_l b_l |\alpha_l\rangle \\ \Rightarrow \langle \varphi | \Psi \rangle &= \sum_{k,l} a_k^* b_l \underbrace{\langle \alpha_k | \alpha_l \rangle}_{\delta_{kl}} = \sum_l a_l^* b_l \end{aligned}$$

4.2 Operatoren im Hilbert-Raum

Der Zustandsvektor $|\Psi\rangle$ enthält alle Informationen über den physikalischen Zustand des qm Systems. Wie kommt man von $|\Psi\rangle$ zu den physikalischen Observablen wie Ort, Impuls, Energie usw.?

2. Axiom der Quantenmechanik:

Jeder Observablen entspricht ein hermitescher Operator. Ort- und Impulsoperatoren erfüllen Vertauschungsrelationen:

$$[\hat{x}_j, \hat{p}_k] = i\hbar \hat{I}_{jk}$$

$$[\hat{p}_j, \hat{p}_k] = 0 = [\hat{x}_j, \hat{x}_k]$$

Formal ist Operator \hat{A} eine Vorschrift, die einem Element des Hilbert-Raumes ein anderes Element zuordnet:

$$|\varphi\rangle = \hat{A}|\Psi\rangle \equiv |\hat{A}\Psi\rangle, |\varphi\rangle, |\Psi\rangle \in \mathbb{H}$$

$$\hat{A} \text{ linear: } \hat{A}(a|\Psi_1\rangle + b|\Psi_2\rangle) = a\hat{A}|\Psi_1\rangle + b\hat{A}|\Psi_2\rangle$$

(Bem.: In der Quantenmechanik sind nur lineare Operatoren relevant, weil Zustände superpositioniert werden können)

$$\text{Summe von Operatoren: } (\hat{A} + \hat{B})|\Psi\rangle = \hat{A}|\Psi\rangle + \hat{B}|\Psi\rangle = \hat{B}|\Psi\rangle + \hat{A}|\Psi\rangle = (\hat{B} + \hat{A})|\Psi\rangle$$

$$\text{Produkt von Operatoren: } (\hat{A}\hat{B})|\Psi\rangle = \hat{A}(\hat{B}|\Psi\rangle) \neq \hat{B}(\hat{A}|\Psi\rangle) \quad (\text{i.allg.})$$

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

Für den zu \hat{A} gehörigen adjungierten Operator \hat{A}^+ gilt:

$$\langle \varphi | \hat{A}\Psi \rangle = \langle \hat{A}^+\varphi | \Psi \rangle \quad \forall |\varphi\rangle, |\Psi\rangle \in \mathbb{H}$$

- $(\hat{A} + \hat{B})^+ = \hat{A}^+ + \hat{B}^+$
- $(\hat{A}^+)^+ = \hat{A}$
- $(a\hat{A})^+ = a^*\hat{A}^+$
- $(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+\hat{A}^+$

Ein Operator heißt selbstadjungiert oder hermitesch, falls $\hat{A}^+ = \hat{A}$.

Identitätsoperator: $\hat{I}|\Psi\rangle = |\Psi\rangle \quad \forall |\Psi\rangle \in \mathbb{H}$

Projektionsoperator \hat{P}_s : von H auf Unterraum S , der durch N Basisvektoren $|\alpha_i\rangle, i = 1, \dots, N$ aufgespannt wird

$$\hat{P}_s |\alpha_i\rangle = |\alpha_i\rangle \quad i = 1, \dots, N$$

$$\hat{P}_s |\alpha_i\rangle = |0\rangle \quad i = N + 1, \dots, \infty$$

$$\text{klar: } \hat{P}_s^2 = \hat{P}_s$$

Unitäre Operator: lassen Skalarprodukt invariant, d.h. $\langle \varphi | \Psi \rangle = \langle \hat{U} \varphi | \hat{U} \Psi \rangle$ für \hat{U} unitär.

$$\text{klar: } \hat{U}^+ = \hat{U}^{-1}$$

Matrixdarstellung von Operatoren in einer Basis

betrachten $\hat{A} : |\varphi\rangle = \hat{A} |\Psi\rangle$

entwickeln: $|\Psi\rangle = \sum_n C_n |\alpha_n\rangle, \quad |\varphi\rangle = \sum_n d_n |\alpha_n\rangle$ damit

$$\sum_n d_n |\alpha_n\rangle = \hat{A} \sum_n C_n |\alpha_n\rangle \quad | \cdot \langle \alpha_m |$$

$$\sum_n d_n \underbrace{\langle \alpha_m | \alpha_n \rangle}_{\delta_{mn}} = \sum_n C_n \underbrace{\langle \alpha_m | \hat{A} \alpha_n \rangle}_{A_{mn}}$$

A_{mn} = Matricelement von \hat{A} in Basis $\{|\alpha_n\rangle\}$

$$\Rightarrow d_m = \sum_n A_{mn} C_n$$

damit Matrixgleichung gefunden:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \end{pmatrix}}_{|\varphi\rangle} = \underbrace{\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots \\ A_{21} & & \\ \vdots & & \end{pmatrix}}_{\hat{A}} \underbrace{\begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \vdots \end{pmatrix}}_{|\Psi\rangle}$$

Matricelement von \hat{A}_{mn}^+ ?

$$\hat{A}_{mn}^+ = \langle \alpha_m | \hat{A}^+ \alpha_n \rangle = \langle \hat{A} \alpha_m | \alpha_n \rangle = \langle \alpha_n | \hat{A} \alpha_m \rangle^* = \hat{A}_{nm}^*$$

Eigenwerte und Eigenvektoren von Operatoren

Falls gilt: $\hat{A}|\Psi\rangle = a|\Psi\rangle$ mit $a \in \mathbb{C}$

$\Rightarrow |\Psi\rangle$ Eigenvektor (EV) zum Eigenwert (EW) a von \hat{A}

Eigenwerte hermitescher Operatoren sind reell

Beweis:

$$\begin{aligned} \hat{A}^+|\Psi\rangle &= \hat{A}|\Psi\rangle = a|\Psi\rangle & |\langle\Psi| \\ \underbrace{\langle\Psi|\hat{A}^+\Psi\rangle} &= \langle\hat{A}\Psi|\Psi\rangle = a^* \langle\Psi|\Psi\rangle \\ \underbrace{\langle\Psi|\hat{A}\Psi\rangle}_{a\langle\Psi|\Psi\rangle} & \\ &\Rightarrow a = a^* \end{aligned}$$

Eigenwertspektrum: Gesamtheit aller EW eines Operators

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

a_n .. n-ter EW, $|\Psi_n\rangle$.. n-ter EV

Bei Entartung gehören zu einem EW a_n mehrere linear unabhängige EV $|\alpha_{n\alpha}\rangle$ mit $\alpha = 1, 2, \dots, M_n$, dabei ist α = Erwartungsindex und M_n = Grad der Entartung

Jede Linearkombination von entarteten EV ist wieder ein EV zum gleichen EW.

Beweis: Bilden Linearkombination

$$|\varphi_n\rangle = \sum_{\alpha=1}^{M_n} C_{n\alpha} |\Psi_{n\alpha}\rangle$$

wenden

$$\hat{A}$$

an

$$\hat{A}|\varphi_n\rangle = \sum_{\alpha} C_{n\alpha} \underbrace{\hat{A}|\Psi_{n\alpha}\rangle}_{a_n|\Psi_{n\alpha}\rangle} = a_n \underbrace{\sum_{\alpha} C_{n\alpha} |\Psi_{n\alpha}\rangle}_{|\varphi_n\rangle}$$

Eigenvektoren von hermiteschen Operatoren, die zu verschiedenen
EW gehören, sind orthogonal.

Beweis:

$$\begin{aligned}\hat{A}|\Psi_1\rangle &= a_1|\Psi_1\rangle; \hat{A}|\Psi_2\rangle = a_2|\Psi_2\rangle \\ \langle\Psi_2|\hat{A}\Psi_1\rangle &= a_1\langle\Psi_2|\Psi_1\rangle \\ &= \langle\hat{A}^+\Psi_2|\Psi_1\rangle = \langle\Psi_1|\hat{A}\Psi_2\rangle^* = a_2^*\langle\Psi_1|\Psi_2\rangle^* = a_2\langle\Psi_2|\Psi_1\rangle \\ \Rightarrow 0 &= \underbrace{(a_2 - a_1)}_{\neq 0}\langle\Psi_2|\Psi_1\rangle \Rightarrow \langle\Psi_2|\Psi_1\rangle = 0\end{aligned}$$

Eigenzustände von hermiteschen Operatoren mit diskretem
Eigenwertspektrum bilden ein vollständiges Orthogonalsystem
(VONS).

Beweis: Hilbert

\Rightarrow Können jeden Vektor $|\Psi\rangle \in \mathbb{H}$ nach Eigenzuständen eines hermiteschen Operators \hat{A} entwickeln.

$$|\Psi\rangle = \sum_n C_n |\Psi_n\rangle$$

Darstellung von \hat{A} in $\{|\Psi\rangle\}$?

$$A_{nm} = \langle\Psi_n|\hat{A}\Psi_m\rangle = a_m \underbrace{\langle\Psi_n|\Psi_m\rangle}_{\delta_{nm}} = a_m \delta_{nm}$$

d.h. hermitesche Operatoren sind in Eigendarstellung diagonal.

4.3 Dirac-Schreibweise

bisher Zustandsvektor $|\Psi\rangle \rightarrow$ ket-Vektor $|\Psi\rangle$

dualer (adjungierter) Vektor $|\Psi\rangle^+ \rightarrow$ bra-Vektor $\langle\Psi|$

(Erinnerung lineare Algebra: Vektoren $\langle\chi|$ des dualen Raums sind Linearformen $\chi(|\Psi\rangle)$ die auf dem Raum der Vektoren $|\Psi\rangle$ definiert sind)

Skalarprodukt $\rightarrow \langle bra | \cdot | ket \rangle$

$$\text{Bem.: } \langle\Psi|\varphi\rangle = \langle\Psi| \cdot |\varphi\rangle$$

$$\begin{aligned}
 &= |\Psi\rangle^+ \langle\varphi|^+ \\
 &= (\langle\varphi| \cdot |\Psi\rangle)^+ \\
 &= \langle\varphi|\Psi\rangle^*
 \end{aligned}$$

→ für komplexe Zahlen ist die Adjungation und die komplexe Konjugation identisch;
konsistent mit Einführung des Skalarprodukts früher

$|ket\rangle \langle bra|$ → "dyadisches Produkt", ist Operator

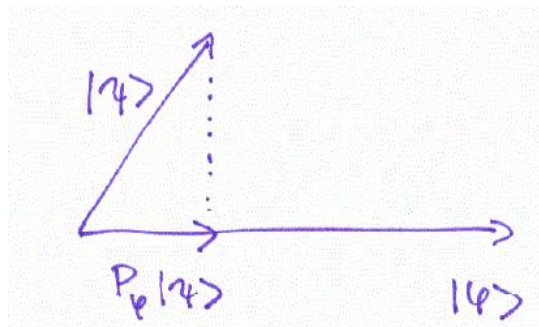
$$\hat{\Omega} = |\Psi\rangle \langle\varphi|$$

$$\hat{\Omega}^+ = (|\Psi\rangle \langle\varphi|)^+ = \langle\varphi|^+ |\Psi\rangle^+ = |\varphi\rangle \langle\Psi|$$

$$\hat{\Omega} |\chi\rangle = |\Psi\rangle \underbrace{\langle\varphi|\chi\rangle}_{\text{Skalarprodukt}}$$

$$\langle\Phi|\hat{\Omega}|\chi\rangle = \langle\Phi|\Psi\rangle \langle\varphi|\chi\rangle$$

speziell: $|\varphi\rangle \langle\varphi| = \hat{P}_\varphi$.. Projektionsoperator auf $|\varphi\rangle$, projiziert $|\varphi\rangle$ - Komponente aus Vektor $|\Psi\rangle$ heraus:



früher (IV.2): \hat{P}_s projiziert auf Unterraum von \mathbb{H} , der durch Basis $\{|\alpha_i\rangle\} \quad i = 1, \dots, N$ aufgespannt wird.

Jetzt explizite Darstellung mit Dirac-Schreibweise möglich:

$$\hat{P}_s = \sum_N^{k=1} |\alpha_k\rangle \langle\alpha_k|$$

früher (IV.2): Matrixdarstellung eines Operators \hat{A} durch

$$A_{mn} = \langle \Psi_m | \hat{A} | \Psi_n \rangle$$

gewonnen. Jetzt: Operator aus Matrixdarstellung gewinnen:

$$\begin{aligned}\hat{A} &= \hat{I} \hat{A} \hat{I} = \sum_m |\Psi_m\rangle \langle \Psi_m| \hat{A} \sum_n |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n| \\ &= \sum_{mn} |\Psi_m\rangle \underbrace{\langle \Psi_m| \hat{A} \Psi_n \rangle}_{A_{mn}} \langle \Psi_n|\end{aligned}$$

für beliebige Orthonormalbasis $\{|\Psi_n\rangle\}$

jetzt speziell: Basis der EV von \hat{A} , d.h. $\hat{A} |\Psi_n\rangle = a_n |\Psi_n\rangle$

$$\Rightarrow A_{mn} = a_n \delta_{mn}$$

$$\begin{aligned}\Rightarrow \hat{A} &= \sum_{mn} |\Psi_m\rangle \delta_{mn} a_n \langle \Psi_n| = \sum_n |\Psi_n\rangle a_n \langle \Psi_n| \\ &= \sum_n a_n |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n| \\ &= \sum_n a_n \hat{P}_n\end{aligned}$$

Spektral- oder Eigendarstellung eines Operators

$$\hat{A} = \sum_n a_n \hat{P}_n$$

Bem.: Für beliebige Funktion $f(\hat{A})$ gilt:

$$f(\hat{A}) = \sum_n f(a_n) |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n|$$

mit $a_n, |\Psi_n\rangle$ EW und EV von \hat{A}

Beweisidee:

- betrachten

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

- analog

$$\hat{A}^k = \sum_n a_n^k |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n|$$

- Taylorentwicklung von $f(\hat{A}) = f(0) + f'(0) \cdot \hat{A} + \frac{1}{2}f''(0) \cdot \hat{A}^2 + \dots$
- jeden Summanden einzeln behandeln wie oben

Warum ist die Spektraldarstellung von Operatoren interessant?

3. Axiom der Quantenmechanik:

Das Spektrum jedes hermiteschen Operators entspricht der Menge der zulässigen Meßwerte der zugehörigen Observablen.

Wie bestimmt man den zu einer Observablen zugehörigen Operator?

starten von den Basisobservablen $x \rightarrow \hat{x}$ und $p \rightarrow \hat{p}$

(I) klassische, physikalische Größen der Form $A = A_1(x) + A_2(p) \rightarrow \hat{A} = A_1(\hat{x}) + A_2(\hat{p})$

(II) alle anderen Fälle (z.B. $A = A(x \cdot p)$)

→ basteln so lange, bis Ergebnis mit empirischen Befunden übereinstimmt

Bsp. für (I): Drehimpuls

klassisch: $\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p}$

quantenmechanisch: $\hat{L} = \hat{x} \times \hat{p}$

d.h. Komponentenweise $\hat{L}_i = \epsilon_{ijk} \hat{x}_j \hat{p}_k$

Bem.: \exists qm. Observable ohne klassisches Analogon, z.B. Spin (später)

Wie kommt man zu einer allgemeinen Darstellung der Basisobservablen Ort und Impuls?

4.4 Darstellungstheorie

Für Orts- und Impulsoperator gelten die Eigenwertgleichungen

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

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

mit EW x, p und EV $|x\rangle, |p\rangle$

Definieren Translationsoperator

$$\hat{T}(\beta) = e^{-\frac{i}{\hbar}\beta\hat{p}} \quad \text{Parameter } \beta \in \mathbb{R}$$

$$\hat{T}^+(\beta) = e^{(\frac{-i}{\hbar}\beta\hat{p})^+} = e^{\frac{i}{\hbar}\beta\hat{p}} = \hat{T}(-\beta) = \hat{T}^{-1}(\beta)$$

(wegen \hat{p} hermitesch)

$\Rightarrow \hat{T}$ unitär

2.Axiom der QM: $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ kann verallgemeinert werden auf

$$[\hat{x}, g(\hat{p})] = i\hbar \frac{dg(\hat{p})}{d\hat{p}}$$

(Beweis über Taylor-Reihe und vollständige Induktion)

Anwendung hier

$$[\hat{x}, \hat{T}(\beta)] = i\hbar \frac{d\hat{T}(\beta)}{d\hat{p}} = \beta\hat{T}(\beta)$$

$$[\hat{x}, \hat{T}(\beta)] |x\rangle = \beta\hat{T}(\beta) |x\rangle$$

$$= \hat{x}\hat{T}(\beta) |x\rangle - \underbrace{\hat{T} \hat{x}}_{|x\rangle} |x\rangle$$

$$\Rightarrow \hat{x}\hat{T}(\beta) |x\rangle = (x + \beta)\hat{T}(\beta) |x\rangle$$

d.h. auch $\hat{T}(\beta) |x\rangle$ ist EV von \hat{x} mit EW $(x + \beta)$

in eingeführter Notation $\hat{T}(\beta) |x\rangle = |x + \beta\rangle$

mit $\hat{T}(\beta)$ kann beliebiger Eigenvektor des Ortsoperators erzeugt werden

\Rightarrow Ortsoperator hat kontinuierliches Spektrum

Insbesondere kann EV $|x\rangle$ erzeugt werden

$$|x\rangle = \hat{T}(x) \underbrace{|x=0\rangle}_{\text{EV zum EW } x=0}$$

$$\langle x|x\rangle = \langle x=0|\hat{T}^+(x)\hat{T}(x)|x=0\rangle$$

\hat{T} unitär

$$\begin{aligned}\langle x|x\rangle &= \langle x=0|\hat{T}^{-1}\hat{T}|x=0\rangle \\ &= \langle x=0|x=0\rangle\end{aligned}$$

d.h. $|x\rangle = \hat{T}(x)|x=0\rangle$ normiert, wenn $|x=0\rangle$ normiert ist

Analog kann mit Translationsoperator

$$\hat{G}(\alpha) = e^{\frac{i}{\hbar}\alpha\hat{x}} \quad \alpha \in \mathbb{R}$$

jeder beliebiger Impulseigenvektor

$$|p\rangle = \hat{G}(p)|p=0\rangle$$

erzeugt werden.

\hat{x}, \hat{p} hermitesch \rightarrow orthogonale EV

Wegen kontinuierlicher Eigenwertspektren genügen die Basisvektoren $\{|x\rangle\}$ und $\{|p\rangle\}$ der verallgemeinerten Orthonormalitätsbedingung.

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x-x')$$

$$\langle p|p'\rangle = \delta(p-p')$$

früher (3.2):

$$f(\hat{A}) = \sum_n f(a_n) |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n|$$

verallgemeinern jetzt auf kontinuierliches Spektrum, damit:

$$f(\hat{A}) = \int da f(a) |\Psi_a\rangle \langle \Psi_a|$$

speziell:

$$\hat{T}(x) = \int dp |p\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}xp} \langle p| \quad (*)$$

$$\hat{G}(p) = \int dx |x\rangle e^{\frac{i}{\hbar}xp} \langle x|$$

jetzt Impuls-EV $|p\rangle$ in Ortsdarstellung angeben:

$$\langle x|p\rangle = \langle x=0|\hat{T}^+(x)|p\rangle$$

$$\begin{aligned}
&= \langle x = 0 | \hat{T}(-x) | p \rangle \\
&\stackrel{(*)}{=} \int dp' \langle x = 0 | p' \rangle e^{\frac{i}{\hbar}xp'} \underbrace{\langle p' | p \rangle}_{\delta(p-p')} \\
&= e^{\frac{i}{\hbar}xp} \underbrace{\langle x = 0 | p \rangle}_{?}
\end{aligned}$$

gilt

$$\delta(p - p') = \langle p | p' \rangle = \int dx \underbrace{\langle p | x \rangle}_* \underbrace{\langle x | p' \rangle}_{**}$$

(oben berechnet)

$$* = e^{-\frac{i}{\hbar}xp} \langle p | x = 0 \rangle$$

$$** = e^{\frac{i}{\hbar}xp'} \langle x = 0 | p' \rangle$$

damit

$$\begin{aligned}
\delta(p - p') &= \int dx e^{\frac{i}{\hbar}x(p'-p)} \langle p | x = 0 \rangle \langle x = 0 | p' \rangle \\
&= 2\pi\hbar\delta(p - p') |\langle p | x = 0 \rangle|^2
\end{aligned}$$

\Rightarrow Normierbarkeit erfordert $\langle x = 0 | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$

Darstellung der Eigenzustände $|p\rangle$ des Impulsoperators \hat{p} in Ortsdarstellung, d.h. in Basis $\{|x\rangle\}$ des Ortsoperators

$$\langle x | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}xp}$$

ohne Rechnen (komplexe Konjugation)

Impulsdarstellung der Eigenzustände $|x\rangle$ des Ortsoperators

$$\langle p | x \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar}xp}$$

Brauchen noch allg. Zustände $|\Psi\rangle$ sowie Operatoren in Orts- und Impulsdarstellung.

Ortsdarstellung von $|\Psi\rangle$

$$\Psi(x) := \langle x | \Psi \rangle = \int dp \underbrace{\langle x | p \rangle}_{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}xp}} \underbrace{\langle p | \Psi \rangle}_{\varphi(p)}$$

geht durch FT aus Impulsdarstellung hervor

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp e^{\frac{i}{\hbar}xp} \varphi(p)$$

analog umgekehrt

$$\varphi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx e^{-\frac{i}{\hbar}xp} \Psi(x)$$

Das heißt, daß der Formalismus konsistent mit der heuristischen Einführung (2.2) ist.

Einnerung Interpretation:

- $|\langle x|\Psi\rangle|^2 = |\Psi(x)|^2$.. Wahrscheinlichkeitsdichte bei Ortsmessung an einem Quantensystem im Zustand $|\Psi\rangle$ den EW x zum Ortsoperator \hat{x} zu messen
- $|\langle p|\Psi\rangle|^2 = |\varphi(x)|^2$.. Wahrscheinlichkeitsdichte bei Impulsmessung den EW p zum Impulsoperator \hat{p} zu messen

Orts- und Impulsdarstellung von Operatoren

Ortsoperator \hat{x}

- In Ortsdarstellung

$$\langle x|\hat{x}|x'\rangle = \langle x|x'|x'\rangle = x' \underbrace{\langle x|x'\rangle}_{\delta(x-x')} = x'\delta(x-x')$$

formal korrekt, aber unüblich

einfacher: starten von Abb. $|\Psi\rangle \xrightarrow{\hat{x}} |\varphi\rangle$, d.h.

$$|\varphi\rangle = \hat{x}|\Psi\rangle \quad | \langle x|$$

$$\underbrace{\langle x|\varphi\rangle}_{\varphi(x)} = \langle x|\hat{x}|\Psi\rangle = \int dx' \underbrace{\langle x|\hat{x}|x'\rangle}_{x'\delta(x-x')} \underbrace{\langle x'|\Psi\rangle}_{\Psi(x')} = x\Psi(x)$$

$$\text{d.h. } \varphi(x) = x\Psi(x)$$

Damit können wir die Zuordnung $\hat{x} \rightarrow x$ treffen (konsistent mit heuristischer Einführung in 2.2).

- In Impulsdarstellung

$$\langle p|\hat{x}|p'\rangle = -\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dp'} \delta(p-p')$$

$$\text{bzw. } \hat{x} \rightarrow -\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dp} \quad (\text{Übung})$$

Impulsoperator \hat{p}

- In Ortsdarstellung

starten von Abb. $|\Psi\rangle \xrightarrow{\hat{p}} |\varphi\rangle$ d.h.

$$\begin{aligned}
 |\varphi\rangle &= \hat{p}\Psi \quad \langle x| \\
 \langle x|\varphi\rangle &= \langle x|\hat{p}\Psi\rangle \\
 &= \int dx' \underbrace{\langle x|\hat{p}|x'\rangle}_{\text{gesucht!}} \langle x'|\Psi\rangle \quad (*) \\
 &= \int dx' \int dp' \underbrace{\langle x|\hat{p}|p'\rangle}_{\langle x|p'\rangle} \underbrace{\langle p'|x'\rangle}_{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar}x'p'}} \langle x'|\Psi\rangle \\
 &\quad \underbrace{p'}_{p' \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}xp'}} \langle x|p'\rangle \\
 &= \int dx' dp' \frac{1}{2\pi\hbar} \underbrace{p' e^{\frac{i}{\hbar}p'(x-x')}}_{\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} e^{\frac{i}{\hbar}p'(x-x')}} \langle x'|\Psi\rangle \\
 &= \int dx' \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \underbrace{\int \frac{dp'}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}p'(x-x')}}_{\delta(x-x')} \langle x'|\Psi\rangle
 \end{aligned}$$

vgl. mit (*)

$$\Rightarrow \langle x|\hat{p}|x'\rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \delta(x-x')$$

Formal korrekt, lässt sich aber vereinfachen - führen Integration in (*) aus

$$\begin{aligned}
 \underbrace{\langle x|\varphi\rangle}_{\varphi(x)} &= \int dx' \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \delta(x-x') \underbrace{\langle x'|\Psi\rangle}_{\Psi(x')} \\
 \Rightarrow \varphi(x) &= \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \Psi(x)
 \end{aligned}$$

damit Zuordnung $\hat{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ aus 2.2 bestätigt!

- In Impulsdarstellung

$$\langle p|\hat{p}|p'\rangle = p\delta(p-p')$$

bzw. $\hat{p} = p$ (Beweis: Übung)

Bem.:

- können aus \hat{x} und \hat{p} zusammengesetzte Operatoren $\hat{A}(\hat{x}, \hat{p})$ ebenfalls in Orts- oder Impulsdarstellung ausdrücken, z.B. Ortsdarstellung

$$\hat{A}(\hat{x}, \hat{p}) \rightarrow A\left(x, \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}\right)$$

- Orts- und Impulsdarstellung sind nur zwei Möglichkeiten die QM zu formulieren. Prinzipiell können wir Zustände $|\Psi\rangle$ und Operatoren \hat{A} in einer beliebigen Basis $\{|\varphi_n\rangle\}$ darstellen. Oft ist z.B. die Energiedarstellung, d.h. die Entwicklung nach EV des Hamiltonoperators zielführend.

\Rightarrow sinnvoll, die Born'sche Wahrscheinlichkeitsinterpretation (die sich auf die Ortsdarstellung bezieht) auf eine beliebige Darstellung zu erweitern:

4. Axiom der Quantenmechanik:

Ist $\{|\varphi_n\rangle\}$ eine vollständige Basis, die aus den EV einer Observablen A besteht, so daß $\hat{A}|\varphi_n\rangle = a_n|\varphi_n\rangle$ gilt, dann ist $|\langle\varphi_n|\Psi\rangle|^2$ die Wahrscheinlichkeit, daß im qm. Zustand $|\Psi\rangle$ bei einem Experiment der Eigenwert a_n gemessen wird.

4.5 Meßprozeß in der Quantenmechanik

früher (II.1) Erwartungswerte beliebiger Funktionen des Orts $f(x)$ und des Impulses $g(p)$ bestimmt

$$\bar{f} = \int dx \Psi^*(x) f(x) \Psi(x)$$

$$\bar{g} = \int dx \Psi^*(x) g\left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}\right) \Psi(x)$$

verallgemeinern jetzt auf Erwartungswert \bar{A} einer Observablen A in Ortsdarstellung

$$\bar{A} = \int dx \Psi^*(x) A\left(x, \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}\right) \Psi(x)$$

$$= \int dx \int dx' \langle\Psi|x\rangle \langle x|\hat{A}|x'\rangle \langle x'|\Psi\rangle$$

d.h.

$$\bar{A} = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle$$

darstellungsfreier Ausdruck des Erwartungswertes

bestimmt durch:

- \hat{A} .. hermitescher Operator
- $|\Psi\rangle$.. qm. Zustand

\bar{A} reell:

$$\bar{A} = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle = \langle \hat{A} \Psi | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{A} \Psi \rangle^* = \bar{A}^*$$

Erwartungswert $\hat{=}$ Mittelwert einer Vielzahl von Messungen des Zustands $|\Psi\rangle$

Wie kann $|\Psi\rangle$ so präpariert werden, daß jede Messung auf \bar{A} führt?

Fordern, daß Streuung $\Delta A = \sqrt{\langle (\hat{A} - \bar{A})^2 \rangle}$ verschwindet!

$$\begin{aligned} \Rightarrow 0 &\stackrel{!}{=} (\Delta A)^2 = \overline{(\hat{A} - \bar{A})^2} = \langle \Psi | (\hat{A} - \bar{A})^2 | \Psi \rangle \quad \underbrace{=} \quad \langle (\hat{A} - \bar{A}) \Psi | (\hat{A} - \bar{A}) \Psi \rangle \\ &\hspace{15em} \hat{A} \text{ hermitesch} \\ &\Rightarrow \|(\hat{A} - \bar{A}) \Psi\| \stackrel{!}{=} 0 \\ &\Rightarrow \hat{A} |\Psi\rangle = \bar{A} |\Psi\rangle \end{aligned}$$

D.h. stimmt bei qm. Messung der Erwartungswert mit den Ergebnissen der Einzelmessung überein, dann ist $|\Psi\rangle$ ein EV von \hat{A} und gemessen wird der EW von \hat{A} !

Zwei Messungen kurz hintereinander müssen zum selben Ergebnis kommen (sonst macht Messen keinen Sinn). Das heißt, daß das Ergebnis der zweiten Messung schon vorher feststeht!

$\Rightarrow \Delta A = 0 \Rightarrow$ messen Eigenwert von \hat{A} (Argumentation von oben)

\Rightarrow Das heißt, daß das Ergebnis der 1. Messung auch schon ein EW von \hat{A} gewesen sein muß.

\Rightarrow D.h. 1. Messung hat Zustand $|\Psi\rangle$ so beeinflusst, daß sich nach der Messung das System in einem Eigenzustand von \hat{A} befindet.

\Rightarrow Meßprozeß führt zum Kollaps der Wellenfunktion.

5. Axiom der Quantenmechanik:

Unmittelbar nach einer Messung der Observablen A mit dem Meßresultat a befindet sich das System sicher im Zustand $|a\rangle$.

D.h. vor der Messung ist das System in einem Zustand $|\Psi\rangle$. Messen Observable A , die durch \hat{A} ausgedrückt wird. EV von \hat{A} bilden ONS $\{|\varphi_n\rangle\}$, können $|\Psi\rangle$ nach $\{|\varphi_n\rangle\}$ entwickeln

$$|\Psi\rangle = \sum_n \langle\varphi_n|\Psi\rangle |\varphi_n\rangle$$

Erwartungswert der Messung

$$\begin{aligned} \bar{A} &= \langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle = \sum_{n,m} \langle\Psi|\varphi_n\rangle \underbrace{\langle\varphi_n|\hat{A}|\varphi_m\rangle}_{\langle\varphi_n|a_m|\varphi_m\rangle} \langle\varphi_m|\Psi\rangle \\ &= \sum_n a_n |\langle\varphi_n|\Psi\rangle|^2 \end{aligned}$$

a_n - mögliche Meßwerte

$|\langle\varphi_n|\Psi\rangle|^2$ - Wahrscheinlichkeit der jeweiligen Meßwerte

Nach der 1. Messung ist das System mit Wahrscheinlichkeit $|\langle\varphi_n|\Psi\rangle|^2$ im Zustand $|\varphi_n\rangle$, d.h. Wellenfunktion ist kollabiert, eine weitere Messung ergibt mit Sicherheit den Meßwert a_n .

4.6 Zeitliche Evolution

4.6.1 Zeitentwicklungsoperatoren und Bilder

zeitliche Entwicklung der Zustände durch SG bestimmt

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi\rangle = \hat{H}(\hat{x}, \hat{p}) |\Psi\rangle$$

Wahrscheinlichkeit kann nicht verloren gehen, d.h. Norm von $|\Psi\rangle$ bleibt erhalten, d.h. $|\Psi(t_0)\rangle \xrightarrow{\hat{H}} |\Psi(t)\rangle$ muß durch unitären Operator darstellbar sein.

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

mit $\hat{U}(t, t_0)$ = Zeitentwicklungsoperator, unitär

Einsetzen in SG:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H} \hat{U}(t, t_0)$$

falls \hat{H} nicht zeitabhängig, gilt:

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)}$$

Es ist oft sinnvoll \hat{U} in Energiedarstellung anzugeben

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

$$U_{mn} = \langle \varphi_m | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} | \varphi_n \rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n(t-t_0)} \delta_{mn}$$

damit

$$\begin{aligned} \langle \varphi_m | \Psi(t) \rangle &= \langle \varphi_m | \hat{U}(t, t_0) | \Psi(t_0) \rangle \\ &= \sum_n U_{mn}(t, t_0) \langle \varphi_n | \Psi(t_0) \rangle \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar} E_m(t-t_0)} \langle \varphi_m | \Psi(t_0) \rangle \end{aligned}$$

D.h. Koeffizienten $\langle \varphi_m | \Psi(t) \rangle$ oszillieren mit Eigenfrequenz $\omega_m = \frac{E_m}{\hbar}$.

Schrödingerbild:

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

zeitliche Änderung wird durch unitären Operator \hat{U} beschrieben:

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

$$\text{mit } \hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)}$$

(bisher immer im Schrödingerbild)

Operatoren sind im Schrödingerbild zeitunabhängig (allenfalls explizit zeitabhängig).

D.h.

$$\dot{\hat{A}}_s = \frac{d}{dt} \hat{A}_s = \frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_s$$

Zeitabhängigkeit von Matrixelementen

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \underbrace{\langle \Psi_s | \hat{A}_s | \phi_s \rangle}_{=:\langle \Psi_s | \hat{A}_s | \phi_s \rangle} &= - \left\langle \frac{i}{\hbar} \hat{H} \Psi_s | \hat{A}_s | \phi_s \right\rangle + \left\langle \Psi_s | \frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_s | \phi_s \right\rangle + \left\langle \Psi_s | \hat{A}_s | - \frac{i}{\hbar} \hat{H} \phi_s \right\rangle \\
 &= \left\langle \Psi_s | \frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{A}_s + \frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_s - \frac{i}{\hbar} \hat{A}_s \hat{H} | \phi_s \right\rangle \\
 &= \left\langle \Psi_s | \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}_s] + \frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_s | \phi_s \right\rangle \\
 \Rightarrow \dot{\hat{A}}_s &= \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_s, \hat{A}_s] + \frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_s \neq \dot{\hat{A}}_s
 \end{aligned}$$

$\dot{\hat{A}}_s$ = Operator der zeitlichen Änderung der Observablen A

$\dot{\hat{A}}_s$ = zeitliche Änderung des Operators der Observablen A

Heisenbergbild

Zustände zeitunabhängig, Operatoren zeitabhängig

$$\begin{aligned}
 \langle \Psi_s(t) | \hat{A}_s | \phi_s(t) \rangle &= \underbrace{\langle \Psi_s(t_0) |}_{\langle \Psi_H |} \underbrace{\hat{U}^+(t, t_0) \hat{A}_s \hat{U}(t, t_0)}_{\hat{A}_H(t)} \underbrace{| \phi_s(t_0) \rangle}_{| \phi_H \rangle} \\
 \hat{A}_H(t) &= e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} \hat{A}_s e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)}
 \end{aligned}$$

\hat{A}_H und $| \phi_H \rangle$... Operatoren und Zustände im Heisenbergbild

offensichtlich $\hat{H}_s = \hat{H}_H = \hat{H}$

es gilt (Übung):

$$\dot{\hat{A}}(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}_H(t)] + \frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_H = \dot{\hat{A}}$$

Wechselwirkungs- oder Dirac-Bild : sowohl Zustandsvektoren als auch Operatoren zeitabhängig, angewendet in Fällen wo

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$$

\hat{H}_0 - zeitunabhängig

\hat{H}_1 - zeitabhängige Störung

Annahme: $\hat{H}_1 = 0$, dann Zeitabhängigkeit bestimmt durch $\hat{U}_0(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0(t-t_0)}$

$$| \Psi_s(t) \rangle = \hat{U}_0(t, t_0) | \Psi(t_0) \rangle$$

falls $\hat{H}_1(t) \neq 0$, dann muß Gleichung modifiziert werden; Ansatz:

$$|\Psi_s(t)\rangle = \hat{U}_0(t, t_0) \underbrace{|\Psi_W(t)\rangle}_{\text{Zustandsvektor im WW-Bild}}$$

damit in SG:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi_s(t)\rangle = (\hat{H}_0 + \hat{H}_1) |\Psi_s(t)\rangle$$

unter Ausnutzung von

$$\frac{d}{dt} \hat{U}_0(t, t_0) = \frac{d}{dt} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0(t-t_0)} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0(t-t_0)} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 \hat{U}_0$$

folgt (Produktregel):

$$\begin{aligned} i\hbar \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \hat{H}_0 |\Psi_s\rangle + i\hbar \hat{U}_0 \frac{d}{dt} |\Psi_W\rangle &= (\hat{H}_0 + \hat{H}_1) |\Psi_s\rangle \\ i\hbar \hat{U}_0 \frac{d}{dt} |\Psi_W\rangle &= \hat{H}_1 |\Psi_s\rangle \quad |\hat{U}_0^+ \\ i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi_W(t)\rangle &= \underbrace{\hat{U}_0^+ \hat{H}_1 \hat{U}_0}_{\hat{H}_{1W}(t)} |\Psi_W(t)\rangle \end{aligned}$$

D.h. Zeitabhängigkeit des Zustandsvektors durch Störung $\hat{H}_1(t)$ getrieben

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi_W(t)\rangle = \hat{H}_{1W}(t) |\Psi_W(t)\rangle$$

Zeitabhängigkeit der Operatoren

$$\hat{A}_W(t) := \hat{U}_0^+(t, t_0) \hat{A}_s \hat{U}_0(t, t_0)$$

bestimmt durch

$$\frac{d}{dt} \hat{A}_W(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_0, \hat{A}_W(t)] + \frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_W(t) \quad (\text{Übung})$$

d.h. durch zeitunabhängigen Operator \hat{H}_0

Bem.: Dirac-Bild besonders relevant für praktische Rechnungen!

6. Axiom der Quantenmechanik:

Die Zeitenwicklung eines qm. Zustands wird durch qm. Evolutionsgleichung bestimmt.

Bem.: (hier, Physik C) SG, für relativistische Teilchen Dirac-Gleichung oder Klein-Gordon-Gleichung

4.7 Unschärferelation

4.7.1 Vertauschbare Operatoren

Satz: Sind \hat{A} und \hat{B} vertauschbare, hermitesche Operatoren, d.h. $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, so lassen sich immer gemeinsame Eigenzustände finden, die sowohl $\hat{A}|\varphi\rangle = a|\varphi\rangle$ als auch $\hat{B}|\varphi\rangle = b|\varphi\rangle$ erfüllen.

Beweis für nichtentartete Eigenwerte

EV $|\Psi_n\rangle$ von \hat{A} erfüllen

$$\hat{A}|\Psi_n\rangle = a_n|\Psi_n\rangle \quad |\hat{B}$$

$$\hat{B}\hat{A}|\Psi_n\rangle = \hat{A}\hat{B}|\Psi_n\rangle = a_n\underbrace{\hat{B}|\Psi_n\rangle}_{|\tilde{\Psi}_n\rangle}$$

$\Rightarrow \hat{B}|\Psi_n\rangle = |\tilde{\Psi}_n\rangle$ ebenfalls EV von \hat{A} zum EW a_n

keine Entartung vorausgesetzt!, d.h. $|\tilde{\Psi}_n\rangle \parallel |\Psi_n\rangle$

$\Rightarrow |\Psi_n\rangle$ muß wegen $\hat{B}|\Psi_n\rangle = |\tilde{\Psi}_n\rangle$ ebenfalls EV von \hat{B} sein, d.h. $\hat{B}|\Psi_n\rangle = b_n|\Psi_n\rangle$

Konsequenzen für Meßprozeß?

falls $|\Psi\rangle$ gemeinsamer EV von \hat{A} und \hat{B} , dann folgt

$$(\Delta A)^2 = \langle \Psi | (\hat{A} - \bar{A})^2 | \Psi \rangle = 0 = (\Delta B)^2$$

d.h. man kann die Observablen A und B gleichzeitig beliebig genau messen

Bem.: gegebenenfalls muß das qm. System erst geeignet präpariert werden, um in einem Eigenzustand zu sein

4.7.2 Nichtvertauschbare Operatoren

$$(\Delta A)^2 = \underbrace{\langle (\hat{A} - \bar{A}) \Psi |}_{\langle u |} \underbrace{(\hat{A} - \bar{A}) \Psi \rangle}_{| u \rangle} = \langle u | u \rangle$$

$$(\Delta B)^2 = \underbrace{\langle (\hat{B} - \bar{B}) \Psi |}_{\langle v |} \underbrace{(\hat{B} - \bar{B}) \Psi \rangle}_{| v \rangle} = \langle v | v \rangle$$

es gilt die Schwarz'sche Ungleichung

$$\langle u|u \rangle \langle v|v \rangle \geq |\langle u|v \rangle|^2$$

damit hier (mit $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$)

$$\begin{aligned} (\Delta A)(\Delta B) &\geq |\langle u|v \rangle| = \left| \underbrace{\frac{\langle u|v \rangle + \langle v|u \rangle}{2}}_{\alpha} + \underbrace{\frac{\langle u|v \rangle - \langle v|u \rangle}{2}}_{i\beta} \right| \\ &= |\alpha + i\beta| = \sqrt{\alpha^2 + \beta^2} \geq |\beta| \\ \Rightarrow (\Delta A)(\Delta B) &\geq \frac{1}{2} |\langle u|v \rangle - \langle v|u \rangle| \end{aligned}$$

es gilt:

$$\begin{aligned} \langle u|v \rangle - \langle v|u \rangle &= \left\langle (\hat{A} - \bar{A}) \Psi \middle| (\hat{B} - \bar{B}) \Psi \right\rangle - \left\langle (\hat{B} - \bar{B}) \Psi \middle| (\hat{A} - \bar{A}) \Psi \right\rangle \\ &= \left\langle \Psi \middle| (\hat{A} - \bar{A}) (\hat{B} - \bar{B}) - (\hat{B} - \bar{B}) (\hat{A} - \bar{A}) \Psi \right\rangle \\ &= \left\langle \Psi \middle| \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \Psi \right\rangle \\ &= \left\langle \Psi \middle| [\hat{A}, \hat{B}] \Psi \right\rangle =: \overline{[A, B]} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow (\Delta A)(\Delta B) \geq \frac{1}{2} \overline{[A, B]}$$

verallgemeinerte HUR

D.h. wenn zwei Operatoren nicht vertauschen, können wir die zugehörigen Observablen nicht gleichzeitig (also für dasselbe $|\Psi\rangle$!) messen.

Beispiele

- HUR, $[\hat{p}, \hat{x}] = \frac{\hbar}{i} \hat{I}$
 $\rightarrow (\Delta x)(\Delta p) \geq \frac{\hbar}{2}$ (vgl. 2.3)
- "Energie-Zeit-Unschärfe"
 $\hat{H} |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle$
 \Rightarrow können $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} t$ als "Energieoperator \hat{E} " interpretieren

$$[\hat{E}, t] = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} t - ti\hbar \frac{\partial}{\partial t} = i\hbar$$

$$\Rightarrow (\Delta E)(\Delta t) \geq \frac{\hbar}{2}$$

Bem.: Zeit ist keine Observable des qm. Systems, sondern ein Parameter $t \in \mathbb{R}$, deshalb muß vorsichtig interpretiert werden!

Zeitpunkt, an dem ein Teilchen den Ort x_0 passiert, ist um $\Delta t \approx \frac{\Delta x}{v}$ unbestimmt.

Seine Energie hat Unbestimmtheit

$$\Delta E = \left. \frac{\partial E}{\partial p} \right|_{p=p_0} \quad \Delta p = \frac{p_0}{m} \Delta p = v \Delta p$$

$$\Rightarrow \Delta E \Delta t = v \Delta p \frac{\Delta x}{v} = \Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$$

D.h. wenn man Energie sehr genau messen will ($\Delta E \rightarrow 0$) muß Δp sehr klein sein ($\Delta p \rightarrow 0$), dann ist Δx sehr groß, d.h. $\Delta t \rightarrow \infty$, müssen unendlich lange messen.

Falls der Zustand nicht hinreichend lange existiert (Bsp. angeregter Zustand eines Atoms), bleibt seine Energie unscharf (sogenannte "Lebensdauerbreitening").

- (4.3. Drehimpuls)

$$\hat{L} = \hat{L}x \times \hat{p} \quad \text{d.h.} \quad \hat{L}_i = \epsilon_{ijk} \hat{x}_j \hat{p}_k$$

$$\Rightarrow (\Delta L_x)(\Delta L_y) \geq \frac{\hbar}{2} |\bar{L}_z| \quad (\text{Übung})$$

d.h. Unschärferelation hängt hier vom Zustand des Systems selbst ab!

5 Harmonischer Oszillator

grundlegendes Modellsystem, z.B. atomare Schwingungen

5.1 Schrödingergleichung

Erinnerung Physik A, 4.4:

$$E = E_{KIN} + E_{POT} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} k x^2$$

mit Federkonstante $k = m\omega_0^2$

ω_0 .. Eigenfrequenz

\Rightarrow Hamiltonoperator in Ortsdarstellung

$$\hat{H}(\hat{x}, \hat{p}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2\hat{x}^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2$$

stationäre Lösung aus $\hat{H}\Psi = E\Psi$

Vereinfachung durch dimensionslose Variablen

$$x \rightarrow \xi = \sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}} x$$

damit in SG:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar\omega_0}{2} \frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{\hbar\omega_0}{2} \xi^2$$

normalisieren Energie $E \rightarrow \epsilon = \frac{E}{\hbar\omega_0}$

damit

$$\frac{1}{2} \left(-\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2 \right) \varphi(\xi) = \epsilon \varphi(\xi)$$

5.2 Grundzustand

weitere Vereinfachung des Hamiltonoperators

Definieren "Erzeugungsoperator"

$$\hat{b}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-\frac{d}{d\xi} + \xi \right)$$

und "Vernichtungsoperator"

$$\begin{aligned} \hat{b} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{d}{d\xi} + \xi \right) \\ \hat{b}^+\hat{b} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-\frac{d}{d\xi} + \xi \right) \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{d}{d\xi} + \xi \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(-\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi \frac{d}{d\xi} - \underbrace{\frac{d}{d\xi} \xi}_{-1 - \xi \frac{d}{d\xi}} + \xi^2 \right) \end{aligned}$$

$$= \underbrace{\frac{1}{2} \left(-\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2 \right)}_{\hat{H}\text{-dimensionsloser Hamiltonoperator}} \quad -\frac{1}{2}$$

$$\Rightarrow \left(\hat{b}^+ \hat{b} + \frac{1}{2} \right) \varphi = \epsilon \varphi \quad | \int d\xi \varphi^*(\xi)$$

$$\int d\xi \varphi^* \hat{b}^+ \hat{b} \varphi = \left(\epsilon - \frac{1}{2} \right) \int d\xi \varphi^*(\xi) \varphi(\xi)$$

\hat{b}, \hat{b}^+ adjungiert zueinander

$$\Rightarrow \int d\xi \hat{b} \varphi^*(\xi) \hat{b} \varphi(\xi) = \left(\epsilon - \frac{1}{2} \right) \int d\xi |\varphi|^2$$

$$\Rightarrow \epsilon - \frac{1}{2} = \frac{\int d\xi |\hat{b} \varphi|^2}{\int d\xi |\varphi|^2} \geq 0 \Rightarrow \epsilon \geq \frac{1}{2}$$

$\epsilon = \frac{1}{2}$ falls $\hat{b} \varphi(\xi) = 0$

dies legt nahe, daß $\hat{b} \varphi_0 \equiv 0$ den Grundzustand bestimmt, falls φ_0 normierbar; untersuchen

$$\hat{b} \varphi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{d}{d\xi} + \xi \right) \varphi_0(\xi) = 0$$

$$\Rightarrow \frac{d\varphi_0}{d\xi} + \xi \varphi_0 = 0$$

$$\varphi_0 = C e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \quad C \text{ aus Normierung}$$

$$1 \stackrel{!}{=} C^2 \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi}_{\sqrt{\pi}} \Rightarrow C = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}}$$

Grundzustand des harmonischen Oszillators

$$\varphi_0(\xi) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-\frac{1}{2}\xi^2}; \epsilon_0 = \frac{1}{2}$$

5.3 Eigenwertspektrum

vorhin

$$\hat{b} \varphi_0 = 0 \quad | \hat{b}^+$$

$$\hat{b}^+ \hat{b} \varphi_0 = 0 \quad | \hat{b}^+$$

$$\hat{b}^+ \hat{b}^+ \hat{b} \varphi_0 = 0$$

$$\hat{b}^+ \hat{b} = \hat{b} \hat{b}^+ - \underbrace{[\hat{b}, \hat{b}^+]}_{i(\text{Übung})}$$

$$\hat{b}^+ (\hat{b} \hat{b}^+ - \hat{I}) \varphi_0 = 0$$

$$\hat{b}^+ \hat{b} (\hat{b}^+ \varphi_0) = \hat{b}^+ \varphi_0 \quad (*) \quad | + \frac{1}{2} \hat{b}^+ \varphi_0$$

$$\left(\hat{b}^+ \hat{b} + \frac{1}{2} \right) (\hat{b}^+ \varphi_0) = \left(1 + \frac{1}{2} \right) (\hat{b}^+ \varphi_0)$$

$$\text{vorhin } \left(\hat{b}^+ \hat{b} + \frac{1}{2} \right) \varphi = \epsilon \varphi \text{ (dimensionslose SG)}$$

$\Rightarrow \hat{b}^+ \varphi_0$ ist ebenfalls EV der dimensionslosen SG mit EW $1 + \frac{1}{2}$

$\Rightarrow \varphi_1 \propto \hat{b}^+ \varphi_0$ (noch nicht normiert)

$$\epsilon_1 = 1 + \frac{1}{2} = \frac{3}{2}$$

Bem.: streng genommen nicht klar, daß $\hat{b}^+ \varphi_0$ tatsächlich Anlaß zum nächsthöheren EW ϵ_1 gibt. Beweis kann über die Anzahl der Knoten in Ortsdarstellung geführt werden.

jetzt interessiert in weiteren EW, EV, starten von (*)

$$\hat{b}^+ \hat{b} (\hat{b}^+ \varphi_0) = \hat{b}^+ \varphi_0 \quad | \hat{b}^+$$

$$\hat{b}^+ \underbrace{\hat{b}^+ \hat{b}}_{\hat{b} \hat{b}^+ - \hat{I}} \hat{b}^+ \varphi_0 = \hat{b}^+ \hat{b}^+ \varphi_0$$

$$\hat{b}^+ (\hat{b} \hat{b}^+ - 1) \hat{b}^+ \varphi_0 = (\hat{b}^+)^2 \varphi_0$$

$$\hat{b}^+ \hat{b} (\hat{b}^+)^2 \varphi_0 = 2 (\hat{b}^+)^2 \varphi_0 \quad | + \frac{1}{2} (\hat{b}^+)^2 \varphi_0$$

$$\left(\hat{b}^+ \hat{b} + \frac{1}{2} \right) (\hat{b}^+)^2 \varphi_0 = \left(2 + \frac{1}{2} \right) (\hat{b}^+)^2 \varphi_0$$

Vergleich mit dimensionsloser SG liefert weiteren EW und EV

$$\varphi_2 \propto (\hat{b}^+)^2 (\varphi_0); \epsilon_2 = 2 + \frac{1}{2} = \frac{5}{2}$$

allgemein gilt

$$\left(\hat{b}^+\hat{b} + \frac{1}{2}\right) \left(\hat{b}^+\right)^n \varphi_0 = \left(n + \frac{1}{2}\right) \left(\hat{b}^+\right)^n \varphi_0$$

$$\varphi_n \propto \left(\hat{b}^+\right)^n \varphi_0, \epsilon_n = n + \frac{1}{2}$$

mit $\epsilon = \frac{E}{\hbar\omega_0}$ folgt $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_0$

Bem.:

- tiefste Energie $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0 \neq 0$,
sogenannte "Nullpunktsenergie"; ist übrigens die kleinste Energie, die mit der HUR kompatibel ist. (Beweis: Übung)
- Energieniveaus äquidistant
- \hat{b}^+ erhöht Anregungszustand um ein "Energiequant des Oszillators" = "Photon"
→ \hat{b}^+ deswegen "Erzeugungsoperator" genannt
- $\underbrace{\hat{b}^+\hat{b}}_{\text{Anzahloperator}} \left(\hat{b}^+\right)^n \varphi_0 = n \left(\hat{b}^+\right)^n \varphi_0$
- \hat{b} vernichtet ein Energiequant \Rightarrow "Vernichtungsoperator"

5.4 Eigenfunktionen

normierter Zustand

$$\varphi_n = C_n \left(\hat{b}^+\right)^n \varphi_0 = \frac{C_n}{C_{n-1}} \left(\hat{b}^+\right) \underbrace{C_{n-1} \left(\hat{b}^+\right)^{n-1} \varphi_0}_{\varphi_{n-1} \text{..normiert}}$$

wegen Normierung gilt

$$1 = \int d\xi |\varphi_n|^2 = \frac{C_n^2}{C_{n-1}^2} \int \underbrace{d\xi |b^+ \varphi_{n-1}|^2}_{\int d\xi \varphi_{n-1} \hat{b} \hat{b}^+ \varphi_{n-1}}$$

$$\int d\xi \varphi_{n-1} \hat{b} \hat{b}^+ \varphi_{n-1} = \int d\xi \varphi_{n-1}^* \left(\hat{b}^+\hat{b} + 1\right) \varphi_{n-1} = n$$

$\hat{b}^+\hat{b}$ = Anzahloperator, führt auf $n - 1 +$ Orthonormalität

$$\Rightarrow C_n = \frac{1}{\sqrt{n}} C_{n-1} = \frac{1}{\sqrt{n(n-1)}} C_{n-2} = \dots$$

$$\Rightarrow C_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} C_0 \text{ mit } C_0 = 1 \text{ (Normierung in 5.2)}$$

Es folgen die normierten Eigenfunktionen

$$\varphi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{b}^+)^n \varphi_0$$

Bem.: speziell folgt

$$-\hat{b}^+ \varphi_n = \sqrt{n+1} \varphi_{n+1}$$

$$\hat{b} \varphi_n = \sqrt{n} \varphi_{n-1}$$

jetzt konkret

$$\begin{aligned} \varphi_1 &= \frac{1}{\sqrt{1!}} \hat{b}^+ \varphi_0 = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi} \sqrt{1!2}} \left(-\frac{d}{d\xi} + \xi \right) e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \\ &= \frac{1}{\sqrt[4]{\pi} \sqrt{1!2}} 2\xi e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \end{aligned}$$

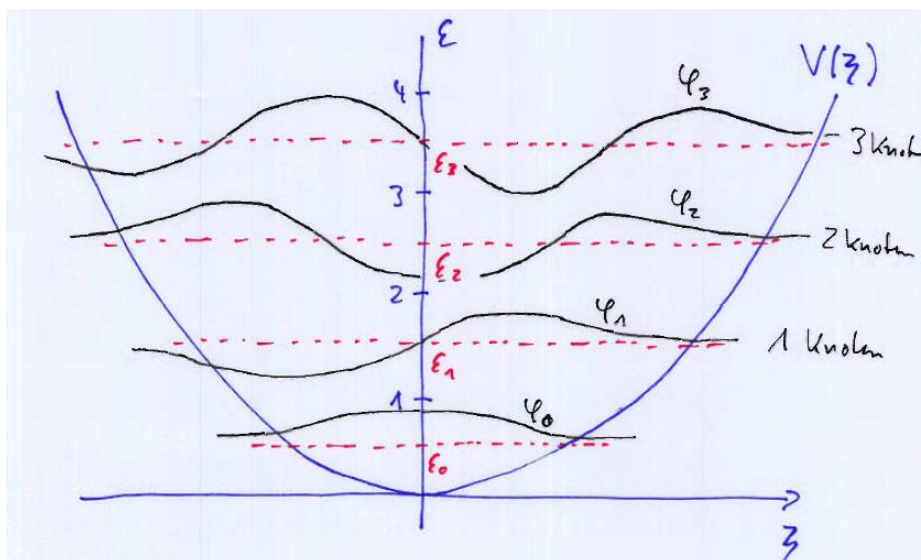
$$\varphi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{b}^+ \varphi_1 = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi} \sqrt{2!2^2}} (4\xi^2 - 2) e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$$

allgemein

$$\varphi_n = \underbrace{\frac{1}{\sqrt[4]{\pi} \sqrt{n!2^n}}}_{\text{Normierungsfaktor}} \underbrace{H_n(\xi)}_{\text{hermitesches Polynom}} \underbrace{e^{-\frac{1}{2}\xi^2}}_{\text{exponentielle Dämpfung}}$$

hermitesche Polynome

$$H_0 = 1; \quad H_1 = 2\xi; \quad H_2 = 4\xi^2 - 2; \quad H_3 = 8\xi^3 - 12\xi$$



Bem.:

1. φ_n löst dimensionslose SG

$$\Psi_n(x) = \sqrt[4]{\frac{m\omega_0}{\hbar}} \varphi_n(\xi)$$

2. Vgl. mit klass. Oszillator (Physik A, 4.4)

$$x = \sqrt{\frac{2E}{m\omega_0^2}} \sin \omega_0 t$$

$$\dot{x} = \sqrt{\frac{2E}{m\omega_0^2}} \omega_0 \cos \omega_0 t$$

$$\Rightarrow \omega_0^2 x^2 + \dot{x}^2 = \frac{2E}{m\omega_0^2} \omega_0^2$$

$$\Rightarrow |\dot{x}| = \omega_0 \sqrt{\frac{2E}{m\omega_0^2} - x^2}$$

Aufenthaltswahrscheinlichkeit in dx ? Bestimmen Wahrscheinlichkeitsdichte $w(x)$

$$w(x)dx = \frac{dt \text{ } \left. \begin{array}{l} \text{Zeit in dx} \\ \text{halbe Periodendauer} \end{array} \right\} T/2}{T/2}$$

$$\Rightarrow w(x) = \frac{dt/dx}{T/2} = \frac{2}{|\dot{x}|T} = \frac{\omega_0}{\pi|\dot{x}|} \quad \text{mit } T = \frac{2\pi}{\omega_0}$$

damit

$$w(x) = \frac{1}{\pi \sqrt{\frac{2E}{m\omega_0^2} - x^2}} \quad \text{für } |x| \leq \sqrt{\frac{2E}{m\omega_0^2}}$$

$$\text{sonst: } w(x) = 0$$

$$\text{mit } x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}} \xi, \quad E = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_0$$

$$\text{und } \frac{w(\xi)}{w(x)} = \frac{dx}{d\xi} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}}$$

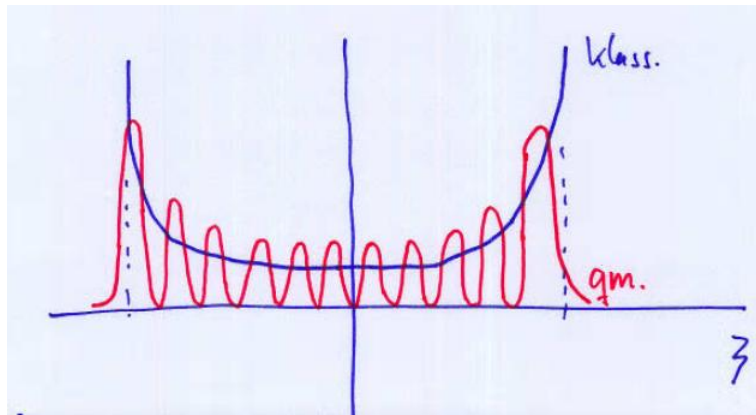
folgt klassisch

$$w(\xi) = \frac{1}{\pi \sqrt{2n+1 - \xi^2}} \quad \text{für } |\xi| \leq \sqrt{2n+1}$$

sonst: $w(\xi) = 0$

quantenmechanisch:

$$w(\xi) = |\varphi_n(\xi)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi n! 2^n}} H_n(\xi)^2 e^{-\xi^2}$$



Für große n nähern sich qm. und klass. Wahrscheinlichkeitsdichten an

3. bisher nur stationäre Lösungen betrachtet

$\varphi_n(\xi)$ mit ϵ_n

zeitabhängige Lösung ergibt sich (3.2) zu

$$|\varphi(t)\rangle = \sum_n C_n e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon_n t} |\varphi_n\rangle$$

mit $C_n = \langle \varphi_n | \varphi(0) \rangle$

$\varphi(0)$ entspricht den Anfangsbedingungen, ist im allgem. eine Überlagerung mehrerer Eigenzustände

6 Zentralfeld

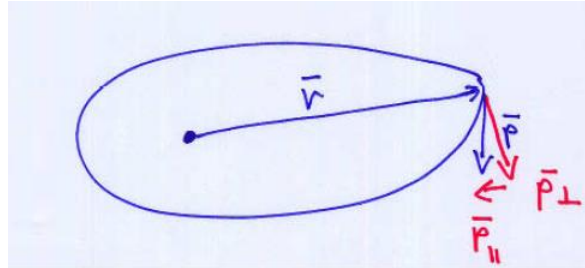
6.1 Erinnerung: klassisch

Zentralfeld: $V = V(r)$ mit $r = |\vec{r}|$

$$m\ddot{\vec{r}} = \vec{F} = -\frac{dV}{dr} \vec{\nabla} r = -\frac{dV}{dr} \frac{\vec{r}}{r}$$

$$\underbrace{m\bar{r} \times \ddot{\bar{r}}}_{\frac{d}{dt}(\bar{r} \times m\dot{\bar{r}})} = -\frac{dV}{dr}\bar{r} \times \frac{\bar{r}}{r} = 0 \quad \text{da } \bar{r} \times \bar{r} = 0$$

\vec{L} .. Drehimpuls, bleibt im Zentralfeld erhalten



$|\bar{p}_{||}| = \frac{\bar{r}\bar{p}}{r}$.. Projektion auf \bar{r}

$|\bar{p}_{\perp}| = \frac{\bar{r} \times \bar{p}}{r}$.. \perp zu \bar{r}

$$\bar{p}^2 = \bar{p}_{||}^2 + \bar{p}_{\perp}^2 = \underbrace{\left(\frac{\bar{r}\bar{p}}{r}\right)^2}_{p_r^2} + \underbrace{\left(\frac{\bar{r} \times \bar{p}}{r}\right)^2}_{\frac{\bar{L}^2}{r^2}}$$

damit kinetische Energie

$$T = \frac{\bar{p}^2}{2m} = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{1}{2mr^2}\bar{L}^2$$

und Gesamtenergie

$$H = T + V = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{1}{2mr^2}\bar{L}^2 + V(r)$$

6.2 Drehimpulsoperator

klassisch: $\vec{L} = \bar{r} \times \bar{p}$ d.h. $L_i = \epsilon_{ijk} x_j p_k$

quantenmechanisch: $\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p}$ d.h. $\hat{L}_i = \epsilon_{ijk} \hat{x}_j \hat{p}_k$

Klassisch gilt bei Bewegung im Zentralfeld die Erhaltung der Energie (Invarianz gegenüber zeitlichen Transformation) und des Drehimpulses (Isotropie des Raumes).

\Rightarrow man kann erwarten, daß Energie und Drehimpuls auch in qm. Zentralfeldern erhalten bleiben

\Rightarrow man kann erwarten, daß bestimmte Zustände gleichzeitig scharfe Werte für E und L

annehmen

$$\Rightarrow [\hat{L}, \hat{H}] = 0 \text{ (Übung)}$$

weiterhin gilt

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{L}_k$$

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

\Rightarrow Übung

EW und EV zu \hat{L}^2 und \hat{L}_z

wegen $[\hat{L}_i, \hat{L}^2] = 0$ können EV bestimmt werden, die gleichzeitig die Eigenwertgleichung für \hat{L}_i und \hat{L}^2 erfüllen. O.v.a.A.:

$$\hat{L}_i = \hat{L}_z$$

Wegen $[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = \epsilon_{ijk}i\hbar\hat{L}_k$ sind dann L_x und L_y unbestimmt

Indizieren EW zu \hat{L}^2 mit l und \hat{L}_z mit m

schreiben speziell

$$\hat{L}^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle$$

$$L_z |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle$$

hier wurden spezielle Ausdrücke für die EW verwendet, die sich später als sinnvoll erweisen werden

$|l, m\rangle \Rightarrow$ gemeinsamer EV zu \hat{L}^2 und \hat{L}_z

führen Leiteroperatoren ein:

$$\hat{L}_{\pm} = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y, \quad (\hat{L}_{\pm})^{\dagger} = \hat{L}_{\mp}$$

$$\hat{L}_x = \frac{1}{2} (\hat{L}_+ + \hat{L}_-) \Rightarrow \hat{L}_x^2 = \frac{1}{4} (\hat{L}_+ \hat{L}_+ + \hat{L}_+ \hat{L}_- + \hat{L}_- \hat{L}_+ + \hat{L}_- \hat{L}_-)$$

$$\hat{L}_y = \frac{1}{2i} (\hat{L}_+ - \hat{L}_-) \Rightarrow \hat{L}_y^2 = \frac{1}{4} (-\hat{L}_+ \hat{L}_+ + \hat{L}_+ \hat{L}_- + \hat{L}_- \hat{L}_+ - \hat{L}_- \hat{L}_-)$$

damit

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = \frac{1}{2} (\hat{L}_+ \hat{L}_- + \hat{L}_- \hat{L}_+) + \hat{L}_z^2$$

gelten Vertauschungsrelationen

$$[\hat{L}_+, \hat{L}_-] = 2\hbar\hat{L}_z$$

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

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

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

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

\Rightarrow (Übung)

$$\hat{L}^2 = \frac{1}{2} (\hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_-\hat{L}_+) + \hat{L}_z^2$$

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

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

damit

$$\underbrace{\hat{L}_+\hat{L}_-}_{(\hat{L}_-)^+\hat{L}_-} |l, m\rangle = \underbrace{(\hbar^2 l(l+1) - \hbar m(\hbar m - \hbar))}_{\hbar^2(l+m)(l-m+1)} |l, m\rangle \quad | \langle l, m|$$

$$\underbrace{\langle l, m| \hat{L}_+\hat{L}_-}_{|\hat{L}_- |l, m\rangle^2} |l, m\rangle = \underbrace{\langle l, m| \hbar^2(l+m)(l-m+1)}_{\hbar^2(l+m)(l-m+1)} |l, m\rangle$$

≥ 0 wenn $|l, m\rangle$ normiert

\Rightarrow Beziehung zwischen Drehimpulsquantenzahlen $(l+m)(l-m+1) \geq 0$ (*)

analog folgt aus $\hat{L}_-\hat{L}_+ = \hat{L}^2 - \hat{L}_z (\hat{L}_z + \hbar)$

$$(l-m)(l+m+1) \geq 0 \quad (**)$$

(*)/(**) erfüllt für

$$m \in \{-l, -l+1, \dots, l-1, l\} \quad (***)$$

D.h. zu jeder Drehimpulsquantenzahl l existieren $\max 2l+1$ Quantenzahlen für die z-Komponente des Drehimpulses, $(2l+1)$ Einstellungsmöglichkeiten des Drehimpulses

$$m^{\max} - m^{\min} = 2l = N \Rightarrow l = \frac{N}{2}$$

$(\Rightarrow) l$ kann nur ganz- oder halbzahlig sein:

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

trifft wegen (***) auch für m zu

Bem.: Einzig aus der Kenntnis der Kommutationsrelationen des Drehimpulses wurden zentrale Aussagen über mögliche Werte der Bahndrehimpulsquantenzahl l , die den Eigenwert $\hbar^2 l(l+1)$ von \hat{L}^2 beschreibt, und die z-Komponente $\hbar m$ gewonnen!

Veranschaulichung im Vektormodell

$$\hat{L}^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle$$

⇒ Betrag des Drehimpulses

$$|\bar{L}| = \hbar \sqrt{l(l+1)} > \hbar l$$

$$\hat{L}_z |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle \quad \text{mit } m \in \{-l, -l+1, \dots, l\}$$

D.h. für $l \neq 0$ $|\bar{L}| \neq L_z$

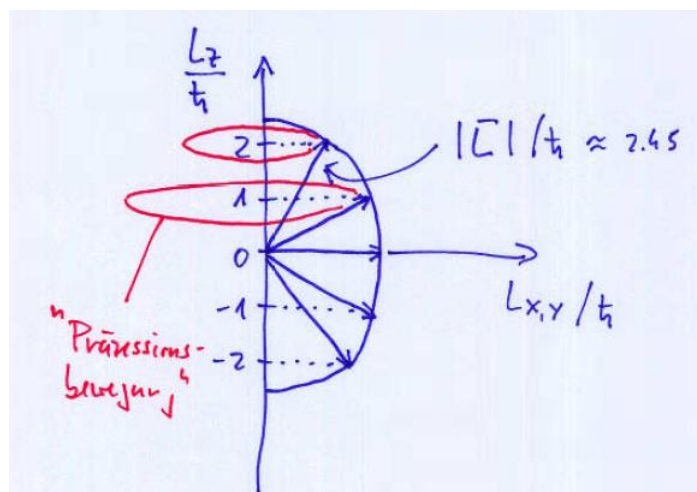
d.h. Bahndrehimpuls kann nicht $||\bar{e}_z$ sein!

Bem.: Ursache ist die Unschärferelation: falls $|\bar{L}||\bar{e}_z$ wären L_z, L_x, L_y bekannt!

anschauliche Interpretation: \bar{L} präzisiert um die z-Achse

Bsp.: $l = 2 \Rightarrow |\bar{L}| = \hbar \sqrt{2(2+1)} \approx \hbar \cdot 2,45$

$m \in \{-2, -1, 0, 1, 2\}$



"Präzessionsbewegung" ist eine klassische Vorstellung; wie sehen EV zum Drehimpulsoperator tatsächlich aus?

vorhin:

$$\begin{aligned} [\hat{L}_z, \hat{L}_+] &= \hbar \hat{L}_+ \\ \Rightarrow \hat{L}_z \hat{L}_+ |l, m\rangle &= \hat{L}_+ \hat{L}_z |l, m\rangle + \hbar \hat{L}_+ |l, m\rangle \\ &= \hbar(m+1) \hat{L}_+ |l, m\rangle \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} \hat{L}_z \hat{L}_- |l, m\rangle &= \hat{L}_- \hat{L}_z |l, m\rangle - \hbar \hat{L}_- |l, m\rangle \\ &= \hbar(m-1) \hat{L}_- |l, m\rangle \end{aligned}$$

d.h. $\hat{L}_\pm |l, m\rangle$ sind EV zu \hat{L}_z mit EW $\hbar(m \pm 1)$

Sukzessive Anwendung der Leiteroperatoren erzeugt neue EV von \hat{L}_z mit höherem/niedrigerem EW.

wegen $m \in \{-l, -l+1, \dots, l-1, l\}$ muß die Reihe der so erzeugten EV abbrechen:

$$\begin{aligned} \hat{L}_- |l, m = -l\rangle &= 0; \hat{L}_z |l, -l\rangle = -\hbar l |l, -l\rangle \\ \hat{L}_+ |l, m = l\rangle &= 0; \hat{L}_z |l, l\rangle = \hbar l |l, l\rangle \end{aligned}$$

Um eine anschauliche Vorstellung zu gewinnen, ist es sinnvoll, jetzt in die Ortsdarstellung zu wechseln:

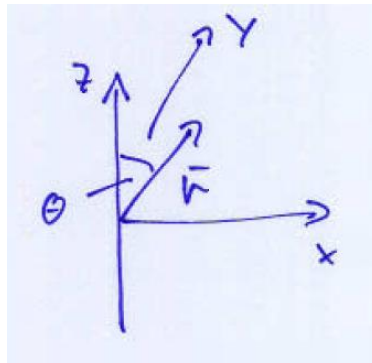
$$\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p} \rightarrow \hat{L} = \bar{r} \times \frac{\hbar}{i} \bar{\nabla}$$

Wegen der Rotationssymmetrie ist es zweckäßig, im folgenden mit Kugelkoordinaten zu arbeiten.

$$x = r \sin \theta \cos \varphi$$

$$y = r \sin \theta \sin \varphi$$

$$z = r \cos \theta$$



damit

$$\vec{r} \rightarrow r \vec{e}_r$$

$$\vec{\nabla} \rightarrow \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

(Beweis: Übung)

damit

$$\hat{L} = \frac{\hbar}{i} \left[\vec{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \vec{e}_\theta \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right]$$

Drücken nun \vec{e}_θ und \vec{e}_φ in kartesischen Koordinaten aus, damit folgt für die Drehimpuls-komponenten

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{i} \left[-\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\cos \theta \cos \varphi}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right]$$

$$\hat{L}_y = \frac{\hbar}{i} \left[\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\cos \theta \sin \varphi}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right]$$

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$\hat{L}_\pm = \hat{L}_x + i\hat{L}_y = \hbar e^{\pm i\varphi} \left[\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right]$$

Operatoren des Drehimpulses hängen ausschließlich von Winkelargumenten (θ, φ) ab, d.h. erwarten EV, die ausschließlich von (θ, φ) abhängen

$$|l, m\rangle = Y_{e,m}(\theta, \varphi)$$

solle orthogonal sein, d.h.:

$$\delta_{l,l'}\delta_{m,m'} = \int Y_{l',m'}^*(\theta, \varphi) Y_{l,m}(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi$$

vorhin (*)

$$\hat{L}_+ |l, m = l\rangle = 0; \quad \hat{L}_z |l, m = l\rangle = \hbar l |l, m = l\rangle$$

in Ortsdarstellung

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right\} Y_{ll}(\theta, \varphi) = 0 (*1)$$

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} Y_{ll}(\theta, \varphi) = \hbar l Y_{ll}(\theta, \varphi) (*2)$$

(*2) wird gelöst durch $Y_{ll}(\theta, \varphi) = e^{il\varphi} f_l(\theta)$ mit $f_l(\theta)$ zunächst beliebig.

q.m. Zustand muß eindeutig sein, d.h. $Y_{ll}(\theta, \varphi + 2\pi) \stackrel{!}{=} Y_{ll}(\theta, \varphi) \Rightarrow e^{il2\pi} \stackrel{!}{=} 1 \Rightarrow l$ muß ganze Zahl sein, halbzahlige Werte können ausgeschlossen werden

$\Rightarrow m \in \{-l, -l+1, \dots, l\}$ ganzzahlig

jetzt mit $Y_{ll}(\theta, \varphi) = e^{il\varphi} f_l(\theta)$ in (2*)

$$e^{il\varphi} \frac{\partial f_l(\theta)}{\partial \theta} + i \cot \theta (il) e^{il\varphi} f_l(\theta) = 0$$

$$\frac{\partial f_l(\theta)}{\partial \theta} = l \frac{\cos \theta}{\sin \theta} f_l(\theta)$$

$$\frac{df_l}{f_l} = l \frac{\cos \theta d\theta}{\sin \theta} = l \frac{d \sin \theta}{\sin \theta}$$

wird gelöst durch

$$f_l(\theta) = C_l \sin^l \theta$$

(Bem: einsetzen $\frac{df_l}{d \sin \theta} = C_l l \sin^{l-1} \theta = \frac{f_l}{\sin \theta} l$)

damit

$$Y_{ll} = C_l \sin^l \theta e^{il\varphi}$$

jetzt noch normieren

$$1 \stackrel{!}{=} |C_l|^2 \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi}_{2\pi} \int_0^\pi d\theta \sin \theta \sin^{2l} \theta$$

$$\begin{aligned}
&= 2\pi |C_l|^2 \underbrace{\int_0^\pi d\theta \sin^{2l+1} \theta}_{2 \frac{(2l)!}{(2l+1)!}} \\
&\Rightarrow C_l = (-1)^l \frac{l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}} \\
&\Rightarrow Y_l(\theta, \varphi) = (-1)^l \frac{1}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}} e^{il\varphi} \sin^l \theta
\end{aligned}$$

Eigenfunktionen für $m < l$

vorhin: Anwendung des Leiteroperators \hat{L}_- verringert z-Komponente

$$|l, m-1\rangle = C \hat{L}_- |l, m\rangle$$

vorhin

$$\begin{aligned}
\underbrace{\langle l, m | \hat{L}_- \hat{L}_- |l, m\rangle}_{|\hat{L}_- |l, m\rangle|^2 = \frac{1}{|C|^2} \underbrace{||l, m-1\rangle|^2}_{\stackrel{!}{=1}}} &= \underbrace{\langle l, m | \hbar^2 (l+m)(l-m+1) |l, m\rangle}_{\hbar^2 (l+m)(l-m+1), \text{ wenn } |l, m\rangle \text{ normiert}} \\
\Rightarrow C &= \frac{1}{\hbar \sqrt{(l+m)(l-m+1)}}
\end{aligned}$$

d.h.

$$|l, m-1\rangle = \frac{1}{\hbar \sqrt{(l+m)(l-m+1)}} \hat{L}_- |l, m\rangle$$

In Ortsdarstellung

$$\hat{L}_- = \hbar e^{-i\varphi} \left\{ -\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right\}$$

folgen Drehimpulseigenzustände

$$Y_{lm} = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} \frac{e^{iml}}{\sin^m \theta} \left(\frac{\partial}{\partial \cos \theta} \right)^{l-m} \sin^{2l} \theta$$

Y_{lm} sind "Kugelflächenfunktionen"

oft geschrieben als

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}$$

mit $P_l^m(m \geq 0)$.. "zugeordnete Legendresche Polynome"

für $m < 0$ gilt

$$Y_{l,-m}(\theta, \varphi) = (-1)^m Y_{lm}^*(\theta, \varphi)$$

wobei

$$P_l^m(x) = (-1)^m (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \left(\frac{d}{dx} \right)^m P_l(x)$$

mit Legendreschem Polynom:

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \left(\frac{d}{dx} \right)^l (x^2 - 1)^l$$

Veranschaulichung der Drehimpulszustände

In der Atomphysik heißt die Zahl " l " aus dem Meßwert $\hbar\sqrt{l(l+1)}$ des Drehimpulses "Drehimpulsquantenzahl"

$l = 0 \rightarrow$ s-Zustände

$l = 1 \rightarrow$ p-Zustände

$l = 2 \rightarrow$ d-Zustände

$l = 3 \rightarrow$ f-Zustände

$l = 4 \rightarrow$ g-Zustände

s-Zustand

$$l = 0 (\Rightarrow m = 0) \quad Y_{00}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

vollkommen rotationssymmetrisch

p-Zustände

$$l = 1, m = -1, 0, 1 \quad Y_{1\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$$

$|Y_{1\pm 1}|^2 =$ Aufenthaltswahrscheinlichkeit max. in Ebene $\perp \bar{e}_z$, d.h. Teilchen läuft mit pos./neg. Umlaufsinn um z-Achse, nicht scharf in Bahnebene lokalisiert.

$$l = 1, m = 0 \quad Y_{1,0}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \cos \theta$$

klassische Interpretation schwer:

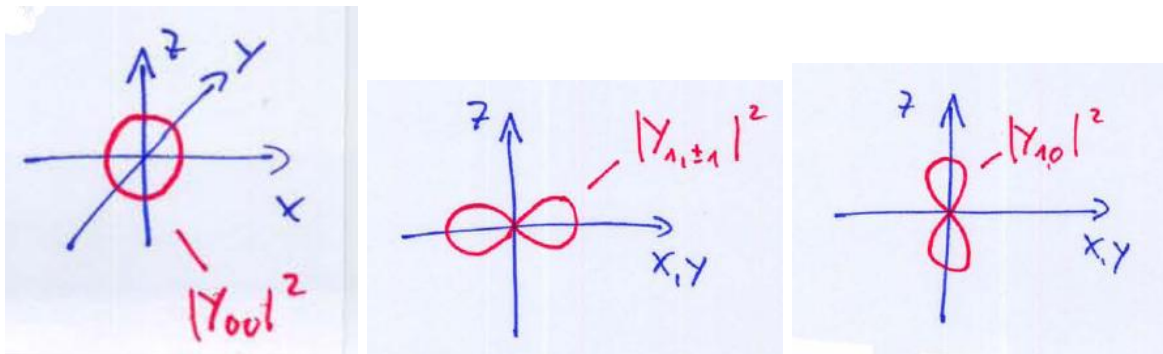
$$L_z = 0$$

$$\bar{L}_x = 0$$

$$\bar{L}_y = 0$$

$$L^2 = \hbar^2 \cdot 2$$

D.h. Teilchen hat L_x, L_y , die sich im Mittel kompensieren. Also läuft das Teilchen mit gleicher Wahrscheinlichkeit mit pos./neg. Drehsinn um Achse $\perp \bar{e}_z$



d-Zustände

-

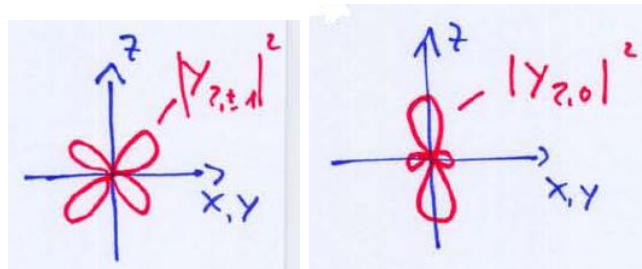
$$Y_{2\pm 2}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi} \quad (\text{ähnlich } Y_{1\pm 1})$$

-

$$Y_{2\pm 1}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cos \theta \sin \theta e^{\pm i\varphi}$$

-

$$Y_{2,0}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{15}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$$



6.3 Das Wasserstoffproblem

für Zentralfeld gilt klassisch (6.1):

$$H = T + V = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{\bar{L}^2}{2mr^2} + V(r)$$

jetzt quantenmechanisch:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{1}{2m\hat{r}^2}\hat{L}^2 + V(\bar{r})$$

damit stationäre SG lösen

Ansatz

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = \frac{u(r)}{r} Y(\theta, \varphi)$$

damit SG: ausnutzen, daß

$$\hat{L}^2(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y(\theta, \varphi) \quad (6.2)$$

damit stat. SG:

$$\left\{ \frac{\hat{p}_r^2}{2m\hat{r}^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m\hat{r}^2} + V(\bar{r}) \right\} \frac{u(r)}{r} = E \frac{u(r)}{r}$$

$$p_r = \frac{\bar{r}\bar{p}}{r} \quad (6.1)$$

$$\rightarrow \hat{p}_r = \frac{1}{2} \left[\underbrace{\frac{\hat{r}}{|\hat{r}|} \hat{p}}_{\frac{\hbar}{i} \frac{\hat{r}}{r} \nabla} + \underbrace{\hat{p} \frac{\hat{r}}{|\hat{r}|}}_{\frac{\hbar}{i} \nabla \frac{\hat{r}}{r}} \right]$$

in Kugelkoordinaten folgt (vgl. Übung) $\hat{p}_r^2 = \left(\frac{\hbar^2}{i}\right) \left\{ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right\}$

\hat{p}_r^2 einsetzen + Produktregel für $\frac{u(r)}{r}$ liefert

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right\} u(r) = E u(r)$$

jetzt speziell H-Atom $\Rightarrow V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar l(l+1)}{2mr^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right\} u(r) = Eu(r)$$

skalieren auf dimensionslose Länge r'

$$r \rightarrow r'\lambda \quad \text{mit } \lambda = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = a_0 = 0,529 \text{ \AA} \quad \text{Bohr'scher Radius}$$

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{m^2 e^4}{16\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^4} \frac{\partial^2}{\partial r'^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr'^2} \frac{m^2 e^4}{16\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^4} - \frac{me^4}{16\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 r'} \right\} \tilde{u}(r') = E\tilde{u}(r')$$

$$\quad \left| \cdot \frac{32\pi^3 \epsilon_0^2 \hbar^2}{me^4} = \frac{1}{R_y} = \frac{2}{H} = \frac{1}{13,605 \text{ eV}} \right.$$

mit $\epsilon = \frac{E}{R_y}$ als dimensionslose Größe für Energie folgt 1D SG für Radialteil in skalierten Einheiten (jetzt wieder ohne Strich)

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \epsilon + \frac{2}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} u(r) = 0$$

Asymptotik für $r \ll 1$:

setzen $r = Kx$, damit

$$\underbrace{\left\{ \frac{d^2 U}{dx^2} + K^2 \epsilon + \frac{2K}{x} - \frac{l(l+1)}{x^2} \right\}}_{K \rightarrow 0} u = 0$$

$$\Rightarrow \left\{ \frac{d^2 U}{dx^2} - \frac{l(l+1)}{x^2} \right\} u = 0$$

Ansatz: $U = x^\lambda$ einsetzen, liefert: $\lambda(\lambda - 1) - l(l + 1) = 0$

2 Lösungen:

$$\lambda_1 = l + 1$$

$$\lambda_2 = -l \Rightarrow u = x^\lambda \text{ divergiert für } l > 0 \text{ für } x \rightarrow 0; \text{ verwerfen}$$

damit asymptotisches Verhalten für kleine r

$$u(r) \propto r^{l+1} \quad \text{für } r \rightarrow 0$$

Asymptotik für $r \rightarrow \infty$:

$$\underbrace{\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \epsilon + \frac{2}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\}}_{r \rightarrow \infty} u(r) = 0$$

$$\Rightarrow \frac{d^2 u}{dr^2} + \epsilon u = 0$$

Suchen Lösung für gebundene Zustände, d.h. $\epsilon < 0$

gegeben durch $u = Ae^{-\alpha r} + \underbrace{B e^{\alpha r}}_{\rightarrow \infty, r \rightarrow \infty}$ mit $\alpha^2 = -\epsilon$

damit

$$u(r) \propto e^{-\alpha r} \quad \text{für } r \gg 1$$

Vollständige Lösung

$$u(r) = \underbrace{r^{l+1}}_{r < 1} \underbrace{e^{-\alpha r}}_{r > 1} \sum_{i=0}^{\infty} a_i r^i$$

In radiale SG einsetzen liefert Rekursionsformel für a_i

$$a_i = \frac{2\alpha(i+l) - 1}{i(i+2l+1)} a_{i-1}$$

d.h. bestimmen a_0 durch Normierung, danach sukzessive den Rest. Wie groß ist "der Rest"? Reihenentwicklung $a_i r^i$ muß für endliche i abbrechen, sonst ist keine Normierung möglich.

Annahme: $\alpha = \frac{1}{n}$ mit $n \in \mathbb{N}$ damit

$$a_i = \frac{2 \frac{i+l}{n} - 1}{\underbrace{i(i+2l+1)}_{\stackrel{!}{=} 0}} a_{i-1}$$

$$\Rightarrow i = n - 1$$

es gilt $i \geq 1$ (sonst keine Reihe)

und $l \geq 0$ (Drehimpulsquantenzahl)

$$n \geq l + 1 \quad \text{.. Hauptquantenzahl}$$

Potenzreihe bricht ab bei

$$i_{max} = n_r = n - l - 1 \quad \text{.. radiale Quantenzahl}$$

vorhin: $\alpha^2 = -\epsilon \Rightarrow \epsilon_n = -\frac{1}{n^2} \left(E_n = -\frac{R_y}{n^2} \right)$

D.h. Energieeigenwerte werden ausschließlich durch Hauptquantenzahl n bestimmt, nicht

durch $l!$

Bem.: Dies ist eine zufällige Entartung infolge der speziellen Form des Coulombpotentials

$$V(r) \propto \frac{1}{r}$$

Eigenfunktionen: hängen von l, n ab

$$u_{n,l}(r) = r^{l+1} e^{-\frac{r}{n}} P_{n_r,l}(r)$$

(Rekursionsformel einsetzen)

$$P_{n_r,l} = a_0 \frac{n_r!(2l+1)!}{(n_r+2l+1)!} L_{n_r}^{2l+1} \left(\frac{2r}{n} \right)$$

mit Laguerreschem Polynom

$$L_n^\alpha(x) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(n+\alpha)!}{(n-i)!(\alpha+i)!i!} (-x)^i$$

a_0 durch Normierung, weiterhin Rücksubstitution ($r'a_0 \rightarrow r$) zu SI-Einheiten

$$\frac{u(r)}{r} = R_{nl}(r) = \frac{2}{n^2 a_0^{3/2}} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{(n+1)!}} \left(\frac{2r}{na_0} \right)^l e^{-\frac{r}{na_0}} L_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2r}{na_0} \right)$$

damit jetzt vollständige Eigenfunktionen des H-Problems

$$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi)$$

mit $n \hat{=}$ Hauptquantenzahl ($n \geq 1$)

$l \hat{=}$ Drehimpulsquantenzahl ($l \leq n-1$)

$m \hat{=}$ Magnetquantenzahl (z-Komponente von L) ($|m| \leq l$)

$$E_n = -\frac{R_y}{n^2} \quad (R_y = 13,605 \text{ eV})$$

wobei

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) e^{im\varphi}$$

↓

"zugeordnete Legendresche Polynome"

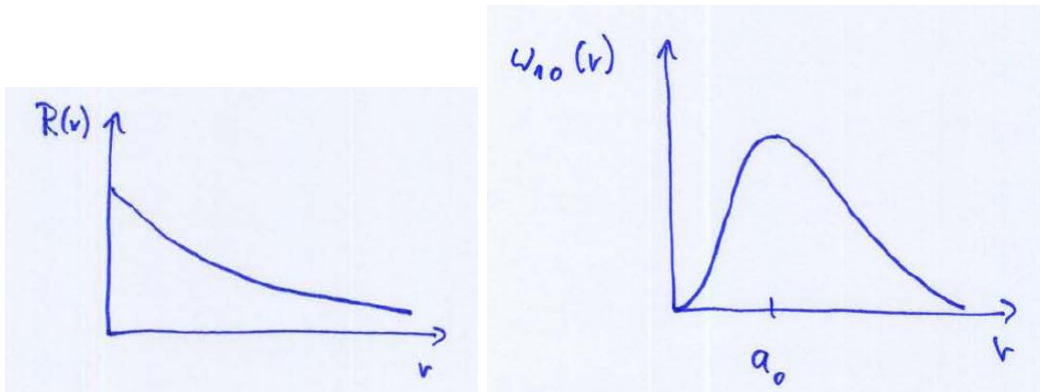
Veranschaulichung:

- $n = 1 \Rightarrow l = 0 (l \leq n - 1)$ (1s-Zustand)

$$R_{1,0} = \frac{2}{\sqrt{a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}$$

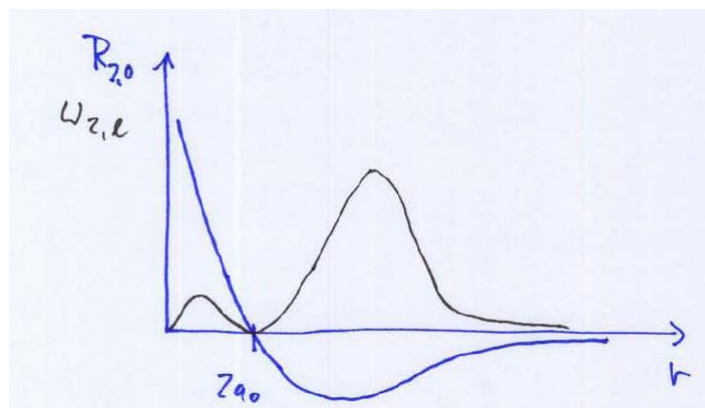
radiale Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\omega_{n,l}(r) = \int_0^\pi d\varphi \int_0^{2\pi} \sin\theta d\theta r^2 |\Psi_{n,l,m}|^2 = r^2 |R_{nl}|^2$$



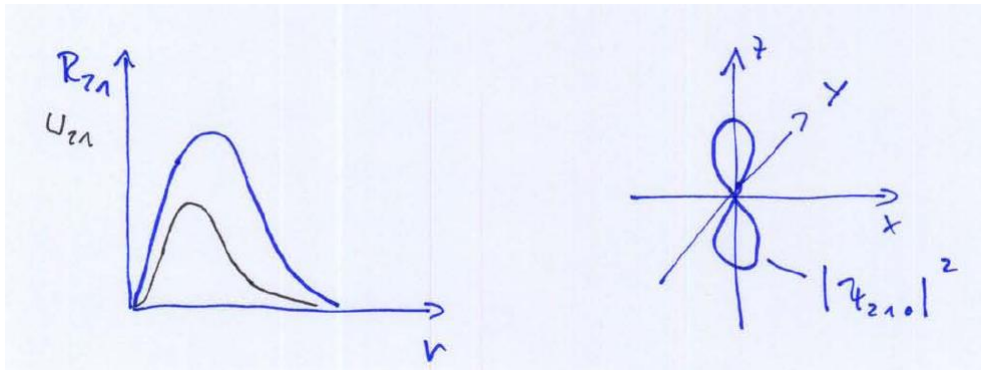
- $n = 2, l = 0$ (2s-Zustand)

$$R_{2,0} = \frac{1}{\sqrt{(2a_0)^3}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}}$$



- $n = 2, l = 1$ (2p-Zustand)

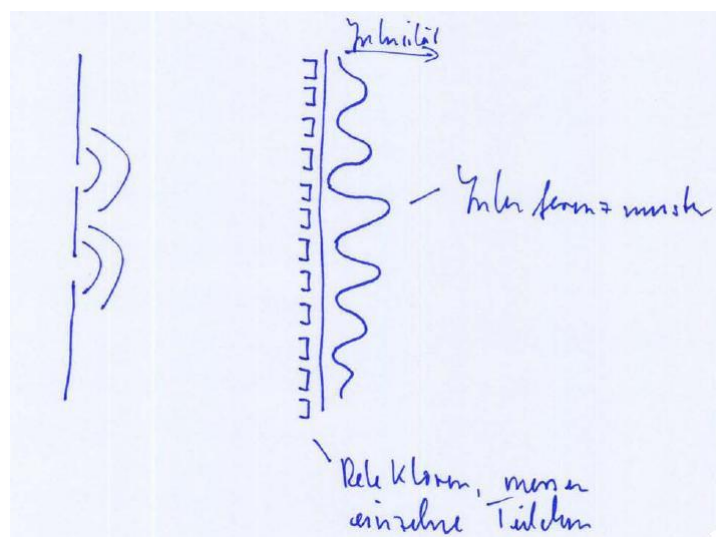
$$R_{2,1} = \frac{1}{\sqrt{24a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}}$$



7 Implikationen der QM

7.1 Determinismus und Lokalität

- Doppelspaltexperiment



Wir brauchen zur Erklärung der Messung sowohl Wellenmodell (Führungsfeld) als auch Teilchenmodell (Detektoren).

Was passiert jedoch, wenn man registriert, durch welchen der beiden Spalten die Elektronen jeweils gehen? (Zum Beispiel mit einer Drahtschleife, die den Induktionsstrom aufnimmt, wenn Teilchen durch läuft.)

⇒ Interferenzmuster verschwindet

D.h. Teilchen wird durch Anwesenheit eines Spaltes, den es gegebenenfalls gar

nicht passiert, beeinflusst! Mögliche Interpretationen:

- nichtlokale WW (Teilchen nimmt anderen Spalt wahr)
- statistische Interpretation über Führungsfeld \rightarrow QM ist indeterministisch, können keine Aussage treffen, durch welchen Spalt das Teilchen laufen wird

- de Broglie's Paradoxon

- bringen e^- in Kasten
- teilen Kasten
- bringen Kästen an beliebig entfernte Orte (z.B. Tokio und Paris), Zustandsfunktion

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \{|\Psi_T\rangle + |\Psi_P\rangle\}$$

Variante a)

- öffnen Kasten in Tokio
- Wellenfunktion kollabiert, e^- ist entweder in T oder P , wissen Ergebnis einer Messung in P

Variante b)

- bringen Kästen wieder zusammen
- machen Doppelspaltexperiment \Rightarrow Interferenzmuster, d.h. e^- ist in T "und" P . Also ändert sich durch Öffnung eins der beiden Kästen die WF $|\Psi\rangle$ instantan in T und P .

"Kollaps" der Wellenfunktion

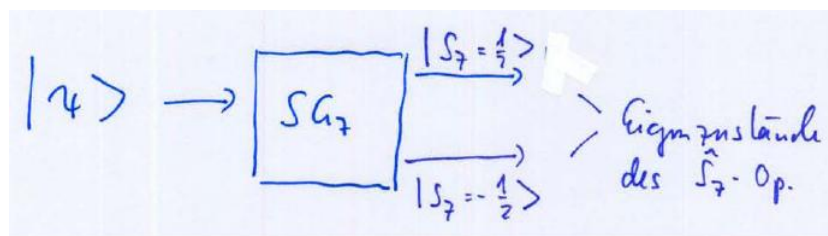
Kästen sind WW-frei, d.h. kein Energie- und Informationsaustausch \Rightarrow Relativitätstheorie formal nicht verletzt (c ist maximale Ausbreitungsgeschwindigkeit)

- Wigners Freund

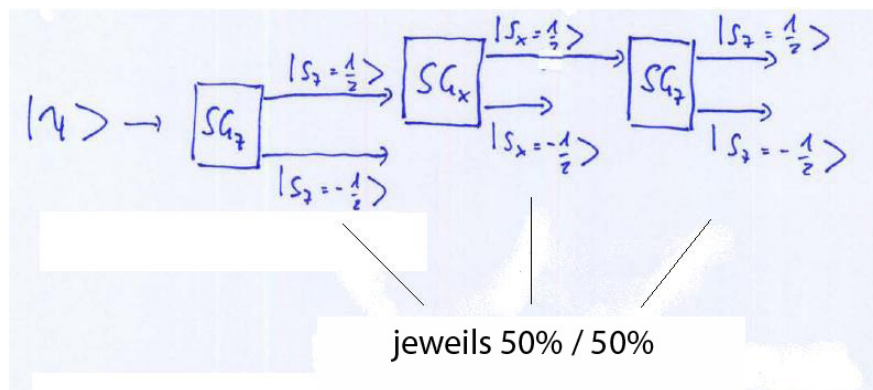
- $|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \{|\Psi_T\rangle + |\Psi_P\rangle\}$
- Physiker T nimmt in T eine Messung vor \rightarrow für ihn ist WF kollabiert
- Physiker P in P weiß davon noch nichts
- \Rightarrow für P ist WF nicht kollabiert
- \Rightarrow Physiker T ist für Physiker P in einem superponiertem Bewusstseinszustand, sowohl $|\Psi_T\rangle$ als auch $|\Psi_P\rangle$ gemessen zu haben.

- Stern-Gerlach-Versuch

Ankopplung des Drehimpulses an inhomogenes Magnetfeld \Rightarrow Strahlaufspaltung nach Drehimpuls - (oder Spin-)komponenten:



jetzt mehrere SG-Aufspaltungen

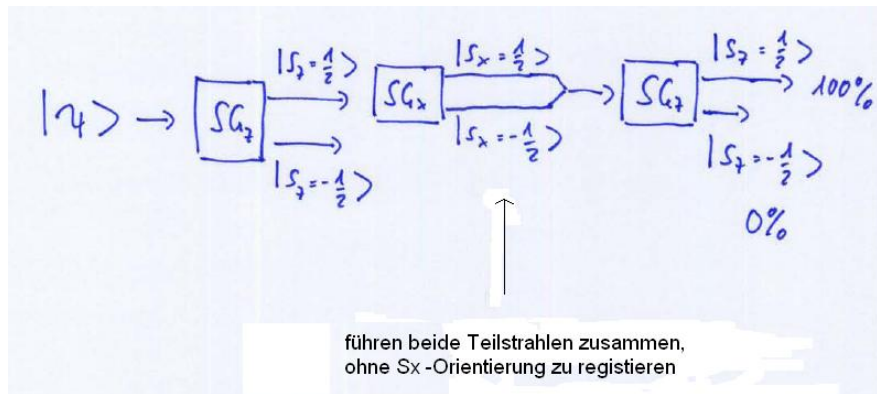


Ursache: können nur jeweils eine Drehimpulskomponente scharf messen

(vgl. 4.1: $[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{L}_k$)

modifizieren Versuch:

D.h. wenn wir ein einziges Elektron mit $S_z = -\frac{1}{2}$ am Ende des Strahlengangs messen, bedeutet das, daß die S_x -Orientierung zwischenzeitlich registriert wurde!



Bem.: → Quantenkryptographie als mögliche Anwendung

7.2 Theorie verborgener Parameter

Ist indeterministischer Charakter der QM real oder Ausdruck unseres unzureichenden Wissens über die Systeme?

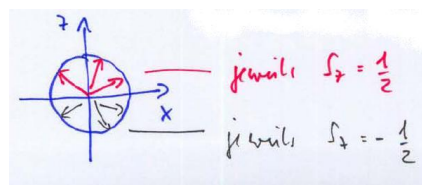
Bsp.

Beschreiben in Thermodynamik ca. 10^{23} Teilchen mit sehr wenigen Zustandsgrößen wie p, V, T , die letztlich Mittelwerten entsprechen.

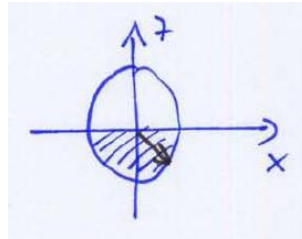
Gibt es in QM "verborgene Parameter", die Eigenschaften des Systems letztlich doch deterministisch festlegen? Und können wir das überhaupt wissen, d.h. experimentell verifizieren?

Betrachten dazu Teilchenpaar aus zwei räumlich getrennten Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen, deren Gesamtspin verschwindet. ("Verschränkte Teilchen").

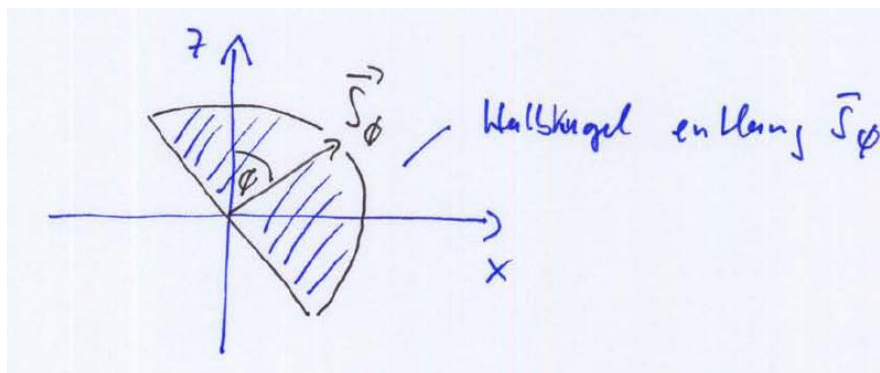
Annahme: Spin vollständig bestimmt, können aber jeweils nur eine Komponente messen, Wert $\pm\frac{1}{2}$ durch das Vorzeichen der Projektion bestimmt:



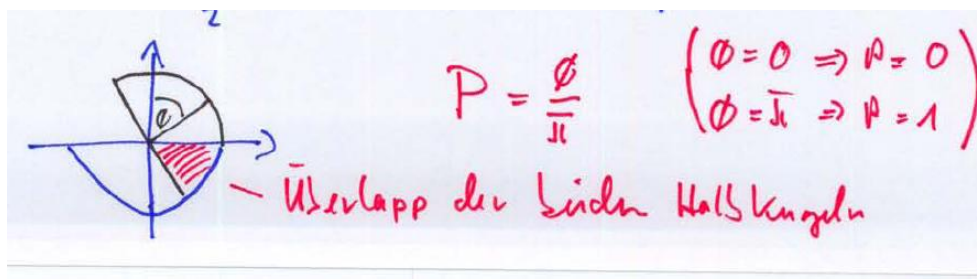
betrachten 2 verschränkte Teilchen; messen am 1. Teilchen $S_z = \frac{1}{2} \Rightarrow$ 2. Teilchen hat Spinvektor in unterer Halbkugel



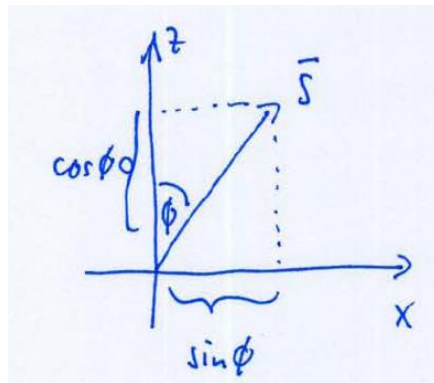
gesucht: Wahrscheinlichkeit, daß das 2. Teilchen eine bestimmte Orientierung ϕ zur z-Achse hat. Teilchen sei zunächst unabhängig;



\Rightarrow Wahrscheinlichkeit, daß das 2. Teilchen $S_z = \frac{1}{2}$ und Orientierung ϕ hat:



jetzt qm behandeln:



Operator, der Spinkomponente im Winkel ϕ zur z-Achse, darstellt:

$$\hat{S}_\phi = \hat{S}_z \cos \phi + \hat{S}_x \sin \theta$$

(später, Physik D:)

$$\hat{S}_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \hat{S}_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \cos \phi & \sin \phi \\ \sin \phi & -\cos \phi \end{pmatrix}$$

gilt

$$\hat{S}_\phi \begin{pmatrix} \cos \frac{\phi}{2} \\ \sin \frac{\phi}{2} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \cos \frac{\phi}{2} \\ \sin \frac{\phi}{2} \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_\phi \begin{pmatrix} -\sin \frac{\phi}{2} \\ \cos \frac{\phi}{2} \end{pmatrix} = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} -\sin \frac{\phi}{2} \\ \cos \frac{\phi}{2} \end{pmatrix}$$

\Rightarrow damit EV bekannt

(Leicht nachzurechnen über Funktionen des halben Winkels)

Wenn am 1. Teilchen $S_z = \frac{1}{2}$ gemessen wurde, muß das zweite Teilchen im Eigenzustand

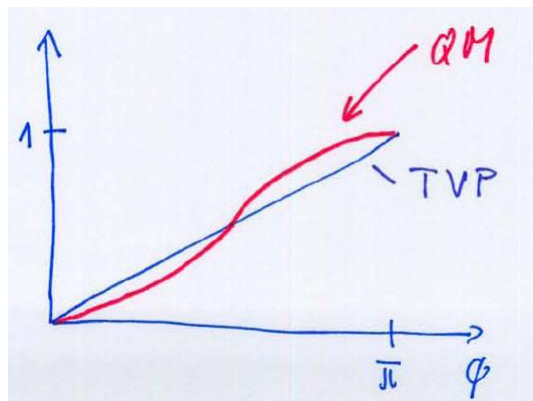
$\chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ zum Spin $-\frac{1}{2}$ sein. Entwickeln χ_- nach EV von \hat{S}_ϕ , gilt

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = c_1 \begin{pmatrix} \cos \frac{\phi}{2} \\ \sin \frac{\phi}{2} \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} -\sin \frac{\phi}{2} \\ \cos \frac{\phi}{2} \end{pmatrix}$$

ablesen: $c_1 = \sin \frac{\phi}{2}$, $c_2 = \cos \frac{\phi}{2}$

D.h. Wahrscheinlichkeit, daß das 2. Teilchen $S_z = -\frac{1}{2}$ **und** $S_\phi = \frac{1}{2}$ hat, ist $c_1^2 = \sin^2 \frac{\phi}{2}$

\Rightarrow Theorie der verborgenen Parameter (TVP) und Quantenmechanik liefern unterschiedliche Voraussagen, siehe graphische Veranschaulichung von $P(S_z = -\frac{1}{2}, S_\phi = \frac{1}{2})$



\Rightarrow können experimentell verifizieren, ob die Theorie verborgener Parameter die Realität beschreibt

Experimente mit verschränkten Photonen, siehe z.B. Phys. Rev. Lett. 54, 1790 (1985) zeigen, daß TVP die Realität nicht beschreibt!

\Rightarrow Problem mit Determinismus und Lokalität nicht gelöst! (Für weitergehende Fragen: Bell'sche Ungleichung)

7.3 Realitätsproblem

- WF $|\Psi\rangle$ keine direkte phys. Bedeutung, ist theoretische Konstruktion, mit der die Wahrscheinlichkeit bestimmter Ereignisse berechnet werden kann

- Annahme weiterer Eigenschaften von Quantensystem (z.B. TVP) führt zum Widerspruch mit Exp.
 \Rightarrow außerhalb von $|\Psi\rangle$ keine phys. Realität, aber $|\Psi\rangle$ selbst ist nicht physikalisch.

philosophischer Ausweg: Positivismus, d.h. wir können Existenz oder Nichtexistenz einer Welle außerhalb unserer Sinneseindrücke ohnehin nicht verifizieren ("egal")

Versuche, die Realität zu retten:

- Theorie unauslöschbarer Aufzeichnungen $\hat{=}$ Meßprozeß, irreversible Änderung \rightarrow real existent
 Reversible Zustandsänderungen (z.B. Aufspaltung nach Spinkomponenten $S_x = \pm\frac{1}{2}$ und späteres Zusammenführen des Strahls) sind unbeobachtbar und Existenzaussagen dazu sinnlos.
- sich teilendes Universum: Universum endet nicht in einem von vielen möglichen Zuständen als Ergebnis einer Messung, sondern alle möglichen Ergebnisse treten tatsächlich auf
 \Rightarrow Universum teilt sich in nichtwechselwirkende Parallelwelten
 \Rightarrow nicht überprüfbar, keine ökonomische Theorie

8 Nährungsmethoden

8.1 Zeitunabhängige Störungstheorie

Hamiltonoperator $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$ mit $\hat{H}_1 \ll \hat{H}_0$

\hat{H}_0 - ungestörter Operator

\hat{H}_1 - Störoperator

SG für \hat{H}_0 gelöst:

$$\hat{H}_0 |\Psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\Psi_n^{(0)}\rangle$$

$E_n^{(0)}$ nicht entartet,

$$\langle \Psi_m^{(0)} | \Psi_n^{(0)} \rangle = \delta_{mn}$$

suchen Lösung für $\hat{H} |\Psi_n\rangle = E_n |\Psi_n\rangle$

Ansatz: $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1$ ($\lambda = 1$.. volle Störung)

E_n hängen von λ ab, Taylorentwicklung

$$E_n = E_n(\lambda) = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots = \sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i E_n^{(i)}$$

analoge Entwicklung für Zustände

$$|\Psi_n\rangle = |\Psi_n(\lambda)\rangle = |\Psi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\Psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\Psi_n^{(2)}\rangle + \dots = \sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i |\Psi_n^{(i)}\rangle$$

jetzt einsetzen in SG:

$$\begin{aligned} \left\{ \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1 \right\} |\Psi_n(\lambda)\rangle &= E_n(\lambda) |\Psi_n(\lambda)\rangle \\ \hat{H}_0 \sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i |\Psi_n^{(i)}\rangle + \hat{H}_1 \sum_{i=0}^{\infty} \lambda^{i+1} |\Psi_n^{(i)}\rangle &= \sum_{i,j}^{\infty} \lambda^{i+j} E_n^{(i)} |\Psi_n^{(j)}\rangle \end{aligned}$$

Koeffizientenvergleich in Potenzen von λ

$$\begin{aligned} \lambda^0 \rightarrow \hat{H}_0 |\Psi_n^{(0)}\rangle &= E_n^{(0)} |\Psi_n^{(0)}\rangle \\ \lambda^1 \rightarrow \hat{H}_0 |\Psi_n^{(1)}\rangle + \hat{H}_1 |\Psi_n^{(0)}\rangle &= E_n^{(0)} |\Psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)} |\Psi_n^{(0)}\rangle \\ \lambda^2 \rightarrow \hat{H}_0 |\Psi_n^{(2)}\rangle + \hat{H}_1 |\Psi_n^{(1)}\rangle &= E_n^{(0)} |\Psi_n^{(2)}\rangle + E_n^{(1)} |\Psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)} |\Psi_n^{(0)}\rangle \end{aligned}$$

ähnliches Vorgehen in Normierungsbedingungen:

$$\underbrace{\langle \Psi_n | \Psi_m \rangle}_{\delta_{nm}} = \sum_{i,j}^{\infty} \lambda^{i+j} \langle \Psi_n^{(i)} | \Psi_m^{(j)} \rangle$$

muß für jedes λ erfüllt sein.

Koeffizientenvergleich gibt nur für $\lambda^{(0)}$ nicht verschwindenden Beitrag ($\delta_{nm} = \text{const.}$)

$$\begin{aligned} \lambda^0 \rightarrow \delta_{nm} &= \langle \Psi_n^{(0)} | \Psi_m^{(0)} \rangle \\ \lambda^1 \rightarrow 0 &= \langle \Psi_n^{(1)} | \Psi_m^{(0)} \rangle + \langle \Psi_n^{(0)} | \Psi_m^{(1)} \rangle \\ \lambda^2 \rightarrow 0 &= \langle \Psi_n^{(2)} | \Psi_m^{(0)} \rangle + \langle \Psi_n^{(1)} | \Psi_m^{(1)} \rangle + \langle \Psi_n^{(0)} | \Psi_m^{(2)} \rangle \end{aligned}$$

damit GS um $E_n^{(i)}, |\Psi_n^{(i)}\rangle$ zu bestimmen

8.1.1 Störungstheorie 1. Ordnung

\hat{H}_0 ist hermitescher Operator $\Rightarrow \{|\Psi_n^{(0)}\rangle\}$ VONS

können Korrekturen nach $|\Psi_n^{(0)}\rangle$ entwickeln

$$|\Psi_n^{(1)}\rangle = \sum_l c_{nl}^{(1)} |\Psi_n^{(0)}\rangle$$

damit in Gleichungen, die sich für λ^1 ergeben hatten

$$\underbrace{\hat{H}_0 \sum_l c_{nl}^{(1)} |\Psi_l^{(0)}\rangle + \hat{H}_1 |\Psi_n^{(0)}\rangle}_{\sum_l c_{nl}^{(1)} \underbrace{\hat{H}_0 |\Psi_l^{(0)}\rangle}_{E_l^{(0)} |\Psi_l^{(0)}\rangle}} = E_n^{(0)} \sum_l c_{nl}^{(1)} |\Psi_l^{(0)}\rangle + E_n^{(1)} |\Psi_n^{(0)}\rangle$$

$$|\langle \Psi_m^{(0)} |$$

wegen Orthogonalität von $\{|\Psi_m^{(0)}\rangle\}$ bleibt

$$\sum_l c_{nl}^{(1)} E_l^{(0)} \delta_{ml} + \langle \Psi_m^{(0)} | \hat{H}_1 | \Psi_n^{(0)} \rangle = E_n^{(0)} \sum_l c_{nl}^{(1)} \delta_{ml} + E_1^{(1)} \delta_{nm}$$

$$E_m^{(0)} c_{nm}^{(1)} + \langle \Psi_m^{(0)} | \hat{H}_1 | \Psi_n^{(0)} \rangle = E_n^{(0)} c_{nm}^{(1)} + E_1^{(1)} \delta_{nm} \quad (*)$$

speziell $n = m$

$$\Rightarrow E_n^{(1)} = \langle \Psi_n^{(0)} | \hat{H}_1 | \Psi_n^{(0)} \rangle$$

d.h. in 1. Ordnung Störungstheorie folgt

$$E_n \approx E_n^{(0)} + \langle \Psi_n^{(0)} | \hat{H}_1 | \Psi_n^{(0)} \rangle$$

Bem.:

- Standardmethode um den Einfluß kleiner Störungen auf Energieeigenwerte abzuschätzen
- Methode kann auf andere als den Hamiltonoperator verallgemeinert werden

Veränderung der Wellenfunktion?

vorhin

$$\begin{aligned}
\langle \Psi_n^{(1)} | \Psi_m^{(0)} \rangle + \langle \Psi_n^{(0)} | \Psi_m^{(1)} \rangle &= 0 \\
|\Psi_n^{(1)}\rangle &= \sum_l c_{nl}^{(1)} |\Psi_l^{(0)}\rangle \\
\Rightarrow \sum_l c_{nl}^{(1)*} \underbrace{\langle \Psi_l^{(0)} | \Psi_m^{(0)} \rangle}_{\delta_{lm}} + \sum_l c_{ml}^{(1)} \underbrace{\langle \Psi_n^{(0)} | \Psi_l^{(0)} \rangle}_{\delta_{nl}} &= 0 \\
\Rightarrow c_{mn}^{(1)*} + c_{mn}^{(1)} &= 0
\end{aligned}$$

speziell $n = m \Rightarrow c_{nn}^{(1)*} + c_{nn}^{(1)} = 0$ d.h. $c_{nn}^{(1)} = iKn$ mit $Kn \in \mathbb{R}$ aus (*) folgt weiterhin für $n \neq m$

$$c_{nm}^{(1)} = \frac{\langle \Psi_m^{(0)} | \hat{H}_1 | \Psi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

damit jetzt in $|\Psi_n\rangle = |\Psi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\Psi_n^{(1)}\rangle + O(\lambda^2)$

$$|\Psi_n^{(1)}\rangle = \sum_m c_{nm}^{(1)} |\Psi_m^{(0)}\rangle$$

$$\Rightarrow |\Psi_n\rangle = \underbrace{(1 + \lambda c_{nn}^{(1)})}_{e^{i\lambda Kn} + O(\lambda^2)} |\Psi_n^{(0)}\rangle + \lambda \sum_{m \neq n} c_{nm}^{(1)} |\Psi_m^{(0)}\rangle + O(\lambda^2)$$

damit

$$|\Psi_n\rangle = e^{i\lambda Kn} \left\{ |\Psi_n^{(0)}\rangle + e^{-i\lambda Kn} \lambda \sum_{m \neq n} c_{nm}^{(1)} |\Psi_m^{(0)}\rangle \right\} + O(\lambda^2)$$

Zustandsvektor ist nur bis auf Phasenfaktor bestimmt

$$\Rightarrow o.v.a.A. \quad K_n = 0$$

setzen weiterhin $\lambda = 1$ (volle Störung)

$$|\Psi_n\rangle \approx |\Psi_n^{(0)}\rangle + \sum_{m \neq n} c_{mn}^{(1)} |\Psi_m^{(0)}\rangle$$

mit $c_{nm}^{(1)} = \frac{\langle \Psi_m^{(0)} | \hat{H}_1 | \Psi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$

D.h. durch Störung mischen weitere Zustände $|\Psi_m^{(0)}\rangle$ mit $m \neq n$ in den Zustand Ψ_n ein, Einmischungskoeffizient von energetischem Abstand $E_n^{(0)} - E_m^{(0)}$ abhängig, typischerweise brauchen nur energetisch benachbarte Zustände betrachtet zu werden.

8.1.2 Störungstheorie 2. Ordnung

Abkürzung: $H_{1,ml} = \langle \Psi_m^{(0)} | \hat{H}_1 | \Psi_l^{(0)} \rangle$

Matrixelement des Störoperators

damit GS bis λ^2 auswerten

$$E_n = E_n^{(0)} + H_{1,nn} + \sum_{l \neq n} \frac{|H_{1,ln}|^2}{E_n^{(0)} - E_l^{(0)}}$$

$$|\Psi_n\rangle = \left(1 - \frac{1}{2} \sum_{l \neq n} \frac{|H_{1,ln}|^2}{(E_n^{(0)} - E_l^{(0)})^2} \right) |\Psi_n^{(0)}\rangle$$

$$+ \sum_{l \neq n} \frac{H_{1,ln}}{E_n^{(0)} - E_l^{(0)}} |\Psi_l^{(0)}\rangle$$

$$+ \sum_{l,m \neq n} \left\{ \frac{H_{1,lm} H_{1,mn}}{(E_n^{(0)} - E_l^{(0)}) (E_n^{(0)} - E_m^{(0)})} - \frac{H_{1,nn} H_{1,ln}}{(E_n^{(0)} - E_l^{(0)})^2} \right\} |\Psi_l^{(0)}\rangle$$

8.1.3 Störungstheorie mit Entartung

Abkürzung: M_n Eigenvektoren zum Eigenwert E_n

$$\hat{H}_0 |\Psi_{n\alpha}^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\Psi_{n\alpha}^{(0)}\rangle$$

$\alpha = 1, \dots, M_n$ Unter Einfluss von Störung \hat{H}_1 kann diese Entartung (teilweise) aufgehoben werden \Rightarrow Übergang zu symmetrieangepassten EV sinnvoll

$$|\varphi_{m\rho}\rangle = \sum_{\alpha=1}^{M_n} C_{n\rho\alpha} |\Psi_{n\alpha}^{(0)}\rangle$$

Entwicklung nach Stärke der Störung

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1$$

$$E_{n\rho}(\lambda) = E_n^{(0)} + \lambda E_{n\rho}^{(1)} + \dots$$

$$|\varphi_{n\rho}(\lambda)\rangle = |\varphi_{n\rho}^{(0)}\rangle + \lambda |\varphi_{n\rho}^{(1)}\rangle + \dots$$

einsetzen in $\hat{H} |\varphi_{n\rho}(\lambda)\rangle = E_{n\rho} |\varphi_{n\rho}(\lambda)\rangle$

$$(\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1) (|\varphi_{n\rho}^{(0)}\rangle + \lambda |\varphi_{n\rho}^{(1)}\rangle) = (E_n^{(0)} + \lambda E_{n\rho}^{(1)}) (|\varphi_{n\rho}^{(0)}\rangle + \lambda |\varphi_{n\rho}^{(1)}\rangle)$$

Terme in $\lambda^0 \Rightarrow \hat{H}_0 |\varphi_{n\rho}^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\varphi_{n\rho}^{(0)}\rangle$ (klar)

Terme in $\lambda^1 \Rightarrow \hat{H}_0 |\varphi_{n\rho}^{(1)}\rangle + \hat{H}_1 |\varphi_{n\rho}^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\varphi_{n\rho}^{(1)}\rangle + E_{n\rho}^{(1)} |\varphi_{n\rho}^{(0)}\rangle \quad | \langle \Psi_{n\gamma}^{(0)} |$

$$\left\langle \underbrace{\Psi_{n\gamma}^{(0)} | \hat{H}_0 |}_{E_n^{(0)} \langle \Psi_{n\gamma}^{(0)} |} \varphi_{n\rho}^{(1)} \right\rangle + \langle \Psi_{n\gamma}^{(0)} | \hat{H}_1 | \varphi_{n\rho}^{(0)} \rangle = E_n^{(0)} \langle \Psi_{n\gamma}^{(0)} | \varphi_{n\rho}^{(1)} \rangle + E_{n\rho}^{(1)} \langle \Psi_{n\gamma}^{(0)} | \varphi_{n\rho}^{(0)} \rangle$$

übrig bleibt

$$\langle \Psi_{n\gamma}^{(0)} | \hat{H}_1 | \varphi_{n\rho}^{(0)} \rangle = E_{n\rho}^{(1)} \langle \Psi_{n\gamma}^{(0)} | \varphi_{n\rho}^{(0)} \rangle$$

Vereinfachung: betrachten spezielles n , lassen n -Index weg

$$|\varphi_{\rho}^{(0)}\rangle = \sum_{\alpha}^M C_{\rho\alpha} |\Psi_{\alpha}^{(0)}\rangle$$

einsetzen

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha} C_{\rho\alpha} H_{1,\gamma\alpha} &= \sum_{\alpha} C_{\rho\alpha} E_{\rho}^{(1)} \delta_{\gamma\alpha} \\ \Rightarrow \sum_{\alpha=1}^M C_{\rho\alpha} \{ H_{1,\gamma\alpha} - E_{\rho}^{(1)} \delta_{\gamma\alpha} \} &= 0 \quad (*) \end{aligned}$$

Homogenes Gleichungssystem von M Gleichungen, hat nicht triviale Lösung für

$$\det \{H_{1,\gamma\alpha} - E^{(1)}\} = \begin{pmatrix} H_{1,11} - E^{(1)} & \dots & H_{1,1M} \\ \vdots & & \vdots \\ H_{1,M1} & \dots & H_{1,MM} - E^{(1)} \end{pmatrix} = 0$$

$\Rightarrow M$ Energiekorrekturen $E_1^{(1)}, E_2^{(2)}, \dots, E_M^{(1)}$

$E_\rho^{(1)}$ in (*) einsetzen, $c_{\rho\alpha}$ mit $\alpha = 1, \dots, M$ bestimmen

\Rightarrow Symmetrieangepasste EV $|\varphi_\rho^{(0)}\rangle = \sum_\alpha c_{\rho\alpha} |\Psi_\alpha^{(0)}\rangle$

D.h. welcher Eigenzustand unter Einfluss von \hat{H}_1 seinen EW um $E^{(1)}$ verändert, ist jetzt bekannt.

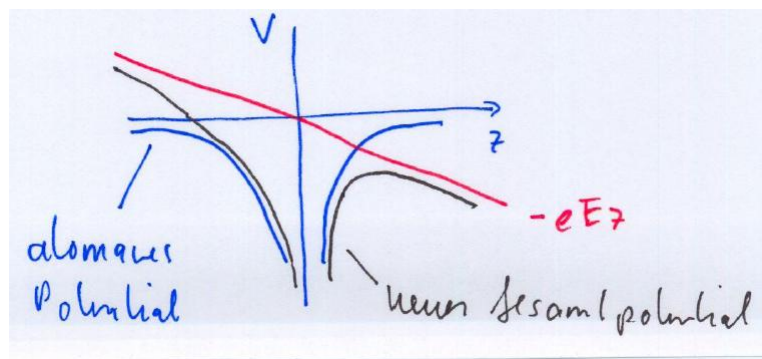
8.1.4 Beispiel: Starkeffekt

Stark-Effekt: Verschiebung und Aufspaltung atomarer Niveaus im el-Feld

Hier: H-Atom $\Rightarrow \hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$

jetzt Atom im homogenen E-Feld $\vec{E} = E\vec{e}_z$

$\Rightarrow e^-$ spürt zusätzliches Potential $-eEz$



Frage der Stabilität!

$$\Rightarrow \hat{H}_1 = -eEz$$

Erinnerung (4.3) WF des ungestörten Problems:

$$1s : \Psi_{100} = R_{10}Y_{00} = \frac{2}{\sqrt{a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}} \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$2s : \Psi_{200} = R_{20} Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{(2a_0)^3}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}} \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$2p : \Psi_{210} = R_{21} Y_{10} = R_{21} \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta = \frac{R_{21}}{r} \sqrt{\frac{3}{4\pi}} z$$

$$\Psi_{211} = R_{21} Y_{11} = R_{21} \left(-\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\varphi} \right) = -\frac{R_{21}}{r} \sqrt{\frac{3}{8\pi}} (x + iy)$$

$$\Psi_{21-1} = R_{21} Y_{1-1} = \frac{R_{21}}{r} \sqrt{\frac{3}{8\pi}} (x - iy)$$

wobei $R_{21} = \frac{1}{\sqrt{24a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}}$

$$E_1 = -R_y, \quad E_2 = -0,25R_y \quad \text{vierfach entartet}$$

1s: nicht entartet

$$\Rightarrow E_{100}^{(1)} = \left\langle \underbrace{\Psi_{100}^{(0)}}_{\text{kugelsymmetrisch}} \left| \underbrace{\hat{H}_1}_{\propto z(\text{antisymmetrisch})} \right| \Psi_{100}^{(0)} \right\rangle = 0$$

in erster Ordnung Störungstheorie keine Energieverschiebung

2s,p: 4-fach entartet \rightarrow Übergang zu symmetrieangepassten Wellenfunktionen durch Liko

$$|\varphi_\rho^{(0)}\rangle = c_{1\rho} |\Psi_{200}\rangle + c_{2\rho} |\Psi_{210}\rangle + c_{3\rho} |\Psi_{21-1}\rangle + c_{4\rho} |\Psi_{211}\rangle$$

vgl. 8.1.3, $c_{i\rho}, E_\rho^{(0)}$ aus GS

$$\sum_{i=1}^4 c_{i\rho} \{H_{1,ji} - E^{(1)}\delta_{ji}\} = 0 \quad j = 1, \dots, 4$$

brauchen Matrixelemente $H_{1,ji}$ mit ungestörter WF, insgesamt 16 Matrixelemente

$$\hat{H}_1(z) = -\hat{H}_1(-z)$$

$$\Psi_{210}(z) = -\Psi_{210}(-z)$$

$$\Psi_{21\pm 1}(\alpha) = -\Psi_{21\pm 1}(-\alpha) \quad \alpha = x, y$$

\Rightarrow aus Symmetriegründen nur ein Matrixelement $\neq 0$

$$\left\langle \Psi_{210} | \hat{H}_1 | \Psi_{200} \right\rangle = \left\langle \Psi_{200} | \hat{H}_1 | \Psi_{210} \right\rangle = 3eEa_0$$

damit GS

$$\begin{pmatrix} -E^{(1)} & 3eEa_0 & 0 & 0 \\ 3eEa_0 & -E^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -E^{(1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -E^{(1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{pmatrix} = 0$$

nicht triviale Lösung nur für

$$\{(E^{(1)})^2 - (3eEa_0)^2\} E_1^{(1)2} = 0 \quad (\text{Säkulargleichung})$$

Vier Lösungen:

$$E_1^{(1)} = -3eEa_0 \rightarrow |\varphi_1^{(0)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\Psi_{200}^{(0)}\rangle - |\Psi_{210}^{(0)}\rangle)$$

klar: $c_1 = -c_2, c_3 = c_4 = 0$

$$E_2^{(1)} = 3eEa_0 \rightarrow |\varphi_1^{(0)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\Psi_{200}^{(0)}\rangle + |\Psi_{210}^{(0)}\rangle)$$

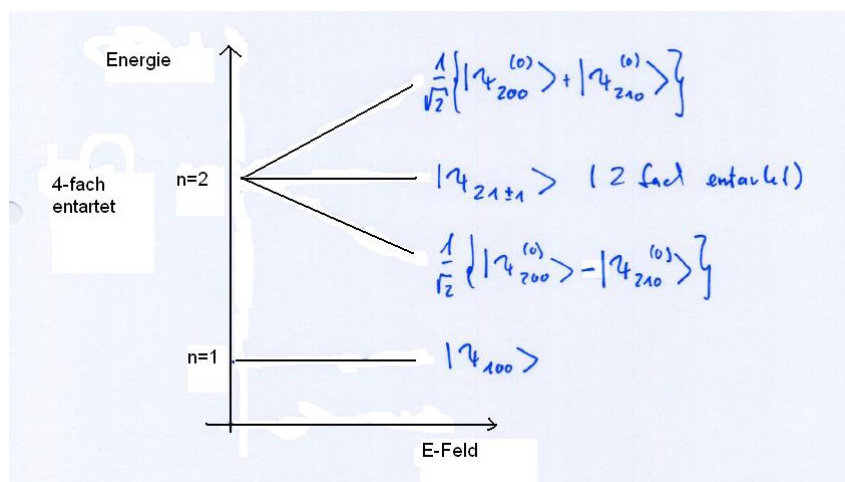
$c_1 = c_2, c_3 = c_4 = 0$

$$E_3^{(1)} = 0 \rightarrow |\Psi_1^{(0)}\rangle = |\Psi_{21-1}^{(0)}\rangle$$

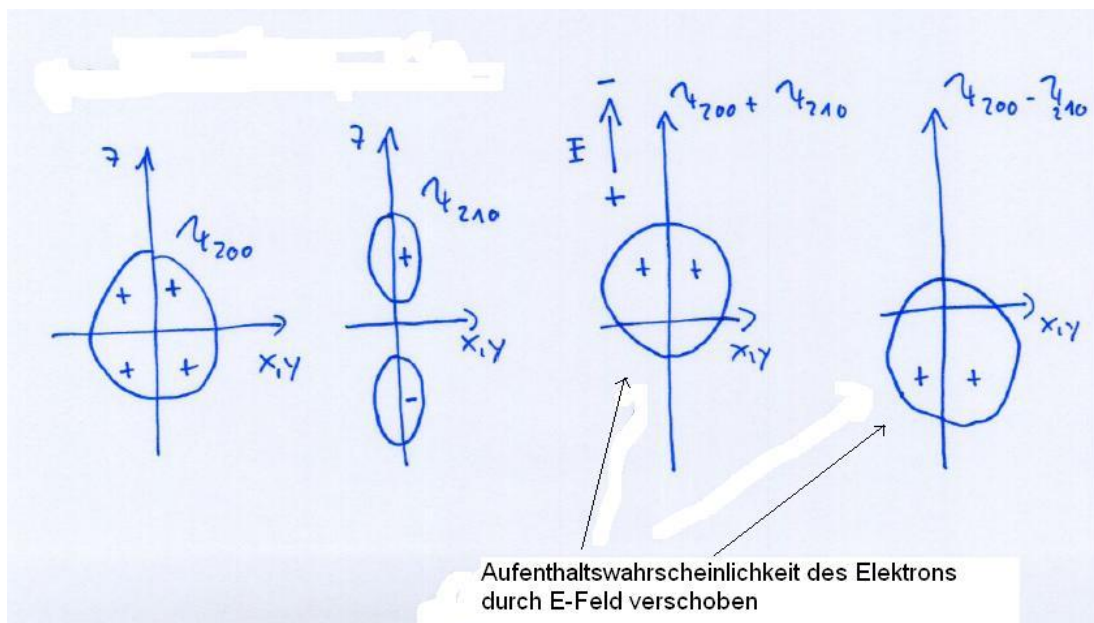
$$E_4^{(1)} = 0 \rightarrow |\varphi_4^{(0)}\rangle = |\Psi_{211}^{(0)}\rangle$$

$c_1 = c_2 = 0, c_3$ und c_4 beliebig

D.h. der vierfach entartete, 1. angeregte Zustand des H-Atoms spaltet unter Einfluss des E-Feldes auf



graphische Interpretation:



Bem.: hier nur Störungstheorie 1. Ordnung

→ linearer Starkeffekt, 2. Ordnung

Störungstheorie liefert den quadratischen Starkeffekt

8.2 Zeitabhängige Störungstheorie

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}_1(t)$$

\hat{H}_1 .. zeitabhängige Störung

Lösung des ungestörten, stationären Problems

$$\hat{H}_0 |n\rangle = E_n |n\rangle$$

sei bekannt, gelte $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$, $\sum_n |n\rangle \langle n| = \hat{I}$

gesucht ist die Lösung des zeitabhängigen Problems

$$i\hbar \left| \dot{\Psi}(t) \right\rangle = \hat{H}(t) |\Psi\rangle$$

entwickeln $|\Psi(t)\rangle$ nach $|n\rangle$:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n \tilde{c}_n(t) |n\rangle = \sum_n c_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} |n\rangle$$

$e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$ = Zeitabhängigkeit der Lösung des statischen Problems

In SG einsetzen:

$$\begin{aligned} i\hbar \sum_n \dot{c}_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} |n\rangle + i\hbar \sum_n C_n(t) \left(-\frac{i}{\hbar}E_n\right) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} |n\rangle \\ = \sum_n c_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \underbrace{\hat{H}_0 |n\rangle}_{E_n |n\rangle} + \sum_n c_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \hat{H}_1(t) |n\rangle \\ \sum_n i\hbar \dot{c}_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} |n\rangle = \sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \hat{H}_1 |n\rangle \quad | \langle m | \\ i\hbar \dot{c}_m(t) e^{-\frac{i}{\hbar}E_m t} = \sum_n \langle m | \hat{H}_1(t) |n\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} c_n(t) \end{aligned}$$

Definieren Übergangsfrequenz $\omega_{nm} := \frac{E_n - E_m}{\hbar}$

damit Bewegungsgleichung für $c_m(t)$:

$$i\hbar \dot{c}_m(t) = \sum_n \langle m | \hat{H}_1(t) |n\rangle e^{-i\omega_{nm}t} c_n(t)$$

System von (i.allg. ∞ vielen) DGL mit zeitabhängigen Koeffizienten

Annahme: System zur Zeit $t_0 = 0$ im Zustand $|l\rangle$

$|c_n(t)|^2$.. Wahrscheinlichkeit dafür, dass das System zum Zeitpunkt t durch Störung $\hat{H}_1(t)$ in Zustand $|n\rangle$ übergegangen ist.

approximative Lösung $\int_{t_0}^t d\tau$

$$\Rightarrow c_m(t) = c_m(t_0) + \frac{1}{i\hbar} \sum_n \int_{t_0}^t d\tau H_{1mn}(\tau) e^{-i\omega_{nm}\tau} c_n(\tau) \quad (*)$$

Annahme: $\hat{H}_{1mn}(\tau)$ kleine Störung

$$\Rightarrow c_m(t) \approx c_m(t_0)$$

$$\Rightarrow c_m(t) \approx c_m^{(1)}(t) = c_m(t_0) + \frac{1}{i\hbar} \sum_n \int_{t_0}^t d\tau H_{1mn}(\tau) \times e^{-i\omega_{nm}\tau} c_n(t_0)$$

Bem.: höhere Ordnungen durch Einsetzen von $c_m^{(1)}(t)$ unter dem Integral (*)

8.2.1 Beispiel: "Fermi's golden rule"

Untersuchen Störung durch zeitabhängiges, monochromatisches E-Feld

$$\bar{E}(\bar{x}, t) = \bar{a} \left(F e^{i(\bar{k}\bar{x} - \omega t)} + F^* e^{-i(\bar{k}\bar{x} - \omega t)} \right)$$

(über Real- und Imaginärteil von F beliebige Phase darstellbar)

jetzt Atom im \bar{E} -Feld, e^- erfährt zusätzliches Potential $V(t) = -e\bar{x}\bar{E}(\bar{x}, t)$

\Rightarrow Störoperator $\hat{H}_1 = -e\hat{x}\bar{E}(\hat{x}, t)$

$$= \underbrace{-e\hat{x}\bar{a}e^{i\bar{k}\hat{x}} F}_{\hat{A}} e^{-i\omega t} + \underbrace{(-e\hat{x}\bar{a}e^{-i\bar{k}\hat{x}} F^*)}_{\hat{A}^+} e^{i\omega t}$$

$$|\bar{k}| \cdot |\bar{x}| = \frac{2\pi}{\lambda} \cdot |\bar{x}|$$

für $|\bar{x}| \propto$ Atomdurchmesser, d.h. klein gegen λ , gilt

$$\hat{A} \approx -e\hat{x}\bar{a}F, \quad \hat{A}^+ \approx -e\hat{x}\bar{a}F^*$$

$$H_{1ml}(\tau) = A_{ml}e^{-i\omega\tau} + A_{ml}^*e^{i\omega\tau}$$

mit $A_{ml} = \langle m | \hat{A} | l \rangle = -F\bar{a} \langle m | e\hat{x} | l \rangle$

nach 1. Ordnung Störungstheorie (8.2):

$$c_m^{(1)}(t) = c_m(0) + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t d\tau \sum_n H_{1mn}(\tau) e^{-i\omega_{nm}\tau} c_n(0)$$

Atom sei vor Einschalten des Feldes in $|l\rangle$, d.h. $c_n(0) = \delta_{nl}$

damit für $m \neq l$

$$c_m^{(1)}(t) = \left[\frac{A_{ml}}{i\hbar} \frac{e^{-i(\omega_{lm} + \omega)\tau}}{-i(\omega_{lm} + \omega)} \right]_0^t + \frac{A_{ml}^*}{i\hbar} \frac{e^{-i(\omega_{lm} - \omega)\tau}}{-i(\omega_{lm} - \omega)}$$

mit $\omega_{lm} = -\omega_{ml}$

$$c_m^{(1)}(t) = \frac{A_{ml}}{i\hbar} \frac{e^{i(\omega_{ml} - \omega)t} - 1}{i(\omega_{ml} - \omega)} + \frac{A_{ml}^*}{i\hbar} \frac{e^{-i(\omega_{lm} - \omega)t} - 1}{(-i)(\omega_{lm} - \omega)}$$

jetzt speziell Absorption: $\omega_{ml} \approx \omega$ näherungsweise Resonanz, d.h. $E_m \approx E_l + \hbar\omega$

wegen $\omega_{ml} - \omega \approx 0$ dominiert erster Summand in $c_m^{(1)}(t)$ und

$$c_m^{(1)}(t) \approx \frac{A_{ml}}{i\hbar} \frac{e^{i(\omega_{ml} - \omega)t} - 1}{i(\omega_{ml} - \omega)}$$

gilt

$$\begin{aligned}
 |e^{ix} - 1|^2 &= |e^{i\frac{x}{2}}e^{i\frac{x}{2}} - e^{i\frac{x}{2}}e^{-i\frac{x}{2}}|^2 \\
 &= \underbrace{|e^{i\frac{x}{2}}|^2}_1 \underbrace{|(e^{i\frac{x}{2}} - e^{-i\frac{x}{2}})|^2}_{2i \sin \frac{x}{2}} = 4 \sin^2 \frac{x}{2} \\
 \Rightarrow |c_m^{(1)}(t)|^2 = P_{l \rightarrow m}(t) &= \frac{|A_{ml}|^2}{\hbar^2} \frac{4 \sin^2 \frac{\omega_{ml} - \omega}{2} t}{(\omega_{ml} - \omega)^2} = \frac{|A_{ml}|^2}{\hbar} \cdot 4 \cdot \underbrace{\frac{\sin^2(\omega_{ml} - \omega) \frac{t}{2}}{(\omega_{ml} - \omega)^2 \frac{t}{2}}}_{\xrightarrow{t \rightarrow \infty} \pi \delta(\omega_{ml} - \omega)} \cdot \frac{t}{2}
 \end{aligned}$$

Bem.: Es gilt:

$$\delta(x) = \frac{1}{\pi} \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\sin^2 kx}{kx^2}$$

$$P_{l \rightarrow m}(t) = |A_{ml}|^2 \frac{2\pi t}{\hbar^2} \delta(\omega_{ml} - \omega)$$

Übergangsrate $\hat{=}$ Übergangswahrscheinlichkeit por Zeiteinheit

$$\omega_{ml} = \frac{d}{dt} P_{lm}(t) = \frac{2\pi}{\hbar^2} |A_{ml}|^2 \delta(\omega_{ml} - \omega)$$

"Fermis goldene Regel"

- Übergangsrate \propto |Übergangsmatrixelement|²
- Energieerhaltung durch δ - Funktion