

TII: Quantenmechanik

Vorlesungsskriptum, Wintersemester 07/08

Prof. Dr. Stefan Kehrein

Arnold Sommerfeld Center
for Theoretical Physics
Department Physik
Universität München
80333 München, Germany

Letzte Aktualisierung: 28. Januar 2009

Mitwirkende Studenten der LMU München

Sebastian Gottwald, Philipp Grötsch, Astrid Seifert

Hinweis

Dies ist eine Vorabversion des Skriptums, d.h. auf die Korrektheit der Inhalte ist keine Gewähr. Insbesondere sind wir für Korrektur- und Verbesserungsvorschläge dankbar: gottwald_AT_gmx.org (Skriptum), philipp.g_AT_gmx.de (Grafiken), astrid-seifert_AT_gmx.de (Übungen).

Inhaltsverzeichnis

I	Quantenmechanik in endlichdim. Zustandsräumen	1
1	Motivation	2
1.1	Doppelspaltexperiment	2
1.2	Atommodell	3
1.3	Hohlraumstrahlung	3
1.4	Photoelektrischer Effekt	3
1.5	Das Stern-Gerlach-Experiment	4
2	Endlichdimensionale Hilberträume	6
2.1	Die Struktur des Hilbertraums \mathcal{H}	7
2.2	Operatoren auf \mathcal{H}	9
2.3	Darstellungen	12
2.4	Spektralsatz	15
2.5	Sätze kommutierender Operatoren	15
2.6	Ein wichtiges Beispiel	16
3	Die Postulate der Quantenmechanik	18
3.1	Postulat 1	18
3.2	Postulat 2	19
3.3	Postulat 3	19
3.4	Postulat 4	20
3.5	Postulat 5	21
3.6	Postulat 6	28
4	Dichtematrix	33

II	Quantenmechanik in beliebigen Zustandsräumen	37
5	Unendlichdimensionale Hilberträume	38
5.1	Motivation	38
5.2	Eigenschaften unendlichdim. Hilberträume	39
5.3	Wichtige Hilberträume	39
5.4	Kontinuierliche Spektren	40
6	Korrespondenzprinzip	44
6.1	Postulat 7	44
7	Wellenmechanik	46
7.1	Ortsdarstellung	46
7.2	Erweiterung von Postulat 4	48
7.3	Schrödinger-Gleichung in Ortsdarstellung	48
7.4	Wahrscheinlichkeitsstrom	49
7.5	Impulsdarstellung	52
7.6	Schrödinger-Gleichung in Impulsdarstellung	54
8	Freies Teilchen/freies Wellenpaket	56
8.1	Wellenfunktion eines freien Teilchens	56
8.2	Unschärfe	57
8.3	Stationary phase approximation	58
8.4	Gaußsches Wellenpaket	62
9	Potentialkasten	64
9.1	Unendlich hoher Potentialkasten	64
9.2	Endlicher Potentialkasten	66
10	Harmonischer Oszillator	70
10.1	Vernichtungs- und Erzeugungsoperator	71
10.2	Konstruktion der Eigenzustände	72
10.3	Eigenschaften der Eigenzustände	76
10.4	Dynamik im harmonischen Oszillator	79
11	Streuung am Delta-Potential	80

11.1	Konstruktion der Eigenfunktionen	80
11.2	Streuung eines Wellenpakets	85
12	Heisenberg- und Schrödinger-Bild der Quantenmechanik	87
12.1	Zeitentwicklungsoperator	87
12.2	Heisenberg- und Schrödinger-Bild	89
12.3	Beispiel: Harmonischer Oszillator	90
III	Symmetrien und Drehimpuls	93
13	Drehimpulsalgebra	95
13.1	Die Drehimpulsoperatoren	95
13.2	Die Leiteroperatoren L_{\pm}	96
13.3	Eigenwertspektrum für den Drehimpuls	98
14	Kugelflächenfunktionen	101
14.1	Ortsdarstellung der Impulsoperatoren	101
14.2	Gem. Eigenfunktionen von L_z und L^2	103
15	Radialgleichung	106
15.1	Zeitunabhängige Schrödingergleichung in Kugelkoordinaten	106
15.2	Anwendung von Symmetrien	107
16	Wasserstoffatom	108
16.1	Asymptotische Analyse	108
16.2	Lösungsweg 1: Eigenspektrum	110
16.3	Lösungsweg 2: Eigenfunktionen	111
17	Drehimpuls und Drehgruppe	114
17.1	Wdh.: Drehungen in der klass. Mechanik	114
17.2	Drehungen in der Quantenmechanik	114
18	Spin	119
18.1	Der Spinzustandsraum	119
18.2	Spin-1/2 Teilchen	121
18.3	Spin-1 Teilchen	123

18.4 Messungen und Dynamik der Spinfreiheitsgrade	124
19 Addition von Drehimpulsen	127
IV Quantensysteme mit mehreren Teilchen	130
20 Unterscheidbare Teilchen und verschränkte Zustände	131
20.1 Postulat 8	131
20.2 Verschränkte Zustände	132
20.3 Vielteilchen-Wellenfunktion	134
21 Ununterscheidbare Teilchen	135
21.1 Gedankenexperiment	135
21.2 Erweiterung von Postulat 8	136
22 Mehrelektronenatome	140
22.1 Heliumatom	140
22.2 Grundzustände von Mehrelektronenatomen	142
V Störungstheorie	144
23 Zeitunabhängige (stationäre) Störungstheorie	145
23.1 Allgemeine Strategie	145
23.2 Störungstheorie 1. Ordnung (nicht-entartet)	147
23.3 Störungstheorie 2. Ordnung (nicht-entartet)	149
23.4 Entartete Störungstheorie (1. Ordnung)	150
24 Die Feinstruktur des Wasserstoffatoms	152
24.1 Spin-Bahn-Kopplung	152
24.2 Relativistische Korrektur	155
24.3 Vollständige Feinstrukturaufspaltung	155
25 Zeeman-Effekt	157
25.1 Problematik und allgemeiner Ansatz	157
25.2 Zeeman-Effekt bei schwachem Magnetfeld	158
25.3 Zeeman-Effekt bei starkem Magnetfeld	159

26 Zeitabhängige Störungstheorie	160
26.1 Wechselwirkungsbild	160
26.2 Zeitabh. Störungstheorie 1. Ordnung	162
26.3 Übergangswahrscheinlichkeit	162
26.4 Emission und Absorption von Strahlen	164
26.5 Fermis Goldene Regel	167
VI Variationsrechnung	169
27 Variationswellenfunktion	170
VII Streutheorie	173
28 Grundlagen	174
29 Bornsche Näherung	177
29.1 Integralform der zeitunabh. Schrödinger-Gleichung	177
29.2 Erste Bornsche Näherung	179
VIII Anhang	181
A Übungsaufgaben	182
A.1 Blatt 0: Präsenzübung	183
A.2 Blatt 1	185
A.3 Blatt 2	188
A.4 Blatt 3	190
A.5 Blatt 4	193
A.6 Blatt 5	196
A.7 Blatt 6	198
A.8 Blatt 7	201
A.9 Blatt 8	204
A.10 Blatt 9	206
A.11 Blatt 10	209
A.12 Blatt 11	211

A.13 Blatt 12	214
A.14 Probeklausur 1	217
A.15 Probeklausur 2	221
B Lösungen zu den Übungsaufgaben	224
B.1 Blatt 0 Präsenzübung	225
B.2 Blatt 1	228
B.3 Blatt 2	233
B.4 Blatt 3	238
B.5 Blatt 4	246
B.6 Blatt 5	251
B.7 Blatt 6	258
B.8 Blatt 7	265
B.9 Blatt 9	273
B.10 Blatt 10	281
B.11 Blatt 11	288
B.12 Blatt 12	296
B.13 Probeklausur 1	305

Teil I

**Quantenmechanik in
endlichdimensionalen
Zustandsräumen**

Kapitel 1

Motivation

Im Folgenden werden einige experimentelle Befunde vorgestellt, die maßgeblich zur Entwicklung der Quantenphysik beitrugen. Sie zeigten die Grenzen der klassischen Physik auf und verlangten nach einer Revidierung klassischer Begriffe.

1.1 Doppelspaltexperiment

1.2 Atommodell

1.3 Hohlraumstrahlung

1.4 Photoelektrischer Effekt

1.5 Das Stern-Gerlach-Experiment

1.1 Doppelspaltexperiment

Wir betrachten zunächst das sogenannte *Doppelspaltexperiment* mit Elektronen¹, welches in Abb. 1.1 schematisch dargestellt ist. Ein Elektronenstrahl gelangt durch eine Blende auf einen Schirm, wo ein Detektor die jeweilige Intensitätsverteilung misst. Links ist das Ergebnis für einen Einfachspalt abgebildet, rechts das entstandene Interferenzmuster beim Doppelspalt.

Interferenzmuster

Man erkennt bei einer direkten Gegenüberstellung der Intensitätsverteilungen, dass an den Maxima im klassischen Bild (also bei einer Superposition der beiden Einzelspaltmuster) im realen Doppelspaltinterferenzmuster Minima sind, also dort die Auftreffwahrscheinlichkeiten verschwinden.

Beeinflussung durch
Messung

Um herauszufinden durch welchen der beiden Spalte die Elektronen tatsächlich gelangen, könnte man einen Detektor hinter einem der Spalte platzieren, der sofort signalisiert, wenn er ein Elektron absorbiert. Hier beobachtet man allerdings, dass mit installiertem Detektor kein Doppelspaltinterferenzmuster mehr auftritt, also durch die Messung das Verhalten des Systems grundlegend beeinflusst wird.

Eine Veranschaulichung bietet eine Animation, die [hier](#) zu finden ist.

¹Analog kann man das Experiment auch mit Licht, Neutronen, leichten Molekülen oder Fullerenen (C60) durchführen.

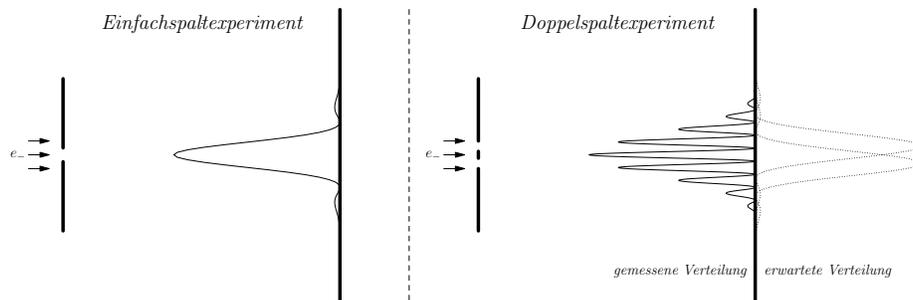


Abbildung 1.1: Doppelspaltexperiment

1.2 Atommodell

Diskrete
Energiespektren

- Die Bindungsenergien von gebundenen Atomen sind in der klassischen Physik kontinuierlich verteilt, was den Beobachtungen widerspricht, denn in Wirklichkeit treten diese Energien in diskreten Spektren auf.

Instabilität der
Atome

- Beschleunigte Ladung strahlt elektromagnetische Wellen ab. Dies würde im klassischen Sinne allerdings zur Instabilität aller Atome führen. Das *Bohr-Sommerfeld-Atommodell* gibt eine quantenmechanische Erklärung für die offensichtliche Stabilität.

1.3 Hohlraumstrahlung

Unendliche
Strahlungsenergie

Ein Hohlraum mit geheizten und absorbierenden Innenwänden und einer kleinen Öffnung, aus der Strahlung austritt, wird als Hohlraumstrahler bezeichnet. Würde man die gespeicherte Strahlungsenergie mithilfe klassischer Physik berechnen, so würde man einen unendlich großen Wert erhalten. Nur eine Quantenbeschreibung löst dieses Problem.

1.4 Photoelektrischer Effekt

Quantisierte
Lichtenergie

Wird ein Lichtstrahl auf eine Metallplatte gelenkt, so treten ab einer bestimmten Lichtfrequenz Elektronen aus dem Metall aus. Dieser Effekt, der unabhängig von der Intensität des Lichts ist, kann nur durch den Teilchencharakter von Photonen erklärt werden. Demnach wird einem Photon die Energie

$$E = hf = \hbar\omega \tag{1.1}$$

zugeordnet (neue Fundamentalkonstante: Plancksches Wirkungsquantum h).

1.5 Das Stern-Gerlach-Experiment

Stern-Gerlach-Versuch

Aus einem Atomstrahlrohr werden Silberatome abgedampft. Dieser Strahl wird mit Hilfe zweier Blenden kollimiert und durchläuft ein inhomogenes Magnetfeld. Auf einem Schirm schlägt sich das Silber nieder (siehe Abb.1.2).

Um den Effekt des Magnetfelds auf die Silberatome zu verstehen, benutzen wir ein vereinfachtes Modell eines Silberatoms:

Ein Silberatom besteht aus einem Kern und 47 Elektronen. Das magnetische Moment $\boldsymbol{\mu}$ des Atoms entsteht durch das Zusammenwirken aller Bahndrehimpulse und Spins dieser Elektronen. 46 von ihnen kompensieren ihre Wirkung allerdings gegenseitig, womit nur noch ein Elektron für das magnetische Moment verantwortlich ist. Dieses 5s-Elektron hat keinen Bahndrehimpuls, es ist also nur der Spin \mathbf{S} des äußersten Elektrons, der das magnetische Moment $\boldsymbol{\mu}$ des Atoms bewirkt. Es gilt deshalb

$$\boldsymbol{\mu} \propto \mathbf{S} \quad (1.2)$$

Die potentielle Energie des Atoms im Magnetfeld \mathbf{B} ist $-\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$, wodurch eine Kraft in z -Richtung auf das Atom wirkt:

$$F_z = \frac{\partial(\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B})}{\partial z} \approx \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \quad (1.3)$$

Wie stark und ob das Atom nach oben oder nach unten abgelenkt wird ist somit abhängig vom Vorzeichen und Wert von μ_z . Die Stern-Gerlach-Apparatur kann also als Messgerät für die z -Komponenten der magnetischen Momente $\boldsymbol{\mu}$ der Silberatome verstanden werden.

Quantisierung des Ergebnisses

Da die Atome im Ofen willkürlich orientiert sind, gibt es im klassischen Sinne keine ausgezeichnete Orientierung von $\boldsymbol{\mu}$. μ_z müsste somit alle Werte zwischen $|\boldsymbol{\mu}|$ und $-|\boldsymbol{\mu}|$ annehmen können und entsprechend würden wir eine kontinuierliche Verteilung der Silberatome auf dem Schirm erwarten. Dem entgegen steht allerdings die experimentelle Beobachtung, denn in Wirklichkeit wird der ursprüngliche Silberstrahl in zwei voneinander getrennte Komponenten aufgeteilt, was sich durch zwei separate „Silberflecken“ auf dem Schirm niederschlägt.

Einführung eines Zwei-Zustand-systems

Wir ordnen die Atome deshalb zwei Zuständen zu:

$$\text{Atome mit } \mu_z > 0 \quad : \quad \text{Vektor } (1, 0) \quad (1.4)$$

$$\text{Atome mit } \mu_z < 0 \quad : \quad \text{Vektor } (0, 1) \quad (1.5)$$

Quantenmechanisches Axiom

Dies ist ein Beispiel für ein Grundkonzept der Quantenmechanik:

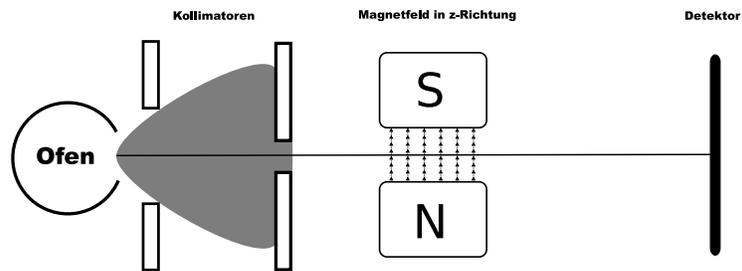


Abbildung 1.2: Der Stern-Gerlach-Versuch

Der physikalische Zustand eines Quantensystems entspricht einem Vektor eines geeigneten Zustandsraums.

Wichtige Lerninhalte des Kapitels

- Quantisierte Energieniveaus im Atommodell
- Stern-Gerlach Experiment: Quantisierung der Werte des magnetischen Moments μ_z im Experiment

Kapitel 2

Endlichdimensionale Hilberträume

In der Quantenmechanik kann man den Zustand eines Teilchens durch eine Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$ angeben. Die wahrscheinlichkeitstheoretische Interpretation dieser Wellenfunktion besagt, dass deren Betragsquadrat die Wahrscheinlichkeit angibt, das Teilchen zu einer gegebenen Zeit an einem bestimmten Ort aufzufinden:

$$dP = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3x \quad (2.1)$$

mit

$$\int |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3x = 1 \quad (\text{Integration über den gesamten Raum}) \quad (2.2)$$

Deshalb müssen wir den Raum der quadratisch-integrierbaren Funktionen betrachten, welcher mit L^2 bezeichnet wird und die Struktur eines Hilbertraums inne hat. Tatsächlich benötigen wir aber nur die stetigen, unendlich oft differenzierbaren Funktionen $\psi(\mathbf{r}, t) \in L^2$.

Da uns noch nicht alle mathematischen Mittel zur Verfügung stehen, unendlichdimensionale Hilberträume zu untersuchen, beschränken wir uns zunächst auf endlichdimensionale Hilberträume. Wir werden im nächsten Kapitel den Elementen eines solchen Raumes quantenmechanische Zustände zuordnen. Zunächst müssen wir uns allerdings mit der Struktur eines Hilbertraums und mit den auf ihm lebenden Operatoren beschäftigen.

2.1 Die Struktur des Hilbertraums \mathcal{H}

2.2 Operatoren auf \mathcal{H}

11.1 Repräsentationen

2.4 Spektralsatz

2.5 Sätze kommutierender Operatoren

2.6 Ein wichtiges Beispiel

Wahrscheinlichkeitstheoretische Interpretation der Wellenfunktion

Vorläufige Einschränkung

2.1 Die Struktur des Hilbertraums \mathcal{H}

Definition 2.1 (Hilbertraum, Ket).

Def.: Der
Hilbertraum \mathcal{H}

Sei \mathcal{H} ein endlichdimensionaler Vektorraum über \mathbb{C} . Gibt es in \mathcal{H} ein positiv definites Skalarprodukt, so ist \mathcal{H} ein (Prä-)Hilbertraum. Die Elemente von \mathcal{H} bezeichnen wir als Ket-Vektoren (auch Kets) und schreiben

Def.: Ket-Vektoren

$$|\psi\rangle \in \mathcal{H} \tag{2.3}$$

Beispiel 2.1

Beispielsweise können wir die Zustände des oben betrachteten Zweizustandssystems im Stern-Gerlach-Experiment schreiben als

$$(1, 0) = |+\rangle, \quad (0, 1) = |-\rangle \tag{2.4}$$

2.1.1 Skalarprodukt und Norm

Skalarprodukt

Für das Skalarprodukt in \mathcal{H} schreiben wir

$$(\varphi, \psi) =: \langle \varphi | \psi \rangle \in \mathbb{C} \tag{2.5}$$

mit den Eigenschaften

- (i) $\langle \varphi | \psi \rangle = \langle \psi | \varphi \rangle^*$ (komplexe Konjugation)
- (ii) $\langle \varphi | \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2 \rangle = \lambda_1 \langle \varphi | \psi_1 \rangle + \lambda_2 \langle \varphi | \psi_2 \rangle$ (Linearität)
- (iii) $\langle \lambda_1 \varphi_1 + \lambda_2 \varphi_2 | \psi \rangle = \lambda_1^* \langle \varphi_1 | \psi \rangle + \lambda_2^* \langle \varphi_2 | \psi \rangle$ (Antilinearität)
- (iv) $\langle \psi | \psi \rangle \geq 0$ und $\langle \psi | \psi \rangle = 0 \Rightarrow |\psi\rangle = 0$ (positive Definitheit)

Norm

Durch dieses Skalarprodukt wird eine Norm in \mathcal{H} induziert

$$\|\psi\| = \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle} \tag{2.6}$$

2.1.2 Der Dualraum \mathcal{H}^* und dessen Elemente

Dualraum

Ein Dualraum V^* eines \mathbb{K} -Vektorraums V besteht aus der Menge aller linearen Abbildungen $\chi : V \rightarrow \mathbb{K}$, also aus allen linearen Abbildungen, die Vektoren aus V Zahlen aus dem zugrundeliegenden Körper zuordnen. Der Dualraum \mathcal{H}^* besteht also aus den linearen Verknüpfungen von Ket-Vektoren aus \mathcal{H} mit komplexen Zahlen:

$$\mathcal{H}^* := \{ \chi : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}, |\psi\rangle \mapsto c \} \tag{2.7}$$

Definition 2.2 (Bra).

Def.: Bra-Vektoren

Da \mathcal{H}^* als Dualraum auch ein Vektorraum ist, können wir dessen Elemente auch als Vektoren bezeichnen. In unserem Fall nennen wir sie Bra-Vektoren und schreiben

$$\langle \chi | \in \mathcal{H}^* \tag{2.8}$$

für ein Element aus \mathcal{H}^* und definieren

$$\boxed{\langle \chi | : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}, |\psi\rangle \mapsto \langle \chi | \psi \rangle} \tag{2.9}$$

Bemerkung 2.1

Man schreibt gerne $|\lambda\psi\rangle$, womit man den Vektor $\lambda|\psi\rangle$ notiert. Beachten sollte man, dass gilt

$$\langle \lambda\psi | = \lambda^* \langle \psi | \tag{2.10}$$

Satz 2.1 (Schwarzsche Ungleichung)

Schwarzsche Ungleichung

Seien $|\varphi_1\rangle$ und $|\varphi_2\rangle$ zwei beliebige Kets aus \mathcal{H} , dann gilt die Ungleichung

$$\boxed{|\langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle|^2 \leq \|\varphi_1\|^2 \|\varphi_2\|^2} \tag{2.11}$$

Beweis: Für einen beliebigen Ket $|\psi\rangle \neq 0$ gilt immer

$$\langle \psi | \psi \rangle \geq 0 \tag{2.12}$$

Sei nun $|\psi\rangle := |\varphi_1\rangle + \lambda|\varphi_2\rangle$, dann ist

$$\langle \psi | \psi \rangle = \langle \varphi_1 | \varphi_1 \rangle + \lambda \langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle + \lambda^* \langle \varphi_2 | \varphi_1 \rangle + \lambda \lambda^* \langle \varphi_2 | \varphi_2 \rangle \geq 0 \tag{2.13}$$

Wenn wir nun $\lambda = -\frac{\langle \varphi_2 | \varphi_1 \rangle}{\langle \varphi_2 | \varphi_2 \rangle}$ setzen, ergibt sich

$$\langle \psi | \psi \rangle = \langle \varphi_1 | \varphi_1 \rangle - \frac{\langle \varphi_2 | \varphi_1 \rangle \langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle}{\langle \varphi_2 | \varphi_2 \rangle} \geq 0 \tag{2.14}$$

$$\Leftrightarrow |\langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle|^2 \leq \langle \varphi_1 | \varphi_1 \rangle \langle \varphi_2 | \varphi_2 \rangle \quad \square \tag{2.15}$$

2.2 Operatoren auf \mathcal{H}

2.2.1 Lineare Operatoren

Definition 2.3 (Linearer Operator).

Def.: Lineare Operatoren

Es ist ein Merkmal der Quantenmechanik, dass ausschließlich lineare Operatoren auftreten. Dies sind Abbildungen $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, welche die Eigenschaft erfüllen

$$A(\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle) = \lambda_1 A|\psi_1\rangle + \lambda_2 A|\psi_2\rangle \quad (2.16)$$

Bemerkung 2.2

Anwendung linearer Operatoren auf Bras

- (i) Lineare Operatoren können nicht nur auf Ket-, sondern auch auf Bra-Vektoren angewendet werden:

$$(\langle\varphi|A)|\psi\rangle := \langle\varphi|(A|\psi\rangle) \quad (2.17)$$

Anders ausgedrückt erhalten wir nach Anwendung einer linearen Abbildung A auf einen Bra-Vektor $\langle\varphi|$ wieder einen Bra-Vektor $\langle\varphi|A$.

- (ii) Die Definition der Anwendung linearer Operatoren auf Bra-Vektoren zeigt, dass die Klammersetzung dabei willkürlich ist, weshalb wir nur noch schreiben

$$\langle\varphi|A|\psi\rangle := \langle\varphi|(A|\psi\rangle) = (\langle\varphi|A)|\psi\rangle \quad (2.18)$$

- (iii) Die Reihenfolge von Abbildung und Bra-Vektor ist bei deren Kombination von Bedeutung, denn $A\langle\varphi|$ ergibt nach Anwendung auf einen Ket-Vektor: $A\langle\varphi|\psi\rangle$, was der Multiplikation einer linearen Abbildung mit einer Zahl entspricht.

2.2.2 Der adjungierte Operator A^\dagger

Definition 2.4 (Adjungierter Operator).

Def.: adjungierter Operator

Der adjungierte Operator A^\dagger (oder auch die hermitesch konjugierte) eines linearen Operators A wirkt auf einen Bra-Vektor, indem er ihm den Bra-Vektor zuordnet, der dem Ket-Vektor entspricht, welcher durch den Operator A aus dem ursprünglichen Ket-Vektor entsteht:

$$\langle\psi|A^\dagger = \langle\psi'|, \quad \text{wenn } |\psi'\rangle := A|\psi\rangle \quad (2.19)$$

Der adjungierte Operator ist linear (wie man leicht zeigt).

Satz 2.2

Skalarprodukt und hermitesche Konjugation

Seien $|\varphi\rangle, |\psi\rangle$ zwei beliebige Ket-Vektoren, A ein linearer Operator, so gilt

$$\langle\varphi|A|\psi\rangle = \langle\psi|A^\dagger|\varphi\rangle^* \quad (2.20)$$

Beweis: $\langle\varphi'|\psi\rangle = \langle\psi|\varphi'\rangle^* \Leftrightarrow \langle\varphi|A^\dagger|\psi\rangle = \langle\psi|A|\varphi\rangle^*$ □

2.2.3 Hermitesche Operatoren

Definition 2.5 (Hermitescher Operator).

Def.: hermitescher Operator

Ein Operator A heißt hermitesch, wenn er die Relation erfüllt

$$A = A^\dagger \quad (2.21)$$

Satz 2.3 (Eigenwerte und Eigenvektoren hermitescher Operatoren)

Eigenwerte und Eigenvektoren

Die Eigenwerte eines hermiteschen Operators sind reell und Eigenvektoren zu unterschiedlichen Eigenwerten sind orthogonal zueinander.

Beweis: (a) Sei $|\varphi\rangle$ ein Eigenvektor von A , dann ist

$$\langle \varphi | A | \varphi \rangle = \lambda \langle \varphi | \varphi \rangle, \quad \langle \varphi | A | \varphi \rangle = \langle \varphi | A^\dagger | \varphi \rangle = \lambda^* \langle \varphi | \varphi \rangle \quad (2.22)$$

Somit ist $\lambda \in \mathbb{R}$.

(b) Sei $A|\varphi\rangle = \lambda|\varphi\rangle$ und $A|\psi\rangle = \mu|\psi\rangle$, dann ist

$$\langle \varphi | A | \psi \rangle = \mu \langle \varphi | \psi \rangle, \quad \langle \varphi | A | \psi \rangle = \langle \varphi | A^\dagger | \psi \rangle = \lambda \langle \varphi | \psi \rangle \quad (2.23)$$

Da aber $\lambda \neq \mu$, muss gelten: $\langle \varphi | \psi \rangle = 0$ □

2.2.4 Unitäre Operatoren

Definition 2.6 (Unitärer Operator).

Def.: Unitärer Operator

Ein Operator U ist unitär, wenn

$$U^{-1} = U^\dagger \quad (2.24)$$

Falls also gilt

$$UU^\dagger = U^\dagger U = \mathbb{1} \quad (2.25)$$

Bemerkung 2.3 (Eigenschaften)

Eigenschaften unitärer Operatoren

(i) Das Skalarprodukt zweier Ket-Vektoren ist invariant unter der Wirkung eines unitären Operators:

$$\langle (U\varphi) | (U\psi) \rangle = \langle \varphi | U^\dagger U | \psi \rangle = \langle \varphi | \psi \rangle \quad (2.26)$$

(ii) Das Produkt zweier unitärer Operatoren ist unitär:

$$(UV)(UV)^\dagger = UVV^\dagger U^\dagger = UU^\dagger = \mathbb{1} \quad (2.27)$$

(iii) Unitäre Operatoren sind die Verallgemeinerung im komplexen mehrdimensionalen Raum von orthogonalen Operatoren im reellen dreidimensionalen Raum. Das Skalarprodukt – insbesondere die dadurch beschriebene Norm – ist ebenfalls invariant unter der Wirkung dieser Operatoren (Rotationen, punkt- oder ebenensymmetrische Operationen).

(iv) Sei $\{|i\rangle\}$ eine orthonormale Basis des Zustandsraums \mathcal{H} . Dann gilt für die durch einen unitären Operator U transformierten Ket-Vektoren der Menge $\{|\tilde{i}\rangle := U|i\rangle\}$:

$$\langle \tilde{j} | \tilde{i} \rangle = \langle j | i \rangle = \delta_{ij} \quad (2.28)$$

$$|\psi\rangle = U(U^\dagger|\psi\rangle) = U \sum_i c_i |i\rangle = \sum_i c_i |\tilde{i}\rangle \quad (2.29)$$

Also bildet das Orthonormalsystem $\{|\tilde{i}\rangle : |\tilde{i}\rangle = U|i\rangle\}$ eine Basis in \mathcal{H} . Das heißt, unitäre Operatoren führen einen Basenwechsel durch:

$$A'_{mn} = \langle Um | A | Un \rangle = \langle m | U^\dagger A U | n \rangle = (U^\dagger A U)_{mn} \quad (2.30)$$

Satz 2.4 (Eigenwerte unitärer Operatoren)

Charakteristik der Eigenwerte

Sei $|\psi_u\rangle$ ein normierter Eigenvektor des unitären Operators U .

$$U|\psi_u\rangle = u|\psi_u\rangle \quad (2.31)$$

Dann ist

$$1 = \langle \psi_u | \psi_u \rangle = \langle \psi_u | U^\dagger U | \psi_u \rangle = u^* u \langle \psi_u | \psi_u \rangle = u^* u \quad (2.32)$$

Also ist der Eigenwert u eine komplexe Zahl mit Betrag 1.

$$u = e^{i\varphi_u} \quad (2.33)$$

Satz 2.5 (Eigenvektoren unitärer Operatoren)

Eigenschaft der Eigenvektoren

Seien $|\psi_u\rangle$ und $|\psi_{u'}\rangle$ zwei normierte Eigenvektoren des unitären Operators U . Dann ergibt sich

$$\langle \psi_u | \psi_{u'} \rangle = \langle \psi_u | U^\dagger U | \psi_{u'} \rangle = u^* u' \langle \psi_u | \psi_{u'} \rangle = e^{i(\varphi_{u'} - \varphi_u)} \langle \psi_u | \psi_{u'} \rangle \quad (2.34)$$

Sind die Eigenwerte u und u' verschieden, so sind also die zugehörigen Eigenvektoren orthogonal.

2.2.5 Projektionsoperatoren

Definition 2.7 (Projektionsoperator).

Def.: Projektor

Sei \mathcal{H}_1 ein Untervektorraum von \mathcal{H} und \mathcal{H}_1^\perp dazu orthogonal, d.h. $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_1^\perp$. Jeder Vektor $|\varphi\rangle$ kann eindeutig zerlegt werden in $|\varphi\rangle = |\varphi_1\rangle + |\varphi_2\rangle$, wobei $|\varphi_1\rangle \in \mathcal{H}_1$ und $|\varphi_2\rangle \in \mathcal{H}_1^\perp$. Dann heißt der Operator

$$P_1 : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}_1, |\varphi\rangle \mapsto |\varphi_1\rangle \quad (2.35)$$

Projektionsoperator.

Bemerkung 2.4 (Eigenschaften)

- (i) P_1 ist hermitesch. ($\langle \varphi | P_1 | \psi \rangle = \langle \varphi | \psi_1 \rangle = \langle \varphi_1 | \psi_1 \rangle = \langle \varphi_1 | \psi \rangle = \langle \varphi | P_1^\dagger | \psi \rangle$)
 P_1 ist idempotent ($P_1^2 = P_1$). ($P_1^2 | \psi \rangle = P_1 | \psi_1 \rangle = | \psi_1 \rangle$)
 \implies Gilt $P_1^\dagger P_1 = P_1$, so ist P_1 ein Projektor.

- (ii) Sei $|\psi\rangle$ normiert und spanne den Unterraum \mathcal{H}_1 auf, dann ist durch

$$P_1 := |\psi\rangle\langle\psi| \tag{2.36}$$

ein Projektor in den Unterraum \mathcal{H}_1 gegeben.

- (iii) Zerlegung der Identität: Sei $\{|i\rangle : i \in \{1, \dots, n\}\}$ ein vollständiges Orthonormalsystem von \mathcal{H} , dann kann die Identität zerlegt werden in

$$\mathbb{1} = \sum_{i=1}^n |i\rangle\langle i| \tag{2.37}$$

Zerlegung der Identität

2.3 Darstellungen

Eine bestimmte Darstellung zu wählen bedeutet – nach Einführung einer diskreten oder kontinuierlichen Basis – Vektoren und Operatoren nur noch durch Zahlen (für Vektoren Komponenten, für Operatoren Matrizenelemente) bezüglich dieser Basis zu charakterisieren. Welche Darstellung – also welche Basis – gewählt wird, ist für die Theorie beliebig. In der Praxis wählt man diejenige, welche die gewünschten Eigenschaften mit sich bringt.

2.3.1 Orthonormierungsrelation

Orthonormierungsrelation

Eine Menge von Ket-Vektoren $\{|i\rangle\}$ wird orthonormal genannt, falls gilt

$$\langle i | j \rangle = \delta_{ij} \tag{2.38}$$

2.3.2 Darstellung der Ket- und Bra-Vektoren

Darstellung der Kets:
Spaltenvektoren

In einer diskreten Basis $\{|i\rangle\}$ wird ein Ket-Vektor durch die Menge seiner Komponenten $c_i = \langle i | \psi \rangle$ bezüglich dieser Basis dargestellt:

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \langle 1 | \psi \rangle \\ \langle 2 | \psi \rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{2.39}$$

Darstellung der Bras:
Zeilenvektoren

Ein Bra-Vektor kann geschrieben werden als

$$\langle \psi | = \langle \psi | \mathbb{1} = \sum_i \langle \psi | i \rangle \langle i | = \sum_i b_i^* \langle i | \tag{2.40}$$

Also kann der Bra-Vektor $\langle\psi|$ als Linearkombination der Bras $\langle i|$ geschrieben werden, mit den Komponenten b_i^* , welche die komplex Konjugierten der Komponenten des zugehörigen Ket-Vektors in derselben Basis darstellen. Da wir die Komponenten von Kets in Spaltenvektoren schreiben, wählen wir für die Bras eine Zeilenschreibweise:

$$\langle\psi| = (\langle\psi|1\rangle \langle\psi|2\rangle \cdots \langle\psi|i\rangle \cdots) \quad (2.41)$$

Bemerkung 2.5 (Skalarprodukt)

Um das Skalarprodukt zweier Kets zu berechnen, können wir uns nun der Spalten- und Zeilenschreibweise bedienen, indem wir einfach deren Matrix-Produkt bilden:

$$\langle\varphi|\psi\rangle = (\langle\varphi|u_1\rangle \langle\varphi|u_2\rangle \cdots) \begin{pmatrix} \langle u_1|\psi\rangle \\ \langle u_2|\psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} = (b_1^* \ b_2^* \ \cdots) \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \sum_i b_i^* c_i$$

Koordinaten-
darstellung des
Skalarprodukts

Und erhalten dadurch die bekannte Komponentenschreibweise des Skalarprodukts.

2.3.3 Darstellung von Operatoren

Sei $|\psi'\rangle := A|\psi\rangle$, mit den Komponenten b'_j in der Basis $\{|i\rangle\}$. Betrachten wir die erste Komponente

$$b'_1 = \langle 1|\psi'\rangle = \langle 1|(A|\psi\rangle) \quad (2.42)$$

Für $|\psi\rangle$ können wir schreiben $|\psi\rangle = \sum_j b_j|j\rangle$:

$$b'_1 = \langle 1|(A|\psi\rangle) = \langle 1|\left(A \sum_j b_j|j\rangle\right) = \sum_j \langle 1|A|j\rangle b_j \quad (2.43)$$

Allgemein:

$$b'_i = \langle i|(A|\psi\rangle) = \langle i|\left(A \sum_j b_j|j\rangle\right) = \sum_j \langle i|A|j\rangle b_j \quad (2.44)$$

Darstellung von
Operatoren:
Matrizen

Wir nennen die Zahlen $\langle i|A|j\rangle := A_{ij}$ und schreiben sie in eine Matrix

$$\underline{A} := \begin{pmatrix} A_{11} & \cdots & A_{1j} & \cdots \\ \vdots & & \vdots & \\ A_{i1} & \cdots & A_{ij} & \cdots \\ \vdots & & \vdots & \end{pmatrix} \quad (2.45)$$

Denn wir erhalten

$$A|\psi\rangle = \begin{pmatrix} b'_1 \\ \vdots \\ b'_i \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_j A_{1j}b_j \\ \vdots \\ \sum_j A_{ij}b_j \\ \vdots \end{pmatrix} = \underline{A} \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_j \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (2.46)$$

Daraus ergibt sich der

Satz 2.6 (Matrizelemente)

Berechnung der
Matrizelemente

Die Matrizelemente A_{ij} der darstellenden Matrix \underline{A} einer Abbildung A ergeben sich aus

$$A_{ij} = \langle i|A|j\rangle \quad (2.47)$$

Bemerkung 2.6

Jede lineare Abbildung kann geschrieben werden als

$$A = \sum_{m,n} A_{mn}|m\rangle\langle n| \quad (2.48)$$

Denn

$$A|\psi\rangle = \sum_n c_n A|n\rangle = \sum_n \mathbb{1}A|n\rangle c_n = \sum_{m,n} |m\rangle\langle m|A|n\rangle\langle n|\psi\rangle \quad (2.49)$$

Matrix-Darstellung des adjungierten Operators

Darstellung des
adjungierten
Operators

Die zum adjungierten Operator A^\dagger gehörende Matrix lässt sich berechnen durch

$$A^\dagger_{ij} = \langle i|A^\dagger|j\rangle = \langle j|A|i\rangle^* = A^*_{ji} \quad (2.50)$$

Somit ist die zum adjungierten Operator gehörende Matrix \underline{A}^\dagger die transponierte der komplex konjugierten Matrix \underline{A}^* (Matrizelemente konjugiert) der Matrix \underline{A} .

Hermitesche Matrix

Hermitesche Matrix

Eine Hermitesche Matrix ist die zu einem hermiteschen Operator ($A = A^\dagger$) gehörende Matrix, sie hat somit die Eigenschaft:

$$A_{ij} = A^*_{ji} \quad (2.51)$$

$$A_{ii} = A^*_{ii} \quad (2.52)$$

Die Diagonalelemente sind also reelle Zahlen und die bezüglich der Diagonalen symmetrischen Einträge ihre jeweiligen komplex Konjugierten.

Unitäre Matrizen

Unitäre Matrix

Es ist

$$\langle u_i | u_j \rangle = \langle u_i | U^\dagger U | u_j \rangle = \sum_k \langle u_i | U^\dagger | u_k \rangle \langle u_k | U | u_j \rangle \quad (2.53)$$

Die Elemente einer unitären Matrix erfüllen also die Relation

$$\sum_k U_{ki}^* U_{kj} = \delta_{ij} \quad (2.54)$$

Das heißt, das Skalarprodukt einer Spalte mit der komplex Konjugierten einer anderen Spalte ergibt null (orthonormale Spalten).

2.4 Spektralsatz

Spektralsatz

Satz 2.7

Sei A hermitesch, dann existiert eine unitäre Matrix U , sodass $U^\dagger A U$ Diagonalfom hat, mit den Eigenwerten von A als Diagonalelemente. Für entartete Eigenwerte λ_n können $e(n)$ (Grad der Entartung) orthonormierte Eigenvektoren $|n, r\rangle$ gewählt werden. Man kann dann Projektoren in die jeweiligen Eigenräume durch $P_n = \sum_{r=1}^{e(n)} |n, r\rangle \langle n, r|$ definieren. Für A gilt die Spektralzerlegung

$$A = \sum_n \lambda_n P_n \quad (2.55)$$

2.5 Sätze kommutierender Operatoren

Hilfssatz

Satz 2.8

Sind die Operatoren A und B vertauschbar und ist $|\psi\rangle$ ein Eigenvektor von A , so ist auch $B|\psi\rangle$ ein Eigenvektor von A mit demselben Eigenwert a .

Beweis: $A(B|\psi\rangle) = B(A|\psi\rangle) = B(a|\psi\rangle) = a(B|\psi\rangle)$ □

Bemerkung 2.7 (Folgerungen)

Es ergeben sich direkte Folgerungen:

1. Ist a ein nicht entarteter Eigenwert, so sind alle ihm zugehörigen Eigenvektoren linear:

$$B|\psi\rangle \propto |\psi\rangle \quad (2.56)$$

Also ist $|\psi\rangle$ auch ein Eigenvektor von B .

2. Ist a ein entarteter Eigenwert, so gehört $B|\psi\rangle$ zum Eigenraum \mathcal{E}_a von a . Das heißt:

$$|\psi\rangle \in \mathcal{E}_a \Rightarrow B|\psi\rangle \in \mathcal{E}_a \quad (2.57)$$

(Man sagt: \mathcal{E}_a ist global invariant unter Einwirkung von B .)

Satz 2.9 (Gemeinsame Eigenbasis)

Gemeinsame
Eigenbasis

Sind die hermiteschen Operatoren A und B vertauschbar, so besitzen A und B gemeinsame Eigenvektoren, die eine Orthonormalbasis des Zustandsraums bilden.

Beweis: Da A eine Observable ist, existiert mindestens ein Orthonormalsystem von Eigenvektoren $\{u_n^i\}$ von A bezüglich Eigenwerten a_n , die eine Basis des Zustandsraums \mathcal{E} bilden.

1. Ist der Eigenwert a_n nicht entartet, so ist der zugehörige Eigenvektor $|u_n\rangle$ von A auch ein Eigenvektor von B (Satz 2.8).
2. Ist a_n entartet, so sind alle Elemente des Eigenraums \mathcal{E}_n Eigenvektoren von A mit Eigenwert a_n . B hat im Eigenraum \mathcal{E}_n die Darstellung $\beta_{ij}^{(n)} = \langle u_n^i | B | u_n^j \rangle$. Diese Matrix ist hermitesch, da B hermitesch ist. Das heißt, sie ist diagonalisierbar, also existiert eine Basis aus Eigenvektoren von B in \mathcal{E}_n , die automatisch Eigenvektoren von A sind. \square

Definition 2.8 (Vollständiger Satz kommutierender Operatoren).

Def.: Vollständiger
Satz vertauschbarer
hermitescher
Operatoren

Eine Menge von vertauschbaren hermiteschen Operatoren A_i wird als vollständiger/maximaler Satz von kommutierenden Operatoren bezeichnet, wenn durch Eigenwerte dieser Operatoren gemeinsame Eigenvektoren (bis auf einen konstanten Faktor) eindeutig bestimmt werden.

Bemerkung 2.8

Äquivalent dazu ist: Eine Menge von Observablen A_i ist eine vollständige Menge kommutierender Operatoren, wenn eine eindeutige Orthonormalbasis aus gemeinsamen Eigenvektoren existiert.

2.6 Ein wichtiges Beispiel

Beispiel

Ist H ein hermitescher Operator, so ist

$$U = e^{itH} \quad , t \in \mathbb{R} \quad (2.58)$$

ein unitärer Operator.

Beweis: $U^\dagger = \left(\sum_n \frac{(itH)^n}{n!} \right)^\dagger = \sum_n \frac{(-itH)^n}{n!} = e^{-itH}$. Somit ist $UU^\dagger = \mathbb{1}$. \square

Satz 2.10

Sei H hermitesch mit der Spektralzerlegung $H = \sum_n \lambda_n P_n$. Dann ist

$$U = e^{itH} = \sum_n e^{it\lambda_n} P_n \quad (2.59)$$

Beweis: Da $P_n P_m = \delta_{mn}$ und $P_n^2 = P_n$ ist

$$H^2 = \left(\sum_n \lambda_n P_n \right)^2 = \sum_n \lambda_n^2 P_n \quad (2.60)$$

Somit

$$e^{itH} = \sum_{n,k} \frac{(it\lambda_n)^k}{k!} P_n = \sum_n e^{it\lambda_n} P_n \quad (2.61) \quad \square$$

Wichtige Lerninhalte des Kapitels

- Definition Hilbertraum
- Schwarzsche Ungleichung
- Adjungierte, hermitesche und unitäre Operatoren
- Bra-Ket-Notation
- Projektionsoperatoren
- Spektralsatz
- Kommutierende Operatoren

Kapitel 3

Die Postulate der Quantenmechanik

Erstes Postulat

3.1 Postulat 1 – Zustandsvektoren und Zustandsräume

Der physikalische Zustand eines Quantensystems wird zu einer gegebenen Zeit t_0 vollständig durch einen Zustandsvektor $|\varphi\rangle \in \mathcal{H}$ beschrieben, wobei \mathcal{H} ein komplexer Hilbertraum (Zustandsraum) ist. $|\varphi\rangle$ ist dabei normiert zu wählen.

Bemerkung 3.1

- (i) $|\varphi\rangle, |\chi\rangle \in \mathcal{H} \Rightarrow |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\varphi\rangle + |\chi\rangle) \in \mathcal{H}$ (repräsentiert einen phys. Zustand)
- (ii) Klassische Mechanik: Der Zustand eines Systems ist definiert durch Angabe von Ort und Impuls.
 \Leftrightarrow
Quantenmechanik: Der Zustand eines Systems ist abstrakt definiert. Trennung von Zustand und physikalischen Eigenschaften.

Beispiel 3.1

In Abschnitt 1.2 wurde der Stern-Gerlach-Versuch vorgestellt und den beiden möglichen Zuständen des Systems Vektoren aus dem Zustandsraum $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$ zugeordnet. Ein solcher Zustand wird also durch einen Ket-Vektor der Form

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \quad \text{wobei } \alpha, \beta \in \mathbb{C} \quad (3.1)$$

charakterisiert.

- 3.1 Zustandsvektoren und -Räume
- 3.2 Physikalische Eigenschaften
- 3.3 Messergebnisse
- 3.4 Messwahrscheinlichkeit
- 3.5 „Kollaps der Wellenfunktion“
- 3.6 Schrödinger-Gleichung

3.2 Postulat 2 – Physikalische Eigenschaften

Zweites Postulat

Jede physikalisch messbare Eigenschaft \mathcal{A} wird durch einen hermiteschen Operator A im Zustandsraum beschrieben. A bezeichnet man als Observable.

Beispiel 3.2 (Pauli-Matrizen)

Die Einheitsmatrix

$$\mathbb{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

und die drei *Pauli-Matrizen*

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

sind linear unabhängige hermitesche Operatoren (Observablen). Jede 2×2 -Matrix ist als Linearkombination dieser Matrizen darstellbar (vgl. Übungsblatt Nr. 1 Aufgabe 1).

Den Pauli-Matrizen werden die drei Komponenten (μ_x, μ_y, μ_z) des magnetischen Moments $\boldsymbol{\mu}$ zugeordnet, für das wir uns im Stern-Gerlach-Versuch interessieren.

3.3 Postulat 3 – Messergebnisse

Drittes Postulat

Die Messung der physikalischen Eigenschaft \mathcal{A} liefert immer einen der Eigenwerte von A .

Bemerkung 3.2

Da hermitesche Operatoren reelle Eigenwerte besitzen (wie in Unterabschnitt 2.2.3 gezeigt wurde), sind Messergebnisse – den Erwartungen entsprechend – immer reell.

Beispiel 3.3

Im Stern-Gerlach-Experiment werden quantisierte Ergebnisse beobachtet: Die Verteilung der möglichen magnetischen Momente μ_z ist nicht kontinuierlich, wie es die klassische Theorie vorhersagt, sondern ist auf zwei Werte beschränkt. Dies sind genau die Eigenwerte ± 1 der Pauli-Matrix σ_z .

3.4 Postulat 4 – Messwahrscheinlichkeit

Viertes Postulat

Wird die Eigenschaft \mathcal{A} im Zustand $|\psi\rangle$ gemessen, dann findet man mit der Wahrscheinlichkeit

$$p_n = \langle \psi | P_n | \psi \rangle \quad (3.4)$$

das Messergebnis λ_n .

($P_n := \sum_{r=1}^{e(n)} |n, r\rangle \langle n, r|$ projiziert in den Eigenraum des Messergebnisses λ_n .)

Bemerkung 3.3

(i) Es ist $p_n \in \mathbb{R}$ (notwendige Eigenschaft einer Wahrscheinlichkeit), da

$$p_n^* = \langle \psi | P_n | \psi \rangle^* = \langle P_n \psi | \psi \rangle = \langle \psi | P_n^\dagger | \psi \rangle = \langle \psi | P_n | \psi \rangle = p_n \quad (3.5)$$

(ii) Nach dem dritten Postulat, sollte $\sum_n p_n = 1$ sein, da die Möglichkeit eines der Ergebnisse λ_n zu erhalten immer vorhanden ist:

$$\sum_n \langle \psi | P_n | \psi \rangle = \langle \psi | \sum_n P_n | \psi \rangle \stackrel{(2.37)}{=} \langle \psi | \mathbb{1} | \psi \rangle = 1 \quad (3.6)$$

Def.:
Erwartungswert

(iii) Der *Erwartungswert* der Messung einer Observablen A wird definiert durch

$$\langle A \rangle := \sum_n p_n \lambda_n = \sum_n \langle \psi | P_n | \psi \rangle \lambda_n \stackrel{(2.55)}{=} \langle \psi | A | \psi \rangle \quad (3.7)$$

- Wie man leicht sieht, ist der Erwartungswert $\langle A \rangle$ eines hermiteschen Operators reell.
- In der Regel ist der Erwartungswert kein erlaubtes Messergebnis einer einzelnen Messung.

Globale Phase

(iv) Physikalische Zustände sind nur bis auf eine *globale Phase* festgelegt, denn der Vektor $|\psi'\rangle := e^{i\alpha} |\psi\rangle$ ($\alpha \in \mathbb{R}$) hat die gleichen Messwahrscheinlichkeiten wie $|\psi\rangle$:

$$p'_n = \langle \psi' | P_n | \psi' \rangle = \langle e^{i\alpha} \psi | P_n | e^{i\alpha} \psi \rangle = e^{i(\alpha-\alpha)} \langle \psi | P_n | \psi \rangle = p_n \quad (3.8)$$

- Strenggenommen entsprechen physikalische Zustände einem sog. *Strahl* (ray), d.h. einem Vektor bis auf einen Phasenfaktor.
- Während eine globale Phasendifferenz keinen Einfluss auf die Wahrscheinlichkeiten hat, ist eine relative Phase zwischen zwei aufsummierten Zustandsvektoren von Bedeutung. So sind die physikalischen Eigenschaften der Zustände

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|\varphi\rangle + |\chi\rangle) \quad , \quad \frac{-1}{\sqrt{2}}(|\varphi\rangle + |\chi\rangle) \quad (3.9)$$

dieselben, wohingegen die Vektoren

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|\varphi\rangle + |\chi\rangle) \quad , \quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|\varphi\rangle - |\chi\rangle) \quad (3.10)$$

jeweils zu verschiedenen Messergebnissen führen.

(v) Das vierte Postulat erklärt einen fundamentalen Indeterminismus (es sei denn es existiert ein i mit $p_i = 1$).

3.5 Postulat 5 – “Kollaps der Wellenfunktion“

Fünftes Postulat

Wenn die Messung der physikalischen Eigenschaft \mathcal{A} im Zustand $|\psi\rangle$ das Messergebnis λ_n ergibt, so ist das System nach der Messung im Zustand

$$|\psi_n\rangle := \frac{P_n|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|P_n|\psi\rangle}} \quad (3.11)$$

(normierte Projektion in den Eigenraum des Eigenwerts λ_n).

Bemerkung 3.4

Dieses Postulat führt zu zwei grundsätzlichen Fragen:

- Ist das fünfte Postulat fundamental oder ableitbar?
- Ist diese Veränderung des Zustands ein physikalischer Effekt oder ein rechnerisches Hilfsmittel?

3.5.1 Bornsche Regel

Eine Kombination aus dem vierten und fünften Postulat ergibt den

Satz 3.1

Bornsche Regel

Die Wahrscheinlichkeit dafür, das System $|\psi\rangle$ im normierten Zustand $|\varphi\rangle$ zu finden, ist durch das Betragsquadrat des Überlappmatrixelements $\langle\varphi|\psi\rangle$ gegeben:

$$p(\psi \rightarrow \varphi) = |\langle\varphi|\psi\rangle|^2 \quad (3.12)$$

Beweis: Für eine Observable mit nicht-entarteten Eigenwerten werden die Wahrscheinlichkeiten nach dem vierten Postulat berechnet durch

$$p_n = \langle\psi|P_n|\psi\rangle = \langle\psi|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\psi\rangle = |\langle\varphi_n|\psi\rangle|^2 \quad \square$$

3.5.2 Präparation eines Quantenzustands

Präparation eines Zustands

Als eine Konsequenz des fünften Postulats ergibt sich, dass durch die Messung eines vollständigen Satzes kommutierender Observablen der Quantenzustand des gemessenen Systems eindeutig festgelegt wird (der Zustand wird präpariert).

Beispiel 3.4 (Stern-Gerlach-Experiment)

Im Stern-Gerlach-Experiment (1.5) konnte eine Quantisierung des Messergebnisses beobachtet werden. Den Atomen mit $\mu_z > 0$ wurde der Zustand $|+\rangle$,

denen mit $\mu_z < 0$ der Zustand $|-\rangle$ zugeschrieben. Benutzen wir die Pauli-Matrix

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

(siehe Übungsblatt Nr.1 und Nr.2) um die Messung durch die Stern-Gerlach-Apparatur mit Ausrichtung in z -Richtung zu beschreiben, wird die Quantisierung durch das diskrete Eigenwertspektrum $\{+1, -1\}$ von σ_z mit zugehörigen Eigenvektoren $|+\rangle, |-\rangle$ erklärt.

Desweiteren bildet $\{\sigma_z\}$ einen vollständigen Satz kompatibler Observablen, da keiner der Eigenwerte entartet ist (eindimensionale Eigenräume).

Wird nun einer der entstandenen Atomstrahlen blockiert (sagen wir, der mit $\mu_z < 0$), so ist der Zustand des noch vorhandenen Strahls eindeutig festgelegt, was einer Präparation des Zustands $|\psi\rangle = |+\rangle$ entspricht.

3.5.3 Messung von kompatiblen Observablen

Wir betrachten zwei kommutierende Observablen A, B mit der gemeinsamen orthonormierten Eigenbasis

$$\{|a_n, b_m, i\rangle : n = 1, \dots, N; m = 1, \dots, M; i = 1, \dots, e(n, m)\} \quad (3.14)$$

(N, M : Anzahl der verschiedenen Eigenwerte von A bzw. B ,
 $e(n, m)$: Grad der restlichen Entartung)

a_n und b_m geben dabei die Eigenwerte von A und B an, die den Eigenraum bestimmen, in dem die Menge $\{|a_n, b_m, i\rangle : i = 1, \dots, e(n, m)\}$ eine Orthonormalbasis bildet. Das System sei im Anfangszustand $|\psi\rangle = \sum_{m,n,i} c_{nmi} |a_n, b_m, i\rangle$.

Ziel

Im Folgenden soll untersucht werden, ob die Reihenfolge der Messung von A und B einen Unterschied für die Wahrscheinlichkeit $p(a_{n_0}, b_{m_0})$ macht, die angibt, mit welcher Wahrscheinlichkeit a_{n_0} und b_{m_0} gemessen wird.

$A \rightarrow B$

(i) Wird zuerst A gemessen, so ist die Wahrscheinlichkeit dafür a_{n_0} zu finden:

$$p(a_{n_0}) = \sum_{m,i} |c_{n_0,m,i}|^2 \quad (3.15)$$

Das System befindet sich dann im Zustand

$$|\psi'_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{\sum_{m,i} |c_{n_0,m,i}|^2}} \sum_{m,i} c_{n_0,m,i} |a_{n_0}, b_m, i\rangle \quad (3.16)$$

Wird nun B gemessen, so ist die Wahrscheinlichkeit einen Wert b_{m_0} zu finden

$$p_{a_{n_0}}(b_{m_0}) = \frac{1}{\sum_{m,i} |c_{n_0,m,i}|^2} \sum_i |c_{n_0,m_0,i}|^2 \quad (3.17)$$

Somit erhalten wir für die gesuchte Gesamtwahrscheinlichkeit

$$p(a_{n_0}, b_{m_0}) = p(a_{n_0}) \cdot p_{a_{n_0}}(b_{m_0}) = \sum_i |c_{n_0,m_0,i}|^2 \quad (3.18)$$

$B \rightarrow A$

(ii) Messen wir zuerst B , so erhalten wir einen Wert b_{m_0} mit der Wahrscheinlichkeit

$$p(b_{m_0}) = \sum_{n,i} |c_{n,m_0,i}|^2 \quad (3.19)$$

Das System befindet sich dann im Zustand

$$|\psi'_m\rangle = \frac{1}{\sqrt{\sum_{n,i} |c_{n,m_0,i}|^2}} \sum_{n,i} c_{n,m_0,i} |a_n, b_{m_0}, i\rangle \quad (3.20)$$

Wird nun A gemessen, so ist die Wahrscheinlichkeit einen Wert a_{n_0} zu finden

$$p_{b_{m_0}}(a_{n_0}) = \frac{1}{\sum_{n,i} |c_{n,m_0,i}|^2} \sum_i |c_{n_0,m_0,i}|^2 \quad (3.21)$$

Somit erhalten wir für die gesuchte Gesamtwahrscheinlichkeit

$$p(b_{m_0}, a_{n_0}) = p(b_{m_0}) \cdot p_{b_{m_0}}(a_{n_0}) = \sum_i |c_{n_0,m_0,i}|^2 \quad (3.22)$$

Es ist also

$$p(b_{m_0}, a_{n_0}) = p(a_{n_0}, b_{m_0}) \quad (3.23)$$

und macht somit für die Gesamtwahrscheinlichkeit keinen Unterschied, welche der kommutierenden Observablen zuerst gemessen wird. Das heißt, für kompatible (vertauschbare) Observablen sind die physikalischen Vorhersagen unabhängig von der Reihenfolge der Messung. Nach der Messung ist das System im Zustand

$$|\psi''\rangle = \frac{1}{\sqrt{\sum_i |c_{n_0,m_0,i}|^2}} \sum_i c_{n_0,m_0,i} |a_{n_0}, b_{m_0}, i\rangle \quad (3.24)$$

und jede weitere Messung von A oder B liefert a_{n_0} oder b_{m_0} .

Resultat:
gleichzeitige
Messung möglich

Die Hintereinanderausführung der Messung kompatibler Observablen liefert zusätzliche Informationen.

3.5.4 Messung inkompatibler Observablen

Nun wollen wir Observablen A, B betrachten, die nicht kommutieren, aber – als Vereinfachung – deren Eigenwerte den jeweils zugehörigen Eigenzustand eindeutig festlegen (es treten keine entarteten Eigenwerte auf). Ein Beispiel für ein solches System von Observablen sind die Pauli-Matrizen.

Ziel: Es soll wieder untersucht werden, ob die Reihenfolge der Messung von A und B eines Quantensystems im Zustand $|\psi\rangle$ einen Einfluss auf die jeweilige Gesamtwahrscheinlichkeit $p(a_{n_0}, b_{m_0})$ hat, die Eigenwerte a_{n_0} und b_{m_0} zu messen:

$A \rightarrow B$ (i) Die Messung von a_{n_0} mit der Wahrscheinlichkeit

$$p(a_{n_0}) = |\langle a_{n_0} | \psi \rangle|^2 \quad (3.25)$$

führt zum Zustand

$$|\psi'_n\rangle = |a_{n_0}\rangle \quad (3.26)$$

Wird daraufhin B gemessen, so erhält man den Wert b_{m_0} mit der Wahrscheinlichkeit

$$p_{\psi'_n}(b_{m_0}) = |\langle b_{m_0} | a_{n_0} \rangle|^2 \quad (3.27)$$

und den Endzustand

$$|\psi''_m\rangle = \langle b_{m_0} | a_{n_0} \rangle |b_{m_0}\rangle \quad (3.28)$$

Die Gesamtwahrscheinlichkeit ist also

$$p(a_{n_0}, b_{m_0}) = |\langle a_{n_0} | \psi \rangle|^2 |\langle b_{m_0} | a_{n_0} \rangle|^2 \quad (3.29)$$

$B \rightarrow A$ (ii) Wird b_{m_0} mit der Wahrscheinlichkeit

$$p(b_{m_0}) = |\langle b_{m_0} | \psi \rangle|^2 \quad (3.30)$$

zuerst gemessen, so führt dies zum Zustand

$$|\psi'_m\rangle = |b_{m_0}\rangle \quad (3.31)$$

Wird daraufhin A gemessen, so erhält man den Wert a_{n_0} mit der Wahrscheinlichkeit

$$p_{\psi'_m}(a_{n_0}) = |\langle a_{n_0} | b_{m_0} \rangle|^2 \quad (3.32)$$

und den Endzustand

$$|\psi''_m\rangle = \langle a_{n_0} | b_{m_0} \rangle |a_{n_0}\rangle \quad (3.33)$$

Die Gesamtwahrscheinlichkeit ist

$$p(b_{m_0}, a_{n_0}) = |\langle b_{m_0} | \psi \rangle|^2 |\langle a_{n_0} | b_{m_0} \rangle|^2 \quad (3.34)$$

Da im Allgemeinen gilt:

$$|\langle b_{m_0} | \psi \rangle|^2 \neq |\langle a_{n_0} | \psi \rangle|^2 \quad (3.35)$$

unterscheiden sich die Gesamtwahrscheinlichkeiten sowie die Endzustände bei der Messung inkompatibler Observablen in verschiedener Reihenfolge.

Resultat: keine
gleichzeitige
Messung möglich

Inkompatible Observablen können nicht gleichzeitig gemessen werden. Die Messung der zweiten Observablen zerstört die Information, die die erste Messung geliefert hat, da es keine gemeinsame Eigenbasis gibt.

Bemerkung 3.5

Eine mögliche Interpretation dieses Ergebnisses ist, dass sich die Messungen inkompatibler Observablen gegenseitig stören.

Beispiel 3.5 (Sequenz von Stern-Gerlach-Apparaturen)

Beispiel: Sequenz
von Stern-Gerlach-
Apparaturen

Wir betrachten eine Sequenz von Stern-Gerlach-Apparaturen, wie sie in Abb. 3.1 schematisch dargestellt ist.

Nachdem durch eine erste Apparatur in z -Richtung der Zustand $|\sigma_z = +1\rangle$ (normierter Eigenzustand zum Eigenwert $\lambda_+ = +1$ von σ_z) präpariert wurde (siehe Bsp. 3.4), wird das System in diesem Zustand in einer zweiten Apparatur gemessen, deren Magnet nun in x -Richtung (senkrecht zur z -Richtung und zur Ausbreitungsrichtung) positioniert ist.

Wir ordnen dieser Apparatur (analog zur ersten) die Pauli-Matrix

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.36)$$

zu, mit den möglichen Messergebnissen (Eigenwerte) $\lambda_{\pm} = \pm 1$. Nach dieser zweiten Messung befindet sich das System in einem der beiden Eigenzustände von σ_x :

$$|\sigma_x = +1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |\sigma_x = -1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (3.37)$$

Ist nun das System im Zustand $|\sigma_z = +1\rangle$, so ergeben sich die Wahrscheinlichkeiten für die beiden möglichen Messergebnisse nach der Bornschen Regel (3.5.1) zu

$$p(\sigma_x = +1) = |\langle \sigma_x = +1 | \sigma_z = +1 \rangle|^2 = \frac{1}{2} \quad (3.38)$$

$$p(\sigma_x = -1) = \frac{1}{2} \quad (3.39)$$

Nachdem der Atomstrahl nun die zweite Apparatur passiert hat und in die beiden Eigenzustände von σ_x aufgespalten wurde, blockieren wir erneut einen

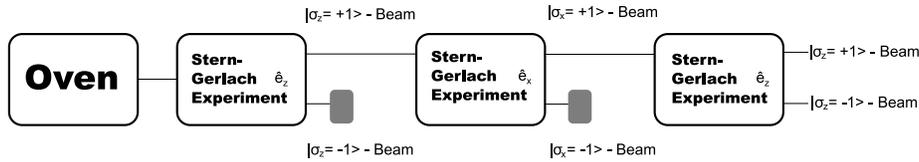


Abbildung 3.1: Sequenzielles Stern-Gerlach-Experiment

($|\sigma_x = -1\rangle$) der beiden Komponenten (was dem „Kollaps der Wellenfunktion“ bei Messung von $\lambda_+ = +1$ entspricht) und positionieren eine dritte Apparatur wieder in z -Richtung, in der der präparierte Zustand $|\sigma_x = +1\rangle$ einer Messung von σ_z unterzogen wird. Für die möglichen Ergebnisse ($\lambda_{\pm} = \pm 1$) finden wir die Wahrscheinlichkeiten

$$p(\sigma_z = +1) = |\langle \sigma_z = +1 | \sigma_x = +1 \rangle|^2 = \frac{1}{2} \left| (1 \ 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right|^2 = \frac{1}{2} \quad (3.40)$$

$$p(\sigma_z = -1) = \frac{1}{2} \quad (3.41)$$

σ_x und σ_z sind nicht kompatibel

Das heißt, obwohl durch die erste Apparatur der Zustand $|\sigma_z = +1\rangle$ präpariert wurde, ist es nach der Messung von σ_x bei einer folgenden Messung von σ_z wieder gleich wahrscheinlich, als Endzustand der Messung $|\sigma_z = +1\rangle$ oder $|\sigma_z = -1\rangle$ zu erhalten. Die Messung durch die zweite Apparatur hat somit die Information aus der ersten zerstört.

Dass σ_x und σ_z nicht gleichzeitig gemessen werden können, sieht man auch folgendermaßen: Das Quantensystem sei im Zustand $|+\rangle$. Es ist

$$p(\sigma_z = +1, \sigma_x = +1) = 1 \cdot \frac{1}{2} = \frac{1}{2} \quad (3.42)$$

$$p(\sigma_x = +1, \sigma_z = +1) = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} = \frac{1}{4} \quad (3.43)$$

Bei unterschiedlicher Reihenfolge der Messung erhalten wir also andere Wahrscheinlichkeiten für die gleichen Messergebnisse.

3.5.5 Verallgemeinerte Unschärferelation

Definition 3.1 (Varianz).

Def.: Varianz

Befindet sich das Quantensystem im Zustand $|\psi\rangle$, so ist die Varianz einer Observablen A gegeben durch

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle := \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \quad (3.44)$$

Sie ist ein Maß für die Unschärfe der Messergebnisse von A .

* Siehe Übungsblatt Nr. 2 Aufgabe 6.

Bemerkung 3.6

Die Varianz verschwindet genau dann, wenn $|\psi\rangle$ ein Eigenzustand von A ist, denn falls $A|\psi\rangle = a|\psi\rangle$ gilt, ist

$$\langle A \rangle = a \quad , \quad \langle A^2 \rangle = a^2 \tag{3.45}$$

Satz 3.2 (Verallgemeinerte Unschärferelation)

Seien A und B zwei beliebige Observablen, dann gilt die Unschärferelation

Verallgemeinerte
Unschärferelation

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle \langle (\Delta B)^2 \rangle \geq \frac{1}{4} |\langle [A, B] \rangle|^2 \tag{3.46}$$

Beweis: Siehe Übungsblatt Nr.2.

□

Für nicht-kommutierende Observablen gibt es Zustände mit $\langle [A, B] \rangle \neq 0$. In solchen Zuständen kann das Produkt der Unschärfen der Messergebnisse von A und B also nicht kleiner sein als ein bestimmter Wert.

Bemerkung 3.7

Besonders wichtig sind die Fälle, in denen

$$[A, B] = \alpha \quad , \quad \alpha \in \mathbb{C} \tag{3.47}$$

(Dies kann nur in unendlichdimensionalen Hilberträumen auftreten.) Das Produkt der Unschärfen ist dann *für alle* Zustände nach unten beschränkt. Das heißt, man kann dann A und B nicht simultan beliebig genau kennen.

Beispiel 3.6 (Heisenbergsche Unschärferelation)

Betrachten wir die Observablen für Ort und Impuls, X und P , und geben an

Heisenbergsche
Unschärferelation

$$[X, P] = i\hbar \tag{3.48}$$

so erhalten wir die *Heisenbergsche Unschärferelation*

$$(\Delta x)(\Delta p) \geq \frac{\hbar}{2} \tag{3.49}$$

3.6 Postulat 6 – Schrödinger-Gleichung

Sechstes Postulat

Die Zeitentwicklung eines Zustands $|\psi(t)\rangle$ wird durch die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung (SG) beschrieben:

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle \quad (3.50)$$

mit dem hermiteschen Hamiltonoperator $H(t)$, der die Gesamtenergie des Systems repräsentiert und dem Planckschen Wirkungsquantum $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,054 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$.

Bemerkung 3.8

- (i) Wie man aus der klassischen Hamilton-Funktion \mathcal{H} den quantenmechanischen Operator H erhält, wird später diskutiert werden, wenn uns der notwendige Formalismus vertraut ist.
- (ii) Unter der zeitlichen Entwicklung eines Zustands, die durch die Schrödinger-Gleichung beschrieben wird, muss die Norm erhalten bleiben:

Normerhaltung

$$\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \left(\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\right)|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|\left(\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle\right) \quad (3.51)$$

$$\stackrel{(3.50)}{=} -\frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t)|H(t)|\psi(t)\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t)|H(t)|\psi(t)\rangle \quad (3.52)$$

$$= 0 \quad (3.53)$$

Das heißt, ist ein Anfangszustand $|\psi(t_0)\rangle$ gegeben mit $\|\psi(t_0)\| = 1$ so ist

$$\|\psi(t)\| = 1, \quad \forall t \quad (3.54)$$

- (iii) Während individuelle Messergebnisse indeterministisch sind, ist die Zeitentwicklung eines Zustands in der Quantenmechanik völlig deterministisch (festgelegt durch die SG).
- (iv) Aus der Linearität der Schrödinger-Gleichung folgt, dass Superpositionen von Lösungen auch Lösungen sind.
- (v) Da die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung eine Differentialgleichung erster Ordnung ist, wird als Anfangszustand nur $|\psi(t_0)\rangle$ benötigt (keine Ableitungen).

Superpositionsprinzip

3.6.1 Die Zeitentwicklung des Erwartungswerts

Satz 3.3 (Ehrenfest-Theorem)

Das
Ehrenfest-Theorem

Die Zeitentwicklung des Erwartungswerts einer Observablen A ist gegeben durch

$$\frac{d}{dt}\langle A(t) \rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle [A, H] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle \quad (3.55)$$

Beweis:

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

Bemerkung 3.9 (Analogie zur klassischen Mechanik)

Verbindung zur
klassischen
Mechanik

In der klassischen Mechanik gilt für die totale Zeitableitung einer Observable

$$\frac{dA}{dt} = \{A, H\} + \frac{\partial A}{\partial t} \quad (3.56)$$

Bei dieser Analogie ist zu beachten, dass in der Quantenmechanik die Aussage für den Erwartungswert, nicht für individuelle Messergebnisse gilt. Für die Erwartungswerte des Orts- und Impulsoperators ergibt sich

$$\frac{d}{dt}\langle x \rangle = \frac{\langle p \rangle}{m}, \quad \frac{d}{dt}\langle p \rangle = -\langle V'(x) \rangle \quad (3.57)$$

Somit ist die klassische Mechanik in gewisser Weise in der Quantenmechanik enthalten.

Definition 3.2 (Erhaltungsgröße).

Def.:
Erhaltungsgröße

Eine nicht explizit zeitabhängige Observable, die mit H kommutiert, heißt Erhaltungsgröße.

Satz 3.4

Der Erwartungswert einer Erhaltungsgröße ist zeitunabhängig.

$$\frac{d}{dt}\langle A \rangle = 0 \quad (3.58)$$

Beweis: Klar. □

konservative Systeme

Bemerkung 3.10

In konservativen Systemen (Systeme mit $H \neq H(t)$) ist die Gesamtenergie eine Erhaltungsgröße und es gilt

$$\frac{d}{dt}\langle H \rangle = 0 \tag{3.59}$$

3.6.2 Zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

Lösung der SG in konservativen Systemen

Satz 3.5 (Lösung der SG in konservativen Systemen)

In konservativen Systemen kann anstelle der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung auch die Gleichung

$$H|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle \quad (E \in \mathbb{R}) \tag{3.60}$$

gelöst werden. (Eigenwertproblem)

Die Lösungen $\{\varphi_{n,i}\}$ dieser Gleichung (Eigenvektoren von H mit Eigenwerten E_n und Entartung $i = 1, \dots, e(n)$) bilden eine Basis des Zustandsraums. Ein gegebener Anfangszustand kann dann zerlegt werden in

$$|\psi(t_0)\rangle = \sum_{n,i} c_{n,i} |\varphi_{n,i}\rangle \tag{3.61}$$

Die Lösung für die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung ergibt sich daraus zu

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n,i} e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} c_{n,i} |\varphi_{n,i}\rangle \tag{3.62}$$

Beweis: Da der Hamiltonoperator H zeitunabhängig ist, sind dessen Eigenwerte und Eigenvektoren ebenfalls zeitunabhängig. Die Lösung der zeitabhängigen SG muss somit der Form sein

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n,i} c_{n,i}(t) |\varphi_{n,i}\rangle \tag{3.63}$$

Wir benötigen also lediglich einen Ausdruck für die $c_{n,i}(t) = \langle \varphi_{n,i} | \psi(t) \rangle$. Dazu bedienen wir uns der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung:

$$\langle \varphi_{n,i} | \left(i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle \right) = \langle \varphi_{n,i} | H |\psi(t)\rangle = E_n \langle \varphi_{n,i} | \psi(t)\rangle \tag{3.64}$$

$$\Leftrightarrow i\hbar \frac{d}{dt} c_{n,i}(t) = E_n c_{n,i}(t) \tag{3.65}$$

Durch Lösung dieser Differentialgleichung erhalten wir

$$c_{n,i}(t) = c_{n,i}(t_0) e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} \tag{3.66} \quad \square$$

Allgemeine
Lösungsstrategie

Bemerkung 3.11 (Allgemeine Strategie)

Allgemein ist beim Lösen der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung in konservativen Systemen also wie folgt vorzugehen:

- (i) Bestimmung der Eigenwerte und Eigenzustände des Hamiltonoperators.
- (ii) Zerlegung eines Anfangszustands in die Eigenbasis.
- (iii) Die gesuchte Lösung hat die Form aus (3.62).

3.6.3 Stationäre Zustände

Befindet sich ein System im Anfangszustand $|\psi_0\rangle$, welcher ein Eigenzustand zum Eigenwert E des Hamiltonoperators eines konservativen Systems ist, so ist die Lösung der Schrödinger-Gleichung nach Satz 3.5

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iE(t-t_0)/\hbar}|\psi_0\rangle \quad (3.67)$$

Dieser Zustand unterscheidet sich für alle Zeiten nur um einen globalen Phasenfaktor von $|\psi_0\rangle$, weshalb er physikalisch von seinem Anfangszustand nicht unterscheidbar ist (siehe Bemerkung 3.3.iv). Die folgende Definition erscheint deshalb sinnvoll.

Definition 3.3 (Stationäre Zustände).

Die Eigenzustände des Hamiltonoperators werden stationär genannt.

Def.: Stationäre
Zustände

Bemerkung 3.12 (Energieerhaltung)

Wird die Gesamtenergie eines Systems gemessen, so kollabiert die zugehörige Wellenfunktion in den zur gemessenen Eigenenergie E_0 gehörenden Eigenzustand. Das System befindet sich dann also in einem stationären Zustand, der sich einerseits zeitlich nicht ändert und andererseits bei jeder weiteren Messung dieselbe Eigenenergie E_0 liefert. Dies bildet die quantenmechanische Erklärung für die Energieerhaltung in konservativen Systemen.

Energieerhaltung

Wichtige Lerninhalte des Kapitels

- Zustandsvektor und Zustandsraum
- Observable
- Messergebnisse und Messwahrscheinlichkeiten
- Indeterminismus
- „Kollaps der Wellenfunktion“
- Bornsche Regel
- Sequenz von Stern-Gerlach-Experimenten
- Messung von kompatiblen und nicht-kompatiblen Observablen
- Verallgemeinerte Heisenbergsche Unschärferelation
- Schrödinger-Gleichung
- Superpositionsprinzip
- Zeitentwicklung von Erwartungswerten; Erhaltungsgrößen
- Zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung
- Stationäre Zustände

Kapitel 4

Dichtematrix

In diesem Kapitel wollen wir uns mit der Beschreibung von Systemen beschäftigen, für die kein Anfangszustand vorgegeben ist. Betrachten wir dazu erneut das Stern-Gerlach-Experiment:

Beispiel 4.1

Im Stern-Gerlach-Experiment kennen wir für jedes Teilchen nach dem Passieren des Magnetfelds den genauen Zustand: Einer der Eigenzustände $|\chi_+\rangle$, $|\chi_-\rangle$ der zugeordneten Pauli-Matrix. Doch wir können keine Angabe darüber machen, wie der Zustand vor dem Eintritt ins Magnetfeld aussah. Wir beschreiben diesen deshalb in einer Art von Mischzustand, in dem die möglichen Zustände mit bestimmten – aus dem System resultierenden – Wahrscheinlichkeiten versehen sind.

Mischzustände

Im Folgenden bedienen wir uns einer statistischen Mischung von orthogonalen Eigenzuständen $|\psi_n\rangle$ einer Observablen.

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \delta_{nm} \quad (4.1)$$

Reine Zustände

Ein solcher Mischzustand ist nicht zu verwechseln mit einem reinen Zustand, der als Superposition der $|\psi_n\rangle$ geschrieben werden kann, mit Koeffizienten c_n , deren Betragsquadrate die Wahrscheinlichkeiten $\mathcal{P}(a_n) = |\langle \psi_n | \psi \rangle|^2$ angeben, bei einer Messung den Eigenwert a_n zu erhalten.

Messwahrscheinlichkeit

Angenommen, es sei bekannt, mit welchen Wahrscheinlichkeiten p_k der Anfangszustand in einem Eigenzustand $|\psi_k\rangle$ präpariert wurde, dann erhält man die Wahrscheinlichkeit $\mathcal{P}(a_n)$ aus der Summe der Produkte $p_k \mathcal{P}_k(a_n)$, wobei $\mathcal{P}_k(a_n) = \langle \psi_k | P_n | \psi_k \rangle$ die Wahrscheinlichkeit angibt, im Zustand $|\psi_k\rangle$ den Eigenwert a_n zu messen (mit Projektionsoperator P_n).

$$\mathcal{P}(a_n) = \sum_k p_k \mathcal{P}_k(a_n) \quad (4.2)$$

Definition 4.1 (Dichtematrix).

Def.: Dichtematrix

Zur Beschreibung eines gemischten Zustands verwendet man die Dichtematrix

$$\rho := \sum_k p_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k| \quad (4.3)$$

Satz 4.1 (Wahrscheinlichkeit im Mischzustand)

Messwahrscheinlichkeit im Mischzustand

Die Wahrscheinlichkeit $\mathcal{P}(a_n)$, in einem – durch ρ beschriebenen – Mischzustand den Eigenwert a_n als Messergebnis zu erhalten, ist gegeben durch

$$\mathcal{P}(a_n) = \text{Tr}(\rho P_n) \quad (4.4)$$

Beweis: Wir erhalten den Ausdruck (4.2) folgendermaßen:

$$\text{Tr}(\rho P_n) = \sum_k \langle\psi_k|\rho P_n|\psi_k\rangle = \sum_{k,l} \langle\psi_k|\psi_l\rangle p_l \langle\psi_l|P_n|\psi_k\rangle = \sum_k p_k \mathcal{P}_k(a_n) \quad \square$$

Bemerkung 4.1 (Unterschied zum reinen Zustand)

- (i) Den Unterschied zur Messwahrscheinlichkeit in einem reinen Zustand erkennt man durch einfaches Umformen:

$$\mathcal{P}_{\text{pure}}(a_n) = \langle\psi|P_n\psi\rangle = \sum_{k,l} c_k c_l^* \langle\psi_l|P_n|\psi_k\rangle \quad (4.5)$$

$$= \underbrace{\sum_k |c_k|^2 \langle\psi_k|P_n|\psi_k\rangle}_{\mathcal{P}(a_n)} + \sum_{k \neq l} c_l^* c_k \langle\psi_l|P_n|\psi_k\rangle \quad (4.6)$$

$\mathcal{P}_{\text{pure}}(a_n)$ unterscheidet sich von $\mathcal{P}(a_n)$ also um zusätzliche Interferenzterme.

- (ii) Da ρ im Falle eines reinen Zustands in einen Projektionsoperator $|\psi\rangle\langle\psi|$ übergeht, ist $\rho^2 = \rho$. So kann man allgemein zwischen reinen und gemischten Zuständen (für die offensichtlich $\rho^2 \neq \rho$ gilt) unterscheiden.

Satz 4.2 (Allgemeine Eigenschaften des Dichteoperators)

Eigenschaften der Dichtematrix

Der Dichteoperator erfüllt die Eigenschaften

$$(i) \quad \text{Tr}(\rho) = 1 \quad (4.7)$$

$$(ii) \quad \langle\phi|\rho|\phi\rangle \geq 0 \quad \forall|\phi\rangle \quad (\text{positiver Operator}) \quad (4.8)$$

Beweis:

$$(i) \quad \text{Tr}(\rho) = \sum_{m,k} p_k \langle\psi_m|\psi_k\rangle\langle\psi_k|\psi_m\rangle = \sum_k p_k = 1$$

$$(ii) \quad \langle\phi|\rho|\phi\rangle = \sum_k p_k \langle\phi|\psi_k\rangle\langle\psi_k|\phi\rangle = \sum_k p_k |\langle\phi|\psi_k\rangle|^2 \geq 0 \quad \square$$

Nun können wir einige der Grundpostulate der Quantenmechanik mit unseren Überlegungen ergänzen.

Postulat 1*Verallgemeinerung
von Postulat 1

Der physikalische Zustand eines Quantensystems ist durch einen Dichteoperator ρ auf dem Hilbertraum \mathcal{H} beschrieben. ρ ist ein positiver Operator mit $\text{Tr}(\rho) = 1$.

Bemerkung 4.2

Da ρ für einen reinen Zustand $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ übergeht in $|\psi\rangle\langle\psi|$, ist das alte Postulat 1 ein Spezialfall von 1*.

Postulat 4*Verallgemeinerung
von Postulat 4

Wird die Eigenschaft \mathcal{A} im Zustand ρ gemessen, so findet man mit der Wahrscheinlichkeit

$$\mathcal{P}_n = \text{Tr}(\rho P_n) \quad (4.9)$$

das Messergebnis λ_n (mit dem Operator P_n , der in den Eigenraum von λ_n projiziert).

Postulat 5*Verallgemeinerung
von Postulat 5

Nach einer Messung befindet sich das gemessene System im Zustand

$$\rho' = \frac{P_n \rho P_n}{\text{Tr}(\rho P_n)} \quad (4.10)$$

Postulat 6*Verallgemeinerung
von Postulat 6

Die Zeitentwicklung des Zustands ρ ist gegeben durch

$$i\hbar \frac{d\rho(t)}{dt} = [H(t), \rho(t)] \quad (4.11)$$

Beweis:

$$i\hbar \frac{d\rho}{dt} = i\hbar \sum_k p_k \left[\left(\frac{d}{dt} |\psi_k(t)\rangle \right) \langle\psi_k(t)| + |\psi_k(t)\rangle \frac{d}{dt} \langle\psi_k(t)| \right] \quad (4.12)$$

$$= \sum_k p_k [H |\psi_k(t)\rangle \langle\psi_k(t)| - |\psi_k(t)\rangle \langle\psi_k(t)| H] = [H, \rho] \quad (4.13) \quad \square$$

Beispiel 4.2 (Stern-Gerlach-Experiment)

Hinweis: Zum Verständnis dieses Beispiels ist die Kenntnis von Kapitel 18 (Teilchenspin) von Vorteil.

Wir beschreiben den Atomstrahl vor dem Eintritt ins Magnetfeld durch eine Dichtematrix, wobei wir uns dabei im Folgenden auf den Spinzustandsraum \mathcal{H}_s beschränken. Die möglichen Zustände der Spin-1/2 Teilchen sind allgemein bei beliebiger Ausrichtung des Magnetfelds die Eigenzustände der Observablen $\mathbf{n} \cdot \mathbf{S} = n_x S_x + n_y S_y + n_z S_z$. Dabei sei \mathbf{n} der Einheitsvektor in Richtung des Magnetfelds. Da wir nach dem Ofen eine gleiche Verteilung der Eigenzustände bezüglich allen Richtungen annehmen können, müssen die Eigenzustände $|\psi(\theta, \phi)\rangle$ (Kugelkoordinaten) von $\mathbf{n} \cdot \mathbf{S}$ mit der Wahrscheinlichkeit $\frac{1}{4\pi}$ (reziproker gesamter Raumwinkel) gewichtet werden.

Eigenzustand für ein beliebig orientiertes Magnetfeld

Der Eigenzustand von $\mathbf{n} \cdot \mathbf{S}$ zum Eigenwert $\frac{\hbar}{2}$ ist gegeben durch

$$|\psi\rangle = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\phi/2} |\chi_+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi/2} |\chi_-\rangle \quad (4.14)$$

mit den Eigenzuständen $|\chi_{\pm}\rangle$ von S_z . Die Dichtematrix dieses reinen Zustands ist

$$\rho(\theta, \phi) = |\psi\rangle\langle\psi| = \begin{pmatrix} \cos^2 \frac{\theta}{2} & \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} \\ \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} e^{i\phi} & \sin^2 \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (4.15)$$

Dichtematrix des Atomstrahls im Stern-Gerlach-Experiment

Damit erhalten wir die Dichtematrix der Teilchen nach dem Ofen aus

$$\rho = \int d\Omega \frac{1}{4\pi} \rho(\theta, \phi) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \rho(\theta, \phi) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (4.16)$$

$$\rho = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (4.17)$$

Wenden wir diese Beschreibung nun an, um zwei Messwahrscheinlichkeiten zu berechnen:

- (i) Mit $P_{+z} = |\chi_+\rangle\langle\chi_+| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ ist $\mathcal{P}(S_z = +\frac{\hbar}{2}) = \text{Tr}(\rho P_{+z}) = \frac{1}{2}$.
- (ii) Mit $P_{+x} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$ ist $\mathcal{P}(S_x = +\frac{\hbar}{2}) = \frac{1}{2}$.

Also ist die Aufspaltwahrscheinlichkeit $\frac{1}{2}$ unabhängig von der Orientierung des Magnetfelds.

Teil II

Quantenmechanik in beliebigen Zustandsräumen

Kapitel 5

Unendlichdimensionale Hilberträume

5.1 Motivation

5.1 Motivation

5.2 Eigenschaften unendlichdim. Hilberträume

5.3 Wichtige Hilberträume

5.4 Kontinuierliche Spektren

Motivation

Betrachten wir die Hamiltonfunktion aus der klassischen Mechanik:

$$H(q, p) = \frac{p^2}{2m} + V(q) \quad (5.1)$$

Um daraus den Hamiltonoperator der Quantenmechanik zu konstruieren, ersetzt man die Größen für den Ort und Impuls durch die zugehörigen Observablen R und P , die der Relation genügen:

$$[R, P] = i\hbar \quad (5.2)$$

(Ersetzt die Poissonklammer-Relation $\{q, p\} = 1$ der klassischen Mechanik.)

Bemerkung 5.1

$[A, B] = c$ ist nur in unendlichdim. Hilberträumen möglich

Eine Relation der Form $[A, B] = c$ mit $c \in \mathbb{C}$ und zwei Observablen A, B ist in endlichdimensionalen Hilberträumen nicht möglich, denn sei $\{|n\rangle\}$ eine Eigenbasis von A , so ist

$$\begin{aligned} \text{Tr}([A, B]) &= \sum_{n=1}^N \langle n | AB - BA | n \rangle \\ &= \sum_n \langle n | AB | n \rangle - \langle n | BA | n \rangle \\ &= \sum_n a_n \langle n | (B - B) | n \rangle = 0 \\ &\neq \text{Tr}(c\mathbf{1}) = Nc \end{aligned} \quad (5.3)$$

5.2 Eigenschaften unendlichdim. Hilberträume

Def.: Unendlichdim.
Hilberträume

Zusätzlich zu den Eigenschaften eines endlichdimensionalen Zustandsraums sind folgende beiden Eigenschaften definierend für einen unendlichdimensionalen Hilbertraum \mathcal{H} :

- (i) **Vollständigkeit:** Jede Cauchyfolge in \mathcal{H} hat einen Grenzwert in \mathcal{H} .
- (ii) **Separabilität:** Jeder Vektor in \mathcal{H} lässt sich durch eine geeignete endliche Summe von Basisvektoren beliebig gut approximieren.

5.3 Wichtige Hilberträume

l^2

- (i) l^2 : Die Elemente $|\varphi\rangle \in l^2$ sind unendliche Folgen von komplexen Zahlen c_1, c_2, \dots mit der Eigenschaft, dass die Summe der Betragsquadrate aller Folgenglieder endlich ist:

$$l^2 = \{(c_1, c_2, \dots) : c_1, c_2, \dots \in \mathbb{C} \text{ mit } \|\varphi\|^2 = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 < \infty\} \quad (5.4)$$

Das Skalarprodukt in l^2 ist definiert durch

$$\langle \chi | \varphi \rangle := \sum_{n=1}^{\infty} d_n^* c_n \in \mathbb{C} \quad (5.5)$$

(Wenn d_n, c_n die Folgenglieder der Elemente $|\chi\rangle, |\varphi\rangle$ sind.)

Mit der Schwarzschen Ungleichung sieht man leicht, dass diese Summe endlich ist.

$L^2[a, b]$

- (ii) $L^2[a, b]$: Die Elemente $|\psi\rangle \in L^2[a, b]$ sind die quadratisch integrierbaren Funktionen auf dem Intervall $[a, b]$:

$$L^2[a, b] = \{f : [a, b] \rightarrow \mathbb{C} : \int_a^b dx |f(x)|^2 < \infty\} \quad (5.6)$$

Das Skalarprodukt in $L^2[a, b]$ ist definiert durch

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \int_a^b dx \psi^*(x) \varphi(x) \quad (5.7)$$

$L^2[\mathbb{R}]$

- (iii) $L^2[\mathbb{R}]$: Die Elemente $|\psi\rangle \in L^2[\mathbb{R}]$ sind die quadratisch integrierbaren Funktionen auf \mathbb{R} :

$$L^2[\mathbb{R}] = \{f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C} : \int_{-\infty}^{\infty} dx |f(x)|^2 < \infty\} \quad (5.8)$$

Bemerkung 5.2

Die Hilberträume $l^2, L^2[a, b]$ und $L^2[\mathbb{R}]$ sind isometrisch isomorph.

5.4 Kontinuierliche Spektren

Beispiel 5.1 (Differentialoperator)

Beispiel für einen hermiteschen Operator in $L^2[\mathbb{R}]$

Betrachten wir den linearen Operator $A := -i\frac{d}{dx}$ in $L^2[\mathbb{R}]$. Es ist

$$\langle \psi | A^\dagger | \varphi \rangle = - \int dx \left(i \frac{d}{dx} \psi(x) \right)^* \varphi(x) \quad (5.9)$$

$$= i \int dx \left(\frac{d}{dx} \psi^*(x) \right) \varphi(x) \quad (5.10)$$

$$= \underbrace{i \psi^*(x) \varphi(x) \Big|_{-\infty}^{\infty}}_{=0} - i \int dx \psi^*(x) \frac{d}{dx} \varphi(x) \quad (5.11)$$

$$= \langle \psi | A | \varphi \rangle \quad (5.12)$$

Also ist A hermitesch, womit es eine „Basis“ aus Eigenfunktionen geben muss.

Berechnen wir die Eigenfunktionen von $-i\frac{d}{dx}$:

Lösungen der Gleichung $-i\frac{d}{dx}\varphi(x) = \lambda\varphi(x)$ sind offensichtlich die Funktionen

$$\varphi_\lambda(x) = e^{i\lambda x} \quad (5.13)$$

Unnormierte Eigenfunktionen

Diese Funktionen sind ebene Wellen, aber nicht quadratisch integrierbar. Es kann also vorkommen, dass die Eigenvektoren eines linearen Operators aus $L^2[\mathbb{R}]$ nicht mehr in $L^2[\mathbb{R}]$ sind, also auch keine physikalischen Zustände mehr darstellen (deswegen kann man streng genommen nicht von einer Basis in L^2 sprechen).

Wir können also jedes Element aus \mathcal{L}^2 in die Eigenfunktionen $e^{i\lambda x}$ mit geeigneten Koeffizienten $c(\lambda) := \tilde{\psi}(\lambda)$ zerlegen:

$$\psi(x) = \int d\lambda \tilde{\psi}(\lambda) e^{i\lambda x} \quad (5.14)$$

mit $\tilde{\psi}(\lambda) = \langle \varphi_\lambda | \psi \rangle = \int dx \psi(x) e^{-i\lambda x}$.

Analogie zur Fouriertransformation

In der Theorie der Fouriertransformation finden wir einen analogen Ausdruck für jede quadratintegrale Funktion $\psi(x)$:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \tilde{\psi}(\lambda) e^{i\lambda x} \quad (5.15)$$

mit $\tilde{\psi}(\lambda) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x) e^{-i\lambda x}$.

In der Tat war die Fouriertransformation der Anfang der Funktionalanalysis, auf welcher die meisten der hier behandelten mathematischen Erkenntnisse beruhen.

Bemerkung 5.3

- (i) Bei einer Definition eines Operators wie in Beispiel 5.1 sei der Definitionsbereich automatisch eingeschränkt auf den Gültigkeitsbereich, sodass z.B. $Af(x) \in L^2[\mathbb{R}]$ ist.
- (ii) Die hier betrachteten Eigenfunktionen $e^{i\lambda x}$ sind orthogonal zueinander, denn

$$\langle \varphi_{\lambda'} | \varphi_{\lambda} \rangle = \int dx e^{-i\lambda'x} e^{i\lambda x} = \delta(\lambda - \lambda') \tag{5.16}$$

Dies folgt aus der Darstellung für die Dirac-Distribution

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda e^{i\lambda x} \tag{5.17}$$

Diese kann man sich klar machen, indem man die Fouriertransformierte der Dirac-Distribution berechnet, die sich ergibt zu $\tilde{\delta}(\lambda) \equiv 1$.

5.4.1 Spektralsatz

Verallgemeinerung
auf kontinuierliche
Spektren

Das Spektrum eines hermiteschen Operators A besteht im Allgemeinen aus einem Anteil aus diskreten Eigenwerten $\lambda_n \in \mathbb{R}$ ($n \in \mathbb{N}$) und einem kontinuierlichen Anteil mit $\lambda(\nu) \in \mathbb{R}$, $\nu \in \mathbb{R}$. Bei geeigneter Wahl der Eigenvektoren $|n, i\rangle$ gilt für das diskrete Spektrum nach wie vor

$$A|n, i\rangle = \lambda_n |n, i\rangle \tag{5.18}$$

$$\langle m, j | n, i \rangle = \delta_{mn} \delta_{ji} \tag{5.19}$$

Analog gilt für das kontinuierliche Spektrum

$$A|\nu, i\rangle = \lambda(\nu) |\nu, i\rangle \tag{5.20}$$

$$\langle \mu, j | \nu, i \rangle = \delta(\mu - \nu) \delta_{ij} \tag{5.21}$$

Da für hermitesche Operatoren Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten orthogonal zueinander sind, gilt für die Eigenvektoren aus dem diskreten und kontinuierlichen Anteil

$$\langle m, j | \nu, i \rangle = 0 \tag{5.22}$$

Satz 5.1 (Zerlegung der Identität)

Zerlegung der
Identität

Analog zu den endlichdimensionalen Hilberträumen können wir die Identität zerlegen

$$\mathbb{1} = \sum_n \sum_{i=1}^{e(n)} |n, i\rangle \langle n, i| + \int d\nu \sum_{j=1}^{e(\nu)} |\nu, j\rangle \langle \nu, j| \tag{5.23}$$

Spektralsatz

Satz 5.2 (Spektralsatz)

Für eine beliebige Observable A gilt die Zerlegung

$$A = \sum_n \sum_{i=1}^{e(n)} |n, i\rangle \lambda_n \langle n, i| + \int d\nu \sum_{i=1}^{e(n)} |\nu, i\rangle \lambda(\nu) \langle \nu, i| \quad (5.24)$$

5.4.2 Zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

In einem konservativen System gibt es eine Basis aus zeitunabhängigen Eigenzuständen der Hamiltonfunktion dieses Systems, sodass für jeden beliebigen Zustand gilt

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n,i} \tilde{c}_{n,i}(t) |n, i\rangle + \int d\nu \sum_i \tilde{c}_i(\nu)(t) |\nu, i\rangle \quad (5.25)$$

(Wenn $|n, i\rangle$ und $|\nu, i\rangle$ die Eigenzustände bezüglich den diskreten und kontinuierlichen Anteilen des Spektrums von H sind.) Genau wie im endlichdimensionalen Fall muss die ganze Zeitabhängigkeit von $|\psi(t)\rangle$ in den Komponenten bezüglich dieser zeitunabhängigen Basis enthalten sein. Die Herleitung des Ausdrucks für diese Komponenten erfolgt analog zu Unterabschnitt 3.6.2.

Satz 5.3

Gehören die Eigenvektoren $|n, i\rangle, |\nu, j\rangle$ zu den Lösungen $E_n, E(\nu)$ des Eigenwertproblems

$$H|n, i\rangle = E_n |n, i\rangle \quad (5.26)$$

$$H|\nu, j\rangle = E(\nu) |\nu, j\rangle \quad (5.27)$$

Und ist ein Anfangszustand gegeben durch

$$|\psi(t_0)\rangle = \sum_{n,i} c_{n,i} |n, i\rangle + \int d\nu \sum_i c_i(\nu) |\nu, i\rangle \quad (5.28)$$

mit $c_{n,i} := \langle n, i | \psi(t_0) \rangle$ und $c_i(\nu) := \langle \nu, i | \psi(t_0) \rangle$, so ist die Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung gegeben durch

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n,i} e^{iE_n(t-t_0)/\hbar} c_{n,i} |n, i\rangle + \int d\nu \sum_i e^{iE(\nu)(t-t_0)/\hbar} c_i(\nu) |\nu, i\rangle \quad (5.29)$$

Bemerkung 5.4

Auch hier sind die Kets $|\nu, i\rangle$ nicht normierbar, also keine Elemente des Zustandsraums \mathcal{H} . Doch sie sind nötig um jeden beliebigen Anfangszustand in Eigenvektoren von H zerlegen zu können.

Zeitunabhängige
Schrödinger-
Gleichung

Wichtige Lerninhalte des Kapitels

- Spektralsatz mit kontinuierlichem Spektrum
- Zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung mit kontinuierlichem Spektrum

Kapitel 6

Korrespondenzprinzip

6.1 Korrespondenzprinzip

6.1 Postulat 7 – Korrespondenzprinzip

Siebtes Postulat

- Ort und Impuls eines Teilchens werden beschrieben durch die Observablen R_j, P_j ($j \in \{1, 2, 3\}$), welche die *kanonischen Vertauschungsrelationen* erfüllen

$$[R_j, P_k] = i\hbar\delta_{jk} \quad (6.1)$$

$$[R_j, R_k] = [P_j, P_k] = 0 \quad (6.2)$$

- Eine beliebige physikalische Eigenschaft der klassischen Mechanik $\mathcal{A}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ wird in der Quantenmechanik durch einen Operator A beschrieben, welcher aus \mathcal{A} hervorgeht, indem \mathbf{r} und \mathbf{p} durch die Operatoren \mathbf{R} und \mathbf{P} ersetzt werden. Falls nötig wird der entsprechende Operator symmetrisiert, um ihn hermitesch zu machen.

Beispiel 6.1

Wir wollen Hamiltonoperatoren für verschiedene Systeme konstruieren:

- (i) Freies Teilchen:

$$H(p) = \frac{p^2}{2m} \rightarrow H = \frac{P^2}{2m} \quad (6.3)$$

Da P hermitesch ist, ist in diesem Fall auch H ohne weiteres hermitesch.

- (ii) Harmonischer Oszillator:

$$H(p, r) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega^2 r^2 \rightarrow H = \frac{P^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega^2 R^2 \quad (6.4)$$

$$(iii) \quad H(p, r) = pr \quad \rightarrow \quad H = \frac{1}{2}(PR + RP) \quad (6.5)$$

Da der Operator $H = PR$ nicht hermitesch ist ($(PR)^\dagger = RP$), wird eine Symmetrisierung vorgenommen, die hier durch das arithmetische Mittel der beiden Operatoren ausgedrückt wird.

Wichtige Lerninhalte des Kapitels

- Kanonische Vertauschungsregeln
- Symmetrisierung

Kapitel 7

Wellenmechanik

7.1 Ortsdarstellung

7.1 Ortsdarstellung

7.2 Erweiterung des vierten Postulats

Definition 7.1 (Eigenvektoren von R).

7.3 Schrödinger-Gleichung in Ortsdarstellung

Eigenkets von R

Die Eigenvektoren des Ortsoperators R werden mit $|x\rangle$ notiert.

Definition 7.2 (Wirkung des Ortsoperators in der Ortsdarstellung).

7.4 Wahrscheinlichkeitsstrom

Wirkung von R

In der Ortsdarstellung, also wenn die Menge $\{|x\rangle\}$ als Basis gewählt wurde, gilt für die Komponenten des Kets $R_i|\psi\rangle$:

$$\langle x|R_i|\psi\rangle = x_i\langle x|\psi\rangle \quad (7.1)$$

7.5 Impulsdarstellung

Wobei x_i die Ortskomponente in der i -ten Raumdimension darstellt.

7.6 Schrödinger-Gleichung in Impulsdarstellung

Bemerkung 7.1

Die x_i können als Eigenwerte zu den Eigenvektoren $|x\rangle$ des Operators R_i aufgefasst werden.

Die Basis $\{|x\rangle\}$

Da die Menge $\{|x\rangle\}$ eine kontinuierliche Basis bildet (der Ort ist nicht quantisiert), gelten

$$\langle x'|x\rangle = \delta(x - x') \quad (7.2)$$

$$\int dx |x\rangle\langle x| = \mathbb{1} \quad (7.3)$$

Somit kann jeder Zustand $|\psi\rangle$ zerlegt werden in

$$|\psi\rangle = \int dx |x\rangle\langle x|\psi\rangle =: \int dx |x\rangle\psi(x) \quad (7.4)$$

Def.:
Wellenfunktion

Definition 7.3 (Wellenfunktion).

Die Komponenten $\langle x|\psi\rangle =: \psi(x)$ werden als (komplexe) Wellenfunktion

$$\psi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}, x \mapsto \psi(x) \quad (7.5)$$

bezeichnet.

Bemerkung 7.2

Wellenfunktionen sind Elemente von $L^2[\mathbb{R}]$, denn es ist

$$1 = \langle \psi|\psi\rangle = \int dx dx' \langle \psi|x'\rangle \langle x'|x\rangle \langle x|\psi\rangle \quad (7.6)$$

$$= \int dx dx' \psi^*(x') \delta(x-x') \psi(x) \quad (7.7)$$

$$= \int dx \psi^*(x) \psi(x) \quad (7.8)$$

$$= \int dx |\psi(x)|^2 \quad (7.9)$$

Wirkung von P in
 $\{|x\rangle\}$

Satz 7.1 (Wirkung des Impulsoperators in der Ortsdarstellung)

In der Ortsdarstellung, also wenn die Menge $\{|x\rangle\}$ als Basis gewählt wurde, gilt für die Komponenten des Kets $P|\psi\rangle$:

$$\langle x|P|\psi\rangle = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} \quad (7.10)$$

Beweis: Plausibilitätsbetrachtung:

$$\begin{aligned} \langle x|[R,P]|\psi\rangle &= \langle x|RP|\psi\rangle - \langle x|PR|\psi\rangle \\ &= x \langle x|P|\psi\rangle - \int dx' \langle x|P|x'\rangle \langle x'|R|\psi\rangle \\ &= -i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x} + i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \int dx' \delta(x-x') x' \psi(x') \\ &= -i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x} + i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (x\psi(x)) \\ &= i\hbar \psi(x) = \langle x|i\hbar|\psi\rangle \end{aligned}$$

Die angegebene Wirkung von P in Ortsdarstellung reproduziert also die kanonische Vertauschungsrelation $[R,P] = i\hbar$. \square

7.2 Erweiterung von Postulat 4

Viertes Postulat
(kontinuierliches
Spektrum)

Die Wahrscheinlichkeit, ein Messergebnis im Intervall $[\nu, \nu + d\nu]$ aus dem kontinuierlichen Spektrum einer Observable zu finden, ist gegeben durch

$$dp(\nu) = |\langle \nu | \psi \rangle|^2 d\nu \quad (7.11)$$

Satz 7.2 (Wahrscheinlichkeitsdichte des Ortes)

Das Betragsquadrat einer Wellenfunktion

Die Wellenfunktion
als Wahrscheinlich-
keitsdichte

$$\rho(x, t) := |\psi(x, t)|^2 \quad (7.12)$$

ist die Wahrscheinlichkeitsdichte, die die Wahrscheinlichkeit angibt, das Teilchen bei einer Ortsmessung zur Zeit t am Ort x zu finden. Denn nach (7.11) ist die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen im Intervall $[a, b]$ zu finden, gegeben durch

$$p = \int_a^b dx |\langle x | \psi(t) \rangle|^2 = \int_a^b dx |\psi(x, t)|^2 \quad (7.13)$$

7.3 Schrödinger-Gleichung in Ortsdarstellung

Satz 7.3 (Eindimensionale Schrödinger-Gleichung)

In der Ortsdarstellung – d.h. wir betrachten nur die Komponenten der Kets bezüglich der Basis $\{|x\rangle\}$ – lautet die (zeitabhängige) Schrödinger-Gleichung (im Eindimensionalen)

Ortsdarstellung der
Schrödinger-
Gleichung in einer
Dimension

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) \right) \psi(x, t) \quad (7.14)$$

Beweis: Das System befinde sich im Zustand $|\psi\rangle$ und werde durch den Hamiltonoperator $H = \frac{1}{2m} P^2 + V(R, t)$ beschrieben. Dann gilt

$$\langle x | i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \langle x | \left(\frac{1}{2m} P^2 + V(R, t) \right) |\psi(t)\rangle \quad (7.15)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \frac{1}{2m} \langle x | \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right]^2 |\psi(t)\rangle + \langle x | V(R, t) |\psi(t)\rangle \quad (7.16)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) + V(x, t) \psi(x, t) \quad (7.17)$$

Dabei wurde benutzt, dass für eine operatorwertige Funktion $F(R)$, die auf einen Eigenket des Operators R angewendet wird, gilt $F(R)|x\rangle = F(x)|x\rangle$ (leicht nachzuprüfen). \square

Ortsdarstellung der
Schrödinger-
Gleichung in drei
Dimensionen

Satz 7.4 (Schrödinger-Gleichung in drei Dimensionen)

Überträgt man obige Überlegungen auf drei Dimensionen ($\mathbf{x} = (x, y, z)$), so erhält man für die Schrödinger-Gleichung in Ortsdarstellung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x}) \right) \psi(\mathbf{x}, t) \quad (7.18)$$

mit $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$.

Satz 7.5 (Zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung in Ortsdarstellung)

Genau wie im endlichdimensionalen Zustandsraum kann für konservative Systeme die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung gelöst werden

$$H|\varphi_E\rangle = E|\varphi_E\rangle \quad (7.19)$$

Ortsdarstellung der
zeitunabhängigen
Schrödinger-
Gleichung

In der Ortsdarstellung erhält man

$$E \varphi_E(\mathbf{x}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x}) \right) \varphi_E(\mathbf{x}) \quad (7.20)$$

Bemerkung 7.3

In der Ortsdarstellung entspricht die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung einer partiellen Differentialgleichung für $\psi(x, t)$, wohingegen die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung eine gewöhnliche Differentialgleichung für die Eigenfunktionen $\varphi_E(x)$ darstellt.

7.4 Wahrscheinlichkeitsstrom

7.4.1 Analogie aus der Hydrodynamik

Wir betrachten ein Volumen V , durch das eine Flüssigkeit hindurch strömt. Wir benutzen die Größe der Stromdichte

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) := \rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) \quad (7.21)$$

die angibt, wieviel Flüssigkeit (Masse) pro Zeit durch eine Fläche hindurchströmt. $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ ist dabei ein zeitabhängiges Geschwindigkeitsfeld der Strömung und $\rho(\mathbf{r}, t)$ die Massendichte. Wollen wir die zeitliche Massenänderung berechnen, so erhalten wir einerseits mithilfe des Gaußschen Satzes

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho(\mathbf{r}, t) d^3x = \frac{dM}{dt} = - \int_{\partial V} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) d\mathbf{A} = - \int_V \operatorname{div} \mathbf{j} d^3x \quad (7.22)$$

Kontinuitäts-
gleichung in der
Hydrodynamik

Da dies für beliebige Volumina gelten muss, erhalten wir die (auch aus der Elektrizitätslehre bekannte) *Kontinuitätsgleichung*

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{div} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0} \quad (7.23)$$

Sie impliziert, dass eine Massenänderung nur mit gleichzeitigem Stromfluss zu erreichen ist (Massenerhaltung).

7.4.2 Wahrscheinlichkeitsstrom

Betrachten wir den Erwartungswert der Geschwindigkeit:

$$\langle \hat{v} \rangle = \langle \psi(t) | \frac{\mathbf{p}}{m} | \psi(t) \rangle = \int d^3x \psi^*(\mathbf{r}, t) \frac{\hbar}{im} \nabla \psi(\mathbf{r}, t) \quad (7.24)$$

$$\stackrel{\text{part. Int.}}{=} \int d^3x \frac{\hbar}{2im} (\psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \psi(\mathbf{r}, t) - \psi(\mathbf{r}, t) \nabla \psi^*(\mathbf{r}, t)) \quad (7.25)$$

Definition 7.4 (Wahrscheinlichkeitsstrom).

Der Integrand des Ausdrucks in (7.25) ist rein reell und wird als *Wahrscheinlichkeitsstrom* bezeichnet:

Def.: Wahrscheinlichkeitsstrom

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) := \frac{\hbar}{2im} (\psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \psi(\mathbf{r}, t) - \psi(\mathbf{r}, t) \nabla \psi^*(\mathbf{r}, t)) \quad (7.26)$$

$$= \Re \left[\frac{\hbar}{im} \psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \psi(\mathbf{r}, t) \right] \quad (7.27)$$

7.4.3 Kontinuitätsgleichung

Satz 7.6 (Kontinuitätsgleichung)

Für die Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(\mathbf{r}, t) = \psi^*(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t)$ und den Wahrscheinlichkeitsstrom $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ gilt die Beziehung

Kontinuitäts-
gleichung

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{r}, t) + \mathbf{div} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0} \quad (7.28)$$

Beweis:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (7.29)$$

$$= \left[\frac{-1}{i\hbar} \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V \right) \right] \psi + \psi^* \left[\frac{1}{i\hbar} \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V \right) \right] \quad (7.30)$$

$$= i \frac{\hbar}{2m} (\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*) \quad (7.31)$$

$$= -\frac{\hbar}{2im}(\psi^* \Delta\psi - \psi \Delta\psi^* + \nabla\psi^* \nabla\psi - \nabla\psi^* \nabla\psi) \quad (7.32)$$

$$= -\frac{\hbar}{2im} \nabla(\psi^* \nabla\psi - \psi \nabla\psi^*) = -\mathbf{div} \mathbf{j} \quad (7.33)$$

□

Das bedeutet, die Quelle eines Wahrscheinlichkeitsflusses ist die Änderung der Wahrscheinlichkeitsdichte. Die Wahrscheinlichkeit bleibt also lokal erhalten.

Bemerkung 7.4

- (i) Der Ortserwartungswert (in einer Dimension) ist gegeben durch

$$\langle R \rangle(t) = \langle \psi(t) | R | \psi(t) \rangle = \int dx x \psi(x, t)^* \psi(x, t) = \int dx x \rho(x, t) \quad (7.34)$$

Für den Impulserwartungswert erhalten wir einen analogen Ausdruck

$$\langle P \rangle(t) = \int dx \psi^*(x, t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t) = m \int dx j(x, t) \quad (7.35)$$

- (ii) Bei der Betrachtung des Wahrscheinlichkeitsstrom stoßen wir erneut auf die Tatsache, dass die Norm eines Zustands zeitlich erhalten bleibt:

$$0 = \int d^3x \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \mathbf{j} \right] = \frac{d}{dt} \int d^3x \rho(\mathbf{r}, t) + \underbrace{\int_{\partial \mathbb{R}^3} \mathbf{j} d\mathbf{A}}_{=0} \quad (7.36)$$

Falls also für einen Zeitpunkt $t = 0$ gilt $\int d^3x |\psi(x, t = 0)|^2 = 1$ so ist $\forall t$

$$\int d^3x |\psi(x, t)|^2 = 1 \quad (7.37)$$

- (iii) Für stationäre Zustände (Eigenfunktionen des Hamiltonoperators in konservativen Systemen)

$$\psi(x, t) = e^{-iEt/\hbar} \varphi_E(x) \quad (7.38)$$

gilt $\forall x$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla \mathbf{j} = 0 \quad (7.39)$$

da $\frac{d}{dt} |\psi(x, t)|^2 = \frac{d}{dt} |\varphi_E(x)|^2 = 0$.

7.5 Impulsdarstellung

Definition 7.5 (Eigenvektoren von P).

Eigenkets von P

Die Eigenvektoren des Impulsoperators P werden mit $|p\rangle$ notiert.

Definition 7.6 (Wirkung des Impulsoperators in der Impulsdarstellung).

Wirkung von P

In der Impulsdarstellung, also wenn die Menge $\{|p\rangle\}$ als Basis gewählt wird, gilt für die Komponenten des Kets $P|\psi\rangle$:

$$\langle p|P|\psi\rangle = p\langle p|\psi\rangle \quad (7.40)$$

Bemerkung 7.5

Die Werte p können als Eigenwerte zu den Eigenvektoren $|p\rangle$ des Impulsoperators P aufgefasst werden.

Satz 7.7 (Die Eigenkets von P in Ortsdarstellung)

Eigenkets von P in Ortsdarstellung

Die Wellenfunktionen $\langle x|p\rangle =: \chi_p(x)$ haben die Form

$$\chi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} \quad (7.41)$$

Beweis:
$$\chi_p(x) = \langle x|p\rangle = \langle x|\left[\frac{1}{p}P\right]|p\rangle = -\frac{i\hbar}{p}\frac{\partial}{\partial x}\chi_p(x) \quad (7.42)$$

Das oben angegebene $\chi_p(x)$ ist eine Lösung dieser Differentialgleichung. □

Bemerkung 7.6

Als Eigenkets der Observablen P bilden die $|p\rangle$ eine Basis des Zustandsraums und erfüllen deshalb die Bedingungen:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \chi_p^*(x)\chi_{p'}(x) dx = \delta(p-p') \quad \text{Orthonormierung} \quad (7.43)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |p\rangle\langle p| dp = \mathbb{1} \quad \text{Vollständigkeitsrelation} \quad (7.44)$$

Satz 7.8 (Wellenfunktion in Impulsdarstellung)

Wellenfunktion in Impulsdarstellung - Fouriertransformierte

Stellen wir einen Zustand $|\psi\rangle$ in Impulsdarstellung dar, d.h. wählen wir die Eigenkets $|p\rangle$ von P als Basis und betrachten nur die Komponenten $\langle p|\psi\rangle$, so erhalten wir

$$\tilde{\psi}(p) := \langle p|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ipx/\hbar}\psi(x) \quad (7.45)$$

Also bilden diese Komponenten gerade die Fouriertransformierte von $\psi(x)$.

Wollen wir nun einen Basenwechsel zur Ortsdarstellung durchführen, so ergibt sich

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{ipx/\hbar} \tilde{\psi}(p) \quad (7.46)$$

Beweis: Wir berechnen die Komponenten:

$$\langle p|\psi\rangle = \int dx \langle p|x\rangle \langle x|\psi\rangle = \int dx \chi_p^*(x) \psi(x) \quad (7.47)$$

$$\langle x|\psi\rangle = \int dp \langle x|p\rangle \langle p|\psi\rangle = \int dp \chi_p(x) \tilde{\psi}(p) \quad (7.48)$$

□

Bemerkung 7.7 (Verallgemeinerung in drei Dimensionen)

Darstellung in drei Dimensionen

In drei Raumdimensionen ist die Wellenfunktion in Orts- und Impulsdarstellung gegeben durch:

$$\tilde{\psi}(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3x e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar} \psi(\mathbf{x}) \quad (7.49)$$

$$\psi(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar} \tilde{\psi}(\mathbf{p}) \quad (7.50)$$

Nun wissen wir, wie die Eigenkets von P in Ortsdarstellung aussehen, welche Komponenten ein beliebiger Zustand $|\psi\rangle$ bezüglich Orts- und Impulsdarstellung hat und wie man zwischen ihnen transformiert (Fouriertransformation). Wir kennen auch die Wirkungen des Impulsoperators P in Ortsdarstellung ($-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$) und in Impulsdarstellung (Multiplikation mit Skalar p). Für den Ortsoperator R kennen wir bis jetzt nur die Wirkung in der eigenen Basis (Multiplikation mit Skalar x) weshalb nun noch dessen Wirkung in Impulsdarstellung zu klären ist.

Satz 7.9 (Wirkung des Ortsoperators in Impulsdarstellung)

Wirkung von R in $\{|p\rangle\}$

Die Komponenten des Kets $R|\psi\rangle$ bezüglich der Basis $\{|p\rangle\}$ haben die Form

$$\langle p|R|\psi\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \tilde{\psi}(p) \quad (7.51)$$

Beweis: Es ist

$$\langle p|R|\psi\rangle = \int dx \langle p|R|x\rangle \langle x|\psi\rangle = \int dx x \langle p|x\rangle \psi(x)$$

Mit $\langle x|p\rangle = \chi_p(x)$ und $\frac{\partial \chi_p^*}{\partial p} = \frac{x}{i\hbar} \chi_p^*(x)$ ergibt sich

$$\langle p|R|\psi\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx e^{-ipx/\hbar} \psi(x) = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \tilde{\psi}(p) \quad \square$$

Es ergibt sich also in der Impulsdarstellung ein zur Ortsdarstellung völlig symmetrisches Verhalten der Operatoren.

7.6 Schrödinger-Gleichung in Impulsdarstellung

Satz 7.10 (Schrödinger-Gleichung in Impulsdarstellung)

In der Impulsdarstellung hat die (zeitabhängige) Schrödinger-Gleichung (im Ein-dimensionalen) die beiden äquivalenten Darstellungen

Impulsdarstellung
der Schrödinger-
Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi}(p, t) = \left[\frac{p^2}{2m} + V \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \right) \right] \tilde{\psi}(p, t) \quad (7.52)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi}(p, t) = \frac{p^2}{2m} \tilde{\psi}(p, t) + \int dp' \tilde{V}(p - p') \tilde{\psi}(p', t) \quad (7.53)$$

Beweis: Wir projizieren die Schrödinger-Gleichung auf die Eigenkets $|p\rangle$:

$$i\hbar \langle p | \frac{d\psi}{dt} \rangle = \langle p | \left(\frac{P^2}{2m} + V(R) \right) | \psi \rangle \quad (7.54)$$

$$\Leftrightarrow i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}(p)}{\partial t} = \frac{p^2}{2m} \tilde{\psi}(p) + \underbrace{\langle p | V(R) | \psi \rangle}_{= \sum_n \alpha_n \langle p | R^n | \psi \rangle} \quad (7.55)$$

$$\Leftrightarrow i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}(p)}{\partial t} = \left[\frac{p^2}{2m} \tilde{\psi}(p) + V \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \right) \right] \tilde{\psi}(p) \quad (7.56)$$

Alternativ dazu können wir $\langle p | V(R) | \psi \rangle$ auch ausdrücken durch

$$\langle p | V(R) | \psi \rangle = \int dx \langle p | V(R) | x \rangle \langle x | \psi \rangle = \int dx V(x) \chi_p^*(x) \psi(x) \quad (7.57)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx V(x) e^{-ipx/\hbar} \int dp' \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip'x/\hbar} \tilde{\psi}(p') \quad (7.58)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp' \tilde{\psi}(p') \int dx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-i(p-p')x/\hbar} V(x) \quad (7.59)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp' \tilde{\psi}(p') \tilde{V}(p - p') \quad (7.60) \quad \square$$

Bemerkung 7.8 (Kanonische Vertauschungsrelation)

Die kanonische Vertauschungsrelation in den Darstellungen

Die kanonische Vertauschungsrelation $[R, P] = i\hbar$ sollte auch in den Darstellungen bezüglich der jeweiligen Basen stimmen. So erhalten wir in der Ortsdarstellung:

$$\left[x, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right] f(x) = -i\hbar x \frac{\partial}{\partial x} f + i\hbar \frac{\partial(xf)}{\partial x} = i\hbar f(x) \quad (7.61)$$

Genauso in der Impulsdarstellung:

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial p}, p \right] f(p) = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} (pf(p)) - i\hbar p \frac{\partial f}{\partial p} = i\hbar f(p) \quad (7.62)$$

Wichtige Lerninhalte des Kapitels

- Ortsdarstellung
- Interpretation des Betragsquadrats der Wellenfunktion
- Schrödinger-Gleichung in Ortsdarstellung
- Kontinuitätsgleichung für Wahrscheinlichkeitsstromdichte
- Impulsdarstellung
- Schrödinger-Gleichung in Impulsdarstellung

Kapitel 8

Freies Teilchen/freies Wellenpaket

8.1 Wellenfunktion eines freien Teilchens

8.1 Wellenfunktion eines freien Teilchens

Eindimensionale Beschreibung

8.2 Unschärfe

Zeitunabhängige SG eines freien Teilchens

Für ein freies Teilchen, nimmt die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung in Impulsdarstellung die Form an

8.3 Stationary phase approximation

$$\frac{p^2}{2m}\tilde{\psi}(p) = E\tilde{\psi}(p) \quad (8.1)$$

8.4 Gaußsches Wellenpaket

Diese Gleichung gilt für beliebige Funktionen $\tilde{\psi}(p)$, solange die Eigenenergie $E(p) = \frac{p^2}{2m}$ beträgt. D.h. alle möglichen $\tilde{\psi}(p, t = 0)$ sind Eigenfunktionen des Hamiltonoperators in Impulsdarstellung. Die Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung ist deshalb

Lösung der SG

$$\tilde{\psi}(p, t) = e^{-iE(p)t/\hbar} \tilde{\psi}(p, t = 0) \quad (8.2)$$

In der Ortsdarstellung erhalten wir dann als Wellenfunktion

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp e^{i(px - E(p)t)/\hbar} \tilde{\psi}(p, t = 0) \quad (8.3)$$

Definition 8.1 (Wellenvektor).

Def.: Wellenvektor

Wir definieren die Größe des Wellenvektors \mathbf{k} durch seinen Betrag

$$k := \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p}{\hbar} \quad (8.4)$$

Dann gilt für die Frequenz

$$\omega(k) = \frac{E(\hbar k)}{\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad (8.5)$$

Damit ergibt sich für die Wellenfunktion

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk e^{i(kx - \omega(k)t)} A(k) \quad (8.6)$$

mit

$$A(k) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx e^{-ikx} \psi(x, t=0) \quad (8.7)$$

Verallgemeinerung auf drei Dimensionen

Die allgemeine Form eines freien Wellenpakets

Im dreidimensionalen Raum wird die Wellenfunktion eines freien Teilchens ausgedrückt durch

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega(\mathbf{k})t)} A(\mathbf{k}) \quad (8.8)$$

$$A(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3x e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \psi(\mathbf{x}, t=0) \quad (8.9)$$

8.2 Unschärfe

Wir erinnern uns an die Heisenbergsche Unschärferelation aus Beispiel 3.6

$$(\Delta x)(\Delta p) \geq \frac{\hbar}{2} \quad (8.10)$$

(Gilt für alle physikalischen Zustände, also nicht für Eigenkets von R und P .)

Unschärferelation für Ort und Wellenvektor

Somit ist

$$(\Delta x)(\Delta k) \geq \frac{1}{2} \quad (8.11)$$

mit

$$(\Delta x)^2 := \text{Var}(R) = \int dx (x - \langle x \rangle)^2 |\psi(x, t=0)|^2 \quad (8.12)$$

$$(\Delta k)^2 := \text{Var}\left(\frac{P}{\hbar}\right) = \int dk (k - \langle k \rangle)^2 |A(k)|^2 \quad (8.13)$$

Das heißt, eine bessere Lokalisierung im Ortsraum führt zu einer größeren Impulsunschärfe und umgekehrt.

Bemerkung 8.1 (Extremfälle)

Extremfälle

- (i) Nehmen wir an, es wäre möglich den Impuls eines Teilchens scharf zu begrenzen, was in Wirklichkeit natürlich von der Heisenbergschen Unschärferelation verboten wird. Sei also die Amplitude des Wellenpakets $\psi(x, t)$ gegeben durch

$$A(k) = \delta(k - k') \tag{8.14}$$

Dann erhalten wir

$$\psi(x, t = 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik'x} \tag{8.15}$$

Also eine ebene Welle, deren Betragsquadrat unabhängig vom Ort und somit völlig delokalisiert ist.

- (ii) Es sei möglich, den Ort eines Teilchens bei $x = x_0$ scharf zu begrenzen, dann ist

$$\psi(x, t = 0) = \delta(x - x_0) \tag{8.16}$$

Daraus resultiert

$$A(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx_0} \tag{8.17}$$

Wir erhalten in diesem Fall also eine unendlich große Unschärfe für den Impuls.

8.3 Stationary phase approximation

Lokalisierte
Impulsverteilung

Wir betrachten den Fall einer Impulsverteilung $A(k) = |A(k)|e^{i\phi(k)}$, die nur um die Stelle $k = \bar{k}$ deutlich von null verschiedene Werte annimmt. Für die Wellenfunktion in Ortsdarstellung können wir schreiben

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk e^{i\alpha(k)} |A(k)| \quad , \quad \alpha(k) := kx - \omega(k)t + \phi(k) \tag{8.18}$$

Da $\omega(k) = \frac{E(\hbar k)}{\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m}$ nun auch nur für Werte um $k = \bar{k}$ interessant ist, entwickeln wir $\alpha(k)$ zu

$$\begin{aligned} \alpha(k) &\approx kx + \phi(k) - \underbrace{\omega(k)}_{:=v_g} t - \frac{1}{2} \underbrace{\frac{d^2\omega}{dk^2}}_{=\hbar/m} (k - \bar{k})^2 t \\ &= k(x - v_g t) + \phi(k) + \omega(\bar{k})t - \frac{1}{2} (k - \bar{k})^2 \frac{\hbar}{m} t \end{aligned} \tag{8.19}$$

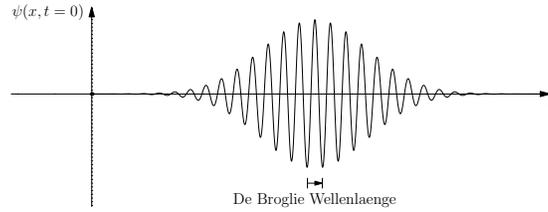


Abbildung 8.1: De-Broglie-Wellenlänge

Definition 8.2 (Gruppengeschwindigkeit).

Der Ausdruck

$$v_g =: \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{\bar{k}} = \frac{\hbar \bar{k}}{m} = \frac{\bar{p}}{m} \tag{8.20}$$

wird als Gruppengeschwindigkeit bezeichnet.

1. Vernachlässigung des quadratischen Terms in $\alpha(k)$

Vernachlässigung von $(k - \bar{k})^2$

Wir wollen zunächst den quadratischen Term in (8.19) vernachlässigen und erhalten damit

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\omega(\bar{k})t} \int dk e^{ik(x-v_g t)} A(k) = e^{i\omega(\bar{k})t} \psi(x - v_g t, t = 0) \tag{8.21}$$

Dies ist ein mit konstanter Geschwindigkeit $v_g = \bar{p}/m$ fortschreitendes Wellenpaket, dessen Form für alle Zeiten bis auf einen globalen Phasenfaktor dieselbe ist, wie zum Zeitpunkt $t = 0$.

Definition 8.3 (De-Broglie-Wellenlänge).

Nach Louis de Broglie bezeichnet man die zur Materiewelle mit Impuls \bar{p} gehörende Wellenlänge

$$\lambda = \frac{h}{\bar{p}} \tag{8.22}$$

als De-Broglie-Wellenlänge (siehe Abb. 8.1).

Bemerkung 8.2 (Doppelspalt)

Die De-Broglie-Wellenlänge ist entscheidend für die quantenmechanische Interferenz. Betrachten wir beispielsweise eine sehr vereinfachte Interferenz am Doppelspalt (vgl. Abb. 8.2): Die einzelnen Auftreffwahrscheinlichkeiten sind abhängig von der jeweiligen Differenz $\Delta l = l_1 - l_2$ der beiden Wege von den Spalten bis zum Schirm, denn die

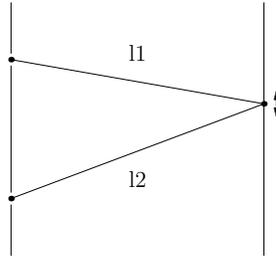


Abbildung 8.2: Interferenz am Doppelspalt

Superposition zweier - der Einfachheit wegen - ebener Einzelwellen am Schirm $e^{i\bar{k}l_1}$ und $e^{i\bar{k}l_2}$ führt zu

$$|e^{i\bar{k}l_1} + e^{i\bar{k}l_2}|^2 = 2 + 2 \cos(\bar{k}(l_1 - l_2)) \quad (8.23)$$

An diesem Ausdruck kann man sehen, dass bei Änderung von Δl um eine Wellenlänge λ die Auftreffwahrscheinlichkeit gerade eine Oszillation ausführt.

Bemerkung 8.3 (Welle-Teilchen-Dualismus)

- (i) Bei einer Messung findet man immer ein ganzes Teilchen mit der Wahrscheinlichkeit $|\psi(x, t)|^2$.
- (ii) Bei Superposition von Materieteilchen findet man Welleneigenschaften, d.h. konstruktive und destruktive Interferenz in der Wahrscheinlichkeitsverteilung.
- (iii) Quantenmechanische Effekte sind dann relevant, wenn die De-Broglie-Wellenlänge vergleichbar oder größer ist als eine charakteristische Längenskala im jeweiligen Experiment.

Beispiel 8.1

Ein kleines Staubteilchen der Masse $m = 10^{-15} \text{kg}$ und Geschwindigkeit von $v = 1 \frac{\text{mm}}{\text{s}}$ hat eine De-Broglie-Wellenlänge von $\lambda = 6,6 \cdot 10^{-6} \text{ \AA}$. Das heißt, hier sind Quanteneffekte nicht sehr relevant.

Neutronen haben hingegen eine De-Broglie-Wellenlänge von $\lambda = 1,8 \text{ \AA}$ bei einer Temperatur $T = 300 \text{K}$; $\lambda = 31 \text{ \AA}$ bei $T = 1 \text{K}$.

2. Berücksichtigung des vernachlässigten Terms in $\alpha(k)$

Berücksichtigung von $(k - \bar{k})^2$

Satz 8.1 (Konsequenz des Ehrenfest-Theorems)

Aus dem Ehrenfest-Theorem folgt für den zeitlichen Verlauf der Varianz des Ortes für freie Teilchen:

$$(\Delta x)^2(t) = \frac{(\Delta p)^2}{m^2}(t - t_0)^2 + (\Delta x)^2(t_0) \quad (8.24)$$

Beweis:

- (i) Aus dem Ehrenfest-Theorem $\frac{d}{dt}\langle A \rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle [A, H] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle$ folgt für den Orts- und Impulserwartungswert

$$\frac{d}{dt}\langle x \rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle [x, \frac{p^2}{2m}] \rangle = \frac{1}{m}\langle p \rangle \quad (8.25)$$

$$\frac{d}{dt}\langle p \rangle = 0 \Rightarrow \langle p(t) \rangle = \langle p \rangle = \text{const.} \quad (8.26)$$

Also erhalten wir

$$\langle x(t) \rangle = \frac{(t - t_0)}{m}\langle p \rangle + \langle x(t_0) \rangle \quad (8.27)$$

- (ii) Es ist außerdem

$$\frac{d}{dt}\langle x^2 \rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle [x, p^2/(2m)] \rangle + [x, p^2/(2m)]x = \frac{1}{m}\langle xp + px \rangle \quad (8.28)$$

$$\frac{d}{dt}\langle px + xp \rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle [p, p^2/(2m)] \rangle + [x, p^2/(2m)]p = \frac{2}{m}\langle p^2 \rangle \quad (8.29)$$

$$\frac{d}{dt}\langle p^2 \rangle = 0 \quad (8.30)$$

$$\Rightarrow \langle x^2(t) \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{m^2}(t - t_0)^2 + \frac{\langle (px + xp)(t_0) \rangle}{m}(t - t_0) + \langle x^2(t_0) \rangle \quad (8.31)$$

Es ergibt sich

$$\begin{aligned} (\Delta x)^2(t) &= \langle x^2(t) \rangle - \langle x(t) \rangle^2 \\ &= \frac{(\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2)}{m^2}(t - t_0)^2 + \frac{(\langle (px + xp)(t_0) \rangle - 2\langle p \rangle\langle x(t_0) \rangle)}{m}(t - t_0) \\ &\quad + \langle x^2(t_0) \rangle - \langle x(t_0) \rangle^2 \end{aligned}$$

Durch geeignetes Umformen (Wahl der Konstanten) ergibt sich obige Relation. \square

Im Falle der obigen Impulsverteilung $A(k)$ mit Erwartungswert \bar{k} erhalten wir nur dann eine nichtkonstante Varianz $(\Delta x)^2(t)$, wenn der quadratische Term $(k - \bar{k})^2$ nicht vernachlässigt werden kann, denn wäre $(k - \bar{k})^2 \approx 0 \approx (p - \bar{p})^2$, so wäre

$$(\Delta p)^2 = \int dp (p - \bar{p})^2 |\tilde{\psi}(p)|^2 \approx 0 \quad (8.32)$$

und damit

$$(\Delta x)^2(t) = (\Delta x)^2(t_0) \quad (8.33)$$

Auseinanderlaufen
des Wellenpakets

Ist nun aber $(k - \bar{k})^2$ zu groß für eine solche Abschätzung, dann verändert sich die Breite des Wellenpakets mit der Zeit gemäß

$$(\Delta x)^2(t) = \frac{(\Delta p)^2}{m^2}(t - t_0)^2 + (\Delta x)^2(t_0) \quad (8.34)$$

Das Wellenpaket läuft also auseinander (Abb. 8.3).

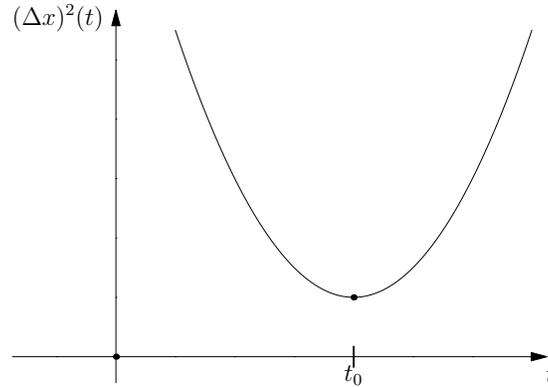


Abbildung 8.3: Zeitabhängigkeit der Ortsunschärfe eines Wellenpakets unter Berücksichtigung einer größeren Impulsunschärfe

8.4 Gaußsches Wellenpaket

Satz 8.2 (Wellenpaket minimaler Unschärfe)

Als Wellenpaket, welches die Unschärferelation minimiert:

$$(\Delta x)(\Delta p) = \frac{\hbar}{2} \quad (8.35)$$

erhält man ein Gaußsches Wellenpaket (siehe Übungsaufgabe 15)

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} e^{ikx} e^{-\left(\frac{x-\bar{x}}{2\sigma}\right)^2} \quad (8.36)$$

mit Standardabweichung $\sigma := \sqrt{(\Delta x)^2}$ und Impulsunschärfe $(\Delta p)^2 = \frac{\hbar^2}{4\sigma^2}$.

Satz 8.3

Das Gaußsche Wellenpaket bleibt bei freier Zeitentwicklung ein Gaußsches Wellenpaket mit zeitabhängiger Breite (Aufgabe 17).

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sigma(t)} \exp \left[-\frac{(x - \frac{\hbar}{m}t - \bar{x})^2}{2\sigma^2(t)} \right] \quad (8.37)$$

mit $\sigma^2(t) = \frac{\hbar^2}{4m^2\sigma^2}t^2 + \sigma^2$ (siehe Abb. 8.4).

Bemerkung 8.4

Dies stimmt mit der Beziehung (8.24) überein.

Charakteristik des
Gaußschen
Wellenpakets

Zeitabhängige
Breite

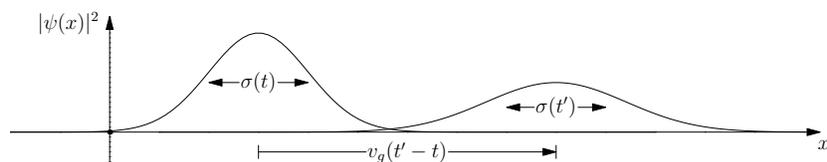


Abbildung 8.4: Zeitabhängige Unschärfe eines Gaußschen Wellenpakets

Beispiel 8.2

Ein Neutron bei Temperatur $T = 300K$, welches anfänglich mit $\sigma = 1nm$ lokalisiert ist, erfährt eine Verdopplung der Ortunscharfe nach einer Wegstrecke von $100nm$.

Bemerkung 8.5 (Zeitabhängige Unschärferelation)

Zeitabhängige
Unschärferelation

Die Unschärferelation für Impuls und Ort ergibt sich dann zu einer zeitabhängigen, wachsenden Größe

$$(\Delta x)(t) (\Delta p) = \sqrt{\frac{\hbar^2}{4} + t^2 \frac{\hbar^4}{4m^2\sigma^4}} \quad (8.38)$$

Kapitel 9

Potentialkasten

9.1 Unendlich hoher Potentialkasten

9.1 Unendlich hoher Potentialkasten

9.2 Endlicher Potentialkasten

Wir wollen uns in diesem Abschnitt mit einem außerhalb eines Kompaktums unendlich großen Potential (Abb. 9.1) beschäftigen, das gegeben ist durch

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } 0 \leq x \leq a \\ \infty & \text{sonst} \end{cases} \quad (9.1)$$

Wir versuchen nun die möglichen Wellenfunktionen eines Teilchens in einem solchen Potential zu finden. Da der Erwartungswert der Energie endlich sein sollte, können wir annehmen, dass die Wellenfunktion des Teilchens außerhalb des Kompaktums verschwindet (denn sonst hätte das unendlich hohe Potential einen Beitrag in $\langle \psi | H | \psi \rangle$). Für den Bereich $0 \leq x \leq a$ lautet die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

Zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi(x) \Leftrightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi \quad \text{mit } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (9.2)$$

Das heißt wir erhalten

$$\psi(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < 0 \\ A \sin(kx) + B \cos(kx) & \text{für } 0 \leq x \leq a \\ 0 & \text{für } x > a \end{cases} \quad (9.3)$$

Anschlussbedingungen

Für einen endlichen Potentialtopf muss die Wellenfunktion immer stetig sein (wird später in Satz 9.2 gezeigt). Da ein unendlicher Potentialtopf durch einen

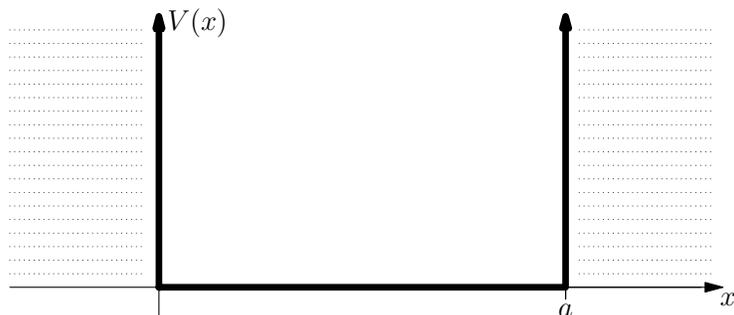


Abbildung 9.1: Unendlich hoher Potentialtopf

Grenzübergang aus dem endlichen entsteht, muss die zugehörige Wellenfunktion ebenfalls stetig sein. Es muss also gelten

$$\psi(x=0) = \psi(x=a) = 0 \quad (9.4)$$

Das ergibt

$$B = 0, \quad \sin(ka) = 0 \quad (9.5)$$

ka kann also nur die Werte $m\pi$ für $m \in \mathbb{Z} \cup \{0\}$ annehmen. $m = 0$ ist aber uninteressant, da der zugehörige Zustand nicht normierbar ist und $m < 0$ kann durch einen globalen Phasenfaktor kompensiert werden. Somit bleiben nur die $m \in \mathbb{N}$ übrig, und k kann nur die Werte annehmen

$$k_n = \frac{n\pi}{a} \quad n \in \{1, 2, 3, \dots\} \quad (9.6)$$

Diskretes
Energiespektrum

Das heißt, im unendlichen Potentialtopf sind nur diskrete Eigenenergien möglich:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad (9.7)$$

Eigenfunktionen im
unendlich hohen
Potentialkasten

Die zugehörigen Eigenfunktionen sind (siehe Abb. 9.2)

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \quad \forall x \in [0, a] \quad (9.8)$$

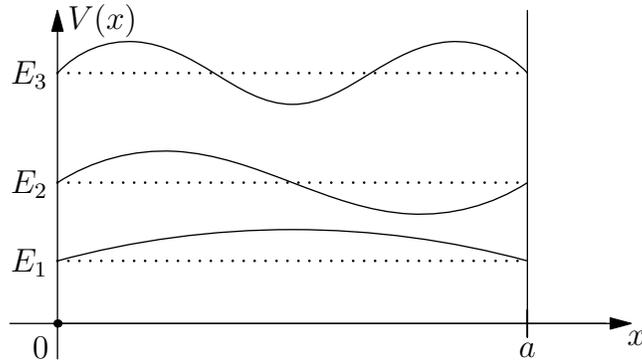


Abbildung 9.2: Eigenzustände im unendlichen Potentialtopf

Bemerkung 9.1 (Beobachtungen)

- (i) Jeder höher angeregte Zustand hat einen zusätzlichen Knoten in der Wellenfunktion.
- (ii) Die Eigenfunktionen ϕ_n sind orthogonal und vollständig:

$$\langle \phi_n | \phi_m \rangle = \int dx \phi_n^*(x) \phi_m(x) = \delta_{mn} \tag{9.9}$$

$$\sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| = \mathbb{1} \Leftrightarrow \psi(x) = \sum_n c_n \phi_n(x), \text{ mit } c_n = \langle \phi_n | \psi \rangle \tag{9.10}$$

für eine beliebige quadratintegrale Funktion $\psi(x)$. Die Orthogonalität folgt aus dem Satz über Eigenzustände hermitescher Operatoren zu verschiedenen Eigenwerten und die Vollständigkeit aus dem Spektralsatz.

- (iii) Die Zeitentwicklung des Anfangszustands kann nun mit einem gegebenen Anfangszustand $\psi(x, t = 0)$ ausgedrückt werden durch

$$\psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-iE_n t/\hbar} c_n \phi_n(x), \text{ wenn } \psi(x, t = 0) = \sum_n c_n \phi_n(x) \tag{9.11}$$

9.2 Endlicher Potentialkasten

Sei nun ein Potential $V(x)$ der Form eines endlichen Potentialtopfes gegeben (Abb. 9.3):

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < -a \\ -V_0 & \text{für } -a \leq x \leq a \\ 0 & \text{für } x > a \end{cases} \tag{9.12}$$

Wir wollen die Intervalle einzeln untersuchen:

- (i) $\boxed{x < -a}$: Da hier das Potential verschwindet, ist die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung gegeben durch

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi(x) \quad (9.13)$$

Wir müssen zwischen zwei Fällen unterscheiden:

$E > 0$ bei $|x| > a$
führt zu
Streuzuständen

- $E > 0$: Lösung von (9.13) ist

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad , \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (9.14)$$

Da hierfür alle $x < -a$ zugelassen sind, ist diese Funktion nicht normierbar. Wir werden solche Fälle später genauer betrachten und feststellen, dass sie sogenannten *Streuzuständen* entsprechen.

$E < 0$ bei $|x| > a$
führt zu
gebundenen
Lösungen

- $E < 0$: Lösung von (9.13) ist (da k hier imaginär):

$$\psi(x) = Ae^{-\kappa x} + Be^{\kappa x} \quad , \quad \kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \quad (9.15)$$

Um Normierbarkeit zu erhalten, muss $A = 0$ sein. Also erhalten wir eine nach $-\infty$ exponentiell abfallende Wellenfunktion.

- (ii) $\boxed{x > a}$: Aus Symmetriegründen verläuft die Argumentation völlig analog zum Fall $x < -a$:

$$E > 0: \quad \psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad (\text{Streuzustand}) \quad (9.16)$$

$$E < 0: \quad \psi(x) = Fe^{-\kappa x} \quad (9.17)$$

- (iii) $\boxed{-a \leq x \leq a}$: Für dieses Intervall lautet die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} - V_0\psi = E\psi \quad (9.18)$$

Gebundene
Lösungen für
 $|x| < a$

Somit erhalten wir die Lösung (da $E + V_0$ immer positiv ist)

$$\psi(x) = C \sin(lx) + D \cos(lx) \quad , \quad l = \frac{\sqrt{2m(E + V_0)}}{\hbar} \quad (9.19)$$

Wir erhalten insgesamt

$$\psi(x) = \begin{cases} Be^{\kappa x} & \text{für } x < -a \\ C \sin(lx) + D \cos(lx) & \text{für } -a \leq x \leq a \\ Fe^{-\kappa x} & \text{für } x > a \end{cases} \quad (9.20)$$

Damit wir die Lösungen genauer angeben können, benötigen wir zunächst Bedingungen über Symmetrie und Stetigkeit.

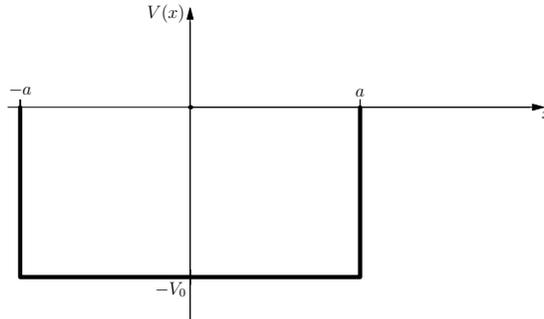


Abbildung 9.3: Endlicher Potentialtopf

Satz 9.1 (Symmetrische Potentiale)

(anti-)symmetrische
Eigenfunktionen

Wenn das Potential $V(x)$ symmetrisch ist, d.h. $V(x) = V(-x)$, dann kann man Eigenfunktionen verwenden, die entweder symmetrisch sind (gerade Parität) oder antisymmetrisch (ungerade Parität).

Beweis: Sei $\psi(x)$ eine Eigenfunktion des Hamiltonoperators $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$ mit Eigenenergie E , dann gilt (bei Substitution von x mit $-x$):

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{d(-x)^2} + V(-x) \right] \psi(-x) = E\psi(-x) \tag{9.21}$$

Da aber $V(-x) = V(x)$ vorausgesetzt ist und $\frac{d^2}{d(-x)^2} = \frac{d^2}{dx^2}$, ist $\psi(-x)$ ebenfalls eine Eigenfunktion des Hamiltonoperators H . Aufgrund der Linearität der Eigenwertgleichung von H (zeitunabh. Schrödinger-Gleichung) sind die Funktionen

$$\phi_{\pm} := \psi(x) \pm \psi(-x) \tag{9.22}$$

ebenfalls Eigenfunktionen zum Eigenwert E . Für diese beiden Funktionen gilt

$$\phi_+(-x) = \psi(-x) + \psi(x) = \phi_+(x) \Rightarrow \phi_+ \text{ symmetrisch} \tag{9.23}$$

$$\phi_-(-x) = \psi(-x) - \psi(x) = -\phi_-(x) \Rightarrow \phi_- \text{ antisymmetrisch} \tag{9.24}$$

□

Satz 9.2 (Stetigkeit der Eigenfunktionen)

Stetigkeit der
Eigenfunktionen des
Hamiltonoperators

Die Wellenfunktion $\psi(x)$ eines Eigenzustands $|\psi\rangle$ des Hamiltonoperators ist überall stetig und deren Ortsableitung ist auch überall stetig, mit Ausnahme von Punkten an welchen das Potential divergiert.

Beweis: O.B.d.A. betrachten wir die Stelle $x = 0$ und integrieren die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung von $-\varepsilon$ bis ε :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{d^2\psi}{dx^2} dx + \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} V(x)\psi(x) dx = E \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \psi(x) dx \tag{9.25}$$

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[\frac{d\psi}{dx} \Big|_{\varepsilon} - \frac{d\psi}{dx} \Big|_{-\varepsilon} \right] = \frac{2m}{\hbar^2} \left[\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} dx (V(x) - E)\psi(x) \right] = 0 \quad (9.26)$$

Also ist die Ableitung von ψ stetig und damit auch ψ selbst. □

Kehren wir nun zurück zu den gebundenen ($E < 0$) Eigenfunktionen des Hamiltonoperators im endlichen Potentialtopf. Wir hatten

$$\psi(x) = \begin{cases} B e^{\kappa x} & \text{für } x < -a \\ C \sin(lx) + D \cos(lx) & \text{für } |x| \leq a \\ F e^{-\kappa x} & \text{für } x > a \end{cases} \quad (9.27)$$

Bedingungen für die
Eigenfunktionen im
endlichen
Potentialtopf

Wir benutzen nun die beiden Sätze:

- (i) Wir wollen hier nur symmetrische Eigenfunktionen benutzen, also

$$\psi(-x) = \psi(x) \quad (9.28)$$

Damit erhalten wir $B = F$ und $C = 0$, also

$$\psi(x) = \begin{cases} B e^{\kappa x} & \text{für } x < -a \\ D \cos(lx) & \text{für } |x| \leq a \\ B e^{-\kappa x} & \text{für } x > a \end{cases} \quad (9.29)$$

- (ii) ψ und $\frac{d\psi}{dx}$ sind stetig. Dies führt im Punkt $x = a$ zur Bedingung

$$\boxed{B e^{-\kappa a} = D \cos(la)} \quad (9.30)$$

Aus der Stetigkeit der Ableitung bei $x = a$

$$\frac{d\psi}{dx} \Big|_{a-\varepsilon} = -Dl \sin(la) \quad , \quad \frac{d\psi}{dx} \Big|_{a+\varepsilon} = -B\kappa e^{-\kappa a} \quad (9.31)$$

folgt die Bedingung

$$\boxed{B\kappa e^{-\kappa a} = Dl \sin(la)} \quad (9.32)$$

Die Konstruktion der Lösungen erfolgt in Übung Nr. 6.

Kapitel 10

Harmonischer Oszillator

Bedeutung des
harmonischen
Oszillators

Die meisten interessanten Potentiale besitzen keine einfache symmetrische Struktur, sondern sind von komplizierter Form mit vielen lokalen Maxima, Minima und Polstellen (vgl. Abb. 10.1). Häufig interessiert man sich aber nur für das Verhalten eines Teilchens in der unmittelbaren Umgebung einer Gleichgewichtslage. In diesem Fall bietet sich eine Taylorentwicklung um das entsprechende lokale Minimum x_0 an, die man als *harmonische Näherung* bezeichnet, wenn man nur bis zur quadratischen Ordnung der Auslenkung entwickelt.

$$V(x) \approx V(x_0) + \left. \frac{dV}{dx} \right|_{x_0} (x - x_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2V}{dx^2} \right|_{x_0} (x - x_0)^2 \quad (10.1)$$

Da wir $V(x_0) = 0$ und $x_0 = 0$ setzen können (durch einfaches Verschieben des Ursprungs möglich) und da die erste Ortsableitung in einem Extremum der Funktion gerade verschwindet, nimmt der Hamiltonoperator die Form für den harmonischen Oszillator an:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad \text{mit } m\omega^2 := V''(x_0) \quad (10.2)$$

In der klassischen Mechanik, würde man als Lösung eines solchen Problems die zeitliche Entwicklung der Auslenkung $x(t) = C_1 \cos(\omega t) + C_2 \sin(\omega t)$ bezeichnen. In der Quantenmechanik suchen wir die Eigenkets des Hamiltonoperators, die in der Ortsdarstellung als Wellenfunktionen bezeichnet werden und der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung genügen:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \psi(x) = E \psi(x) \quad (10.3)$$

Wir könnten nun versuchen, die Differentialgleichung (10.3) analytisch zu lösen, eleganter ist aber ein *algebraisches Lösungsverfahren*.

10.1 Vernichtungs-
und
Erzeugungsoperator

10.2 Konstruktion
der Eigenzustände

10.3 Eigenschaften
der Eigenzustände

10.4 Dynamik im
harmonischen
Oszillator

Schrödinger-
Gleichung für den
harmonischen
Oszillator

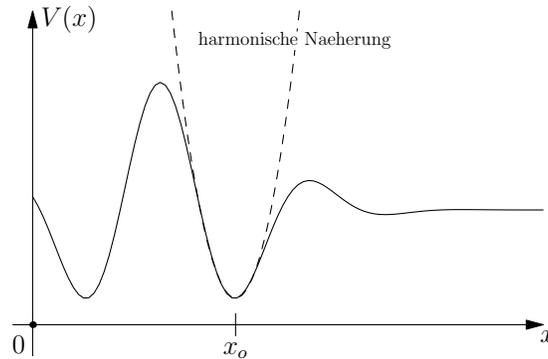


Abbildung 10.1: Harmonische Näherung in der Gleichgewichtslage eines Potentials

10.1 Vernichtungs- und Erzeugungsoperator

Definition 10.1 (Vernichtungsoperator).

Def.: Vernichtungsoperator

Man definiert den Vernichtungsoperator a als

$$a := \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(iP + m\omega X) \quad (10.4)$$

Definition 10.2 (Erzeugungsoperator).

Def.: Erzeugungsoperator

Die Adjungierte des Vernichtungsoperators bezeichnet man als Erzeugungsoperator

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(-iP + m\omega X) \quad (10.5)$$

Der Vorzug, der sich durch diese Definition ergibt, macht der folgende Satz deutlich.

Satz 10.1 (Darstellung des Hamiltonoperators mit a und a^\dagger)

Darstellung des Hamiltonoperators eines harmonischen Oszillators durch a und a^\dagger

Der Hamiltonoperator eines harmonischen Oszillators lässt sich darstellen durch

$$H = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \quad (10.6)$$

Beweis:

$$a^\dagger a = \frac{1}{2\hbar m\omega}(P^2 + m^2\omega^2 X^2 - im\omega PX + im\omega XP) \quad (10.7)$$

$$= \frac{1}{2\hbar m\omega} (P^2 + m^2\omega^2 X^2 + im\omega \underbrace{[X, P]}_{=i\hbar}) \quad (10.8)$$

$$= \frac{1}{\hbar\omega} \underbrace{\left(\frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 \right)}_{=H} - \frac{1}{2} \quad (10.9) \quad \square$$

Satz 10.2 (Vertauschungsrelation von a und a^\dagger)

$[a, a^\dagger]$ *Der Kommutator von Vernichtungs- und Erzeugungsoperator hat das schöne Ergebnis*

$$[a, a^\dagger] = 1 \quad (10.10)$$

Beweis:

$$[a, a^\dagger] = \frac{1}{2\hbar m\omega} [iP + m\omega X, -iP + m\omega X] \quad (10.11)$$

$$= \frac{1}{2\hbar m\omega} ([iP, m\omega X] - [m\omega X, iP]) \quad (10.12)$$

$$= \frac{i}{2\hbar} (-i\hbar - i\hbar) = 1 \quad (10.13) \quad \square$$

10.2 Konstruktion der Eigenzustände

Satz 10.3 (Positive Eigenenergien)

Alle Eigenenergien sind positiv *Alle Energieeigenwerte des harmonischen Oszillators sind positiv.*

Beweis: Sei $|\phi\rangle$ ein normierter Eigenzustand von H zur Eigenenergie E . In Ortsdarstellung ist also

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \phi(x) = E\phi(x) \quad (10.14)$$

Beide Seiten dieser Gleichung mit $\phi^*(x)$ multipliziert und über alle x integriert ergibt

$$E = \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \phi^*(x) \frac{d^2\phi}{dx^2} \right) + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \phi^*(x)\phi(x) \right] \quad (10.15)$$

Partielle Integration im ersten Summand und die Tatsache, dass $\phi(x)$ einen kompakten Träger hat führt zu

$$E = \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\frac{\hbar^2}{2m} \left| \frac{d\phi}{dx} \right|^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 |\phi(x)|^2 \right] \quad (10.16)$$

Da der Integrand für alle $x \in \mathbb{R}$ positiv ist, können nur positive Energien E auftreten. \square

Erzeugung von
Eigenzuständen mit
aufsteigenden
Eigenenergien

Satz 10.4 (Erzeugte Eigenzustände durch Erzeugungsoperator)

Wenn $|\varphi\rangle$ ein Eigenzustand des Hamiltonoperators in (10.6) zur Eigenenergie E ist, dann ist der durch den Erzeugungsoperator transformierte Zustand $a^\dagger|\varphi\rangle$ ein Eigenzustand zur Energie $E + \hbar\omega$. Insbesondere ist $a^\dagger|\varphi\rangle \neq 0$.

Beweis: Es ist

$$Ha^\dagger|\varphi\rangle = \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right)a^\dagger|\varphi\rangle \tag{10.17}$$

$$= \hbar\omega\left(a^\dagger[a, a^\dagger] + a^\dagger a^\dagger a + \frac{1}{2}a^\dagger\right)|\varphi\rangle \tag{10.18}$$

$$= \hbar\omega a^\dagger\left(a^\dagger a + \frac{3}{2}\right)|\varphi\rangle \tag{10.19}$$

$$= a^\dagger(H + \hbar\omega)|\varphi\rangle = (E + \hbar\omega)a^\dagger|\varphi\rangle \tag{10.20}$$

Es bleibt zu zeigen, dass $a^\dagger|\varphi\rangle \neq 0$:

$$\langle\varphi|aa^\dagger|\varphi\rangle = \langle\varphi|[a, a^\dagger] + a^\dagger a|\varphi\rangle = \langle\varphi|1 + \frac{H}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}|\varphi\rangle = \left(\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{1}{2}\right)\langle\varphi|\varphi\rangle > 0 \quad \square$$

Erzeugung mit
absteigenden
Eigenenergien

Satz 10.5 (Eigenzustände erzeugt durch den Vernichtungsoperator)

Wenn $|\varphi\rangle$ ein Eigenzustand des Hamiltonoperators in (10.6) zur Eigenenergie E ist, dann ist der durch den Vernichtungsoperator transformierte Zustand $a|\varphi\rangle$ ein Eigenzustand zur Energie $E - \hbar\omega$ oder $a|\varphi\rangle$ verschwindet.

Beweis: Es ist

$$Ha|\varphi\rangle = \hbar\omega\left(a^\dagger a a + \frac{1}{2}a\right)|\varphi\rangle \tag{10.21}$$

$$= \hbar\omega\left([a^\dagger, a]a + a a^\dagger a + \frac{1}{2}a\right)|\varphi\rangle \tag{10.22}$$

$$= \hbar\omega\left(-a + a a^\dagger a + \frac{1}{2}a\right)|\varphi\rangle \tag{10.23}$$

$$= \hbar\omega a\left(a^\dagger a - \frac{1}{2}\right)|\varphi\rangle \tag{10.24}$$

$$= a\left(\hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) - \hbar\omega\right)|\varphi\rangle = (E - \hbar\omega)a|\varphi\rangle \tag{10.25}$$

\square

Grundzustandswellenfunktion

Sukzessive
Verringerung der
Eigenenergien

Ist ein Eigenzustand $|\varphi\rangle$ des Hamiltonoperators zur Eigenenergie E gegeben, so können nun durch mehrmaliges Anwenden des Vernichtungsoperators a Eigenzustände erzeugt werden, die jeweils eine um $\hbar\omega$ reduzierte Eigenenergie besitzen. Da aber keine negativen Eigenenergien existieren - das Energiespektrum

also nach unten beschränkt ist - muss irgendwann gelten

$$a|\psi_0\rangle = 0 \tag{10.26}$$

Untere Grenze des Spektrums

Diese Gleichung hat eine eindeutige Lösung, die wir nun in Ortsdarstellung berechnen wollen:

$$0 = \langle x|a|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \langle x|iP + m\omega X|\psi_0\rangle \tag{10.27}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(\hbar \frac{d}{dx} + m\omega x \right) \psi_0(x) \tag{10.28}$$

$$\frac{d\psi_0}{dx} = -\frac{m\omega}{\hbar} x \psi_0(x) \tag{10.29}$$

$$\frac{d\psi_0}{\psi_0} = -\frac{m\omega}{\hbar} x dx \tag{10.30}$$

$$\ln \psi_0 = -\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 + \text{const.} \tag{10.31}$$

$$\psi_0(x) = N e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \tag{10.32}$$

Grundzustand des harm. Oszillators

Nach einer Normierung erhalten wir für die *Grundzustandswellenfunktion des harmonischen Oszillators*

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \tag{10.33}$$

Energiespektrum

Für den konstruierten Grundzustand $|\psi_0\rangle$ können wir jetzt die Eigenenergie berechnen

$$H|\psi_0\rangle = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) |\psi_0\rangle = \frac{1}{2} \hbar\omega |\psi_0\rangle \tag{10.34}$$

Für $|\psi_0\rangle$ ist also $E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega$ und da durch den Erzeugungsoperator a^\dagger Eigenzustände $|\psi_{n+1}\rangle = \frac{1}{c_n} a^\dagger |\psi_n\rangle$ mit Eigenenergien $E_{n+1} = E_n + \hbar\omega$ erzeugt werden, besitzt der harmonische Oszillator das *Energiespektrum*

Energiespektrum des harm. Oszillators

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \tag{10.35}$$

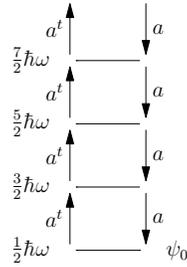


Abbildung 10.2: Schema der Wirkung des Vernichtungs- und des Erzeugungsoperators

Eigenzustände

Ist ein Eigenzustand $|\varphi_n\rangle$ bekannt, wird der Eigenzustand mit der um $\hbar\omega$ höheren Eigenenergie erzeugt durch

$$c_n |\psi_{n+1}\rangle = a^\dagger |\psi_n\rangle \tag{10.36}$$

mit einer Normierungskonstante $c_n \in \mathbb{C}$, die wir noch bestimmen müssen:

$$\begin{aligned} |c_n|^2 \langle \psi_{n+1} | \psi_{n+1} \rangle &= \langle \psi_n | a a^\dagger | \psi_n \rangle = \langle \psi_n | \frac{H}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} + 1 | \psi_n \rangle = \left(\frac{E_n}{\hbar\omega} + \frac{1}{2} \right) \\ \Rightarrow c_n &= \sqrt{n+1}, \quad |\psi_{n+1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n+1}} a^\dagger |\psi_n\rangle \end{aligned} \tag{10.37}$$

Es ist also

$$|\psi_1\rangle = a^\dagger |\psi_0\rangle \tag{10.38}$$

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} a^\dagger |\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (a^\dagger)^2 |\psi_0\rangle \tag{10.39}$$

$$|\psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} a^\dagger |\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3 \cdot 2}} (a^\dagger)^3 |\psi_0\rangle \tag{10.40}$$

Durch Induktion erhält man für die *Eigenzustände* eines harmonischen Oszillators

Energieeigenzustände
des harmonischen
Oszillators

$$|\psi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |\psi_0\rangle \tag{10.41}$$

Bemerkung 10.1

Operatoren mit Vertauschungsrelation $[a, a^\dagger] = 1$ bezeichnet man auch als *Leiteroperatoren*. Spezieller nennt man a Absteige- und a^\dagger Aufsteigeoperator (vgl. Abb. 10.2).

10.3 Eigenschaften der Eigenzustände

10.3.1 Eigenschaften des Grundzustands

Für den Grundzustand $|\psi_0\rangle$ des harmonischen Oszillators, dessen Ortsdarstellung (10.33) die Form einer Gaußkurve annimmt, zeigen sich folgende Eigenschaften:

- (i) Die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi_0(x)|^2$ ist ebenfalls eine Gaußfunktion.
- (ii) Der Ortserwartungswert im Grundzustand ist

$$\langle \psi_0 | X | \psi_0 \rangle = \langle \psi_0 | P | \psi_0 \rangle = 0 \quad (10.42)$$

(In $\langle X \rangle_{\psi_0} = \int x |\psi_0(x)|^2 dx$ hat man über eine ungerade Funktion zu integrieren, weshalb der Ausdruck verschwindet. Für $\langle P \rangle_{\psi_0}$ ergibt sich bis auf einen konstanten Faktor das selbe Integral, wenn man die Differentiation von $\psi_0(x)$ nach x explizit angibt.)

- (iii) Nun wollen wir zeigen, wie man den Wert für $\langle \psi_0 | X^2 | \psi_0 \rangle = \int dx x^2 |\psi_0(x)|^2$ ohne unhandliche Integration elegant bestimmen kann:

Dazu benutzen wir wiederum die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren a und a^\dagger , die der Relation genügen

$$a + a^\dagger = \frac{2m\omega X}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \quad (10.43)$$

Damit ergibt sich

$$\langle \psi_0 | X^2 | \psi_0 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \psi_0 | (a + a^\dagger)^2 | \psi_0 \rangle \quad (10.44)$$

$$= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \psi_0 | \underbrace{aa}_{=0} + aa^\dagger + \underbrace{a^\dagger a}_{=0} + \underbrace{a^\dagger a^\dagger}_{=0} | \psi_0 \rangle \quad (10.45)$$

Dabei wurde ausgenutzt, dass a den Grundzustand $|\psi_0\rangle$ komplett zerstört und dass der Zustand $|\psi_2\rangle = a^\dagger a^\dagger |\psi_0\rangle$ orthogonal zum Grundzustand $|\psi_0\rangle$ ist, da Eigenzustände hermitescher Operatoren zu verschiedenen Eigenwerten orthogonal zueinander sind. Wir erhalten also

$$\langle \psi_0 | X^2 | \psi_0 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \psi_0 | aa^\dagger | \psi_0 \rangle \quad (10.46)$$

$$= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \psi_0 | [a, a^\dagger] + a^\dagger a | \psi_0 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \quad (10.47)$$

- (iv) Den Ausdruck für $\langle \psi_0 | P^2 | \psi_0 \rangle$ bestimmt man analog zu (iii):

$$a - a^\dagger = \frac{2iP}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \quad (10.48)$$

$$\langle \psi_0 | P^2 | \psi_0 \rangle = -\frac{m\hbar\omega}{2} \langle \psi_0 | (a - a^\dagger)^2 | \psi_0 \rangle \quad (10.49)$$

$$= -\frac{m\hbar\omega}{2} \langle \psi_0 | (-aa^\dagger) | \psi_0 \rangle = \frac{\hbar m\omega}{2} \quad (10.50)$$

Orts- und Impulserwartungswert verschwindet im Grundzustand

Bestimmung von $\langle X^2 \rangle_{\psi_0}$

Bestimmung von $\langle P^2 \rangle_{\psi_0}$

Orts- und Impulsunschärfe des harmonischen Oszillators im Grundzustand

(v) Jetzt können wir die Orts- und Impulsunschärfe im Grundzustand und deren Unschärferelation angeben:

$$\Delta x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}, \quad \Delta p = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \quad (10.51)$$

$$\Delta x \Delta p = \hbar/2 \quad (10.52)$$

Ein Teilchen im Grundzustand besitzt also die minimale Unschärfe, die von der Heisenbergschen Unschärferelation für Ort und Impuls erlaubt wird. Man kann sich die Tatsache, dass die Unschärfe von Ort und Impuls nach unten beschränkt ist, auch dadurch plausibel machen, dass die von null verschiedene Grundzustandsenergie $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$ zu einer gewissen Quantenfluktuation führt.

Unschärferelation für den n-ten stationären Zustand

Für den n -ten stationären Zustand des harmonischen Oszillators gilt

$$\Delta x \Delta p = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \quad (10.53)$$

10.3.2 Ortsdarstellung der Eigenzustände

Satz 10.6 (Ortsdarstellung der angeregten Eigenzustände)

Eigenzustände des harmonischen Oszillators in Ortsdarstellung

Die Eigenzustände $|\psi_n\rangle$ des harmonischen Oszillators aus (10.41) sind in Ortsdarstellung gegeben durch

$$\psi_n(\xi) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2} \quad (10.54)$$

mit $\xi := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$ und den Hermite-Polynomen

$$H_0(\xi) = 1, \quad H_1(\xi) = 2\xi, \quad H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2, \quad H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi, \dots$$

bzw. allgemein

$$H_{n+1}(\xi) = 2\xi H_n(\xi) - 2n H_{n-1}(\xi) \quad (10.55)$$

Beweis: Wir wollen hier keinen allgemeinen Beweis geben, sondern (10.54) nur für den ersten angeregten Zustand $|\psi_1\rangle$ überprüfen:

$$\langle x|\psi_1\rangle = \langle x|a^\dagger|\psi_0\rangle = \langle x|\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(-iP + m\omega X)|\psi_0\rangle \quad (10.56)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(-\hbar \frac{d}{dx} + m\omega x\right) \psi_0(x) \quad (10.57)$$

$$(10.33) \quad = \frac{2m\omega x}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \sqrt{2}\xi e^{-\xi^2/2} \quad (10.58)$$

$$= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2}} H_1(\xi) e^{-\xi^2/2} \quad (10.59)$$

□

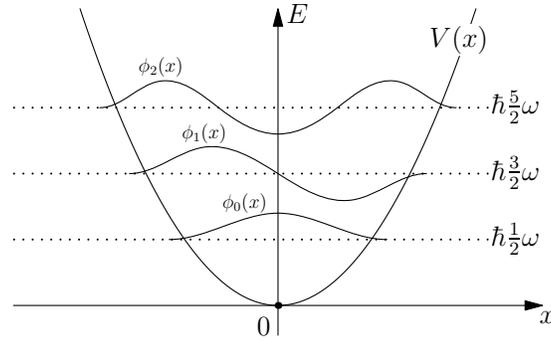


Abbildung 10.3: Energieniveaus und Eigenzustände des harmonischen Oszillators

Satz 10.7 (Orthogonalitätseigenschaft der Hermite-Polynome)

Orthogonalitätseigenschaft der Hermite-Polynome

Die Hermite-Polynome erfüllen die Orthogonalitätsrelation

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-y^2} H_n(y) H_m(y) = \delta_{nm} \sqrt{\pi} 2^n n! \tag{10.60}$$

Beweis: Spektralsatz. □

Bemerkung 10.2 (Beobachtungen)

Wir beobachten folgende Eigenschaften der Eigenfunktionen $\psi_n(x)$ (vgl. Abb. 10.3.):

- (i) Die Grundzustandswellenfunktion hat keine Knoten.
- (ii) Jeder höher angeregte Zustand hat einen zusätzlichen Knoten.
- (iii) Die Lösungen haben abwechselnd positive und negative Parität.

Bemerkung 10.3 (Alternativer Lösungsweg für den harm. Oszillator)

Alternativer Lösungsweg

Anstatt des hier vorgestellten algebraischen Lösungsverfahrens mit dem Erzeugungs- und Vernichtungsoperator, hätte man die Differentialgleichung (10.3) – die Schrödinger-Gleichung des harmonischen Oszillators – auch analytisch lösen können. Dieser etwas mühsamere Lösungsweg soll hier grob skizziert werden:

Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung (10.3) kann mit $\xi := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$ auf die Form gebracht werden

$$\frac{d^2 \psi}{d\xi^2} = \left(\xi^2 - \frac{2E}{\hbar\omega} \right) \psi(\xi) \tag{10.61}$$

Für große ξ , d.h. $\xi^2 \gg \frac{2E}{\hbar\omega}$, ergibt sich als Lösung

$$\psi(\xi) = ae^{-\xi^2/2} + be^{\xi^2/2} \tag{10.62}$$

wobei $b = 0$ sein muss, damit ψ normierbar ist. Dies motiviert den Ansatz für allgemeine ξ (Variation der Konstanten)

$$\psi(\xi) = h(\xi)e^{-\xi^2/2} \quad (10.63)$$

Eingesetzt in Gleichung (10.61) erhalten wir eine Differentialgleichung für $h(\xi)$

$$\frac{d^2 h}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dh}{d\xi} + \left(\frac{2E}{\hbar\omega} - 1 \right) h(\xi) = 0 \quad (10.64)$$

Eine Differentialgleichung dieser Form hat zwei Typen von Lösungen: Eine Art von Lösung $h(\xi)$ ist proportional zu e^{ξ^2} , was für normierbare Wellenfunktionen nicht sinnvoll ist. Die andere Art besteht aus normierbaren Lösungen mit $h(\xi) \propto H_n(\xi)$, wobei $H_n(\xi)$ die oben definierten Hermite-Polynome sind. Dieser Lösungstyp gilt allerdings nur für Energien der Form $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$. Damit sind diese Lösungen konsistent mit den Ergebnissen aus dem algebraischen Lösungsverfahren.

10.4 Dynamik im harmonischen Oszillator

Sei nun ein Anfangszustand zur Zeit $t = 0$ gegeben. Dieser kann zerlegt werden in Komponenten bezüglich der Basis aus Energieeigenzuständen $\{|n\rangle := |\psi_n\rangle\}$

$$|\psi(t=0)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle \quad (10.65)$$

Periodische
Zeitentwicklung

Nach dem Satz über die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung ist die Zeitentwicklung dieses Zustands gegeben durch

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-iE_n t/\hbar} c_n |n\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-i(n+1/2)\omega t} c_n |n\rangle \quad (10.66)$$

Der Zustand verhält sich also periodisch, sodass mit Periodendauer T gilt

$$|\psi(t+T)\rangle = |\psi(t)\rangle \quad (10.67)$$

Daraus folgt, dass die Messergebnisse aller Observablen ebenfalls periodisch mit T verlaufen.

Kapitel 11

Streuung am Delta-Potential

11.1 Konstruktion
der Eigenfunktionen

11.2 Streuung eines
Wellenpakets

Wir wollen nun die in Abschnitt 9.2 angesprochenen Streuzustände genauer untersuchen, die auftreten, wenn die Energie des betrachteten Systems höher ist als die höchst mögliche Bindungsenergie des jeweiligen Potentials. Wir wollen im Folgenden die Streuzustände eines Delta-Potentials konstruieren, welches zwar in Wirklichkeit nicht existiert, aber für theoretische Überlegungen sehr nützlich ist:

$$V(x) = \alpha\delta(x) \quad (11.1)$$

Ist α positiv spricht man von einem *repulsiven*, bei negativem α von einem *attraktiven* Potential (vgl. Abb. 11.1 und 11.2).

11.1 Konstruktion der Eigenfunktionen

11.1.1 Lösungen der Schrödinger-Gleichung

Um die möglichen Grundzustände und das Energiespektrum zu finden betrachten wir die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung in Ortsdarstellung für die Stellen an denen das Potential verschwindet, also für $x < 0$ und $x > 0$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi(x) \quad (11.2)$$

Die Struktur der Lösungen unterscheidet sich für positive und negative Energien (wobei wir für $E < 0$ bereits die Normierbarkeit berücksichtigen):

Schrödinger-
Gleichung für die
Stellen mit
 $V(x) = 0$

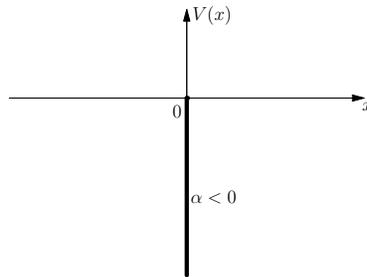


Abbildung 11.1: Attraktives Delta-Potential

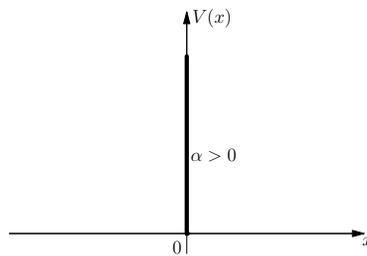


Abbildung 11.2: Repulsives Delta-Potential

$$E < 0 : \quad \psi(x) = \begin{cases} Be^{\kappa x} & \text{für } x < 0 \\ Ae^{-\kappa x} & \text{für } x > 0 \end{cases} \quad (11.3)$$

$$\text{mit} \quad \kappa := \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}} \quad (11.4)$$

$$E > 0 : \quad \psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & \text{für } x < 0 \\ Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} & \text{für } x > 0 \end{cases} \quad (11.5)$$

$$\text{mit} \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (11.6)$$

Bemerkung 11.1

Negative - klassisch verbotene - Energien führen also zu exponentiell abfallenden Wellenfunktionen, wohingegen aus positiven Energien nichtnormierbare Eigenfunktionen resultieren.

Struktur der
Lösungen

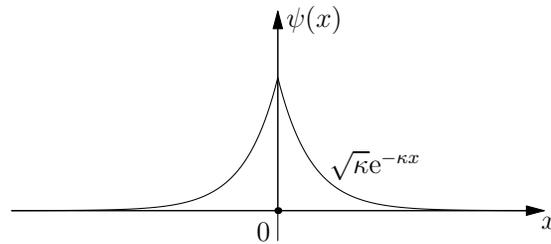


Abbildung 11.3: Wellenfunktion des Gebundenen Zustands im Delta-Potential

11.1.2 Anschlussbedingungen der Wellenfunktion

Anschluss-
bedingungen...

In Abschnitt 9.2 haben wir nachgewiesen, dass die Wellenfunktion und ihre Ableitung für das dort betrachtete Potentialproblem (endlicher Potentialkasten) stetig sein sollte. Da das Delta-Potential (11.1) aber bei $x = 0$ unendlich stark anwachsen soll, kann die Ableitung nicht mehr stetig sein. Wir erhalten als Anschlussbedingungen an der Stelle $x = 0$:

(i) Die Wellenfunktion ist stetig:

$$E < 0 : \quad B = A \quad (11.7)$$

$$E > 0 : \quad A + B = F + G \quad (11.8)$$

...aufgrund der
Stetigkeit der
Wellenfunktion

(ii) Für die Ableitung erhalten wir durch Integration der Schrödinger-Gleichung um eine Umgebung von $x = 0$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \alpha \delta(x) \psi(x) = \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} E \psi(x)$$

$$\Leftrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} (\psi'(\varepsilon) - \psi'(-\varepsilon)) = -\alpha \psi(0) + E(\Psi(\varepsilon) - \Psi(-\varepsilon))$$

...aufgrund der
Sprungstelle der
Ableitung

Ψ stehe hier für die Stammfunktion der Wellenfunktion, weswegen sie stetig ist. Im Grenzübergang $\varepsilon \rightarrow 0$ sehen wir, dass die Ableitung von $\psi(x)$ an der Stelle $x = 0$ um $\frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi(0)$ springt. Wir erhalten deshalb zusätzlich die Bedingungen:

$$E < 0 : \quad -\kappa A - \kappa B = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} A \quad (11.9)$$

$$E > 0 : \quad ik(F - G) - ik(A - B) = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} (A + B) \quad (11.10)$$

11.1.3 Gebundener Zustand ($E < 0$)

Aus (11.4) (Definition von κ) und aus den Bedingungen (11.7) und (11.9) erhalten wir

$$\kappa = -\frac{m\alpha}{\hbar^2} = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}} \quad (11.11)$$

Bindungsenergie im
Delta-Potential

Ein gebundener Zustand ist somit nur für $\alpha < 0$, d.h. für attraktive Potentiale möglich. Er besitzt die Eigenenergie (Bindungsenergie)

$$E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} \quad (11.12)$$

Gebundene
Eigenfunktion im
Delta-Potential

und die Ortsdarstellung ($A = \sqrt{\hbar^2 \kappa}$ aus Normierung)

$$\psi(x) = \begin{cases} \sqrt{\kappa} e^{\kappa x} & \text{für } x < 0 \\ \sqrt{\kappa} e^{-\kappa x} & \text{für } x > 0 \end{cases} \quad (11.13)$$

11.1.4 Streuzustände ($E > 0$)

Schreiben wir die Anschlussbedingungen (11.8) und (11.10) mithilfe der Definition $\beta := -\frac{m\alpha}{\hbar^2}$, so erhalten wir

$$A + B = F + G \quad (11.14)$$

$$F - G = A(1 + 2i\beta) - B(1 - 2i\beta) \quad (11.15)$$

Dies sind zwei Gleichungen mit vier Unbekannten, die wir nur lösen können, wenn wir Bedingungen für weitere Annahmen berücksichtigen.

Annahmen

Vernachlässigung
der zeitabhängigen
Varianz

- (i) Das Zerfließen der Breite der Wellenfunktion soll auf der Zeitskala der Streuung vernachlässigbar sein.
- (ii) Wir betrachten ein freies Wellenpaket, das von links einläuft und eine vernachlässigbare Impulsunschärfe besitzt. Beispielsweise können wir von einem Gaußschen Wellenpaket ausgehen, das zum Zeitpunkt $t = 0$ gegeben ist durch

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{\frac{1}{4}}} e^{ikx} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2}}$$

Dieses Wellenpaket können wir auch in ebene Wellen zerlegt darstellen:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk e^{ikx} \tilde{\psi}(k) \quad , \quad \tilde{\psi}(k) = \frac{2\sigma}{(2\pi)^{\frac{1}{4}}} e^{-\sigma^2(k-\bar{k})^2}$$

Keine ebenen
Wellen mit $k < 0$
im Bereich $x > 0$
erlaubt

mit der Impulsverteilung $\tilde{\psi}(k)$. Für eine hinreichend kleine Impulsunschärfe ($|\sigma\bar{k}| \gg 1$) nimmt $\tilde{\psi}$ nur in einer Umgebung um \bar{k} nicht vernachlässigbare Werte an. Außerdem sollte \bar{k} für ein von links einlaufendes Wellenpaket positiv sein, weshalb auch nur positive k wesentlich zur Superposition (ii) beitragen. Das bedeutet für die Wellenfunktion nach der Streuung, dass für $x > 0$ keine ebenen Wellen e^{ikx} mit $k < 0$ vorhanden sein können. Somit können wir setzen:

$$G = 0 \tag{11.16}$$

Nun können wir die vorhandenen Bedingungen (11.14), (11.15) und (11.16) verarbeiten:

$$A + B = F = A(1 + 2i\beta) - B(1 - 2i\beta) \tag{11.17}$$

$$\Rightarrow B = \frac{i\beta}{1 - i\beta} A \quad , \quad F = \frac{1}{1 - i\beta} A \tag{11.18}$$

Definition 11.1 (Reflexions- und Transmissionsamplitude).

Def.: Reflexions-
und Transmissions-
amplitude

Wir definieren die Reflexionsamplitude über

$$r(k) := \frac{B}{A} = \frac{i\beta(k)}{1 - i\beta(k)} \tag{11.19}$$

und die Transmissionsamplitude durch

$$t(k) := \frac{F}{A} = \frac{1}{1 - i\beta(k)} \tag{11.20}$$

Definition 11.2 (Stationärer Streuzustand für eine ebene Welle).

Eigenzustand für
die fiktive Energie
 $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

Den Streuzustand mit $A = 1$ für die kinetische Energie $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ bezeichnen wir mit

$$\phi_k^+(x) = \begin{cases} e^{ikx} + r(k)e^{-ikx} & \text{für } x < 0 \\ t(k)e^{ikx} & \text{für } x > 0 \end{cases} \tag{11.21}$$

Interpretation von $\phi_k^+(x)$

Bemerkung 11.2 (Interpretation)

Nehmen wir an es wäre möglich, die Energie eines einlaufenden Teilchens auf $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ festzulegen, d.h. eine Impulsunschärfe von $\Delta p = 0$ zu realisieren, so würde diesem zunächst freien Teilchen eine ebene Welle e^{ikx} als (unnormierbare) Wellenfunktion zugeordnet (siehe Bemerkung 8.1). Bei einer Streuung am Potential $V(x) = \alpha\delta(x)$ wäre dann seine Wellenfunktion gegeben durch den Streuzustand $\phi_k^+(x)$. So können wir nun für Superpositionen von ebenen Wellen (Wellenpaketen) die Wirkung der Streuung auf die Wellenfunktion bestimmen.

11.2 Streuung eines Wellenpakets

Nach (8.3) ist die Zeitentwicklung eines freien Wellenpakets gegeben durch

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk e^{ikx} e^{-i\omega(k)t} \tilde{\psi}(k, t = 0) \tag{11.22}$$

Ansatz für das zeitabhängige Wellenpaket bei Streuung

mit $\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$. Nun kennen wir die Streuwirkung eines Delta-Potentials auf die ebene Welle e^{ikx} , weshalb wir für die Wellenfunktion eines gestreuten von links einlaufenden Teilchens ansetzen können

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk \phi_k^+(x) e^{-i\omega(k)t} \tilde{\psi}(k, t = 0) \tag{11.23}$$

Bemerkung 11.3 (Plausibilitätsbetrachtung)

Dieser Ansatz führt zur korrekten Lösung, denn

$$0 \stackrel{!}{=} (i\hbar \frac{d}{dt} - H)\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk \tilde{\psi}(k, t = 0) \underbrace{(\hbar\omega(k) - H)}_{=0} \phi_k^+(x) e^{-i\omega(k)t}$$

Gestreutes Wellenpaket

Mit dem Ausdruck (11.21) für den Streuzustand mit der Eigenenergie $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ und unter der Annahme, dass das $\tilde{\psi}$ um \bar{k} lokalisiert ist und die Reflexions- und Transmissionsamplitude sich in der Umgebung von \bar{k} wenig ändern, können wir das gestreute Wellenpaket ausrechnen:

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk \tilde{\psi}(k, 0) e^{-i\omega(k)t} \begin{cases} e^{ikx} + r(\bar{k})e^{-ikx} & , x < 0 \\ t(\bar{k})e^{ikx} & , x > 0 \end{cases} \\ (8.19) \quad &= \frac{e^{i\omega(\bar{k})t}}{\sqrt{2\pi}} \int dk \tilde{\psi}(k, 0) \begin{cases} e^{ik(x-v_g(\bar{k})t)} + r(\bar{k})e^{ik(-x-v_g(\bar{k})t)} & , x < 0 \\ t(\bar{k})e^{ik(x-v_g(\bar{k})t)} & , x > 0 \end{cases} \end{aligned}$$

$$\psi(x, t) = e^{i\omega(\bar{k})t} \begin{cases} \psi(x - v_g(\bar{k})t, t = 0) + r(\bar{k})\psi(-x + v_g(\bar{k})t, t = 0) & , x < 0 \\ t(\bar{k})\psi(x - v_g(\bar{k})t, t = 0) & , x > 0 \end{cases}$$

Somit ergibt sich für $t \rightarrow -\infty$ die einlaufende Welle von links und für $t \rightarrow \infty$ eine auslaufende Welle bestehend aus reflektierter und transmittierter Welle (siehe Abb. 11.4).

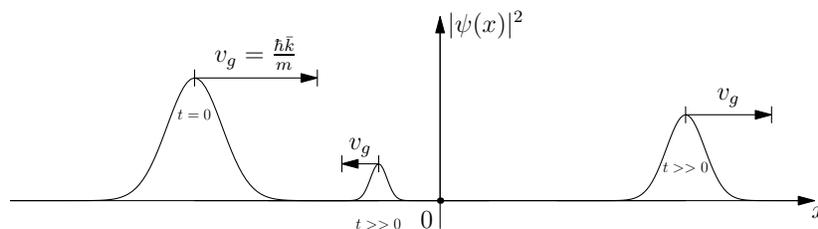


Abbildung 11.4: Streuung am Deltapotential führt zu Reflexion und Transmission einer einlaufenden Welle

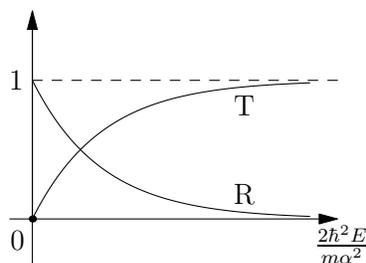


Abbildung 11.5: Reflexions- und Transmissionskoeffizient des δ -Potentials

Bemerkung 11.4 (Transmissions- und Reflexionskoeffizient)

Transmissions- und Reflexionskoeffizient

Die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen mit einem vor der Streuung einigermaßen wohldefinierten Impuls nach der Streuung irgendwo links zu finden, ist gegeben durch den sog. Reflexionskoeffizient $R(\vec{k}) := |r(\vec{k})|^2$ und die Wahrscheinlichkeit, es rechts zu finden durch den Transmissionskoeffizient $T(\vec{k}) := |t(\vec{k})|^2$. Für das δ -Potential gilt

$$T = \frac{1}{1 + \beta^2} = \frac{1}{1 + \frac{m\alpha^2}{2\hbar^2 E}}, \quad R = \frac{\beta^2}{1 + \beta^2} = \frac{1}{1 + \frac{2\hbar^2 E}{m\alpha^2}} \quad (11.24)$$

Die Gesamtwahrscheinlichkeit bleibt dabei erhalten (vgl. Abb. 11.5).

$$R + T = 1 \quad (11.25)$$

Kapitel 12

Heisenberg- und Schrödinger-Bild der Quantenmechanik

12.1 Zeitentwicklungsoperator

Die Zeitentwicklung eines Zustands kann man auch mithilfe eines Operators beschreiben, der wie folgt definiert ist:

Definition 12.1 (Zeitentwicklungsoperator).

Man erhält aus einem Zustand $|\psi(t_0)\rangle$ durch Anwendung des linearen Zeitentwicklungsoperators $U(t, t_0)$ den Zustand zur Zeit t :

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle \quad (12.1)$$

Wir wollen zunächst einige Eigenschaften des Zeitentwicklungsoperators zusammentragen:

Satz 12.1 (Eigenschaften des Zeitentwicklungsoperators)

Der Zeitentwicklungsoperator besitzt die folgenden Eigenschaften

(i) $U(t_0, t_0) = \mathbb{1}$

(ii) Er ist Lösung der Differentialgleichung (auch Schrödinger-Gleichung für den Zeitentwicklungsoperator genannt)

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = H(t)U(t, t_0)} \quad (12.2)$$

12.1 Zeitentwicklungsoperator

12.2 Heisenberg- und Schrödinger-Bild

12.3 Beispiel: Harmonischer Oszillator

Eigenschaften von $U(t, t_0)$

Schrödinger-Gleichung für den Zeitentwicklungsoperator

Diese ist äquivalent zur Integralgleichung

$$1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t') U(t', t_0) dt' \quad (12.3)$$

(iii) Er erfüllt eine Art Gruppeneigenschaft:

$$U(t, t'') = U(t, t') U(t', t'') \quad \forall t, t', t'' \quad (12.4)$$

(iv) Er ist unitär:

$$U^\dagger(t, t') = U^{-1}(t, t') = U(t', t) \quad (12.5)$$

Beweis:

(i) $|\psi(t_0)\rangle = U(t_0, t_0)|\psi(t_0)\rangle$.

(ii) Wir setzen die Definition von $U(t, t_0)$ in die Schrödingergleichung ein:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H(t)|\psi(t)\rangle \Leftrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = H(t)U(t, t_0)$$

(iii) $|\psi(t)\rangle = U(t, t')|\psi(t')\rangle = U(t, t')U(t', t'')|\psi(t'')\rangle \stackrel{!}{=} U(t, t'')|\psi(t'')\rangle$

(iv) Aus (iii) folgt zunächst $\mathbb{1} = U(t, t) = U(t, t')U(t', t)$ und daraus

$$U(t, t') = U^{-1}(t', t).$$

Für die Unitarität betrachten wir den infinitesimalen Zeitentwicklungsoperator $U(t + dt, t)$, den wir sofort aus der Integralgleichung (12.3) erhalten:

$$U(t + dt, t) = 1 - \frac{i}{\hbar} H(t)dt$$

Dieser ist unitär, denn $(1 + \frac{i}{\hbar} H(t)dt)(1 - \frac{i}{\hbar} H(t)dt) = 1 + \mathcal{O}(dt^2)$. Da außerdem jeder Zeitentwicklungsoperator $U(t, t')$ als Produkt von infinitesimalen Zeitentwicklungsoperatoren darstellbar ist und das Produkt von unitären Operatoren auch unitär ist, ist $U(t, t')$ unitär. \square

Oft ist man mit konservativen Systemen konfrontiert. Dafür nimmt der Zeitentwicklungsoperator eine Form an, die zur Zeitentwicklung von Zuständen bei gelöster zeitunabhängiger Schrödingergleichung äquivalent ist.

Satz 12.2 (Zeitentwicklungsoperator in konservativen Systemen)

In Systemen, in denen der Hamiltonoperator nicht von der Zeit abhängt, ist der Zeitentwicklungsoperator gegeben durch

$$U(t, t_0) = e^{-iH(t-t_0)/\hbar} \quad (12.6)$$

Beweis: $U(t_0, t_0) = \mathbb{1}$, $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = -i^2 H e^{-iH(t-t_0)} = H U(t, t_0)$ \square

$U(t, t_0)$ in konservativen Systemen

12.2 Heisenberg- und Schrödinger-Bild

Schrödinger-Bild

War bisher der zeitliche Verlauf des Systems von Interesse, so haben wir den zugehörigen Zuständen eine zeitliche Entwicklung zugeschrieben, die durch die Schrödinger-Gleichung

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

gegeben ist. Den zeitabhängigen Erwartungswert einer Observablen $O_s(t)$ erhalten wir dann aus¹

$$\langle O \rangle(t) = \langle \psi_s(t) | O_s(t) | \psi_s(t) \rangle$$

Die Interpretation, den Zuständen eine Zeitentwicklung zuzuordnen, wird *Schrödinger-Bild der Quantenmechanik* genannt.

Heisenberg-Bild

Alternativ dazu kann man die Zeitentwicklung aber auch der Observablen zuordnen, wobei die Zustände zeitlich konstant bleiben:

$$\langle O \rangle(t) = \langle \psi(t_0) | U^\dagger(t, t_0) O_s(t) U(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle = \langle \psi(t_0) | O_H(t) | \psi(t_0) \rangle$$

Ein Operator O_H im Heisenberg-Bild der Quantenmechanik ist also mit dem Operator O_s aus dem Schrödinger-Bild verknüpft durch

$$O_H(t) = U^\dagger(t, t_0) O_s(t) U(t, t_0) \quad (12.7)$$

Damit erhalten wir eine äquivalente Beschreibung der Zeitentwicklung in der Quantenmechanik. Um zu kennzeichnen, dass man sich im Heisenberg-Bild befindet, werden Zustände und Operatoren meist mit dem Index H versehen. Die Schrödinger-Gleichung für zeitabhängige Wellenfunktionen wird im Heisenberg-Bild ersetzt durch die *Heisenbergsche Bewegungsgleichung*:

Satz 12.3 (Bewegungsgleichung für Operatoren)

Heisenbergsche Bewegungsgleichung

Im Heisenberg-Bild ist die Zeitentwicklung eines Operators O_H durch die Gleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} O_H(t) = [O_H(t), H_H(t)] + i\hbar U^\dagger(t, t_0) \frac{\partial O_s}{\partial t} U(t, t_0) \quad (12.8)$$

gegeben, mit $H_H(t) = U^\dagger(t, t_0) H(t) U(t, t_0)$.

¹Die mögliche Zeitabhängigkeit von $O_s(t)$ stammt aus der Definition der jeweiligen Observablen O_s . Normalerweise kann man eine solche explizite Zeitabhängigkeit umgehen.

Beweis: Es ist

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{d}{dt} O_H(t) &= \left(i\hbar \frac{d}{dt} U^\dagger(t, t_0) \right) O_s(t) U(t, t_0) + U^\dagger(t, t_0) O_s(t) i\hbar \frac{d}{dt} U(t, t_0) \\
 &\quad + U^\dagger(t, t_0) i\hbar \frac{\partial O_s}{\partial t} U(t, t_0) \\
 &\stackrel{(12.2)}{=} -U^\dagger(t, t_0) H(t) U(t, t_0) U^\dagger(t, t_0) O_s(t) U(t, t_0) \\
 &\quad + U^\dagger(t, t_0) O_s(t) U(t, t_0) U^\dagger(t, t_0) H(t) U(t, t_0) \\
 &\quad + U^\dagger(t, t_0) i\hbar \frac{\partial O_s}{\partial t} U(t, t_0) \\
 &= -H_H(t) O_H(t) + O_H(t) H_H(t) + i\hbar U^\dagger(t, t_0) \frac{\partial O_s}{\partial t} U(t, t_0)
 \end{aligned}$$

Bemerkung 12.1 (Spezialfall der Heisenbergschen Bewegungsgl.)

Befinden wir uns in einem konservativen System und besitzt die Observable O_s keine explizite Zeitabhängigkeit, so nimmt die Heisenbergsche Bewegungsgleichung die Form an:

$$i\hbar \frac{d}{dt} O_H(t) = [O_H(t), H] \tag{12.9}$$

12.3 Beispiel: Harmonischer Oszillator

In manchen Fällen ist es durchaus angebracht im Heisenberg-Bild zu denken. Im Folgenden wollen wir einige dieser Gedankengänge am Beispiel des harmonischen Oszillators ausführen.

Davor führen wir nachträglich den sogenannten *Anzahloperator* N für den harmonischen Oszillator ein, für den folgender Satz gilt:

Satz 12.4 (Anzahloperator)

Der Anzahloperator

Def.:
Anzahloperator

$$N := a^\dagger a \tag{12.10}$$

mit den Auf- und Absteigeoperatoren a^\dagger und a erfüllt die Kommutatorrelationen

$$[N, a^\dagger] = a^\dagger, \quad [N, a] = -a \tag{12.11}$$

Der Hamiltonoperator des harmonischen Oszillators kann dann geschrieben werden als

$$H = \hbar\omega \left(N + \frac{1}{2} \right) \tag{12.12}$$

Damit ergibt sich die namensgebende Eigenschaft

$$N|\psi_n\rangle = n|\psi_n\rangle \quad (12.13)$$

Die Eigenwerte des Anzahloperators geben also die jeweilige Anzahl der Erzeugungsoperatoren an, die nötig sind um vom Grundzustand zum entsprechenden Eigenzustand $|\psi_n\rangle \propto (a^\dagger)^n|\psi_0\rangle$ zu gelangen.

Erzeugungs- und Vernichtungsoperator im Heisenberg-Bild

- (i) Zunächst wollen wir die Heisenbergsche Bewegungsgleichung für den Vernichtungsoperator im Heisenberg-Bild a_H lösen:

$$i\hbar \frac{da_H}{dt} = [a_H, H] = \hbar\omega[a_H, N]$$

Wegen den Kommutatorrelationen (12.11) können wir die Lösung raten²:

$$a_H(t) = e^{-i\omega t} a \quad , \quad a_H^\dagger(t) = e^{i\omega t} a^\dagger \quad (12.14)$$

Bemerkung 12.2 (Erhaltung der Kommutatorrelation)

Die Kommutatorrelation $[a, a^\dagger] = 1$ des Erzeugungs- und Vernichtungsoperators im Schrödinger-Bild bleibt auch im Heisenberg-Bild (trotz Zeitentwicklung) erhalten:

Erhaltung der Kommutatorrelationen im Heisenberg-Bild

$$\begin{aligned} [a_H(t), a_H^\dagger(t)] &= U^\dagger(t, t_0) a a^\dagger U(t, t_0) - U^\dagger(t, t_0) a^\dagger a U(t, t_0) \\ &= U^\dagger(t, t_0) [a, a^\dagger] U(t, t_0) = 1 \end{aligned}$$

Da hier nur im letzten Schritt die spezielle Relation für a und a^\dagger benutzt wurde, gilt allgemein: *Wenn der Kommutator zweier Operatoren eine Zahl ergibt, dann bleibt diese Relation auch im Heisenberg-Bild erhalten, d.h. sie ist zeitunabhängig.*

Orts- und Impulsoperator im Heisenberg-Bild

- (ii) Als nächstes interessiert uns die Zeitabhängigkeit des Orts- und Impulsoperators im Heisenberg-Bild für den harmonischen Oszillator. Aus der Linearität des Kommutators folgt:

$$\begin{aligned} \hat{x}_H(t) &= \sqrt{\frac{\pi}{2m\omega}} (a_H(t) + a_H^\dagger(t)) = \sqrt{\frac{\pi}{2m\omega}} (e^{-i\omega t} a + e^{i\omega t} a^\dagger) \\ &= \sqrt{\frac{\pi}{2m\omega}} (\cos\omega t (a + a^\dagger) - i \sin\omega t (a - a^\dagger)) \\ &= \cos(\omega t) \hat{x} + \frac{1}{m\omega} \sin(\omega t) \hat{p} \end{aligned} \quad (12.15)$$

Analog erhält man für den Impulsoperator

$$\hat{p}_H(t) = \cos(\omega t) \hat{p} - m\omega \sin(\omega t) \hat{x} \quad (12.16)$$

²Dies sieht man sofort an $[a_H(t), N] = e^{-i\omega t} [a, N] = a_H(t)$ und $i\frac{d}{dt} a_H(t) = \omega a_H(t)$.

Verbindung zur
klassischen
Mechanik

Bemerkung 12.3

- (i) Aus obigen Ausdrücken sieht man, dass $\frac{d}{dt}\hat{x}_H = \frac{\hat{p}_H}{m}$ und $\frac{d}{dt}\hat{p}_H = -m\omega^2\hat{x}_H$ gilt. Diese Relationen erinnern uns an die hamiltonsche Mechanik:

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -m\omega^2 x$$

- (ii) Im Heisenberg-Bild lässt sich die Zeitabhängigkeit der Erwartungswerte sehr bequem berechnen:

$$\langle x \rangle(t) = \psi | x_H(t) | \psi = \cos(\omega t) \langle x \rangle(t=0) + \frac{\sin(\omega t)}{m\omega} \langle p \rangle(t=0)$$

Wie man sieht, gibt es durchaus praktische Vorteile des Heisenberg-Bildes. In der Regel ist das Schrödinger-Bild aber bequemer, da die Heisenbergsche Bewegungsgleichung im Allgemeinen schwer lösbar ist.

Teil III

Symmetrien und Drehimpuls

Motivation

Um Probleme mit einem Zentralpotential – wie beispielsweise die Beschreibung des Elektrons des Wasserstoffatoms – im quantenmechanischen Formalismus zu beschreiben, betrachten wir die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung in drei Dimensionen in Ortsdarstellung mit einem rotationssymmetrischen Zentralpotential $V(x, y, z) = -\frac{e^2}{r(x, y, z)}$.

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x, y, z) \right) \psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z) \quad (12.17)$$

In der klassischen Mechanik führt ein rotationssymmetrisches Potential zur Drehimpulserhaltung. Wir werden im Folgenden sehen, zu welchen Resultaten der quantenmechanische Formalismus führt.

Kapitel 13

Drehimpulsalgebra

13.1 Die Drehimpulsoperatoren

In der klassischen Mechanik wird der Drehimpuls definiert als $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$. Dies motiviert folgende Definition für die Operatoren, die den Drehimpuls beschreiben.

Definition 13.1 (Drehimpulsoperatoren).

Aus dem Korrespondenzprinzip folgt die komponentenweise Definition der (hermiteschen) Drehimpulsoperatoren:

$$L_x = yp_z - zp_y \quad (13.1)$$

$$L_y = zp_x - xp_z \quad (13.2)$$

$$L_z = xp_y - yp_x \quad (13.3)$$

Satz 13.1 (Vertauschungsrelation)

Die Operatoren für den Drehimpuls erfüllen die Kommutatorrelation

$$[L_i, L_j] = \sum_{k=1}^3 i\hbar \varepsilon_{ijk} L_k \quad (13.4)$$

Beweis: Es ist

$$[L_x, L_y] = [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z] \quad (13.5)$$

$$= [yp_z, zp_x] + \underbrace{[yp_z, xp_z]}_{=0} - \underbrace{[zp_y, zp_x]}_{=0} + [zp_y, xp_z] \quad (13.6)$$

$$= y[p_z, zp_x] + \underbrace{[y, zp_x]p_z}_{=0} + z \underbrace{[p_y, xp_z]}_{=0} + [z, xp_z]p_y \quad (13.7)$$

13.1 Die Drehimpulsoperatoren

13.2 Die Leiteroperatoren L_{\pm}

13.3 Das Eigenwertspektrum für den Drehimpuls

Def.: Drehimpulsoperatoren

Vertauschungsrelation für L_x, L_y, L_z

$$= y[p_z, z]p_x + x[z, p_z]p_y = -i\hbar yp_x + i\hbar xp_y \quad (13.8)$$

$$= i\hbar L_z \quad (13.9)$$

Die Kommutatoren $[L_y, L_z]$ und $[L_z, L_x]$ werden analog berechnet. \square

Bemerkung 13.1 (Widerspruch zur klassischen Mechanik)

Widerspruch zur klassischen Mechanik

Die Observablen, die den Komponenten des Drehimpulses \mathbf{L} zugeordnet werden, sind also nicht kompatibel, d.h. sie können nicht gleichzeitig gemessen werden. Dies widerspricht der klassischen Mechanik in fundamentaler Weise.

Satz 13.2

$$[\mathbf{L}^2, L_i] = 0$$

Die Operatoren L_x, L_y und L_z vertauschen mit $\mathbf{L}^2 := L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$.

Beweis: Wir beweisen die Relation nur für L_z :

$$[\mathbf{L}^2, L_z] = [L_x^2, L_z] + [L_y^2, L_z] + [L_z^2, L_z] \quad (13.10)$$

$$= L_x[L_x, L_z] + [L_x, L_z]L_x + L_y[L_y, L_z] + [L_y, L_z]L_y \quad (13.11)$$

$$= i\hbar(-L_x L_y - L_y L_x + L_y L_x + L_x L_y) = 0 \quad (13.12)$$

\square

13.2 Die Leiteroperatoren L_{\pm}

Wahl von $\{\mathbf{L}^2, L_z\}$ als vollst. Menge kompatibler Observablen

Wir wollen Eigenzustände der Drehimpulsoperatoren bestimmen, die durch Angabe von Eigenwerten eindeutig festgelegt sind. Dazu benötigen wir einen vollständigen Satz kommutierender Observablen. Die Operatoren L_x, L_y, L_z alleine sind dazu nicht geeignet, da sie nicht kompatibel sind. Wir wählen deshalb die Menge $\{\mathbf{L}^2, L_z\}$ ¹. Dies ist möglich, da zum einen $[\mathbf{L}^2, L_z] = 0$ ist und – was wir später sehen werden – die gemeinsamen Eigenzustände eindeutig durch Angabe eines Eigenwerts λ von \mathbf{L}^2 und eines Eigenwerts μ von L_z festgelegt sind.

Zunächst müssen wir die Eigenwerte der Impulsoperatoren herausfinden, was am besten mit einer algebraischen Methode funktioniert.

Definition 13.2 (Die Leiteroperatoren L_{\pm}).

Def.: Die Leiteroperatoren L_{\pm}

Wir wollen das Eigenwertspektrum der Drehimpulsoperatoren mithilfe der (nicht hermiteschen) Leiteroperatoren

$$L_{\pm} := L_x \pm iL_y \quad (= L_{\mp}^{\dagger}) \quad (13.13)$$

bestimmen.

¹Wir könnten genauso gut $\{\mathbf{L}^2, L_x\}$ oder $\{\mathbf{L}^2, L_y\}$ nehmen.

Satz 13.3 (Kommutatorrelationen mit Leiteroperatoren)

Es ist $[L_z, L_\pm] = \pm \hbar L_\pm$ und $[\mathbf{L}^2, L_\pm] = 0$.

Vertauschungs-
relationen der
Leiteroperatoren
mit den
Impulsoperatoren

Beweis:

$$[L_z, L_\pm] = [L_z, L_x] \pm i[L_z, L_y] = i\hbar L_y \mp i^2 \hbar L_x \quad (13.14)$$

$$= \hbar(\pm L_x + iL_y) = \pm \hbar(L_x \pm iL_y) = \pm \hbar L_\pm \quad (13.15)$$

$$[\mathbf{L}^2, L_\pm] = [\mathbf{L}^2, L_x] + i[\mathbf{L}^2, L_y] = 0 \quad (13.16)$$

□

Nun wollen wir untersuchen, was passiert, wenn wir einen Leiteroperator auf einen bereits bekannten gemeinsamen Eigenzustand von \mathbf{L}^2 und L_z anwenden.

Satz 13.4 (Erzeugung von Eigenzuständen)

Sei $|f\rangle$ ein gemeinsamer Eigenzustand von \mathbf{L}^2 und L_z mit $\mathbf{L}^2|f\rangle = \lambda|f\rangle$ und $L_z|f\rangle = \mu|f\rangle$, dann sind auch $L_\pm|f\rangle$ Eigenzustände mit gleichem Eigenwert λ für \mathbf{L}^2 und Eigenwert $\mu \pm \hbar$ für L_z oder $L_\pm|f\rangle$ verschwindet.

Erzeugung von
Eigenzuständen mit
den
Leiteroperatoren

$$\boxed{\mathbf{L}^2|L_\pm f\rangle = \lambda|L_\pm f\rangle, \quad L_z|L_\pm f\rangle = (\mu \pm \hbar)|L_\pm f\rangle} \quad (13.17)$$

Beweis: Sei $|f\rangle$ ein gemeinsamer Eigenzustand wie im Satz angegeben, dann ist

$$\mathbf{L}^2(L_\pm|f\rangle) = L_\pm \mathbf{L}^2|f\rangle = \lambda L_\pm|f\rangle$$

$$L_z(L_\pm|f\rangle) = ([L_z, L_\pm] + L_\pm L_z)|f\rangle = (\pm \hbar L_\pm + L_\pm L_z)|f\rangle = L_\pm(\mu \pm \hbar)|f\rangle \quad \square$$

Satz 13.5 (Beschränktes Spektrum von L_z)

Die möglichen Eigenwerte μ von L_z sind nach oben und unten beschränkt mit

Das Spektrum von
 L_z ist beschränkt

$$\boxed{\mu^2 \leq \lambda} \quad (13.18)$$

Beweis: $\lambda = \langle f|\mathbf{L}^2|f\rangle = \langle L_x^2 \rangle + \langle L_y^2 \rangle + \langle L_z^2 \rangle \geq \langle f|L_z^2|f\rangle = \mu^2$ □

Existenz von $|f_t\rangle$
und $|f_b\rangle$

Nun ist das Spektrum von L_z nach unten und oben beschränkt. Mit den Leiteroperatoren L_+ und L_- können wir aber immer neue Eigenzustände $L_\pm|f\rangle$ mit Eigenwerten $\mu \pm \hbar$ erzeugen. Es müssen also irgendwann Eigenzustände $|f_t\rangle$ und $|f_b\rangle$ erreicht werden mit $L_+|f_t\rangle = 0$ und $L_-|f_b\rangle = 0$. Somit kann man von einer Art „Leiter“ von Eigenzuständen (siehe Abb. 13.1) sprechen, wobei jeder Stufe ein um \hbar verschiedener Eigenwert zugeordnet wird.

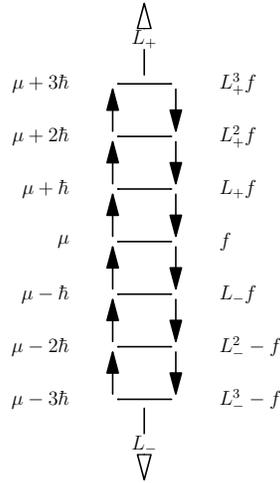


Abbildung 13.1: Die gemeinsamen Eigenzustände von L_z und L^2 mit Eigenwerten $\mu \pm \hbar$ bezüglich L_z bilden eine Leiterstruktur.

Bemerkung 13.2 (Eindeutige Leiter)

Eindeutigkeit der Leiter

Bewegt man sich mit L_+ auf der Leiter nach oben, dann sollten beim umgekehrten Vorgang mit L_- wieder dieselben Stufen erreicht, also die gleichen Eigenzustände (bis auf einen konstanten Faktor) konstruiert werden:

$$L_{\pm}L_{\mp} = (L_x \pm iL_y)(L_x \mp iL_y) = L_x^2 + L_y^2 \pm i[L_y, L_x] = L^2 - L_z^2 \pm \hbar L_z \quad (13.19)$$

Somit ist $L_{\pm}L_{\mp}|f\rangle = \alpha|f\rangle$ mit $\alpha \in \mathbb{C}$.

Nützliche Darstellung von L^2

Damit haben wir gleichzeitig eine wichtige Darstellung von L^2 durch die Leiteroperatoren und L_z :

$$\boxed{L^2 = L_{\pm}L_{\mp} + L_z^2 \mp \hbar L_z} \quad (13.20)$$

13.3 Eigenwertspektrum für den Drehimpuls

Wir sind bei der Konstruktion einer Leiter wie in Abb. 13.1 von einem gemeinsamen Eigenvektor $|f\rangle$ von L^2 und L_z ausgegangen und haben mit L_{\pm} neue Eigenzustände konstruiert, die für L_z jeweils um \hbar verschobene Eigenwerte liefern. Für L^2 bleibt der Eigenwert der konstruierten Zustände aber auf der ganzen Leiter gleich. Das heißt, mit dem Eigenwert λ von L^2 wählen wir gewissermaßen eine Leiter (einen Eigenraum von L^2) aus, deren Stufen dann die Eigenwerte von L_z liefern. Um einen Drehimpuls-Eigenzustand eindeutig zu charakterisieren, benötigen wir also die Angabe des Eigenwerts λ und des Ei-

genwerts μ , wodurch die Wahl von $\{\mathbf{L}^2, L_z\}$ als vollständige Menge kompatibler Observablen gerechtfertigt wird.

Definition 13.3 (Größter und kleinster Eigenwert von L_z).

Wir bezeichnen für ein festes λ den größten Eigenwert von L_z mit $\hbar l$, den kleinsten mit $\hbar \bar{l}$. Es ist also

$$L_z|f_l\rangle = \hbar l|f_l\rangle \quad , \quad L_z|f_{\bar{l}}\rangle = \hbar \bar{l}|f_{\bar{l}}\rangle \quad (13.21)$$

Da $|f_l\rangle$ und $|f_{\bar{l}}\rangle$ zum selben Eigenwert λ von \mathbf{L}^2 gehören, können wir eine Beziehung zwischen dem größten und dem kleinsten Eigenwert von L_z herleiten:

Wir benutzen die Darstellung (13.20) von \mathbf{L}^2 :

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^2|f_l\rangle &= (L_-L_+ + L_z^2 + \hbar L_z)|f_l\rangle = (\hbar^2 l^2 + \hbar^2 l)|f_l\rangle \\ \Rightarrow \lambda &= \hbar^2 l(l+1) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^2|f_{\bar{l}}\rangle &= (L_+L_- + L_z^2 - \hbar L_z)|f_{\bar{l}}\rangle = (\hbar^2 \bar{l}^2 - \hbar^2 \bar{l})|f_{\bar{l}}\rangle \\ \Rightarrow \lambda &= \hbar^2 \bar{l}(\bar{l}-1) \end{aligned}$$

l und \bar{l} müssen somit der Gleichung genügen

$$l(l+1) = \bar{l}(\bar{l}-1) \quad (13.22)$$

Diese Gleichung hat zwei Lösungen: Entweder ist $\bar{l} = l + 1$, was nicht sinnvoll ist, da per Definition $l \geq \bar{l}$ sein muss. Die andere und korrekte Lösung ist $\bar{l} = -l$.

Wir können zusammenfassen: Ein gemeinsamer Eigenzustand von \mathbf{L}^2 und L_z^2 wird eindeutig festgelegt durch die Angabe von λ und μ . Nun haben wir festgestellt, dass der jeweils größte und kleinste Wert für μ bei festem λ (also die „Leitergröße“) von λ abhängt über

$$-\hbar l \leq \mu \leq \hbar l \quad , \quad \text{mit} \quad \lambda = \hbar^2 l(l+1) \quad (13.23)$$

μ läuft dabei vom kleinsten bis zum größten Wert in Schritten der Größe \hbar . Führen wir einen Parameter m ein über $m := \mu/\hbar$, so läuft dieser in ganzen Schritten von $-l$ bis l . Aus diesem Grund muss l ganz- oder halbzahlig sein. Es ist also

$$\mathbf{L}^2|f_l^m\rangle = \hbar^2 l(l+1)|f_l^m\rangle \quad (13.24)$$

$$L_z|f_l^m\rangle = \hbar m|f_l^m\rangle \quad (13.25)$$

mit den *erlaubten Quantenzahlen*

Größter und kleinster Eigenwert von L_z bei festem λ

Struktur des Eigenspektrums

Eigenspektrum

Drehimpulsquantenzahl:	$l = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$	(13.26)
-------------------------------	---	---------

Magnetische Quantenzahl:	$m = -l, -l + 1, \dots, l - 1, l$	(13.27)
---------------------------------	-----------------------------------	---------

Beispiel 13.1 (Starrer Rotator)

Betrachten wir ein starres Molekül der Breite a , dessen Schwerpunkt ruht. Sein Hamiltonoperator ist dann gegeben durch $H = \frac{L^2}{2\theta}$ mit Trägheitsmoment $\theta = \frac{ma^2}{2}$. Das Energiespektrum ist dann *quantisiert*:

$$E_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{ma^2} \quad \text{mit } l = 0, 1, 2, \dots \quad (13.28)$$

Bemerkung 13.3 (Spin)

Um die Eigenspektren in (13.24) und (13.25) zu konstruieren, haben wir lediglich die Drehimpulsalgebra

$$[L_i, L_j] = i\hbar L_k \epsilon_{ijk} \quad (13.29)$$

benutzt. Im späteren Verlauf der Vorlesung werden wir sehen, dass es Observablen S_x, S_y und S_z gibt, die ebenfalls diese Drehimpulsalgebra erfüllen, die aber nicht als Bahndrehimpuls, sondern als *Spin* des Teilchens interpretiert werden.

Kapitel 14

Kugelflächenfunktionen

Im letzten Kapitel haben wir das Eigenwertspektrum mit einer algebraischen Lösungsmethode bestimmt. Im Folgenden werden wir die Ortsdarstellung $f_l^m(\theta, \phi)$ der Eigenvektoren $|f_l^m\rangle$ der Impulsoperatoren bestimmen, das heißt ein analytisches Lösungsverfahren in Form der Lösung einer Differentialgleichung verwenden. Dazu müssen wir die Operatoren L_x, L_y, L_z und L^2 als Differentialoperatoren darstellen.

Im Zusammenhang mit dem Drehimpuls in drei Dimensionen bietet sich eine Beschreibung in Kugelkoordinaten an. Diese Wahl ist sinnvoll, da sich herausstellen wird, dass die Eigenfunktionen nicht vom Radius, sondern nur von den beiden Winkeln θ, ϕ abhängen.

14.1 Ortsdarstellung der Impulsoperatoren

14.2 Gemeinsame Eigenfunktionen von L_z und L^2 .

14.1 Ortsdarstellung der Impulsoperatoren

Ortsdarstellung von $\mathbf{L} = (L_x, L_y, L_z)$

Betrachten wir die Wirkung von $\mathbf{L} = (L_x, L_y, L_z)$ in Ortsdarstellung. Sei $|\psi\rangle$ ein beliebiger Ket aus dem Hilbertraum \mathcal{H} , dann ist

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{L} | \psi \rangle = (\langle x | \langle y | \langle z |) \mathbf{L} | \psi \rangle = \langle x | \langle y | \langle z | \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} | \psi \rangle = -i\hbar (\mathbf{r} \times \nabla) \psi(\mathbf{r}) \quad (14.1)$$

mit $\hat{\mathbf{r}} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$, $\hat{\mathbf{p}} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)$, $\mathbf{r} = (x, y, z)$, wie man komponentenweise sieht. Um die Wirkung von \mathbf{L} in Kugelkoordinaten ausdrücken zu können, benötigen wir den Gradienten in Kugelkoordinaten:

$$\nabla = \hat{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \hat{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \hat{e}_\phi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (14.2)$$

Mit $\mathbf{r} = r \hat{e}_r$ ergibt sich

$$\mathbf{L} = -i\hbar \mathbf{r} \times \nabla = -i\hbar \left(\hat{e}_\phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \hat{e}_\theta \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad (14.3)$$

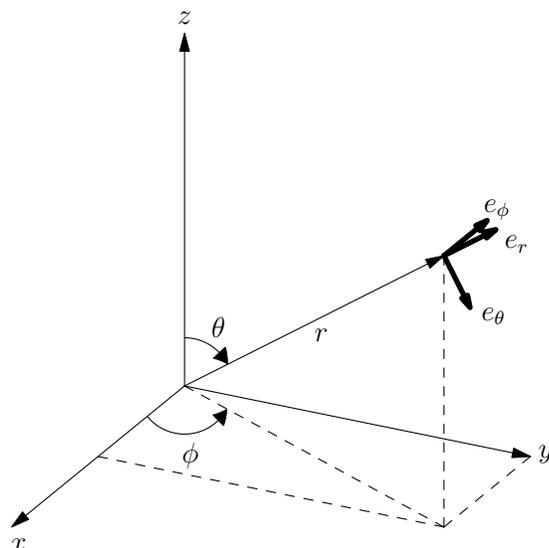


Abbildung 14.1: Kugelkoordinaten

Bemerkung 14.1

An der Darstellung (14.3) sieht man bereits, dass die Ortsdarstellungen der Lösungen der Eigenwertgleichungen (13.24) und (13.25) nicht von r abhängen müssen.

Nun haben wir in (14.3) die Ortsdarstellung des Impulsoperators \mathbf{L} in der Basis $\{\hat{e}_r, \hat{e}_\theta, \hat{e}_\phi\}$ bestimmt. Weil wir aber L_z und \mathbf{L}^2 benötigen, ist eine Darstellung in der kartesischen Basis $\{\hat{e}_x, \hat{e}_y, \hat{e}_z\}$ sinnvoll. Die Einheitsvektoren \hat{e}_θ und \hat{e}_ϕ haben in kartesischen Koordinaten die Darstellung (siehe Abb. 14.1)

$$\hat{e}_\theta = \cos\theta \cos\phi \hat{e}_x + \cos\theta \sin\phi \hat{e}_y - \sin\theta \hat{e}_z \quad (14.4)$$

$$\hat{e}_\phi = -\sin\phi \hat{e}_x + \cos\phi \hat{e}_y \quad (14.5)$$

Impulsoperatoren in
Kugelkoordinaten

Eine einfache Rechnung liefert

$$L_x = i\hbar \left(-\sin\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \cos\phi \cot\theta \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \quad (14.6)$$

$$L_y = -i\hbar \left(\cos\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \sin\phi \cot\theta \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \quad (14.7)$$

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\phi} \quad (14.8)$$

$$\mathbf{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right] \quad (14.9)$$

14.2 Gem. Eigenfunktionen von L_z und L^2

Differentialgleichungen in θ und ϕ als Eigenwertgleichungen

Um die simultanten Eigenfunktionen $f_l^m(\theta, \phi)$ von L_z und L^2 zu erhalten, müssen wir also die beiden partiellen Differentialgleichungen lösen

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} f_l^m(\theta, \phi) = \hbar m f_l^m(\theta, \phi) \quad (14.10)$$

$$-\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] f_l^m(\theta, \phi) = \hbar^2 l(l+1) f_l^m(\theta, \phi) \quad (14.11)$$

Nach Gleichung (14.10) müssen die Lösungen der Form $f_l^m(\theta, \phi) = g(\theta)e^{im\phi}$ sein.

Bemerkung 14.2 (Ganzzahlige m und l)

Später werden wir gemeinsame Eigenfunktionen von H und L^2 konstruieren, die 2π -periodisch in ϕ sein müssen. Deshalb werden wir auch hier nur ganzzahlige Werte für m und damit auch für l zulassen ($e^{im\phi} \stackrel{!}{=} e^{im(\phi+2\pi)}$ gilt nur für $m \in \mathbb{Z}$).

Setzen wir nun den Ansatz für $f_l^m(\theta, \phi)$ in die zweite Eigenwertgleichung (14.11) ein:

$$\sin \theta \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dg(\theta)}{d\theta} \right) + (l(l+1) \sin^2 \theta - m^2)g(\theta) = 0 \quad (14.12)$$

Eine Differentialgleichung dieser Form besitzt zwei Klassen von Lösungen. Wir interessieren uns hier nur für eine der beiden Klassen, da nur diese aus normierbaren Funktionen besteht (der andere Funktionstyp divergiert bei $x = 0$):

$$g(\theta) \propto P_l^m(\cos \theta) \quad (14.13)$$

Zugeordnetes Legendre-Polynom

Dabei ist P_l^m das zugeordnete Legendre-Polynom

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{|m|/2} \left(\frac{d}{dx} \right)^{|m|} P_l(x) \quad (14.14)$$

mit dem Legendre-Polynom $P_l(x)$.

Definition 14.1 (Legendre-Polynom).

Def.: Legendre-Polynom

Die Legendre-Polynome $P_l(x)$ sind Lösungen der legendreschen Differentialgleichung

$$\frac{d}{dx} [(1-x^2)f'(x)] + l(l+1)f(x) = 0 \quad (14.15)$$

Das l -te Legendre-Polynom hat den Grad l und rationale Koeffizienten. Nach der sog. Rodriguez-Formel können sie bestimmt werden durch

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l \quad (14.16)$$

Bemerkung 14.3 (Die ersten Legendre-Polynome)

Die ersten vier Legendre-Polynome sind

$$P_0(x) = 1 \quad (14.17)$$

$$P_1(x) = x \quad (14.18)$$

$$P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1) \quad (14.19)$$

$$P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x) \quad (14.20)$$

Gemeinsame
Eigenfunktionen
von L_z und L^2

Als Lösung der Eigenwertgleichungen (14.10) und (14.11) erhalten wir

$$f_l^m(\theta, \phi) = P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi} \quad (14.21)$$

Definition 14.2 (Kugelflächenfunktion).

Def.: Kugelflächen-
funktion

Als *Kugelflächenfunktion* bezeichnet man die auf der Oberfläche der Einheitskugel $\{(r, \theta, \phi) \in \mathbb{R}^+ \times [0, \pi] \times [0, 2\pi] \mid r = 1\}$ normierten Eigenfunktion $Y_l^m(\theta, \phi)$ der Drehimpulsoperatoren L_z und L^2 . Sie erfüllen also die Relation

$$\langle Y_l^m | Y_l^m \rangle = \int d\phi d\theta \sin \theta |Y_l^m(\theta, \phi)|^2 = 1 \quad (14.22)$$

Sie haben die Darstellung

$$Y_l^m(\theta, \phi) = s \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} e^{im\phi} P_l^m(\cos \theta) \quad (14.23)$$

$$\text{mit } s := \begin{cases} (-1)^m & \text{für } m \geq 0 \\ 1 & \text{für } m < 0 \end{cases}, \quad m = -l, -l+1, \dots, l \text{ und } l = 0, 1, 2, \dots$$

Beispiel 14.1

Beispiele für mögliche normierte Eigenfunktionen sind

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_1^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi} \quad (14.24)$$

Bemerkung 14.4 (Eigenschaften der Kugelflächenfunktionen)

Orthonormalität der Kugelflächenfunktionen

(i) **Orthonormalität:**

Da die $|Y_l^m\rangle$ normierte Eigenvektoren hermitescher Operatoren sind, gilt

$$\langle Y_l^m | Y_{l'}^{m'} \rangle = \int d\phi d\theta \sin \theta Y_l^m(\theta, \phi)^* Y_{l'}^{m'}(\theta, \phi) = \delta_{mm'} \delta_{ll'} \quad (14.25)$$

Denn es gibt eine Ortsbasis $\{|\theta, \phi\rangle\}$ mit

$$\int d\phi d\theta \sin \theta |\theta, \phi\rangle \langle \theta, \phi| = \mathbb{1} \quad (14.26)$$

Vollständigkeit der Kugelflächenfunktionen

(ii) **Vollständigkeit:**

Da die Eigenvektoren hermitescher Operatoren eine Basis bilden, gilt

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l |Y_l^m\rangle \langle Y_l^m| = \mathbb{1} \quad (14.27)$$

Das heißt, jede in ϕ 2π -periodische Funktion auf der Kugeloberfläche lässt sich entwickeln in

$$u(\theta, \phi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l c_{l,m} Y_l^m(\theta, \phi) \quad (14.28)$$

(iii) Aus der Vollständigkeit von $\{|Y_l^m\rangle\}$ folgt

$$\langle \theta, \phi | \theta', \phi' \rangle = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_l^m(\theta, \phi)^* Y_l^m(\theta', \phi') = \delta(\cos \theta' - \cos \theta) \delta(\phi' - \phi)$$

(in der Dirac-Distribution für θ steht $\cos \theta$, weil $d\theta \sin \theta = -d(\cos \theta)$.)

Visualisierung

Visualisierung der Kugelflächenfunktionen

Um die Eigenfunktionen der Impulsoperatoren darstellen zu können, betrachten wir nur reelle Superpositionen¹.

$$S_l^m = \frac{1}{\sqrt{2}}(Y_l^m + Y_l^{-m}) \quad (14.29)$$

$$S_l^0 = Y_l^0 \quad (14.30)$$

$$S_l^{-m} = \frac{1}{i\sqrt{2}}(Y_l^m - Y_l^{-m}) \quad (14.31)$$

Beispiele solcher Superpositionen sind

$$S_1^1 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \theta \cos \phi, \quad S_1^{-1} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \theta \sin \phi, \quad S_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$$

¹Hier findet man ein schönes Applet, mit dem man unter anderem die radialen Wellenfunktionen (Kugelflächenfunktionen) eines Wasserstoffatoms generieren kann. Eine weitere und sehr anschauliche Darstellung ist hier zu finden.

Kapitel 15

Radialgleichung

In diesem kurzen Kapitel werden wir sehen, wie aus der dreidimensionalen zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung in Kugelkoordinaten mithilfe von Symmetrieeigenschaften des Systems mit zentralsymmetrischem Potential eine eindimensionale Radialgleichung entwickelt werden kann, die die Struktur einer eindimensionalen Schrödinger-Gleichung mit einem effektiven Potential besitzt.

15.1
Zeitunabhängige
Schrödingergleichung in
Kugelkoordinaten

15.2 Anwendung
von Symmetrien

15.1 Zeitunabhängige Schrödingergleichung in Kugelkoordinaten

Wir betrachten die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung in Ortsdarstellung:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (15.1)$$

In Kugelkoordinaten hat der Laplace-Operator die Darstellung

$$\begin{aligned} \Delta &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \\ (14.9) \quad &\stackrel{=}{=} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\mathbf{L}^2}{\hbar^2 r^2} \end{aligned} \quad (15.2)$$

Da wir hier den Fall zentralsymmetrischer Potentiale $V = V(r)$ betrachten, hat die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung die Form

$$\left[\frac{1}{2mr^2} \left(-\hbar^2 \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \mathbf{L}^2 \right) + V(r) \right] \psi(r, \theta, \phi) = E\psi(r, \theta, \phi) \quad (15.3)$$

Zeitunabhängige
Schrödinger-
Gleichung in
Kugelkoordinaten
mit zentral-
symmetrischem
Potential

15.2 Anwendung von Symmetrien

Existenz einer
gemeinsamen
Eigenbasis von
 H, \mathbf{L}^2, L_z

Nun können wir verwenden, dass die Differentialoperatoren in \mathbf{L}^2 sich ausschließlich auf θ und ϕ beziehen, insgesamt $\mathbf{L}^2 \neq \mathbf{L}^2(r)$ gilt und V zentral-symmetrisch ist. Diese beiden Operatoren erfüllen deshalb die Vertauschungsrelationen

$$\boxed{[\mathbf{L}^2, V(r)] = 0, \quad [\mathbf{L}^2, \Delta] = 0} \quad (15.4)$$

Dasselbe gilt auch für L_z . Es muss also eine gemeinsame Eigenbasis von H, \mathbf{L}^2, L_z geben. Das heißt, wir können gleichzeitig die Energie, den Gesamtdrehimpuls und den Drehimpuls in z -Richtung eines physikalischen Zustands bestimmen.

Lösungsansatz

Die gemeinsamen Eigenfunktionen von \mathbf{L}^2 und L_z sind bereits bekannt, die Kugelflächenfunktionen $Y_l^m(\theta, \phi)$ aus (14.23). Wir können zur Lösung der Differentialgleichung (15.3) den allgemeinen Separationsansatz machen

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r) Y_l^m(\theta, \phi) \quad (15.5)$$

(Dies sind immer noch Eigenfunktionen von \mathbf{L}^2 und L_z , weil $R(r)$ unabhängig von θ, ϕ ist.)

Durch einsetzen in (15.3) sehen wir, dass $Y_l^m(\theta, \phi)$ herausfällt, die Gleichung also nur noch vom Radius abhängt:

$$\frac{1}{2mr^2} \left(-\hbar^2 \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \hbar^2 l(l+1) + V(r) \right) R(r) = E R(r) \quad (15.6)$$

Nun definieren wir

$$u(r) := r \cdot R(r) \Rightarrow \frac{dR}{dr} = -\frac{u}{r^2} + \frac{1}{r} \frac{du}{dr}, \quad \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) = r \frac{d^2 u}{dr^2} \quad (15.7)$$

Radialgleichung

Wir erhalten die *Radialgleichung*

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left(V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u(r) = E u(r)} \quad (15.8)$$

Dies ist eine eindimensionale Schrödinger-Gleichung für r mit $r \in [0, \infty)$ und effektivem Potential

$$V_{\text{eff}} = V(r) + \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2}}_{\text{Drehimpulsbarriere}} \quad (15.9)$$

Im nächsten Kapitel werden wir diese Gleichung für das in der Quantenmechanik wichtigste Beispiel eines Systems mit Zentralpotential, das Wasserstoffatom, lösen.

Kapitel 16

Wasserstoffatom

Das Wasserstoffatom ist das am einfachsten aufgebaute Atom und bietet daher den Schlüssel zum Verständnis des Aufbaus und der Eigenschaften aller Atome. Es ist das einzige Atom, für das die Schrödinger-Gleichung analytisch in geschlossener Form gelöst werden kann. Die Spektrallinien des Wasserstoffatoms sind mit hoher Genauigkeit berechenbar und können mit den gemessenen Werten verglichen werden. In der Tat war diese Vorhersage eine der wichtigsten theoretischen Ergebnisse in den frühen Jahren der Quantenmechanik.

Wie wir gesehen haben, kann die dreidimensionale Schrödinger-Gleichung im Falle eines zentralsymmetrischen Potentials in drei unabhängige Gleichungen separiert werden. Jede der drei Einzelgleichungen kann mathematisch exakt gelöst werden. Die ersten beiden ergaben die Kugelflächenfunktionen $Y_l^m(\theta, \phi)$. Um die Radialgleichung (15.8) für das Elektron des Wasserstoffatoms (wobei der Kern als unendlich schwer angenommen wird) zu lösen, betrachten wir das effektive Potential (vgl. Abb. 16.1)

Effektives Potential
für das
Wasserstoffatom

$$V_{\text{eff}}(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{2}{a_0 r} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \quad (16.1)$$

mit dem Bohrschen Radius $a_0 := \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = 0,529 \cdot 10^{-10} \text{m}$. Uns genügt es, hier nur die gebundenen Zustände, also jene mit $E < 0$ zu berechnen.

16.1 Asymptotische Analyse

16.2 Lösungsweg 1: Eigenspektrum

16.3 Lösungsweg 2: Eigenfunktionen

16.1 Asymptotische Analyse

Wir legen zunächst dimensionslose Längen fest:

$$\rho := \kappa r, \quad \text{mit } \kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}, \quad \rho_0 := \frac{2}{a_0\kappa} \quad (16.2)$$

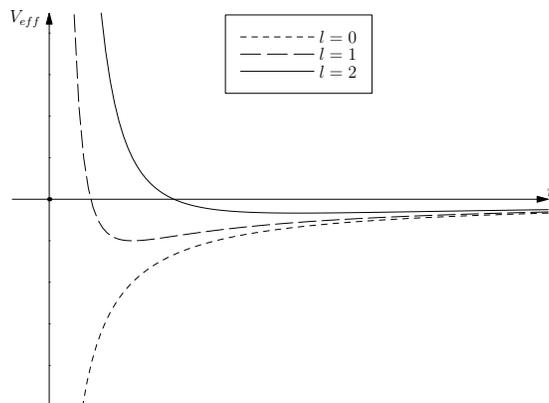


Abbildung 16.1: Effektives Potential für das Elektron des Wasserstoffatoms für verschiedene Drehimpulsquantenzahlen

Damit können wir die Radialgleichung (15.8) umschreiben:

$$-\frac{du^2}{dr^2} + \left(-\frac{2}{a_0 r} + \frac{l(l+1)}{r^2}\right) u(r) = \frac{2mE}{\hbar^2} u(r) \quad (16.3)$$

$$\Leftrightarrow \frac{1}{\kappa^2} \frac{d^2 u}{dr^2} = \left(1 - \frac{2}{a_0 \kappa} \frac{1}{r} + \frac{l(l+1)}{\kappa^2 r^2}\right) u(r) \quad (16.4)$$

$$\Leftrightarrow \frac{d^2 u}{d\rho^2} = \left(1 - \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right) u(\rho) \quad (16.5)$$

Asymptotisches Verhalten der Radialgleichung

Betrachten wir das asymptotische Verhalten dieser Gleichung:

$$(i) \quad \rho \rightarrow \infty: \quad \frac{d^2 u}{d\rho^2} = u(\rho) \quad \Rightarrow \quad u(\rho) = A e^{-\rho}$$

Die Lösung e^{ρ} kann nicht vorkommen, da sonst keine Normierbarkeit vorhanden ist.

$$(ii) \quad \rho \rightarrow 0: \quad \frac{d^2 u}{d\rho^2} = \frac{l(l+1)}{\rho^2} u(\rho) \quad \Rightarrow \quad u(\rho) = C \rho^{l+1}$$

$D\rho^{-l}$ wäre ebenfalls eine Lösung, aber für $\rho \rightarrow 0$ nicht mehr normierbar.

Separation des asymptotischen Verhaltens

Dieses asymptotische Verhalten wird erfüllt durch eine Funktion der Form

$$u(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho} v(\rho) \quad (16.6)$$

Nach Einsetzen in die Radialgleichung (16.5) und etwas aufwendigen Manipulationen ergibt sich als Differentialgleichung für $v(\rho)$:

$$\rho \frac{d^2 v}{d\rho^2} + 2(l+1-\rho) \frac{dv}{d\rho} + (\rho_0 - 2(l+1))v(\rho) = 0 \quad (16.7)$$

16.2 Lösungsweg 1: Eigenspektrum

Möchte man nicht explizit die Eigenfunktionen wissen, sondern genügt zunächst das Eigenspektrum, so ist der folgende dem allgemeinen Lösungsweg (mathematische Literatur) vorzuziehen.

Potenzreihenansatz Wir wählen einen Potenzreihenansatz für $v(\rho)$:

$$v(\rho) = \sum_{j=0}^{\infty} c_j \rho^j \quad (16.8)$$

Wobei wir keine negativen Potenzen j zulassen, damit die Funktion für $\rho \rightarrow 0$ normierbar bleibt. Setzen wir diesen Ansatz in die DGL (16.7) ein, so erhalten wir durch Koeffizientenvergleich eine rekursive Darstellung der Koeffizienten

$$c_{j+1} = \frac{2(j+l+1) - \rho_0}{(j+1)(j+2l+2)} c_j \quad (16.9)$$

Asymptotische
Analyse

An dieser Darstellung können wir ablesen, dass für große j gilt

$$c_{j+1} \approx \frac{2j}{j(j+1)} c_j \approx \frac{2}{j+1} c_j \Rightarrow c_j \approx \frac{2}{j} c_{j-1} \approx \frac{2^2}{j(j-1)} c_{j-2} \approx \dots \propto \frac{2^j}{j!}$$

Das heißt, wir erhalten für große j

$$v(\rho) \propto \sum_j \frac{2^j \rho^j}{j!} = e^{2\rho} \Rightarrow v(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} \infty \quad (16.10)$$

Somit wäre $v(\rho)$ mit der Näherung für große j nicht normierbar. Daraus können wir schließen, dass die Koeffizienten c_j für irgendein j_{max} verschwinden, damit v ein endliches Polynom ist. Wir erhalten somit aus (16.9) die Bedingung

$$2n := 2(j_{max} + l + 1) = \rho_0 \quad (16.11)$$

Und damit

$$2n = \frac{2}{a_0 \kappa} \Rightarrow E_n = -\frac{\hbar^2 \kappa_n^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2 n^2} \quad (16.12)$$

Energiespektrum
des
Wasserstoffatoms

Wir erhalten als *Energiespektrum des Wasserstoffatoms*

$$E_n = -\frac{E_B}{n^2} \quad (16.13)$$

mit *Hauptquantenzahl* $n = 1, 2, 3, \dots$

und *Bindungsenergie* $E_B = \frac{\hbar^2}{2ma_0^2} \approx 13,6 \text{ eV}$.

Bemerkung 16.1

- (i) Da wir $j_{max} + l + 1 =: n$ gesetzt haben, muss die Drehimpulsquantenzahl $l \in \{0, 1, 2, \dots, n-1\}$ sein.
- (ii) Das hier erhaltene Energiespektrum ist konsistent mit der Bohr-Sommerfeld-Quantisierungsregel (Übungsblatt 1):

$$\oint p_p dr = n_r \hbar, \quad \oint p_\phi d\phi = n_\phi \hbar, \quad \text{mit } n = n_r + n_\phi \quad (16.14)$$

- (iii) Das Energiespektrum des Wasserstoffatoms kann für wasserstoffähnliche Atome mit Kernladungszahl Z verallgemeinert werden:

$$E_n = -\frac{z^2 E_B}{n^2} \quad (16.15)$$

16.3 Lösungsweg 2: Eigenfunktionen

In der mathematischen Literatur finden wir für die Rekursionsformel (16.9) der Koeffizienten c_j mit $\rho_0 = 2n$ als Lösung für v :

$$v(\rho) = L_{n-l-1}^{2l+1}(2\rho) \quad (16.16)$$

mit dem zugeordneten *Laguerre-Polynom*

$$L_{q-p}^p(x) = (-1)^p \left(\frac{d}{dx}\right)^p L_q(x) \quad (16.17)$$

mit dem *Laguerre-Polynom* L_q aus Definition 16.1.

Definition 16.1 (Laguerre-Polynom).

Def.:
Laguerre-Polynom

Die *Laguerre-Polynome* L_q sind Lösungen der *Laguerreschen Differentialgleichung*

$$xy''(x) + (1-x)y'(x) + qy(x) = 0, \quad q = 0, 1, \dots \quad (16.18)$$

Das q -te *Laguerre-Polynom* lässt sich darstellen als

$$L_q(x) = e^x \left(\frac{d}{dx}\right)^q (e^{-x} x^q) \quad (16.19)$$

Sammeln wir die Definitionen zusammen:

$$u(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho} v(\rho), \quad \rho = \kappa r, \quad \kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \quad (16.20)$$

$$u(r) = r \cdot R(r), \quad a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = 0,529 \cdot 10^{-10} m \quad (16.21)$$

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r) Y_l^m(\theta, \phi) \quad (16.22)$$

Eigenfunktionen des Wasserstoffatoms

Schließlich erhalten wir als normierte Eigenfunktionen des Wasserstoffatoms

$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = \sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}}$	(Normierung)
$\cdot e^{-r/(na_0)}$	(asymptotischer Abfall)
$\cdot \left(\frac{2r}{na_0}\right)^l$	(Verhalten für kleine r)
$\cdot L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right)$	(Knoten im Radialanteil)
$\cdot Y_l^m(\theta, \phi)$	(Winkelabhängigkeit) (16.23)

mit den Quantenzahlen

$$n = 1, 2, \dots \quad (\text{Hauptquantenzahl}) \quad (16.24)$$

$$l = 0, 1, \dots, n-1 \quad (\text{Drehimpulsquantenzahl}) \quad (16.25)$$

$$m = -l, -l+1, \dots, l-1, l \quad (\text{magnetische Quantenzahl}) \quad (16.26)$$

Bemerkung 16.2

(i) In Ket- und Bra-Schreibweise notieren wir die Eigenzustände des Wasserstoffatoms mit $|n, l, m\rangle$ mit der Ortsdarstellung $\langle r, \theta, \phi | n, l, m \rangle =: \psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi)$.

(ii) Man nennt die Eigenfunktionen eines Elektrons auch *Orbitale*. Als Orbital wählt man den Aufenthaltsraum, in dem sich das Elektron mit ca. 90%-iger Wahrscheinlichkeit aufhält. Dadurch werden Räume definiert, die etwa der Größe der Atome entsprechen. Die Begrenzungsfläche eines solchen Orbitals ist die Fläche gleicher Wahrscheinlichkeit (Isofläche). Die verschiedenen Orbitale werden durch die Quantenzahlen klassifiziert¹:

- n : ...legt die Schale fest, in dem sich das Elektron aufhält, also das Hauptenergieniveau. Alle Lösungen mit gleicher Hauptquantenzahl besitzen die gleiche Energie, sind aber entartet bezüglich l und m .
- l : ...bestimmt die „Form“ des Orbitals, da es über $\hbar^2 l(l+1)$ (Eigenspektrum von \mathbf{L}^2) den Bahndrehimpuls festlegt. Die Orbitale mit $l = 0$ heißen *s-Orbital*, die (dreifache Entartung wegen $m = -1, 0, 1$) mit $l = 1$ heißen *p-Orbitale* und die (fünffache Entartung) Orbitale mit $l = 2$ bezeichnet man als *d-Orbitale*².

¹Oft schreibt man für ein Orbital einfach n, s oder n, p , etc..., wenn man nur das Grundniveau und die Drehimpulsquantenzahl angeben will.

²Dies kann man sich wieder [hiermit](#) sehr schön klar machen. Vergleiche außerdem Abb. 16.2

Orbitale

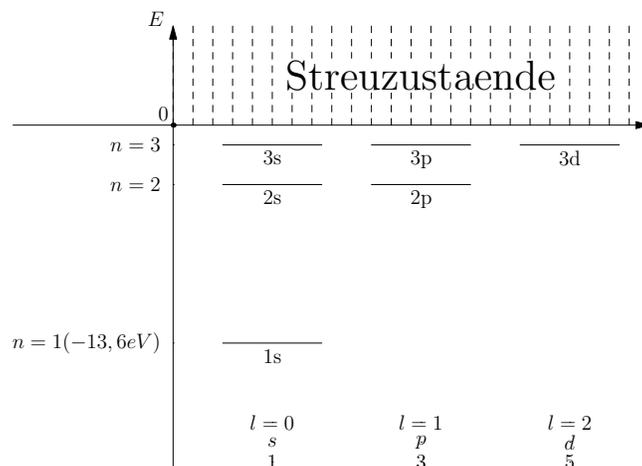


Abbildung 16.2: Orbitale des Wasserstoffatoms

- m : ...beschreibt die möglichen Orbitale pro Drehimpulsquantenzahl und legt über $L_z = \hbar m$ die einzelnen Komponenten des Drehimpulses fest. Später werden wir sehen, dass sie auch die räumliche Ausrichtung in einem äußeren Magnetfeld bestimmt, das in L_z -Richtung anliegt.
- (iii) Geht das Elektron von einem höheren zu einem niedrigeren Energieniveau über oder umgekehrt, so emittiert oder absorbiert das Atom Photonen. Die Übergänge sind dabei nach ihrem jeweiligen Entdecker benannt:

$$n_i, s \rightarrow n_f, s \quad (\text{Lyman-Reihe}) \quad (16.27)$$

$$n_i, p \rightarrow n_f, p \quad (\text{Balmer-Reihe}) \quad (16.28)$$

$$n_i, d \rightarrow n_f, d \quad (\text{Paschen-Reihe}) \quad (16.29)$$

Rydberg-Formel

Um die Wellenlänge des emittierten Lichts zu erhalten, müssen wir die Energiedifferenz $E_i - E_f = -13,6\text{eV} \cdot (1/n_i^2 - 1/n_f^2)$ mit der Energie eines Photons $E_\gamma = h\nu$ gleichsetzen und erhalten damit die sog. *Rydberg-Formel für Wasserstoff*

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right) \quad (16.30)$$

mit der Rydberg-Konstante $R = E_B/(\hbar c)$.

- (iv) Die radiale Wellenfunktion hat nur für die s -Orbitale keinen Knoten bei $r = 0$.

Kapitel 17

Drehimpuls und Drehgruppe

17.1 Wdh.: Drehungen in der klass. Mechanik

17.1 Wdh.:
Drehungen in der
klass. Mechanik

17.2 Drehungen in
der Quanten-
mechanik

Drehungen in der
klassischen
Mechanik

Wir wollen die wichtigsten, aus der klassischen Mechanik bekannten, Merkmale von Drehungen auflisten:

- (i) Eine Drehung \mathcal{R} in \mathbb{R}^3 erhält Winkelabstände und -Orientierung.
- (ii) Als Parametrisierung für eine Drehung $\mathcal{R}_{\mathbf{d}}$ um die Drehachse \mathbf{n} mit Drehwinkel α können wir beispielsweise wählen

$$\mathbf{d} = \alpha \mathbf{n} \tag{17.1}$$

- (iii) Drehungen bilden die nicht-abelsche Gruppe $SO(3)$. Die zugrundeliegende Menge sind alle reellen orthogonalen 3×3 -Matrizen \mathcal{R} mit $\det(\mathcal{R}) = 1$.

- (iv) Für infinitesimale Drehungen mit Drehwinkel $d\alpha$ gilt

$$\mathcal{R}\mathbf{r} = \mathbf{r} + d\alpha \mathbf{n} \times \mathbf{r} + O(d\alpha^2) \tag{17.2}$$

17.2 Drehungen in der Quantenmechanik

Separate
Betrachtung in der
QM

In der Quantenmechanik müssen wir separat betrachten, wie sich eine Drehung auf einen physikalischen Zustand $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ und auf die Observablen auswirkt.

17.2.1 Wirkung auf Zustände

Sei $\mathbf{r}' := \mathcal{R}\mathbf{r}$ ein gedrehter Ortsvektor im dreidimensionalen Raum. ψ' sei die gedrehte Wellenfunktion eines gedrehten Zustands $|\psi'\rangle \in \mathcal{H}$, sodass gilt

$$\langle \mathbf{r}' | \psi' \rangle = \psi'(\mathbf{r}') \stackrel{!}{=} \psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathcal{R}^{-1}\mathbf{r}') = \langle \mathcal{R}^{-1}\mathbf{r}' | \psi \rangle \quad (17.3)$$

Wir können hiermit einen *Rotationsoperator* R auf \mathcal{H} definieren:

Definition 17.1 (Rotationsoperator).

Def.:
Rotationsoperator

Ein gedrehter Ket $|\psi'\rangle \in \mathcal{H}$ soll aus dem ursprünglichen Zustand $|\psi\rangle$ durch $|\psi'\rangle = R|\psi\rangle$ hervorgehen, mit einem Rotationsoperator R , der über seine Ortsdarstellung $\langle \mathbf{r} | R | \psi \rangle$ definiert wird:

$$\langle \mathbf{r} | R | \psi \rangle = \langle \mathcal{R}^{-1}\mathbf{r} | \psi \rangle \quad (17.4)$$

Satz 17.1 (Eigenschaften des Rotationsoperators)

Linearität und
Unitarität von R

Ein Rotationsoperator R ist linear und unitär.

Beweis:

(i) Sei $|\psi\rangle = \lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle$, so ist

$$\langle \mathbf{r} | R | \psi \rangle = \langle \mathcal{R}^{-1}\mathbf{r} | \psi \rangle = \lambda_1 \langle \mathcal{R}^{-1}\mathbf{r} | \psi_1 \rangle + \lambda_2 \langle \mathcal{R}^{-1}\mathbf{r} | \psi_2 \rangle \quad (17.5)$$

$$= \lambda_1 \langle \mathbf{r} | R | \psi_1 \rangle + \lambda_2 \langle \mathbf{r} | R | \psi_2 \rangle \quad (17.6)$$

(ii) Für zwei verschiedene Elemente $|\mathbf{r}\rangle, |\mathbf{r}_0\rangle$ aus der Ortsbasis gilt

$$\langle \mathbf{r} | R | \mathbf{r}_0 \rangle = \langle \mathcal{R}^{-1}\mathbf{r} | \mathbf{r}_0 \rangle = \delta(\mathcal{R}^{-1}\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) = \delta(\mathcal{R}^{-1}(\mathbf{r} - \mathcal{R}\mathbf{r}_0)) \quad (17.7)$$

Da $\delta(Ax) = \frac{1}{\det A} \delta(x)$ (Transformationsatz) und $\det \mathcal{R} = 1$, ist

$$\langle \mathbf{r} | R | \mathbf{r}_0 \rangle = \frac{1}{\det(\mathcal{R}^{-1})} \delta(\mathbf{r} - \mathcal{R}\mathbf{r}_0) = \langle \mathbf{r} | \mathcal{R}\mathbf{r}_0 \rangle \quad (17.8)$$

Wir haben also für allgemeines $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3$: $R|\mathbf{r}\rangle = |\mathcal{R}\mathbf{r}\rangle$ und unmittelbar aus der Definition: $R^\dagger|\mathbf{r}\rangle = |\mathcal{R}^{-1}\mathbf{r}\rangle$. Daraus folgt

$$\langle \mathbf{r} | RR^\dagger | \mathbf{r}_0 \rangle = \langle \mathbf{r} | R | \mathcal{R}^{-1}\mathbf{r}_0 \rangle = \langle \mathbf{r} | \mathcal{R}\mathcal{R}^{-1}\mathbf{r}_0 \rangle = \langle \mathbf{r} | \mathbf{r}_0 \rangle \quad (17.9)$$

Dasselbe gilt für $R^\dagger R$ und damit: $RR^\dagger = R^\dagger R = \mathbf{1}$. □

Bemerkung 17.1

Da R unitär ist, erhält R das Skalarprodukt, das heißt, das Skalarprodukt zweier gedrehter Vektoren ist dasselbe wie das der ursprünglichen. Somit sind Wahrscheinlichkeitsamplituden unabhängig von Drehungen.

Satz 17.2 (Drehgruppe)

SO(3)-Gruppen-
darstellung

Der Rotationsoperator R ist eine Darstellung der Drehgruppe $SO(3)$ auf \mathcal{H} .

Beweis: Wir wollen nur die Abgeschlossenheit bezüglich Komposition zeigen: Seien R_1, R_2 Rotationsoperatoren. Dann ist

$$R_2 R_1 |\mathbf{r}\rangle = R_2 |\mathcal{R}_1 \mathbf{r}\rangle = |\mathcal{R}_2 \mathcal{R}_1 \mathbf{r}\rangle =: |\mathcal{R}_3 \mathbf{r}\rangle = R_3 |\mathbf{r}\rangle \quad (17.10) \quad \square$$

Satz 17.3 (Explizite Darstellung von R)

Der Rotationsoperator für eine infinitesimale Drehung um $d\alpha$ um eine beliebige Achse \mathbf{n} hat die Darstellung

$$R_{d\alpha \mathbf{n}} = 1 - \frac{i}{\hbar} d\alpha \mathbf{n} \cdot \mathbf{L} + \mathcal{O}(d\alpha^2) \quad (17.11)$$

Eine endliche Drehung um den Winkel α um eine beliebige Achse \mathbf{n} lässt sich darstellen als

$$R_{\alpha \mathbf{n}} = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \mathbf{n} \cdot \mathbf{L}} \quad (17.12)$$

Beweis:

- (i) Wir betrachten eine infinitesimale Drehung um die z -Achse, $\mathbf{d} = d\alpha \mathbf{n}$. Für die Rückdrehung eines gedrehten Vektors \mathbf{r} gilt:

$$\mathcal{R}_d^{-1} \mathbf{r} = \mathcal{R}_{-\mathbf{d}} \mathbf{r} = \mathbf{r} - d\alpha \mathbf{e}_z \times \mathbf{r} = (x + y d\alpha, y - x d\alpha, z) \quad (17.13)$$

Somit

$$\psi'(\mathbf{r}) = \psi(\mathcal{R}_d^{-1} \mathbf{r}) = \psi(x + y d\alpha, y - x d\alpha, z) \quad (17.14)$$

$$= \psi(x, y, z) - d\alpha \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x, y, z) \quad (17.15)$$

$$= \psi(x, y, z) \left[1 - \frac{i}{\hbar} d\alpha L_z \right] \quad (17.16)$$

$$\langle \mathbf{r} | \psi' \rangle = \langle \mathbf{r} | 1 - \frac{i}{\hbar} d\alpha L_z | \psi \rangle = \langle \mathbf{r} | R_d | \psi \rangle \quad (17.17)$$

Die Verallgemeinerung für Drehungen um beliebige Achsen ist offensichtlich.

- (ii) Für eine endliche Drehung um die z -Achse gilt:

$$R_{(\alpha+d\alpha)\mathbf{e}_z} = R_{\alpha\mathbf{e}_z} R_{d\alpha\mathbf{e}_z} = R_{\alpha\mathbf{e}_z} \left(1 - \frac{i}{\hbar} d\alpha L_z \right) \quad (17.18)$$

Dann ergibt sich für die Differenz

$$R_{(\alpha+d\alpha)\mathbf{e}_z} - R_{\alpha\mathbf{e}_z} = dR_{\alpha\mathbf{e}_z} = -\frac{i}{\hbar} R_{\alpha\mathbf{e}_z} L_z d\alpha \quad (17.19)$$

$$\frac{dR_{\alpha\mathbf{e}_z}}{d\alpha} = -\frac{i}{\hbar} R_{\alpha\mathbf{e}_z} L_z \quad (17.20)$$

Lösung dieser Differentialgleichung ist

$$R_{\alpha\mathbf{e}_z} = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha L_z} \quad (17.21)$$

Allgemein gilt obiger Ausdruck. \square

Explizite
Darstellung des
Rotationsoperators

Bemerkung 17.2

Die Unitarität von R in dieser Darstellung folgt aus der Hermitizität von L :

$$R_{\alpha n} R_{\alpha n}^\dagger = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha n \cdot L} e^{\frac{i}{\hbar} \alpha n \cdot L} = \mathbb{1} \quad (17.22)$$

Zur Erinnerung: Die Funktionalgleichung der Exponentialfunktion mit Operatoren im Argument gilt nur, wenn diese vertauschbar sind. Das bedeutet für die Darstellung des Rotationsoperators:

$$R_{\alpha n} \neq e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha n_x L_x} e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha n_y L_y} e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha n_z L_z} \quad (17.23)$$

17.2.2 Wirkung auf Observablen

Nun wollen wir wissen, wie eine Observable A in einem gedrehten System aussieht, also wie sie transformiert werden muss, damit sie ihre ursprüngliche Wirkung auf die gedrehten Operatoren beibehält.

Satz 17.4 (Wirkung einer Drehung auf Observablen)

Unter der Wirkung eines Rotationsoperators R transformiert eine Observable A zu

$$A' = R A R^\dagger \quad (17.24)$$

Beweis: Für einen Zustand $|\psi'\rangle = R|\psi\rangle$ soll für die transformierte Observable A' gelten: $A'|\psi'\rangle = R(A|\psi\rangle)$. Damit ergibt sich

$$A' R|\psi\rangle = A'|\psi'\rangle = R A|\psi\rangle \Leftrightarrow R^\dagger A' R|\psi\rangle = A|\psi\rangle \Leftrightarrow A' = R A R^\dagger \quad \square$$

Definition 17.2 (Skalare Observable).

Eine Observable A heißt skalar, wenn für alle Drehungen gilt

$$A' = A \quad (17.25)$$

(Dies ist äquivalent mit $[A, R] = 0$, und damit für $[A, \mathbf{L}] = 0$.)

Beispiel 17.1

Der Hamiltonoperator des Wasserstoffatoms

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) = \frac{1}{2mr^2} \left(-\hbar^2 \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \mathbf{L}^2 \right) + V(r) \quad (17.26)$$

vertauscht mit \mathbf{L} (besteht ausschließlich aus Differentialoperatoren bezüglich Winkeln), ist also ein skalarer Operator.

Transformation der Observablen unter Drehungen

Def.: Skalare Observable

Translationsgruppe

Bemerkung 17.3 (Translationsgruppe)

Für Translationen im dreidimensionalen Raum erhält man eine zu den Drehungen analoge Konstruktion: Der Translationsoperator für eine Verschiebung um \mathbf{a} ist gegeben durch

$$T_{\mathbf{a}} = e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{a} \cdot \mathbf{p}} \quad (17.27)$$

Beweis: Sei $\mathbf{r}' := \mathcal{T}_{\mathbf{a}} \mathbf{r} = \mathbf{r} + \mathbf{a}$. Dann soll für die Wellenfunktion des Zustands $|\psi'\rangle := T_{\mathbf{a}} |\psi\rangle$ gelten: $\psi(\mathbf{r}) = \psi'(\mathbf{r}')$ und damit

$$\psi(\mathbf{r}' - \mathbf{a}) = \langle \mathbf{r}' - \mathbf{a} | \psi \rangle = \langle \mathcal{T}_{\mathbf{a}}^{-1} \mathbf{r}' | \psi \rangle = \langle \mathbf{r}' | T_{\mathbf{a}} | \psi \rangle \quad (17.28)$$

$$= \left[\langle \psi | T_{\mathbf{a}}^\dagger | \mathbf{r}' \rangle \right]^\dagger = \left[\langle \psi | e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{a} \cdot \mathbf{p}} | \mathbf{r}' \rangle \right]^\dagger \quad (17.29)$$

$$= \left[\int d^3 p_0 \langle \psi | \mathbf{p}_0 \rangle \langle \mathbf{p}_0 | e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{a} \cdot \mathbf{p}} | \mathbf{r}' \rangle \right]^\dagger \quad (17.30)$$

$$= \left[\int d^3 p_0 \langle \psi | \mathbf{p}_0 \rangle e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{a} \cdot \mathbf{p}_0} \langle \mathbf{p}_0 | \mathbf{r}' \rangle \right]^\dagger \quad (17.31)$$

$$= \left[\int d^3 p_0 \langle \psi | \mathbf{p}_0 \rangle e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{a} \cdot \mathbf{p}_0} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{r}'} \right]^\dagger \quad (17.32)$$

$$= \left[\int d^3 p_0 \langle \psi | \mathbf{p}_0 \rangle \langle \mathbf{p}_0 | \mathbf{r}' - \mathbf{a} \rangle \right]^\dagger \quad (17.33)$$

$$= \langle \mathbf{r}' - \mathbf{a} | \psi \rangle = \psi(\mathbf{r}' - \mathbf{a}) \quad (17.34)$$

□

Kapitel 18

Spin

Notwendigkeit eines
„inneren
Drehimpulses“

Erinnern wir uns zurück an das in Abschnitt 1.5 eingeführte Stern-Gerlach-Experiment. Eine Messung des magnetischen Moments von Silberatomen in einer Raumrichtung durch ein inhomogenes Magnetfeld ergab eine Quantisierung der Messergebnisse: Nur zwei diskrete Werte sind aufgetreten. Alle bis auf ein Elektron (das 5s Elektron) des Silberatoms kompensieren ihre Wirkung auf das magnetische Moment gegenseitig. Dieses einzelne Elektron bewirkt also die magnetischen Eigenschaften des ganzen Atoms. Da es aber im s-Orbital sitzt, ist $l = 0$, also kein Bahndrehimpuls vorhanden. Um das vorhandene magnetische Moment erklären zu können, muss man annehmen, es gäbe einen „inneren Drehimpuls“, den sogenannten *Spin* des Teilchens, der ebenfalls mit dem magnetischen Moment verknüpft ist.

18.1 Der
Spinzustandsraum

18.2 Spin-1/2
Teilchen

18.3 Spin-1
Teilchen

18.4 Messungen
und Dynamik der
Spinfreiheitsgrade

18.1 Der Spinzustandsraum

Orbitalraum

Spinzustandsraum

Bisher haben wir die Quantisierung von Observablen betrachtet, die klassischen Größen entsprechen, d.h. Observablen, die Funktionen von Ort \mathbf{r} und Impuls \mathbf{p} sind. Diese Operatoren leben auf dem Zustandsraum \mathcal{H} , der in Ortsdarstellung dem Raum der quadratintegrierbaren Wellenfunktionen im \mathbb{R}^3 entspricht. Im Folgenden werden wir diesen Raum mit \mathcal{H}_o bezeichnen und *Orbitalraum* nennen. Dieser Raum muss verallgemeinert, beziehungsweise ergänzt, werden durch einen sogenannten *Spinzustandsraum* \mathcal{H}_s , auf welchem Spinoperatoren definiert werden, die keine klassische Interpretation finden.

Postulat

- (i) Teilchen haben einen zusätzlichen („inneren“) Zustandsraum \mathcal{H}_s für ihren Spinfreiheitsgrad. Der Gesamthilbertraum des Teilchens ist dann das Tensorprodukt des Orbitalraums \mathcal{H}_o mit \mathcal{H}_s :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_o \otimes \mathcal{H}_s \quad (18.1)$$

- (ii) Der Spinoperator $\mathbf{S} := (S_x, S_y, S_z)$ erfüllt die Drehimpulsalgebra

$$[S_i, S_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}S_k \quad (18.2)$$

Daraus folgt (analog zur Beschreibung des Drehimpulses \mathbf{L}), dass \mathbf{S}^2 mit den $S_i, i \in \{x, y, z\}$ vertauscht und $\{\mathbf{S}^2, S_z\}$ ein vollständiger Satz kommutierender Observablen bildet. \mathcal{H}_s wird deshalb durch die Eigenzustände $|s, m\rangle$ aufgespannt, die den Eigenwertgleichungen

$$\mathbf{S}^2|s, m\rangle = \hbar^2 s(s+1)|s, m\rangle \quad (18.3)$$

$$S_z|s, m\rangle = \hbar m|s, m\rangle \quad (18.4)$$

genügen. Die Quantenzahlen m, s sind dabei nicht der Beschränkung unterworfen nur ganzzahlig zu sein:

$$s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots, \quad m = -s, -s+1, \dots, s-1, s \quad (18.5)$$

- (iii) Ein Teilchen wird charakterisiert durch die Festlegung seines Spins s . Der Spinzustandsraum \mathcal{H}_s des Teilchens hat somit $(2s+1)$ Dimensionen:

$$\mathcal{H}_s = \mathbb{C}^{2s+1} \quad (18.6)$$

(Es ist $\dim \mathcal{H}_s = 2s+1$, da es für einen Eigenwert $\hbar^2 s(s+1)$ von \mathbf{S}^2 $(2s+1)$ mögliche Eigenzustände $|s, m\rangle$ gibt, die den Raum \mathcal{H}_s aufspannen.)

- (iv) Der Zusammenhang zwischen dem magnetischen Moment $\boldsymbol{\mu}$ und dem Spinoperator \mathbf{S} ist gegeben durch

$$\boldsymbol{\mu} = \gamma \mathbf{S} \quad (18.7)$$

(Mit dem gyromagnetischen Verhältnis γ , das für jede Teilchenart charakteristisch ist.)

Bemerkung 18.1

Da $\mathcal{H} = \mathcal{H}_o \otimes \mathcal{H}_s$, kommutieren alle Orbitaloperatoren mit allen Spinoperatoren. Das heißt, es genügt im Allgemeinen nicht, einen Teilchenzustand nur durch einen Ket aus \mathcal{H}_o zu charakterisieren. Um einen vollständigen Satz kompatibler Observablen in \mathcal{H} zu erhalten, benötigt man immer einen vollständigen Satz aus \mathcal{H}_o und einen vollständigen Satz aus \mathcal{H}_s .

Beispiel 18.1

Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$ sind beispielsweise das Elektron, das Proton und das Neutron, Spin-0 Teilchen können π -Mesonen, Spin-1 Teilchen ρ^+ -Mesonen sein.

Satz 18.1 (Verhalten unter Drehungen)Drehungen in \mathcal{H}

Soll ein Zustand aus \mathcal{H} mit $\mathbf{d} = \alpha \mathbf{n}$ gedreht werden, so hat der Rotationsoperator die Darstellung

$$R_{\mathbf{d}} = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \mathbf{n} \cdot \mathbf{L}} \otimes e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \mathbf{n} \cdot \mathbf{S}} \quad (18.8)$$

Bemerkung 18.2

Das bedeutet, für $|\psi\rangle := |\phi\rangle \otimes |\chi\rangle$ mit $|\phi\rangle \in \mathcal{H}_o$, $|\chi\rangle \in \mathcal{H}_s$ ist

$$R_{\mathbf{d}}|\psi\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \mathbf{n} \cdot \mathbf{L}}|\phi\rangle \otimes e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \mathbf{n} \cdot \mathbf{S}}|\chi\rangle \quad (18.9)$$

18.2 Spin-1/2 Teilchen

Wichtiges Beispiel:

$$s = \frac{1}{2}$$

18.2.1 Basis im Spin-1/2-Zustandsraum

Der Raum $\mathcal{H}_{s=1/2}$ ist zweidimensional. Es gibt also eine Eigenbasis $\{|\chi_+\rangle, |\chi_-\rangle\}$, sodass jeder Zustand $|\chi\rangle$ aus $\mathcal{H}_{s=1/2} = \mathbb{C}^2$ zerlegt werden kann in

$$|\chi\rangle = a|\chi_+\rangle + b|\chi_-\rangle \quad \text{mit } a, b \in \mathbb{C} \quad (18.10)$$

Die Basenelemente sind Eigenzustände von S_z für die Eigenwerte $m = -\frac{1}{2}$ und $m = \frac{1}{2}$:

$$S_z|\chi_+\rangle = \frac{\hbar}{2}|\chi_+\rangle, \quad S_z|\chi_-\rangle = -\frac{\hbar}{2}|\chi_-\rangle \quad (18.11)$$

Satz 18.2 (Pauli-Matrizen)

Darstellung des Spinoperators im Spin-1/2-Zustandsraum

In $\mathcal{H}_{s=1/2} = \mathbb{C}^2$ kann der Spinoperator \mathbf{S} dargestellt werden als

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}, \quad \boldsymbol{\sigma} := (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z) \quad (18.12)$$

mit den Paulimatrizen

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (18.13)$$

Beweis: Die Pauli-Matrizen erfüllen die Vertauschungsrelation $[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k$. Somit ist die Drehimpulsalgebra (18.2) mit obigem Ausdruck für die Spinoperatoren erfüllt. Außerdem ist $\sigma_i^2 = 1$, womit $\mathbf{S}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2$. Damit ist die Eigenwertgleichung $\mathbf{S}^2|\chi\rangle = \hbar^2 s(s+1)|\chi\rangle$ für alle $|\chi\rangle \in \mathbb{C}^2$ erfüllt¹. \square

18.2.2 Spinor

Die Wahl eines vollst. Satzes komp. Observablen in \mathcal{H}

Wir erhalten eine eindeutige Basis im Gesamtzustandsraum $\mathcal{H} = \mathcal{H}_o \otimes \mathcal{H}_{1/2}$, wenn wir die Eigenfunktionen eines vollständigen Satzes kompatibler Observablen in \mathcal{H} betrachten. Dieser entsteht aus der Vereinigung eines vollständigen Satzes aus \mathcal{H}_o (z.B. $\{\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}\}$ oder $\{H, \mathbf{L}^2, L_z\}$ mit $H \neq H(r)$) und eines vollständigen Satzes aus $\mathcal{H}_{1/2}$ (z.B. $\{\mathbf{S}^2, S_z\}$). Wir wählen hier

$$\{\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}, \mathbf{S}^2, S_z\} \quad (18.14)$$

als eine solche Menge. Wir kennen die gemeinsamen Basen in beiden Räumen:

$$\{|x\rangle \otimes |y\rangle \otimes |z\rangle := |\mathbf{r}\rangle, \mathbf{r} \in \mathbb{R}^3\} \text{ und } \{|\chi_+\rangle, |\chi_-\rangle\} \quad (18.15)$$

Basis in \mathcal{H}

Die gemeinsame Eigenbasis des gesamten vollständigen Satzes besteht dann aus den Elementen $|\mathbf{r}, \pm\rangle$, welche Tensorprodukte der Elemente der beiden einzelnen Basen sind²:

$$|\mathbf{r}, \pm\rangle := |\mathbf{r}\rangle \otimes |\chi_\pm\rangle \quad (18.16)$$

Ein beliebiger Zustand $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ kann zerlegt werden in

$$|\psi\rangle = \int |\mathbf{r}, +\rangle \langle \mathbf{r}, + | \psi \rangle + |\mathbf{r}, -\rangle \langle \mathbf{r}, - | \psi \rangle d^3r \quad (18.17)$$

Spinor

Die Komponenten $\langle \mathbf{r}, \pm | \psi \rangle$ von $|\psi\rangle$ bezüglich dieser Basis können in zwei Funktionen zusammengefasst werden, die wiederum in einen zwei-komponentigen Vektor (in diesem Zusammenhang spricht man von *Spinor*) geschrieben werden können:

$$\langle \mathbf{r}, \pm | \psi \rangle = \begin{pmatrix} \langle \mathbf{r}, + | \psi \rangle \\ \langle \mathbf{r}, - | \psi \rangle \end{pmatrix} \quad (18.18)$$

¹Man kann auch einen direkten Beweis durch Ausrechnen der Matrizelemente $\langle \chi_i | \mathbf{S} | \chi_j \rangle$ mit $i, j \in \{+, -\}$ führen, womit man mithilfe der Leiteroperatoren $S_\pm = S_x \pm iS_y$ die Pauli-Matrizen direkt erhält.

²Beispielsweise ist $S_z|\mathbf{r}, +\rangle = |\mathbf{r}\rangle \otimes S_z|\chi_+\rangle = \frac{\hbar}{2}|\mathbf{r}, +\rangle$ oder $\hat{x}|\mathbf{r}, \pm\rangle = x|\mathbf{r}, \pm\rangle$.

18.2.3 Rotationen in $\mathcal{H}_{1/2}$

Satz 18.3 (Rotationsoperator in $\mathcal{H}_{1/2}$)

Der Rotationsoperator im Spin-1/2-Zustandsraum hat die Darstellung

$$R_{\alpha \mathbf{n}} = \cos \frac{\alpha}{2} - i(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \sin \frac{\alpha}{2} \quad (18.19)$$

Beweis: Der Spinoperator in $\mathcal{H}_{1/2}$ hat die Darstellung

$$\begin{aligned} R_{\alpha \mathbf{n}}^s &= e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \mathbf{n} \cdot \mathbf{S}} = e^{-i \frac{\alpha}{2} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(-i \frac{\alpha}{2}\right)^k (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})^k \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k)!} \left(-i \frac{\alpha}{2}\right)^{2k} (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})^{2k} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k+1)!} \left(-i \frac{\alpha}{2}\right)^{2k+1} (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})^{2k+1} \end{aligned}$$

Mit $(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})^2 = \mathbf{n}^2 = 1$ ergibt sich obiger Ausdruck. \square

Bemerkung 18.3

Zu beachten ist dabei, dass eine Drehung um 2π den Rotationsoperator

$$e^{-\frac{i}{\hbar} 2\pi \mathbf{n} \cdot \mathbf{S}} = -1 \quad (18.20)$$

ergibt. Das heißt, ein Zustand ändert sein Vorzeichen bei ganzer Umdrehung, also erst nach zweimaliger Umdrehung ist der Zustand wieder derselbe. Da dieses Verhalten sich nur auf die globale Phase auswirkt, hat es keine physikalische Bedeutung.

18.3 Spin-1 Teilchen

Beispiel: $s = 1$

In $\mathcal{H}_{s=1}$ sieht die Darstellung des Spinoperators bezüglich der Eigenbasis wie folgt aus:

$$\mathbf{S} = \hbar \mathbf{J} \quad (18.21)$$

$$\text{mit } J_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad J_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Damit ist $\mathbf{S}^2 = \hbar^2 s(s+1) = 2\hbar^2$ erfüllt.

18.4 Messungen und Dynamik der Spinfreiheitsgrade

Im Folgenden werden wir Beispiele von endlichdimensionalen Zustandsräumen betrachten, wie wir sie in Teil I behandelt haben.

18.4.1 Larmor Präzession

Beispiel: Spin-1/2
Teilchen im
Magnetfeld

Wir betrachten ein ruhendes Spin-1/2 Teilchen in einem Magnetfeld B in z -Richtung. Nach (18.7) ist der Operator für das magnetische Moment $\boldsymbol{\mu}$ des Teilchens gegeben durch $\boldsymbol{\mu} = \gamma \mathbf{S}$. Die potentielle Energie eines magnetischen Dipols im äußeren Magnetfeld ist $-\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$. Damit erhalten wir den Hamiltonoperator des Teilchens:

$$H = -\gamma B S_z = -\frac{\gamma B \hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (18.22)$$

Die Energieeigenzustände sind damit die Spin-1/2-Eigenzustände $|\chi_+\rangle$ und $|\chi_-\rangle$ mit den Eigenwerten $E_{\pm} = \mp \frac{\gamma B \hbar}{2}$. Es gibt komplexe Zahlen a, b , womit die Zeitentwicklung eines beliebigen Zustands dargestellt werden kann als

$$|\chi(t)\rangle = e^{-iE_+t/\hbar} a |\chi_+\rangle + e^{-iE_-t/\hbar} b |\chi_-\rangle = \begin{pmatrix} e^{-iE_+t/\hbar} a \\ e^{-iE_-t/\hbar} b \end{pmatrix} \quad (18.23)$$

Zeitabhängige
Spin Erwartungs-
werte

Der Erwartungswert von S_x ist zeitabhängig:

$$\begin{aligned} \overline{S}_x(t) &= \langle \chi(t) | S_x | \chi(t) \rangle = \begin{pmatrix} a e^{-i\gamma B t/2} & b e^{i\gamma B t/2} \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a e^{i\gamma B t/2} \\ b e^{-i\gamma B t/2} \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{2} ab (e^{-i\gamma B t} + e^{i\gamma B t}) = \hbar ab \cos(\gamma B t) \end{aligned} \quad (18.24)$$

Analog ergibt sich für $\overline{S}_y(t)$ und \overline{S}_z :

$$\overline{S}_y(t) = -\hbar ab \sin(\gamma B t) \quad (18.25)$$

$$\overline{S}_z = \frac{\hbar}{2}(a^2 - b^2) \quad (18.26)$$

Larmor-Frequenz

Die Frequenz γB , mit der \overline{S}_x und \overline{S}_y oszillieren, heißt *Larmor-Frequenz* (vgl. Abb. 18.1).

Bemerkung 18.4

Hier ist zu beachten, dass nur die Erwartungswerte der Spinoperatoren oszillieren, nicht aber die Messwerte selbst. Zum Beispiel ist $S_x^2 = \frac{\hbar^2}{4} \sigma_x^2 = \frac{\hbar^2}{4}$.

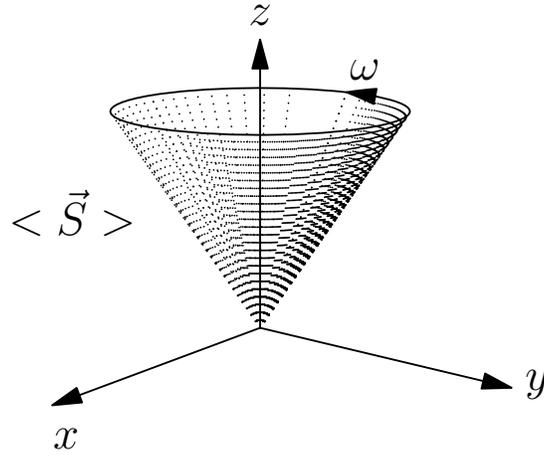


Abbildung 18.1: Larmor-Präzession der Spinwertungswerte

18.4.2 Stern-Gerlach-Experiment

Wir betrachten nun erneut das in Abschnitt 1.5 eingeführte Stern-Gerlach-Experiment mit einem inhomogenen Magnetfeld in z -Richtung und wollen mit einem vereinfachten Modell die Zeitentwicklung eines Spin-1/2 Teilchens (Silberatom bzw. das Elektron, das die Dipoleigenschaften verursacht) berechnen. Dazu betrachten wir den Versuch aus dem Inertialsystem, das sich mit dem Atomstrahl bewegt. Deshalb müssen wir das Problem mit einem zeitabhängigen Hamiltonoperator beschreiben:

$$H(t) = \begin{cases} 0 & \text{für } t < 0 \\ -\gamma B(z)S_z & \text{für } 0 \leq t \leq T \\ 0 & \text{für } t > T \end{cases} \quad (18.27)$$

Dabei sei T die Zeit, während das Teilchen vom Magnetfeld beeinflusst wird und $B(z) \approx B_0 + \alpha z$. Vor dem Eintritt ins Magnetfeld sei das Spin-1/2 Teilchen im Anfangszustand

$$|\chi(t)\rangle = a|\chi_+\rangle + b|\chi_-\rangle, \quad t < 0 \quad (18.28)$$

Im Magnetfeld wirkt der Hamiltonoperator auf die übliche Art und Weise:

$$|\chi(t)\rangle = ae^{-iE_+t/\hbar}|\chi_+\rangle + be^{-iE_-t/\hbar}|\chi_-\rangle, \quad 0 \leq t \leq T \quad (18.29)$$

mit $E_{\pm} = \mp\gamma B(z)\frac{\hbar}{2}$. Danach, also für $t > T$, finden wir

$$\begin{aligned} |\chi(t)\rangle &= ae^{i\gamma TB(z)/2}|\chi_+\rangle + be^{-i\gamma TB(z)/2}|\chi_-\rangle \\ &= \underbrace{e^{i\gamma T\alpha z/2} a e^{i\gamma TB_0/2}}_{up} |\chi_+\rangle + \underbrace{e^{-i\gamma T\alpha z/2} b e^{-i\gamma TB_0/2}}_{down} |\chi_-\rangle \end{aligned}$$

Wirkung des
Magnetfelds auf
den Spin-1/2
Atomstrahl

Aufspaltung in zwei
Strahlen

Dieser Zustand besteht nun aus zwei Teilen, die beide einen Impuls in z -Richtung besitzen. Wirkt der Impulsoperator in Ortsdarstellung $p_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}$ auf diesen Zustand, so ergibt sich für den mit up bezeichneten Teil ein Impulseigenwert $p_z = \frac{\alpha\gamma T\hbar}{2}$ und für den anderen ($down$) einen negativen Impuls $p_z = -\frac{\alpha\gamma T\hbar}{2}$:

$$p_z \langle \chi_{\pm} | \chi(t) \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \begin{pmatrix} up \\ down \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha\gamma T\hbar/2 \\ -\alpha\gamma T\hbar/2 \end{pmatrix} \quad (18.30)$$

Bemerkung 18.5 (Klassische Interpretation)

Auch klassisch erhält man diese Werte für den Impuls. Die Kraft durch das Magnetfeld auf ein Teilchen mit $s = \hbar/2$ ist

$$\mathbf{F} = \nabla(\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}) = \nabla \left[\gamma \frac{\hbar}{2} (B_0 + \alpha z) \mathbf{e}_z \right] = \gamma \frac{\hbar}{2} \alpha \mathbf{e}_z \quad (18.31)$$

Diese Kraft wirkt während der Zeit T , wobei das Feld den Impuls p_z überträgt:

$$p_z = F_z T = \frac{\alpha\gamma\hbar T}{2} \quad (18.32)$$

Kapitel 19

Addition von Drehimpulsen

Drehimpulsoperatoren in zwei versch. Systemen

Gegeben seien zwei Quantensysteme \mathcal{H}_1 und \mathcal{H}_2 mit Drehimpulsoperatoren \mathbf{J}_1 und \mathbf{J}_2 , die der Drehimpulsalgebra

$$\begin{aligned}[J_{1i}, J_{1j}] &= i\hbar\epsilon_{ijk}J_{1k} \\ [J_{2i}, J_{2j}] &= i\hbar\epsilon_{ijk}J_{2k}\end{aligned}$$

genügen. In jedem System sei eine vollständige Basis aus gemeinsamen Eigenvektoren von \mathbf{J}_i^2 und J_{iz} bekannt:

$$\begin{aligned}\mathbf{J}_1^2|j_1, m_1\rangle &= \hbar^2 j_1(j_1 + 1)|j_1, m_1\rangle \\ J_{1z}|j_1, m_1\rangle &= \hbar m_1|j_1, m_1\rangle \\ \mathbf{J}_2^2|j_2, m_2\rangle &= \hbar^2 j_2(j_2 + 1)|j_2, m_2\rangle \\ J_{2z}|j_2, m_2\rangle &= \hbar m_2|j_2, m_2\rangle\end{aligned}$$

Mögliche Basis von \mathcal{H}

mit $m_i = -j_i, -j_i + 1, \dots, j_i$. Eine mögliche Basis des Gesamthilbertraums $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ besteht dann aus den Zustandsvektoren

$$|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle := |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle \quad (19.1)$$

Interessiert man sich außerdem für die Eigenzustände des Hamiltonoperators H (Quantenzahl n) des Systems, so ist es nützlich, wenn die Drehimpulsoperatoren \mathbf{J}_i^2 und J_{iz} mit diesem vertauschen, denn dann sind die gemeinsamen Eigenzustände $|n_i, j_i, m_i\rangle$ leicht aus den $|j_i, m_i\rangle$ ableitbar. Oft ist man aber mit Systemen konfrontiert, in denen dieses zumindest teilweise nicht erfüllt ist, wie zum Beispiel das Wasserstoffatom mit Spin-Bahn-Kopplung (siehe Kap. 24.1).

Ausweichen auf den
Gesamtdrehimpuls
 \mathbf{J}

Seien nun $\mathbf{J}_1, \mathbf{J}_2$ keine Erhaltungsgrößen mehr (d.h. sie kommutieren nicht mit H), wohl aber $\mathbf{J}_1^2, \mathbf{J}_2^2$. In solchen Fällen lohnt es sich auf den Gesamtdrehimpuls¹

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2 \quad (= \mathbf{J}_1 \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \mathbf{J}_2) \quad (19.2)$$

auszuweichen (falls dieser mit H kommutiert). Man kann immer eine gemeinsame Eigenbasis von $\mathbf{J}_1^2, \mathbf{J}_2^2, \mathbf{J}^2, J_z$ finden.

Beispiel: Addition
von Spinoperatoren
mit Spin 1/2

Beispiel 19.1 (Addition von zwei Spinoperatoren aus $\mathcal{H}_{1/2} \otimes \mathcal{H}_{1/2}$)

Dieses Beispiel wird in Aufgabe 30 behandelt. Gesucht sind die Eigenzustände des Gesamtspinoperators $\mathbf{S} := \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$ bzw. seines Betragsquadrats und der Projektion in z -Richtung:

$$\begin{aligned} \mathbf{S}^2 |S, M\rangle &= \hbar^2 S(S+1) |S, M\rangle \\ S_z |S, M\rangle &= \hbar M |S, M\rangle \end{aligned}$$

Mithilfe der Paulimatrizen stellt man \mathbf{S}^2 in der Eigenbasis der Operatoren S_{1z}, S_{2z} dar und diagonalisiert die entsprechende Matrix. Das Ergebnis sind die Vektoren

$$\begin{aligned} S = 0 : \quad |0, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+, -\rangle - |-, +\rangle) \\ S = 1 : \quad |1, 1\rangle &= |+, +\rangle \\ |1, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+, -\rangle + |-, +\rangle) \\ |1, -1\rangle &= |-, -\rangle \end{aligned}$$

Satz 19.1 (Eigenzustände von \mathbf{J})

Die Eigenzustände des Drehimpulsoperators \mathbf{J} mit den Quantenzahlen

Allgemein:
Eigenzustände von
 \mathbf{J}

$$J = |j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, \dots, j_1 + j_2 \quad (19.3)$$

$$M = -J, \dots, +J \quad (19.4)$$

sind gegeben durch

$$|J, M\rangle = \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, M \rangle \quad (19.5)$$

mit den Clebsch-Gordan Koeffizienten $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, M \rangle$.

¹ \mathbf{J} erfüllt die Drehimpulsalgebra $[J_j, J_k] = i\hbar \epsilon_{ijk} J_i$, wie man leicht nachprüft. Das heißt, \mathbf{J} ist ein üblicher Drehimpuls im Sinne von Kap. 18.2. Insbesondere besitzt \mathbf{J}^2 das Eigenwertspektrum $\hbar^2 J(J+1)$.

Die Eigenzustände erfüllen die gewünschten Eigenschaften:

$$\mathbf{J}_{1,2}^2 |J, M\rangle = \hbar^2 j_{1,2}(j_{1,2} + 1) |J, M\rangle \quad (19.6)$$

$$\mathbf{J}^2 |J, M\rangle = \hbar^2 J(J + 1) |J, M\rangle \quad (19.7)$$

$$\mathbf{J}_z |J, M\rangle = \hbar M |J, M\rangle \quad (19.8)$$

Der Beweis ist langwierig und umständlich, weshalb wir auf ihn verzichten.

Bemerkung 19.1

- (i) Es gilt immer: $M = m_1 + m_2$.
- (ii) Konvention: $\langle j_1, j_2; j_1, j_2 | j_1 + j_2, m_1 + m_2 \rangle = 1$

Teil IV

Quantensysteme mit mehreren Teilchen

Kapitel 20

Unterscheidbare Teilchen und verschränkte Zustände

20.1 Postulat 8

Zunächst wollen wir uns mit Systemen von mehreren unterscheidbaren¹ Teilchen beschäftigen. Dazu benötigen wir ein Postulat über die quantenmechanische Beschreibung solcher Systeme.

20.2 Verschränkte Zustände

20.3 Vielteilchen-Wellenfunktion

20.1 Postulat 8 – Gesamthilbertraum zweier Teilchen

Achtes Postulat

Der Gesamthilbertraum zweier Teilchen (1 und 2) ist das Tensorprodukt ihrer Hilberträume $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$.

Bemerkung 20.1

Basis im
Mehnteilchensystem

- (i) Die Verallgemeinerung auf N Teilchen ist offensichtlich: $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N$.
- (ii) Die Orthonormalbasis in \mathcal{H} erhalten wir aus den Tensorprodukten der Orthonormalbasiselemente der Einzelräume. Sei $\mathcal{H}_1 = \text{span}\{|n\rangle\}$ und $\mathcal{H}_2 = \text{span}\{|m\rangle\}$, dann ist

$$\mathcal{H} = \text{span}\{|n\rangle \otimes |m\rangle\} \quad (20.1)$$

Man schreibt auch $|n \otimes m\rangle$, $|1 : n, 2 : m\rangle$ oder $|n, m\rangle$ für diese Basenelemente.

- (iii) Sei $|\psi\rangle = |\phi\rangle \otimes |\chi\rangle$ mit $|\phi\rangle \in \mathcal{H}_1$, $|\chi\rangle \in \mathcal{H}_2$. Dann ist

$$|\psi\rangle = \left(\sum_n c_n |n\rangle \right) \otimes \left(\sum_m d_m |m\rangle \right) = \sum_{m,n} c_n d_m |n \otimes m\rangle \quad (20.2)$$

Skalarprodukt in \mathcal{H}

- (iv) Das Skalarprodukt in \mathcal{H} ergibt sich zu

$$\langle \psi' | \psi \rangle = \sum_{n,m,n',m'} c'_{n'} d'_{m'} c_n d_m \underbrace{\langle n' \otimes m' | n \otimes m \rangle}_{\delta_{nn'} \delta_{mm'}} = \sum_{m,n} c'_{n'} c_n d'_{m'} d_m \quad (20.3)$$

¹Was ununterscheidbare Teilchen sind, wird im nächsten Kapitel klar werden.

Beispiel 20.1

Der Spinzustandsraum für zwei Spin-1/2 Teilchen (vgl. mit Aufgabe 39) ist

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 = \mathbb{C}^4 \quad (20.4)$$

Die Basenelemente in den beiden Einzelräumen seien die Eigenzustände $|+\rangle$, $|-\rangle$ des Spinoperators S_z . Die Basis in \mathcal{H} besteht damit aus den Elementen

$$|+, +\rangle, |+, -\rangle, |-, -\rangle, |-, +\rangle \quad (20.5)$$

Wir schreiben S_{1z} , wenn wir den Operator S_z meinen, der im Raum \mathcal{H}_1 lebt. Damit ist z.B. $S_{1z}|+, -\rangle = S_{1z}|+\rangle \otimes \mathbb{1}_2|-\rangle = \frac{\hbar}{2}|+, -\rangle$.

20.2 Verschränkte Zustände

Definition 20.1 (Verschränkte Zustände).

Def.: Verschränkte
Zustände

Zustände $|\psi\rangle \in \mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, die nicht in der Form

$$|\psi\rangle = |\phi\rangle \otimes |\chi\rangle \quad (20.6)$$

mit $|\phi\rangle \in \mathcal{H}_1, |\chi\rangle \in \mathcal{H}_2$ geschrieben werden können, nennt man verschränkt.

Beispiel 20.2

Der Zustandsvektor

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+, -\rangle - |-, +\rangle) \quad (20.7)$$

mit der Basis aus Beispiel 20.1 lässt sich nicht als Tensorprodukt aus zwei Zuständen aus \mathcal{H}_1 und \mathcal{H}_2 schreiben.

20.2.1 EPR-Argument

Einstein, Podolsky,
Rosen

Ein verschränkter Zustand kann also nicht als einfache Kombination zweier Einzelzustände interpretiert werden. In der klassischen Physik kann ein Teilchensystem immer auf lokale Wechselwirkungen zurückgeführt werden. Das heißt, man kann das System in mehrere Einzelsysteme zerlegen, die sich gegenseitig beeinflussen. Deshalb findet das Konzept verschränkter Zustände kein klassisches Analogon. Diese Tatsache führte A. Einstein, B. Podolsky und N. Rosen 1935 dazu, die Vollständigkeit der Quantenmechanik in Frage zu stellen. Sie formulierten einen Artikel in der Fachzeitschrift *Physical Review*, vol. 47, p. 777 mit dem

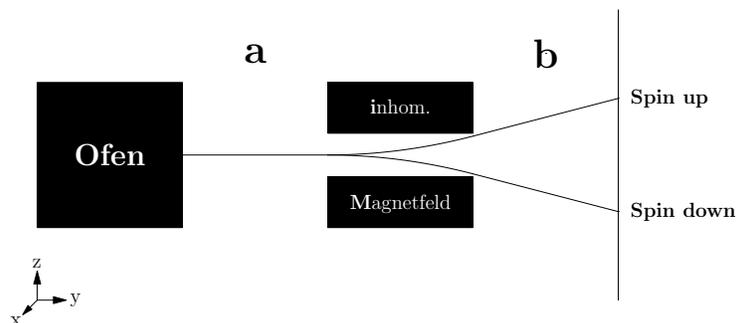


Abbildung 20.1: Messung des verschränkten Zustands mit Stern-Gerlach-Apparaturen.

Titel *Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality be Considered Complete?*².

Gedanken-
experiment

Wir wollen die darin beschriebene Problematik mithilfe eines Gedankenexperiments verdeutlichen: Wir betrachten den Zerfall eines Spin-0 Teilchens³ in zwei unterscheidbare Spin-1/2 Teilchen e^+, e^- . Damit der Gesamtspin $\mathbf{S}^2|\psi\rangle = 0$ erhalten bleibt, muss sich das System nach dem Zerfall in dem verschränkten Zustand

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+, -\rangle - |-, +\rangle) \quad (20.8)$$

befinden⁴. Nun werden die Spin-1/2 Teilchen in zwei Stern-Gerlach-Apparaturen gemessen, die beliebig weit voneinander entfernt sein können⁵ (vgl. Abb. 20.1).

(i) Als erstes messen Alice und Bob beide in z -Richtung:

$$(S_{1z} \otimes S_{2z})|\psi\rangle = \frac{\hbar^2}{4} \frac{1}{\sqrt{2}} (-|+, -\rangle + |-, +\rangle) = -\frac{\hbar^2}{4} |\psi\rangle \quad (20.9)$$

Also liefert eine gleichzeitige Messung von S_z der beiden Spin-1/2 Teilchen einen negativen Eigenwert, weshalb die Ablenkungen jeweils in verschiedene z -Richtungen erfolgen müssen.

(ii) Nun messen Alice und Bob beide in x -Richtung. Dabei gilt

$$S_x|+\rangle = \frac{\hbar}{2}\sigma_x|+\rangle = \frac{\hbar}{2}|-\rangle, \quad S_x|-\rangle = \frac{\hbar}{2}|+\rangle$$

²Hier klicken um zum Artikel zu gelangen.

³Das π -Meson π^0 hat zum Beispiel den Spin 0.

⁴Um dies nachzuprüfen, schreibe man $\mathbf{S}^2 = (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2)^2$, was soviel bedeutet wie $(\mathbf{S}_1 \otimes \mathbf{1}_2 + \mathbf{1}_1 \otimes \mathbf{S}_2)^2$.

⁵Die ausführenden Experimentatoren heißen Alice und Bob. Eine Begründung dieser Benennung findet man [hier](#).

Somit ist

$$(S_{1x} \otimes S_{2x})|\psi\rangle = \frac{\hbar^2}{4} \frac{1}{\sqrt{2}}(|-, +\rangle - |+, -\rangle) = -\frac{\hbar^2}{4}|\psi\rangle \quad (20.10)$$

Also erfolgt die Ablenkung ebenfalls in verschiedene x -Richtungen.

Diskussion über die Vollständigkeit der Quantenmechanik

Einstein, Podolsky und Rosen schlussfolgerten aus einer ähnlichen Überlegung:

Teilchen 1 und Teilchen 2 können beliebig weit voneinander entfernt sein. Damit kann die Messung von S_{1x} oder S_{1z} Teilchen 2 nicht beeinflussen. Deshalb sollte die Information über S_{2x} und S_{2z} in einer lokalen Umgebung von 2 „gespeichert“ sein. Die Quantenmechanik erlaubt aber keine Zustände mit simultan perfekter Kenntnis von S_{2x} und S_{2z} . Deshalb muss die Quantenmechanik „unvollständig“ sein.

Gegenantwort:

Die Quantenmechanik erlaubt eine korrekte Vorhersage aller Messungen. Sie muss also vollständig sein!

Die korrekte Frage lautet in etwa:

Kann es im Sinne von Einstein, Podolsky und Rosen eine vollständige – d.h. lokale klassische Theorie mit verborgenem Freiheitsgrad⁶ – geben?

Die experimentelle Antwort (Bellsche Ungleichungen) auf diese Frage ist:

NEIN.

20.3 Vielteilchen-Wellenfunktion

Wellenfunktion für Systeme mit mehreren Teilchen

Ein Zustand $|\psi\rangle \in \mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ kann wegen der Vollständigkeit der Orthonormalbasis $\{|r_1\rangle \otimes |r_2\rangle\}$ zerlegt⁷ werden in

$$|\psi\rangle = \int dr_1 dr_2 (|r_1\rangle \otimes |r_2\rangle \langle r_1| \otimes \langle r_2|) |\psi\rangle = \int dr_1 dr_2 |r_1, r_2\rangle \psi(r_1, r_2)$$

$|\psi(r_1, r_2)|^2$ gibt die Wahrscheinlichkeitsdichte an, Teilchen 1 am Ort r_1 und Teilchen 2 gleichzeitig am Ort r_2 zu finden. Für n Teilchen mit Spin erhält man

$$\langle r_1, s_1; r_2, s_2; \dots; r_n, s_n | \psi \rangle = \psi(r_1, r_2, \dots, r_n) \chi(s_1, s_2, \dots, s_n) \quad (20.11)$$

mit der Ortswellenfunktion ψ und der Spinwellenfunktion χ .

⁶Man denke dabei z.B. an die Brownsche Bewegung, die ein von Molekülen umgebenes makroskopisches Objekt (z.B. in einer Flüssigkeit) zu einer scheinbaren Eigenbewegung anregt. Dabei kann man entweder die Bahn des Moleküls mithilfe der Chaostheorie untersuchen oder die einzelnen Stöße der Moleküle betrachten, die die Bahn des Objekts verursachen. Die chaotische Bewegung wird hier also auf lokale Wechselwirkungen mit zusätzlichen Freiheitsgraden zurückgeführt.

⁷ $|r_1\rangle, |r_2\rangle$ sind die Eigenvektoren der Ortsoperatoren in den jeweiligen Räumen.

Kapitel 21

Ununterscheidbare Teilchen

Nun wollen wir uns mit Systemen ununterscheidbarer Teilchen beschäftigen. Dabei werden wir feststellen, dass wir Postulat 8 erweitern müssen um sinnvolle Ergebnisse zu erhalten.

21.1 Gedankenexperiment

21.2 Erweiterung von Postulat 8

Beispiel 21.1 (Elektronen)

Elektronen sind ein Beispiel für ununterscheidbare Teilchen. Alle physikalischen Eigenschaften von Elektronen sind identisch, wodurch es keine Möglichkeit gibt, diese zu unterscheiden.

21.1 Gedankenexperiment

Messung eines Systems aus zwei identischen Teilchen

Wir betrachten zwei identische Spin-1/2 Teilchen, deren Spinzustände zu $|+\rangle$ und $|-\rangle$ präpariert wurden. Das heißt, eine Messung von S_z liefert für ein Teilchen $+\frac{\hbar}{2}$ und für das andere Teilchen $-\frac{\hbar}{2}$.

Das eine Teilchen wird mit 1, das zweite Teilchen mit 2 bezeichnet. Dann entsprechen die Kets

$$|1 : +, 2 : -\rangle \quad \text{und} \quad |1 : -, 2 : +\rangle \quad (21.1)$$

den möglichen Zuständen des Systems, da wir die Teilchen nicht unterscheiden können. Allgemein liefern alle Zustände der Form

$$|\psi\rangle = \alpha|+, -\rangle + \beta|-, +\rangle, \quad \text{mit } |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \quad (21.2)$$

das selbe Eigenwertspektrum. Wir interessieren uns nun für die Wahrscheinlichkeit dafür, dass wir für den Spin in x -Richtung für beide Teilchen $+\frac{\hbar}{2}$ erhalten. Dafür benötigen wir den Eigenzustand zum Messergebnis.

Der Eigenzustand von $S_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x$ zum Eigenwert $+\frac{\hbar}{2}$ ist $\frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle)$. Daraus erhalten wir

$$\begin{aligned} |\sigma\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|1: +\rangle + |1: -\rangle) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|2: +\rangle + |2: -\rangle) \\ &= \frac{1}{2}(|+, +\rangle + |+, -\rangle + |-, +\rangle + |-, -\rangle) \end{aligned} \quad (21.3)$$

als Eigenzustand zum Messergebnis. Die gesuchte Wahrscheinlichkeit ist nach der Bornschen Regel gegeben durch

$$p = |\langle\sigma|\psi\rangle|^2 = \left| \frac{1}{2}(\alpha + \beta) \right|^2 \quad (21.4)$$

Dieses Ergebnis ist zunächst irreführend, da wir identische Teilchen betrachten, und das Ergebnis deshalb nicht von der Wahl von α und β abhängen sollte. Um diesen Widerspruch zu beseitigen, bedarf es einer Erweiterung von Postulat 8.

21.2 Erweiterung von Postulat 8

Erweiterung von
Postulat 8

Für ununterscheidbare Teilchen sind nur bestimmte Kets in \mathcal{H} erlaubt. Diese Kets sind entweder symmetrisch unter Vertauschung der ununterscheidbaren Teilchen (Bosonen) oder antisymmetrisch (Fermionen).

Eine intuitive Erklärung des Postulats können wir nicht geben. Die Natur scheint sich einfachste Möglichkeit auszuschauen, die zur Verfügung steht. Zu diesem Postulat gehört das folgende fundamentale Theorem. Leider ist der Beweis unanschaulich und fördert keine wirklich neuen Erkenntnisse, weshalb wir ihn weglassen.

Satz 21.1 (Spin-Statistik-Theorem)

Spin-Statistik-
Theorem

Teilchen mit ganzzahligem Spin (z.B. Photonen) sind Bosonen und Teilchen mit gebrochenzahligem Spin (z.B. Elektronen) sind Fermionen.

Bemerkung 21.1

Auflösung des
Widerspruchs im
Gedankenexp.

- (i) Mit Satz 21.1 und der Erweiterung von Postulat 8 sehen wir, dass der Gesamtzustand der beiden Spin-1/2 Teilchen im Gedankenexperiment

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+, -\rangle - |-, +\rangle) \quad (21.5)$$

sein muss. Es ist also $-\beta = \alpha = \frac{1}{\sqrt{2}}$ und damit $p = 0$.

Allgemeine Form
der Zustände

- (ii) Allgemein gilt für zwei ununterscheidbare Teilchen mit den Quantenzahlen q, q' (z.B. Spinquantenzahlen der Projektion in z -Richtung $+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$):
- für Bosonen: $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1 : q, 2 : q'\rangle + |1 : q', 2 : q\rangle)$;
 - für Fermionen: $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1 : q, 2 : q'\rangle - |1 : q', 2 : q\rangle)$.

Pauli-Ausschlussprinzip

Pauli-Prinzip

Zwei identische Fermionen können nicht im gleichen Zustand sein ($q = q'$), denn sonst wäre $|\psi\rangle = 0$, was nicht erlaubt ist.

Beispiel 21.2 (Zwei Teilchen im harmonischen Oszillator)

Hamiltonoperator
zweier Teilchen im
harmonischen
Oszillator

Seien nun zwei Teilchen (Orte x_1 und x_2) gemeinsam in einem harmonischen Oszillator mit dem Hamiltonoperator

$$H = H(1) + H(2) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{m}{2} \omega^2 x_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{m}{2} \omega^2 x_2^2 \quad (21.6)$$

Wir wollen nun drei verschiedene Möglichkeiten untersuchen: zwei beliebige ununterscheidbare Teilchen, zwei identische Bosonen, zwei identische Fermionen.

Um die Ergebnisse bündig zusammenfassen zu können, benutzen wir die Schreibweise $|n, n'\rangle$ (für spinlose Teilchen) und $|n, n'; S\rangle$ (für Teilchen mit Spin) mit den Energiequantenzahlen n und n' der Teilchen. S steht für den Gesamtspin des Systems aus den beiden Teilchen.

1. unterscheidbar

- (i) *Unterscheidbare Teilchen:*
Die Wellenfunktion ist gegeben durch

$$\langle x_1, x_2 | n', n \rangle = \psi_{n'n}(x_1, x_2) = \phi_{n'}(x_1) \phi_n(x_2), \quad (21.7)$$

$$\text{mit Energiespektrum } E_{n'n} = \hbar\omega(n' + n + 1) \quad (21.8)$$

wobei $\phi_n(x)$ die Eigenfunktion eines Teilchens im Oszillator mit Eigenenergie $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ mit $n = 1, 2, 3, \dots$ darstellt.

Beweis: Es ist

$$\begin{aligned} H\psi_{n'n} &= (H(1)\phi_{n'})\phi_n + \phi_{n'}(H(2)\phi_n) \\ &= \hbar\omega\left(n' + \frac{1}{2}\right)\psi_{n'n} + \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)\psi_{n'n} = E_{n'n}\psi_{n'n} \end{aligned}$$

2. identisch ($s = 0$)

- (ii) *Identische Bosonen mit Spin-0:*
Es sind nur symmetrische Wellenfunktionen zulässig:

$$\psi_{n'n}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_{n'}(x_1)\phi_n(x_2) + \phi_n(x_1)\phi_{n'}(x_2)) \quad (21.9)$$

3. identisch
($s = 1/2$)

(iii) *Identische Fermionen mit Spin-1/2:*

Die Wellenfunktion zweier Teilchen mit Spinfreiheitsgrad ist gegeben durch

$$\langle r_1, s_1; r_2, s_2 | \Psi \rangle = \Psi(r_1, s_1; r_2, s_2) = \psi(r_1, r_2) \chi(s_1, s_2) \quad (21.10)$$

Für Fermionen muss diese antisymmetrisch unter Vertauschung der identischen Teilchen sein:

$$\Psi(r_1, s_1; r_2, s_2) = -\Psi(r_2, s_2; r_1, s_1) \quad (21.11)$$

Das heißt, Ψ muss der Form sein

$$\begin{aligned} \Psi(r_1, s_1; r_2, s_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi(r_1, r_2) \chi(s_1, s_2) - \psi(r_2, r_1) \chi(s_2, s_1)) \\ &= \frac{1}{\sqrt{8}}[(\psi(r_1, r_2) + \psi(r_2, r_1)) (\chi(s_1, s_2) - \chi(s_2, s_1)) \\ &\quad + (\psi(r_1, r_2) - \psi(r_2, r_1)) (\chi(s_1, s_2) + \chi(s_2, s_1))] \end{aligned}$$

Somit gibt es zwei Möglichkeiten für χ und ψ , um (21.10) und (21.11) zu erfüllen: Entweder ist die Spinwellenfunktion χ symmetrisch und die Ortswellenfunktion ψ antisymmetrisch (I), oder umgekehrt (II). Für den harmonischen Oszillator erhalten wir somit:

- Möglichkeit I: (χ antisymmetrisch, ϕ symmetrisch, vgl. Aufgabe 39)

$$\psi_{n'n}(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_{n'}(r_1)\phi_n(r_2) + \phi_n(r_1)\phi_{n'}(r_2)] \quad (21.12)$$

$$\chi(s_1, s_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\chi(+, -) - \chi(-, +)] \quad (21.13)$$

Der Gesamtspin ist hier immer $S = 0$.

- Möglichkeit II: (χ symmetrisch, ϕ antisymmetrisch)

$$\psi(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_{n'}(r_1)\phi_n(r_2) - \phi_n(r_1)\phi_{n'}(r_2)] \quad (21.14)$$

$$\chi(s_1, s_2) : \chi(+, +), \frac{1}{\sqrt{2}}[\chi(+, -) + \chi(-, +)], \chi(-, -) \quad (21.15)$$

Hier ist der Gesamtspin also immer $S = 1$. Hier ist zu beachten, dass für $n' = n$ die Wellenfunktion verschwindet (wie schon das Pauli-Prinzip vorhersagt).

Mögliche
Eigenzustände
zweier Teilchen im
harmonischen
Oszillator

Zusammenfassung: Mögliche Zustände im harmonischen Oszillator

Energieniveau	<i>Unterscheidbar</i>	<i>Identisch, Spin-0</i>	<i>Identisch, Spin-1/2</i>
<i>Grundzustand</i>	$ 0, 0\rangle$ (#1)	$ 0, 0\rangle$ (#1)	$ 0, 0, S = 0\rangle$ (# 1)
<i>1. angeregter Zustand</i>	$ 1, 0\rangle, 0, 1\rangle$ (# 2)	$ 1, 0\rangle = 0, 1\rangle$ (# 1)	$ 1, 0, S = 0\rangle$ (# 1) $ 1, 0, S = 1\rangle$ (# 3)

Kapitel 22

Mehrelektronenatome

22.1 Heliumatom

22.1 Heliumatom

22.2 Grundzustände von Mehrelektronenatomen

Das Heliumatom besitzt zwei Elektronen in der Schale. Damit hat der Hamiltonoperator die Form

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2e^2}{r_1} - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2e^2}{r_2} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \quad (22.1)$$

Vernachlässigung der Elektronenabstoßung

Der letzte Term berücksichtigt die gegenseitige Abstoßung der Elektronen. In dieser Form des Hamiltonoperators ist die Schrödinger-Gleichung nicht geschlossen lösbar. Aus diesem Grund wählen wir hier eine starke Näherung und vernachlässigen die Elektronenabstoßung.

Energiespektrum des Heliumatoms

Wir erinnern uns zurück an die Eigenzustände des Wasserstoffatoms, die wir mit $|n, l, m\rangle$ – bzw. in Ortsdarstellung mit $\phi_{nlm}(r)$ – bezeichnen mit dem Energiespektrum $E_n = -\frac{E_B}{n^2}$. Nach (16.15) ergibt sich für das Energiespektrum der Elektronen des Heliumatoms (Kernladungszahl $Z = 2$)

$$E_{nn'} = 4(E_n + E_{n'}) \quad (22.2)$$

Wir wollen die ersten Zustände betrachten:

Grundzustand

- (i) Die Grundzustandswellenfunktion im Ortsraum muss symmetrisch sein (unsymmetrische würden verschwinden) und damit die Spinwellenfunktion unsymmetrisch:

$$\psi(r_1, r_2) = \phi_{100}(r_1)\phi_{100}(r_2), \quad S = 0 \quad (22.3)$$

1. angeregter Zustand

- (ii) Im ersten angeregten Zustand des Heliumatoms muss eines der beiden Elektronen im Grundzustand bleiben und eines in den ersten angeregten

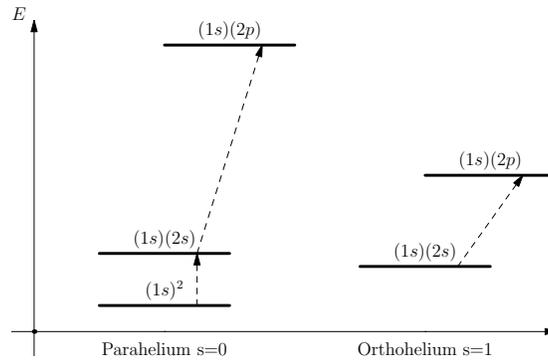


Abbildung 22.1: Energieniveaus beim Heliumatom

Zustand übergehen. Das heißt, es gibt für ein Elektron nur $|1, 0, 0\rangle$ und für das Andere die Möglichkeiten $|2, 0, 0\rangle$, $|2, 1, 0\rangle$, $|2, 1, -1\rangle$ und $|2, 1, 1\rangle$. Für das $(1s)(2s)$ Orbital gibt es dann für die möglichen Werte des Gesamtspins $S = 0$ und $S = 1$ wieder je eine mögliche Ortswellenfunktion:

$$\psi(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_{200}(r_1)\phi_{100}(r_2) + \phi_{100}(r_1)\phi_{200}(r_2)] , \quad S = 0 \quad (22.4)$$

$$\psi(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_{200}(r_1)\phi_{100}(r_2) - \phi_{100}(r_1)\phi_{200}(r_2)] , \quad S = 1 \quad (22.5)$$

Der Zustand mit Gesamtspin $S = 0$ wird *Parahelium*, der mit $S = 1$ *Orthohelium* genannt.

Abweichungen vom
realen Spektrum

In der hier betrachteten Näherung sind die 1. angeregten Zustände (die Orbitale $(1s)(2s)$ mit $S = 0$, $(1s)(2s)$ mit $S = 1$ und $(1s)(2p)$) alle auf dem gleichen Energieniveau. Tatsächlich verursacht die gegenseitige Abstoßung der Elektronen aber ein anderes Verhalten (siehe Abb. 22.1). So hat das Orbital $(1s)(2p)$ eine größere Bindungsenergie als $(1s)(2s)$, da der vorhandene Drehimpuls des einen Elektrons für größere Abstände vom Kern sorgt und dabei durch die Abschirmung des $(1s)$ -Elektrons weniger Kernanziehung erfährt. Außerdem hat das Orbital $(1s)(2s)$ mit $S = 1$ ein geringeres Energieniveau als $(1s)(2s)$ mit $S = 0$, denn das Letztere besitzt eine symmetrische Ortswellenfunktion, womit es möglich ist, dass die beiden Elektronen am selben Ort sind. Die Abstoßung $e^2/|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ trägt dann größere Beiträge zur Gesamtenergie bei, als für die Zustände mit $S = 1$, denn diese dürfen nach dem Pauli-Prinzip niemals am selben Ort sein.

22.2 Grundzustände von Mehrelektronenatomen

Um die Eigenzustände und Eigenenergien von Mehrelektronenatomen mit Kernladungszahl Z zu finden, muss die Schrödingergleichung für den Hamiltonoperator

$$H = \sum_{i=1}^Z \frac{p_i^2}{2m} - \sum_{i=1}^Z \frac{Ze^2}{r_i} + \sum_{i,j=1,i < j}^Z \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \quad (22.6)$$

gelöst werden. Der letzte Term, der die Wechselwirkung der Elektronen untereinander berücksichtigt, führt im Allgemeinen zu Problemen, die nicht mehr analytisch geschlossen lösbar sind.

Zentralfeldnäherung

Man kann diesen Term in grober Näherung vernachlässigen – wie wir es beim Heliumatom getan haben – oder auch die sogenannte *Zentralfeldnäherung* anwenden. Dabei führt man in einem zentralsymmetrischen Potential zusätzliche Terme ein, welche die Abschirmung des Kerns teilweise berücksichtigen, die durch unterschiedliche Abstände der Elektronen zum Kern zustande kommt.

$$H = \sum_{i=1}^Z \left(\frac{p_i^2}{2m} + V_c(r_i) \right) \quad (22.7)$$

Konstruktion der Elektronenkonfigurationen in den Grundzuständen

Wie man im Allgemeinen solche Probleme behandelt, werden wir im nächsten Kapitel kennenlernen. Zunächst wollen wir – ganz ohne analytische Methoden – nur durch die Anwendung des Pauli-Ausschlussprinzips die möglichen Konfigurationen der Grundzustände von Mehrelektronenatomen konstruieren:

Z	Element	Konfiguration des Grundzustands
1	H	(1s)
2	He	(1s) ²
<hr/>		
3	Li	(1s) ² (2s)
4	Be	(1s) ² (2s) ²
<hr/>		
5	B	(1s) ² (2s) ² (2p)
6	C	(1s) ² (2s) ² (2p) ²
7	N	(1s) ² (2s) ² (2p) ³
8	O	(1s) ² (2s) ² (2p) ⁴
9	F	(1s) ² (2s) ² (2p) ⁵
10	Ne	(1s) ² (2s) ² (2p) ⁶
⋮	⋮	⋮

Erläuterung der
Konstruktion

Der Zustand eines Elektrons ist durch die vier Quantenzahlen n, l, m_l, m_s festgelegt¹. Bei der Belegung der Schalenkonfigurationen müssen wir unter Berücksichtigung des Pauli-Prinzips nur darauf achten, dass sich nie zwei Elektronen im selben Zustand $|n, l, m_l, m_s\rangle$ befinden.

Da in der Notation für die Orbitale nur die Werte von n und l erfasst sind, gibt es für einen Eigenwert E_{nl} eine $[2(2l + 1)]$ -fache Entartung².

¹ m_l ist die magnetische Quantenzahl im Orbitalraum, bestimmt also die Eigenwerte des Drehimpulsoperators L_z , wohingegen m_s die magnetische Quantenzahl im Spinzustandsraum darstellt, also die Eigenwerte von S_z festlegt.

²Zur Erinnerung: $m_l = -l, -l + 1, \dots, l - 1, l$ und $m_s = \pm 1/2$.

Teil V

Störungstheorie

Kapitel 23

Zeitunabhängige (stationäre) Störungstheorie

Störungstheorie:
Strategie zur
Lösung
komplizierter
Probleme

Im Folgenden werden wir uns mit Modellen befassen, die nicht analytisch geschlossen lösbar sind (z.B. das Heliumatom). Dafür werden wir Strategien kennenlernen, die für die heutige theoretische Physik von größtem praktischem Nutzen sind.

Beispiel 23.1 (Geladenes Teilchen in Potentialtopf)

Wollen wir das Verhalten eines geladenen Teilchens in einem unendlich tiefen Potentialtopf mit vorhandenem elektrischen Feld beschreiben, so tritt im Hamiltonoperator der zusätzliche Term $W = -qEx$ auf. Die Schrödingergleichung ist dann unmöglich analytisch lösbar.

23.1 Allgemeine
Strategie

23.2
Störungstheorie 1.
Ordnung
(nicht-entartet)

23.3
Störungstheorie 2.
Ordnung
(nicht-entartet)

23.4 Entartete
Störungstheorie (1.
Ordnung)

23.1 Allgemeine Strategie

1. Aufstellen des
Hamiltonoperators
mit Störterm

Wie schreiben für den Hamiltonoperator des Systems

$$H_\lambda = H^{(0)} + \lambda W \quad (23.1)$$

▷ Dabei beschreibt $H^{(0)}$ den Hamiltonoperator für das geschlossen lösbare Problem (in Beispiel 23.1: der Potentialkasten ohne elektrisches Feld). Die Eigenvektoren $|\psi_n^{(0)}\rangle$, die Lösungen von $H^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle$ sind, seien orthogonal gewählt.

▷ W sei ein kleiner Störterm (in Beispiel 23.1: $W = -qEx$), der mit $\lambda \in [0, 1]$ parametrisiert wird. Welche genauen Anforderungen sich hinter *klein* verbergen, soll uns zunächst nicht interessieren.

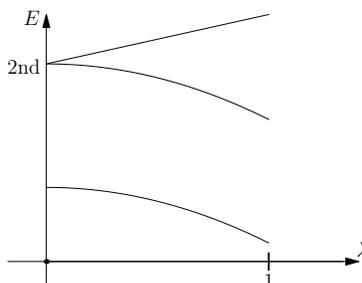


Abbildung 23.1: Spektrum von H_λ .

2. Entwicklung um $\lambda = 0$

Der wesentliche Schritt ist die Entwicklung des Energiespektrums $E_n(\lambda)$ und der Eigenzustände $|\psi_{n,\lambda}\rangle$ um $\lambda = 0$ und das Einsetzen von $\lambda = 1$. Der Grad m dieser Entwicklung betitelt die jeweilige Störungstheorie: *Störungstheorie m-ter Ordnung*.

3. Einsetzen in die Eigenwertgleichung

Schließlich können wir die Entwicklungen in die zu lösende Eigenwertgleichung

$$H_\lambda |\psi_{n,\lambda}\rangle = E_n(\lambda) |\psi_{n,\lambda}\rangle \quad (23.2)$$

einsetzen und per Koeffizientenvergleich das gesuchte Spektrum und die Eigenzustände bestimmen.

Bemerkung 23.1

In Abb. 23.1 ist die Idee hinter den Überlegungen skizziert. Wir suchen das Spektrum von H_λ für $\lambda = 1$, das wir mit E_n bezeichnen wollen (analog $|\psi_n\rangle := |\psi_{n,\lambda=1}\rangle$). Dieses erhalten wir in guter Näherung aus einer Entwicklung von $E_n(\lambda)$, solange $E_n(\lambda)$ im Bereich $0 \leq \lambda \leq 1$ nicht übermäßig stark variiert, was von der Größe des Störterms W abhängt. Wie man ein Energieniveau, wie das mit $2nd$ bezeichnete behandelt, werden wir kennenlernen, wenn wir uns mit entarteter Störungstheorie beschäftigen.

Allgemein:
Entwicklung zur
Eigenwertgleichung
der Störungstheorie

Schreiten wir nun zur Tat und führen die ersten Schritte durch:

Entwicklung um $\lambda = 0$

$$\begin{aligned} E_n(\lambda) &= E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \\ |\psi_{n,\lambda}\rangle &= |\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots \end{aligned}$$

Einsetzen in (23.2)

$$(H^{(0)} + \lambda W)(|\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \dots) = (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \dots)(|\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \dots)$$

Sortieren wir die Terme nach Ordnungen von λ , so ergibt sich folgende Gleichung:

$$\begin{aligned}
 & H^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda \left(W|\psi_n^{(0)}\rangle + H^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle \right) \\
 & + \lambda^2 \left(W|\psi_n^{(1)}\rangle + H^{(0)}|\psi_n^{(2)}\rangle \right) + \dots \\
 = & E_n^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda \left(E_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle \right) \\
 & + \lambda^2 \left(E_n^{(0)}|\psi_n^{(2)}\rangle + E_n^{(1)}|\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)}|\psi_n^{(0)}\rangle \right) + \dots \quad (23.3)
 \end{aligned}$$

Ausgehend von dieser Gleichung können wir nun verschiedene Störungstheorien entwickeln, in Abhängigkeit von der berücksichtigten Ordnung von λ .

23.2 Störungstheorie 1. Ordnung (nicht-entartet)

23.2.1 Energiespektrum

Koeffizientenvergleich bis zur ersten Ordnung

Damit Gl. (23.3) bis zur ersten Ordnung in λ erfüllt wird, müssen wir die entsprechenden Koeffizienten vergleichen:

$$\mathcal{O}(\lambda^0) : \quad H^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle \quad (23.4)$$

$$\mathcal{O}(\lambda) : \quad H^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle + W|\psi_n^{(0)}\rangle \stackrel{!}{=} E_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle \quad (23.5)$$

Gl. (23.4) ist laut Voraussetzung erfüllt. Um Gl. (23.5) nach $E_n^{(1)}$ aufzulösen, wenden wir von links den Bra $\langle\psi_n^{(0)}|$ auf beide Seiten der Gleichung an:

$$\underbrace{\langle\psi_n^{(0)}|H^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle}_{=E_n^{(0)}\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle} + \langle\psi_n^{(0)}|W|\psi_n^{(0)}\rangle \stackrel{!}{=} E_n^{(0)}\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)}\underbrace{\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle}_{=1}$$

Damit ergibt sich als Ergebnis

Energiespektrum in Störungstheorie 1. Ordnung

Störungstheorie 1. Ordnung: Energiespektrum

In der Störungstheorie erster Ordnung für einen nicht-entarteten Zustand ist die Eigenenergie des Zustands um den Erwartungswert des Störterms verschoben.

$$E_n = E_n^{(0)} + \langle\psi_n^{(0)}|W|\psi_n^{(0)}\rangle \quad (23.6)$$

23.2.2 Eigenzustand

Den Eigenzustand $|\psi_n\rangle$ können wir ebenfalls mit Gl. (23.5) bestimmen, die umgeschrieben werden kann zu

$$\left(H^{(0)} - E_n^{(0)}\right) |\psi_n^{(1)}\rangle \stackrel{!}{=} -\left(W - E_n^{(1)}\right) |\psi_n^{(0)}\rangle \quad (23.7)$$

Darstellung in der Basis $\{|\psi_m^{(0)}\rangle\}$

$|\psi_n^{(1)}\rangle$ lässt sich in den Eigenzuständen von $H^{(0)}$ entwickeln:

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} c_{nm} |\psi_m^{(0)}\rangle$$

Berechnung der c_{nm}

Die Summation über $m \neq n$ genügt, da $\left(H^{(0)} - E_n^{(0)}\right) |\psi_n^{(0)}\rangle = 0$ ist. Setzen wir diesen Ausdruck nun in Gl. (23.7) ein:

$$\sum_{m \neq n} \left(E_m^{(0)} - E_n^{(0)}\right) c_{nm} |\psi_m^{(0)}\rangle \stackrel{!}{=} -\left(W - E_n^{(1)}\right) |\psi_n^{(0)}\rangle$$

Anwendung von $\langle \psi_l^{(0)} |$ mit $l \neq n$ von links auf beide Seiten ergibt

$$\left(E_l^{(0)} - E_n^{(0)}\right) c_{nl} \stackrel{!}{=} -\langle \psi_l^{(0)} | W | \psi_n^{(0)} \rangle + E_n^{(1)} \underbrace{\langle \psi_l^{(0)} | \psi_n^{(0)} \rangle}_{=0}.$$

Damit kennen wir die Koeffizienten c_{nl} und können das Ergebnis zusammenfassen:

Eigenzustand in Störungstheorie 1. Ordnung

Störungstheorie 1. Ordnung: Eigenzustand
In der Störungstheorie erster Ordnung ist der Eigenzustand von $H = H^{(0)} + W$ gegeben durch

$$|\psi_n\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m^{(0)} | W | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |\psi_m^{(0)}\rangle \quad (23.8)$$

Bemerkung 23.2

- (i) $|\psi_n\rangle$ aus Gl. (23.8) ist noch nicht normiert.
- (ii) Da $E_n^{(0)} - E_m^{(0)}$ in Gl. (23.8) nicht verschwinden darf, dürfen die Energien für zwei verschiedene Zustände nicht übereinstimmen, d.h. es darf keine Energieentartung auftreten. Deshalb gelten die erhaltenen Ergebnisse nur für Systeme mit nicht-entarteten Zuständen.

Beispiel 23.2 (Geladenes Teilchen im Potentialtopf)

Nun wollen wir Beispiel 23.1 fortführen, indem wir die durch den Störterm $W = -qEx$ veränderte Grundzustandsenergie mit Störungstheorie erster Ordnung berechnen. Die Grundzustandswellenfunktion des unendlich tiefen Potentialtopfes ohne elektrisches Feld ist im Bereich $0 \leq x \leq a$ gegeben durch

$$\psi_{n=1}^{(0)}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\pi \frac{x}{a}\right)$$

Der Erwartungswert des Störterms ist dann gegeben durch

$$\langle \psi_1^{(0)} | W | \psi_1^{(0)} \rangle = -\frac{2}{a} \int dx (qEx) \sin^2\left(\pi \frac{x}{a}\right) = \dots = -\frac{qEa}{2}$$

Damit ist die verschobene Grundzustandsenergie

$$E_{n=1} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} - \frac{qEa}{2} + \mathcal{O}(E^2) \tag{23.9}$$

23.3 Störungstheorie 2. Ordnung (nicht-entartet)

Oft ist man mit Systemen konfrontiert, für die $\langle W \rangle_{\psi_n^{(0)}}$ verschwindet, womit die Anwendung der Störungstheorie erster Ordnung keine Auswirkungen mehr hat. In solchen Systemen ist deshalb die Störungstheorie zweiter Ordnung von besonderer Bedeutung.

23.3.1 Energiespektrum

Koeffizienten-
vergleich bis zur
zweiten Ordnung

Vergleichen wir nun die Koeffizienten von λ^2 in Gl. (23.3):

$$\mathcal{O}(\lambda^2): \quad W|\psi_n^{(1)}\rangle + H^{(0)}|\psi_n^{(2)}\rangle \stackrel{!}{=} E_n^{(0)}|\psi_n^{(2)}\rangle + E_n^{(1)}|\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)}|\psi_n^{(0)}\rangle$$

Wiederum wenden wir $\langle \psi_n^{(0)} |$ von links auf beide Seiten an:

$$\langle \psi_n^{(0)} | W | \psi_n^{(1)} \rangle = E_n^{(1)} \underbrace{\langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(1)} \rangle}_{=0} + E_n^{(2)} \underbrace{\langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(0)} \rangle}_{=1}$$

Dabei haben wir verwendet, dass $|\psi_n^{(1)}\rangle$ laut Gl. (23.8) als Linearkombination der $|\psi_m^{(0)}\rangle$ mit $m \neq n$ geschrieben werden kann. Somit ergibt sich

$$E_n^{(2)} = \langle \psi_n^{(0)} | W | \psi_n^{(1)} \rangle \stackrel{(23.8)}{=} \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m^{(0)} | W | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \langle \psi_n^{(0)} | W | \psi_m^{(0)} \rangle$$

Energiespektrum in
Störungstheorie 2.
Ordnung

Störungstheorie 2. Ordnung: Energiespektrum

In der Störungstheorie zweiter Ordnung ist das Energiespektrum gegeben durch

$$E_n = E_n^{(0)} + \langle \psi_n^{(0)} | W | \psi_n^{(0)} \rangle + \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \psi_m^{(0)} | W | \psi_n^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad (23.10)$$

Bemerkung 23.3 (Absenkung der Grundzustandsenergie)

Der zusätzliche Beitrag in der Störungstheorie zweiter Ordnung kann die Energie des Grundzustands nur absenken, denn der Term $E_n^{(0)} - E_m^{(0)}$ ist für $n = 1$ immer negativ.

23.4 Entartete Störungstheorie (1. Ordnung)

Nun wollen wir den Fall eines entarteten Spektrums $E_n^{(0)}$ betrachten, auf den die bisher entwickelte Störungstheorie nicht angewendet werden kann. Dies haben wir bereits in Gl. (23.8) festgestellt, da für $E_n^{(0)} = E_m^{(0)}$ der Nenner verschwinden würde.

Grundproblem bei
Entartung

Die Strategie, das bekannte Eigenspektrum $E_n^{(0)}$ und die Eigenvektoren $|\psi_n^{(0)}\rangle$ in einem zusätzlichen Parameter λ zu entwickeln, stößt bei entarteten Spektren auf ein Grundproblem: Aufgrund des zusätzlichen Störterms im Hamiltonoperator für $\lambda \neq 0$ kann ein ursprünglich entarteter Eigenwert bei der Entwicklung in λ in mehrere nicht-entartete Eigenwerte übergehen. Dadurch gäbe es bei $\lambda = 1$ eindeutige orthogonale Eigenvektoren zu den nicht-entarteten Eigenwerten, die für $\lambda \rightarrow 0$ gegen die ursprünglichen Eigenvektoren im Unterraum des entarteten Eigenwerts konvergieren. Für $\lambda = 0$ ist die Wahl der Eigenbasis in diesem Unterraum aber völlig beliebig, wodurch in der Regel keine konvergente Potenzreihenentwicklung in λ möglich ist, wenn von den „falschen“ Eigenvektoren ausgegangen wird.

23.4.1 Zweifache Entartung

Spezialfall:
zweifache
Entartung

Sei zunächst eine zweifache Entartung der Energie $E^{(0)}$ gegeben:

$$\begin{aligned} H^{(0)} |\psi_a^{(0)}\rangle &= E^{(0)} |\psi_a^{(0)}\rangle \\ H^{(0)} |\psi_b^{(0)}\rangle &= E^{(0)} |\psi_b^{(0)}\rangle \end{aligned}$$

Dabei können die Eigenvektoren orthogonal gewählt werden: $\langle \psi_a^{(0)} | \psi_b^{(0)} \rangle = 0$. Es werden also nur bestimmte Linearkombinationen

$$|\psi^{(0)}\rangle = \alpha |\psi_a^{(0)}\rangle + \beta |\psi_b^{(0)}\rangle \quad (23.11)$$

eine konvergente Reihenentwicklung zulassen. In erster Ordnung Störungstheorie muss Gl. (23.5)

$$H^{(0)}|\psi^{(1)}\rangle + W|\psi^{(0)}\rangle = E^{(0)}|\psi^{(1)}\rangle + E^{(1)}|\psi^{(0)}\rangle$$

erfüllt werden. Wenden wir zuerst $\langle \psi_a^{(0)} |$, dann $\langle \psi_b^{(0)} |$ von links darauf an und setzen beide Male die Linearkombination (23.11) ein:

$$\langle \psi_{a,b}^{(0)} | W | \psi^{(0)} \rangle = E^{(1)} \langle \psi_{a,b}^{(0)} | \psi^{(0)} \rangle$$

$$\alpha \langle \psi_a^{(0)} | W | \psi_a^{(0)} \rangle + \beta \langle \psi_a^{(0)} | W | \psi_b^{(0)} \rangle = E^{(1)} \alpha \quad (23.12)$$

$$\alpha \langle \psi_b^{(0)} | W | \psi_a^{(0)} \rangle + \beta \langle \psi_b^{(0)} | W | \psi_b^{(0)} \rangle = E^{(1)} \beta \quad (23.13)$$

Diese beiden Gleichungen bilden in Matrixschreibweise ein Eigenwertproblem mit einer hermiteschen Matrix:

$$\begin{pmatrix} \langle \psi_a^{(0)} | W | \psi_a^{(0)} \rangle & \langle \psi_a^{(0)} | W | \psi_b^{(0)} \rangle \\ \langle \psi_b^{(0)} | W | \psi_a^{(0)} \rangle & \langle \psi_b^{(0)} | W | \psi_b^{(0)} \rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = E^{(1)} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad (23.14)$$

Für ein solches Problem kennen wir die Lösungsstrategie.

23.4.2 N-fache Entartung

Verschiebung der
Energie in
Störungstheorie 1.
Ordnung (entartet)

Entartete Störungstheorie 1. Ordnung: Energiespektrum
In der entarteten Störungstheorie 1. Ordnung ist die Verschiebung der Energieeigenwerte in $\mathcal{O}(\lambda)$ durch die Diagonalisierung der Störmatrix

$$\langle \psi_i^{(0)} | W | \psi_j^{(0)} \rangle \quad (23.15)$$

im entarteten Unterraum gegeben. Die $|\psi_i^{(0)}\rangle$ sind dabei die Energieeigenzustände in $\mathcal{O}(\lambda^0)$.

Kapitel 24

Die Feinstruktur des Wasserstoffatoms

24.1 Spin-Bahn-Kopplung

Unter der *Spin-Bahn-Kopplung* versteht man die Wechselwirkung des Bahndrehimpulses eines Elektrons in einem Atom mit dem Spin des Elektrons. Diese zusätzliche Wechselwirkung trägt neben einer rein relativistischen Korrektur zur Feinstruktur der Atomspektren bei. Dazu wird der Hamiltonoperator mit zusätzlichen Korrekturtermen ergänzt (hier H_{SO}).

Man kann die Spin-Bahn-Kopplung mit einem Modell anschaulich begründen. Eine strenge Herleitung ist nur im Rahmen der relativistischen Quantenmechanik (Dirac-Theorie) möglich.

Begibt man sich in das Ruhesystem eines Elektrons im Atom, dann „bewegt sich“ das Proton auf einer Kreisbahn um das Elektron. Aufgrund der bewegten Protonenladung entsteht ein Kreisstrom, der zu einem Magnetfeld \mathbf{B} am Ort des Elektrons führt, welches proportional zum Drehimpuls \mathbf{L} des Protons ist. Da das Elektron aber aufgrund seines Spins ein magnetisches Moment besitzt, kommt es zu einer Wechselwirkungsenergie

$$H_{SO} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} \propto \mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$$

Damit wird die Energie für die eine Spinrichtung erhöht und für die andere verringert. Die korrekte Rechnung liefert

$$H_{SO} = \left(\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \right) \frac{1}{m^2 c^2 r^3} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \quad (24.1)$$

24.1 Spin-Bahn-Kopplung

24.2 Relativistische Korrektur

24.3 Vollständige Feinstrukturaufspaltung

Semiklassisches Modell

Korrekturterm der Spin-Bahn-Kopplung

Der Hamiltonoperator des Wasserstoffatoms ist dann gegeben durch

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} + H_{SO} \quad (24.2)$$

24.1.1 Konsequenz der Korrektur

S_k und L_k sind nicht mehr kompatibel mit H

Wir müssen feststellen, dass nun gilt

$$[H, S_k] = [H_{SO}, S_k] \propto \sum_j [S_j L_j, S_k] = i\hbar \sum_{ij} \epsilon_{ijk} S_i L_j \neq 0$$

$$[H, L_k] \neq 0$$

Die Operatoren L^2 und S^2 vertauschen weiterhin mit H , sind also noch *gute Quantenzahlen*. Es gibt aber keine gemeinsame Eigenbasis von S_k, L_k und H mehr. Das bedeutet, dass L und S für sich genommen keine Erhaltungsgrößen mehr sind. Stattdessen betrachtet man den Gesamtdrehimpuls

Gesamtdrehimpuls

$$\boxed{\mathbf{J} := \mathbf{L} + \mathbf{S}, \quad (24.3)}$$

dessen Komponenten mit H kommutieren:

$$[H, J_k] = [H_{SO}, J_k] \propto \sum_j ([S_j L_j, L_k] + [S_j L_j, S_k]) = i\hbar \sum_{ij} \epsilon_{ijk} (S_j L_i + S_i L_j) = 0$$

Bemerkung 24.1 (Allgemeine Vorgehensweise bei entartetem Niveau)

Praktische Vereinfachung zur Umgehung der entarteten Störungstheorie

Ist man mit einem entartetem Niveau $E^{(0)}$ konfrontiert und möchte den Einfluss eines Störterms W auf dieses Energieniveau berechnen, so muss man nach der entarteten Störungstheorie (in 1. Ordnung) die Matrix $\langle \psi_i^{(0)} | W | \psi_j^{(0)} \rangle$ diagonalisieren, wobei die $|\psi_i^{(0)}\rangle$ orthogonale Basisvektoren des entarteten Eigenraums sind. Die erhaltenen Eigenwerte sind dann die Korrekturen $E^{(1)}$ für die jeweiligen Eigenzustände $|\psi^{(1)}\rangle$. Umso höher die Entartung, desto aufwendiger ist natürlich die Berechnung und Diagonalisierung der Störmatrix. Es wäre deshalb von Vorteil, eine Methode zu finden, die dies zumindest teilweise erleichtert.

Tatsächlich erreicht man eine Vereinfachung, indem man einen hermiteschen Operator B findet, der mit $H^{(0)}$ und W vertauscht. Die gemeinsamen Eigenzustände $|\psi_b^{(0)}\rangle$ von B mit $H^{(0)}$ zu unterschiedlichen Eigenwerten von B sind dann die richtigen Zustände für die Entwicklung in nicht-entarteter Störungstheorie. Das heißt, man berechnet lediglich die Matrixelemente $\langle \psi_b^{(0)} | W | \psi_b^{(0)} \rangle$ um die Korrekturen in 1. Ordnung Störungstheorie des entarteten Niveaus zu erhalten, da die Matrixelemente jenseits der Diagonalen $\langle \psi_{b'}^{(0)} | W | \psi_b^{(0)} \rangle$ (für $b \neq b'$) verschwinden:

$$0 = \langle \psi_{b'}^{(0)} | [B, W] | \psi_b^{(0)} \rangle = \langle \psi_{b'}^{(0)} | BW | \psi_b^{(0)} \rangle - \langle \psi_{b'}^{(0)} | WB | \psi_b^{(0)} \rangle = (b' - b) W_{b'b}$$

Da $b \neq b'$ muss $W_{b'b} = \langle \psi_{b'}^{(0)} | W | \psi_b^{(0)} \rangle = 0$ sein. Die Störmatrix ist also in der Basis $\{|\psi_b^{(0)}\rangle\}$ diagonal. Dies ist eigentlich von vornherein klar, da W mit B laut Annahme vertauscht und somit simultane Eigenfunktionen existieren.

24.1.2 Spin-Bahn-Energieverschiebung

Anwendung der Störungstheorie auf die Spin-Bahn-Kopplung

Wir wollen nun für den Hamiltonoperator

$$H = H^{(0)} + H_{SO} = H^{(0)} + \frac{u}{r^3} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \quad (24.4)$$

die Korrektur des Energiespektrums in 1. Ordnung Störungstheorie berechnen. Da die Energieniveaus $E_n^{(0)} = -\frac{E_B}{n^2}$ mit zunehmendem n immer stärker entartet sind, lohnt es sich, die Eigenzustände in einem entarteten Eigenraum umzusortieren, sodass die Störmatrix einfach wird, nämlich Diagonalform annimmt. Laut Bemerkung 24.1 müssen wir zu diesem Zweck einen hermiteschen Operator suchen, der mit $H^{(0)}$ und H_{SO} vertauscht. Einen Solchen haben wir bereits¹:

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$$

Dass die Eigenzustände $|J, M\rangle = |J, M; l, s\rangle$ von \mathbf{J}^2 aus Gl. (19.5) auch Eigenzustände von $\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$ sind, also die Störmatrix in der Basis aus den Vektoren $|J, M; l, s\rangle$ diagonal wird, sieht man auch wie folgt:

$$\begin{aligned} \mathbf{J}^2 &= (\mathbf{S} + \mathbf{L})^2 = \mathbf{S}^2 + \mathbf{L}^2 + 2\mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \\ \langle \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \rangle &= \frac{1}{2} \langle J, M; l, s | (\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2) | J', M'; l', s' \rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{2} (J(J+1) - l(l+1) - s(s+1)) \end{aligned}$$

Eigenwerte von $\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$

Für Elektronen ist $s = \frac{1}{2}$ und laut Gl. (19.3) ist somit $J = l + \frac{1}{2}$ oder $J = l - \frac{1}{2}$. Damit hat $\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$ die Eigenwerte

$$\frac{\hbar^2}{2} \left(J - \frac{1}{2} \right), \quad -\frac{\hbar^2}{2} \left(J + \frac{3}{2} \right) \quad (24.5)$$

Um die gesamte Korrektur $\langle H_{SO} \rangle$ zu erhalten, benötigen wir noch den Erwartungswert

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{1}{l(l + \frac{1}{2})(l + 1)n^3 a^3} \quad (24.6)$$

Diesen erhält man aus einer längeren Rechnung, die in der Literatur zu finden ist². Das neue Niveau $E_n^{(1)}$ ist also nur noch bezüglich M entartet. Insgesamt erhalten wir die *Spin-Bahn-Energieverschiebung* für die $(2J + 1)$ Eigenzustände mit Gesamtdrehimpuls J

Energieverschiebung durch die Spin-Bahn-Kopplung

$$\begin{aligned} \langle H_{SO} \rangle &= \langle n; J, M; l, s = 1/2 | H_{SO} | n; J, M; l, s = 1/2 \rangle \\ &= \frac{(E_n^{(0)})^2}{mc^2} \frac{n (J(J+1) - l(l+1) - \frac{3}{4})}{l(l + \frac{1}{2})(l + 1)} \end{aligned} \quad (24.7)$$

¹Wir halten nochmals fest: $\mathbf{L}^2, \mathbf{S}^2, \mathbf{J}^2, J_z, H$ sind kompatibel.

²Zum Beispiel in *Introduction to Quantum Mechanics* von David J. Griffiths.

24.2 Relativistische Korrektur

Relativistischer
Korrekturterm

In Aufgabe 43 wird die Korrektur der relativistischen kinetischen Energie berechnet. Der Hamiltonoperator muss mit

$$H_r = -\frac{p^4}{8m^3c^2} \quad (24.8)$$

korrigiert werden, was in 1. Ordnung Störungstheorie eine Verschiebung des Energieniveaus um

Energieverschiebung
durch die
relativistische
Korrektur

$$E_r^{(1)} = \langle H_r \rangle = -\frac{(E_n^{(0)})^2}{2mc^2} \left(\frac{4n}{l + \frac{1}{2}} - 3 \right) \quad (24.9)$$

bewirkt.

24.3 Vollständige Feinstrukturaufspaltung

Energieverschiebung
der vollständigen
Feinstrukturaufspaltung

Die beiden Korrekturen fassen wir unter der Feinstrukturaufspaltung zusammen:

$$E_{fs} = E_r^{(1)} + E_{SO}^{(1)} = \dots = \frac{(E_n^{(0)})^2}{2mc^2} \left(3 - \frac{4n}{J + \frac{1}{2}} \right) \quad (24.10)$$

Die Abhängigkeit von der Drehimpulsquantenzahl l verschwindet zufällig bei Addition dieser Terme.

Notieren wir noch das gesamte Wasserstoffspektrum mit Feinstruktur

Wasserstoffspektrum
mit Feinstruktur

$$E_{nJ} = -\frac{13,6 \text{ eV}}{n^2} \left[1 + \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{J + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \right] \quad (24.11)$$

mit der Entartung $(2J+1)$ der Quantenzahl M . α ist die *Feinstrukturkonstante*³

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \approx \frac{1}{137} \quad (24.12)$$

³Sie wurde 1916 von Arnold Sommerfeld eingeführt und wird deshalb auch oft Sommerfeldkonstante oder Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante genannt. Dieser Zahl wird eine hohe Bedeutsamkeit zugesprochen, da sie unter anderem drei sehr wichtige Gebiete der Physik verknüpft: Elektromagnetismus (e), Relativität (c) und Quantenmechanik (\hbar). Ein Zitat von R. P. Feynman: *It has been a mystery ever since it was discovered more than fifty years ago, and all good theoretical physicists put this number up on their wall and worry about it.* (QED – The strange theory of light and matter, Princeton University Press 1985, p. 129).

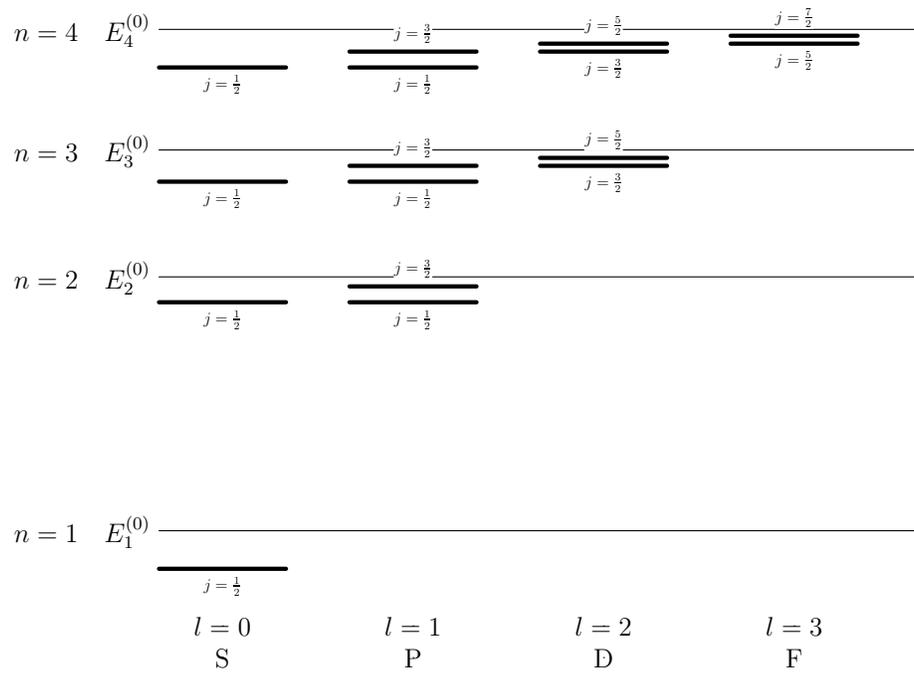


Abbildung 24.1: Energiespektrum des Wasserstoffatoms mit Feinstruktur

Kapitel 25

Zeeman-Effekt

Als *Zeeman-Effekt* bezeichnet man das mehrfache Aufspalten des Energiespektrums eines Atoms, das auftritt, wenn sich dieses in einem externen Magnetfeld \mathbf{B} befindet. Das Phänomen wurde erstmals 1896 von Pieter Zeeman beschrieben, wofür er 1902 den Nobelpreis für Physik erhielt.

Der Störterm für ein einzelnes Elektron (z.B. im Wasserstoffatom) in einem Magnetfeld \mathbf{B} ist gegeben durch

$$H_z = -(\boldsymbol{\mu}_l + \boldsymbol{\mu}_s) \cdot \mathbf{B} \quad (25.1)$$

Dabei sind die magnetischen Dipolmomente über folgende Gleichungen mit dem Spin \mathbf{S} und dem Drehimpuls \mathbf{L} verknüpft:

$$\boldsymbol{\mu}_s = -\frac{e}{m}\mathbf{S} \quad , \quad \boldsymbol{\mu}_l = -\frac{e}{2m}\mathbf{L} \quad (25.2)$$

Der gesamte Hamiltonoperator für das Wasserstoffatom hat dann die Form

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} - \underbrace{\frac{\mathbf{p}^4}{8m^3c}}_{H_{fs}} + \underbrace{\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \frac{\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}}{m^2c^2r^3}}_{H_z} + \underbrace{\frac{e}{2m}(\mathbf{L} + 2\mathbf{S})\mathbf{B}}_{H_z} \quad (25.3)$$

25.1 Problematik und allgemeiner Ansatz

Da wir nun zwei Störterme haben, für die wir keine Observable finden können, die gleichzeitig mit beiden kommutiert¹, können wir die Vereinfachung aus Bemerkung 24.1 zur Vermeidung entarteter Störungstheorie nicht verwenden.

¹Der Hamiltonoperator kommutiert z.B. nicht mehr mit \mathbf{J} , da $[H, \mathbf{J}] = [H_z, \mathbf{J}] \propto [\mathbf{S} \cdot \mathbf{B}, \mathbf{J}] \neq 0$

25.1 Problematik und allgemeiner Ansatz

25.2 Zeeman-Effekt bei schwachem Magnetfeld

25.3 Zeeman-Effekt bei starkem Magnetfeld

Drehimpulse und magnetische Momente

Exakter Hamiltonoperator mit allen Störtermen

Problematik

Allgemeiner Ansatz

Wir untersuchen deshalb zwei Grenzfälle, nämlich wenn einer der beiden problematischen Störterme viel „größer“ ist als der andere, das heißt, wenn die Beiträge zur Energieverschiebung sich sehr unterscheiden. In solchen Fällen führt man die Störungstheorie in zwei Schritten durch:

- (i) Berechnung der Energieverschiebung und der gestörten Eigenzustände für den „größeren“ Störterm;
- (ii) Berechnung der Energieverschiebung des „kleinen“ Störterms mit den Eigenzuständen aus (i).

25.2 Zeeman-Effekt bei schwachem Magnetfeld

O.B.d.A. können wir $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$ annehmen. Ist das Magnetfeld so schwach, dass H_{fs} dominiert, so haben wir Schritt (i) bereits erledigt und können für (ii) das bekannte Ergebnis aus dem Abschnitt über die Spin-Bahn-Kopplung verwenden. Wir benötigen lediglich eine Darstellung für die Eigenzustände $|n; J, M; l\rangle$, die laut (19.5) eine Linearkombination der bekannten Zustände $|n; l, m_l; s = 1/2, m_s\rangle$ mit den Clebsch-Gordan Koeffizienten

$$\langle l, m_l; 1/2, m_s | J, M \rangle$$

Berechnung der Clebsch-Gordan Koeffizienten

ist. Diese werden in Aufgabe 45 berechnet. J kann die Werte $l + \frac{1}{2}$ und $l - \frac{1}{2}$ annehmen. Im Falle $J = l + \frac{1}{2}$ erhält man

$$\begin{aligned} \langle l, m_l; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | l + \frac{1}{2}, m_l + \frac{1}{2} \rangle &= \sqrt{\frac{l + m_l + 1}{2l + 1}} \\ \langle l, m_l; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | l + \frac{1}{2}, m_l - \frac{1}{2} \rangle &= \sqrt{\frac{l - m_l + 1}{2l + 1}} \end{aligned}$$

Durchführung von Schritt (ii)

Damit können wir den gewünschten Störterm in 1. Ordnung Störungstheorie berechnen:

$$\begin{aligned} \langle L_z + 2S_z \rangle &= \langle n; J, M; l | L_z + 2S_z | n; J, M; l \rangle \\ &= \hbar \sum_{m_l, m_s} (m_l + 2m_s) |\langle l, m_l; 1/2, m_s | J, M \rangle|^2 = \dots = \hbar \frac{2J + 1}{2J} M \end{aligned}$$

Zeeman-Effekt bei schwachem Magnetfeld für $J = l + \frac{1}{2}$

Das heißt, für ein kleines Magnetfeld spalten die Zustände mit $J = l + \frac{1}{2}$ folgendermaßen auf:

$$\boxed{E_{n,J,M}(B) = E_{n,J} + \mu_B g B M} \quad (25.4)$$

mit dem *Bohrschen Magneton* $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$ und dem *Landé-Faktor* $g = \frac{2J+1}{2J}$. Für $J = l - 1/2$ erhält man dasselbe Ergebnis mit $g = 1 + \frac{1}{2(J+1)}$.

25.3 Zeeman-Effekt bei starkem Magnetfeld

Jetzt betrachten wir zuerst

$$H = H^{(0)} + H_z$$

(i) Energieverschiebung durch größeren Störterm

Da S_z und L_z mit H_z vertauschen, sind die Eigenzustände die bekannten Kets $|n; l, m_l; \frac{1}{2}, m_s\rangle$. Die Energieverschiebung berechnet sich dann zu

$$E_{n, m_l, m_s} = E_n^{(0)} + \langle H_z \rangle = E_n^{(0)} + \mu_B B (m_l + 2m_s) \quad (25.5)$$

Im zweiten Schritt können wir auf den Störterm H_{fs} die nicht-entartete Störungstheorie anwenden:

$$\langle S \cdot L \rangle = \langle S_x \rangle \langle L_x \rangle + \langle S_y \rangle \langle L_y \rangle + \langle S_z \rangle \langle L_z \rangle = \hbar^2 m_l m_s \quad (25.6)$$

(ii) Energieverschiebung durch kleineren Störterm

Die Erwartungswerte $\langle S_x \rangle$, $\langle S_y \rangle$, $\langle L_x \rangle$, $\langle L_y \rangle$ verschwinden in Eigenzuständen von L_z, S_z . Fügt man die relativistische Korrektur hinzu, so erhält man insgesamt für die Energieverschiebung in Schritt (ii)

$$E_{fs}^{(1)} = \frac{13,6eV}{n^3} \alpha^2 \left[\frac{3}{4n} - \left(\frac{l(l+1) - m_l m_s}{l(l+1/2)(l+1)} \right) \right] \quad (25.7)$$

Kapitel 26

Zeitabhängige Störungstheorie

Zeitabhängiges Störproblem

Mit der zeitabhängigen Störungstheorie kann man Probleme untersuchen, die durch einen zeitabhängigen Hamiltonoperator beschrieben werden, der die Form

$$H(t) = H^{(0)} + W(t) \quad (26.1)$$

annimmt, also einen zeitabhängigen Störterm $W(t)$ besitzt. Wie wir mit solchen Problemstellungen umgehen sollten, können wir am einfachsten herleiten, indem wir uns das sog. *Wechselwirkungsbild* der Quantenmechanik zunutze machen.

26.1 Wechselwirkungsbild
26.2 Zeitabhängige Störungstheorie 1. Ordnung
26.3 Übergangswahrscheinlichkeit

26.1 Wechselwirkungsbild

Neben dem Schrödinger- und Heisenbergbild gibt es ein weiteres Bild, das Wechselwirkungsbild der Quantenmechanik (auch *Dirac-Bild* genannt). Anwendung findet diese Darstellung vor allem in Systemen, in denen der Hamiltonoperator die Form aus Gl. (26.1) annimmt. Der gesamte Hamiltonoperator wirkt dabei auf die zeitliche Entwicklung von Observablen und Zuständen: Die Zeitentwicklung, die $H^{(0)}$ verursacht, wird der zeitlichen Abhängigkeit der Operatoren zugeschrieben, während die von W verursachte Zeitabhängigkeit in die Entwicklung des Zustandes eingeht.

Definition 26.1.

Wir definieren den Zeitentwicklungsoperator für Zustände im Wechselwirkungsbild $U_I(t, t_0)$ über die Aufspaltung des gesamten Zeitentwicklungsoperators $U(t, t_0)$:

$$U(t, t_0) = U^{(0)}(t, t_0)U_I(t, t_0) \quad (26.2)$$

mit $U^{(0)}(t, t_0) = e^{-iH^{(0)}(t-t_0)/\hbar}$.

Aufspaltung der Zeitentwicklung

Für den Operator $U_I(t, t_0)$ können wir mit der Schrödinger-Gleichung für den Zeitentwicklungsoperator eine Operatorgleichung entwickeln:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_I(t, t_0) = H^{(0)} U(t, t_0) + U^{(0)}(t, t_0) i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_I(t, t_0) \quad (26.3)$$

$$\stackrel{!}{=} H U(t, t_0) = H^{(0)} U(t, t_0) + W(t) U(t, t_0) \quad (26.4)$$

Satz 26.1 (Dynamik von $U_I(t, t_0)$)

$U_I(t, t_0)$ erfüllt die Gleichung

Bewegungsgleichung
für $U_I(t, t_0)$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_I(t, t_0) = W_I(t, t_0) U_I(t, t_0) \quad (26.5)$$

mit $W_I(t, t_0) := [U^{(0)}(t, t_0)]^\dagger W(t) U^{(0)}(t, t_0)$.

Definition 26.2 (Operatoren im Wechselwirkungsbild).

Observablen im
Wechselwirkungs-
bild

Eine Observable $O_s(t)$ aus dem Schrödinger-Bild (mit womöglicher expliziter Zeitabhängigkeit) wird im Wechselwirkungsbild zu einem zeitabhängigen Operator $O_I(t, t_0)$, wobei seine neue zeitliche Abhängigkeit nur durch den Hamiltonoperator $H^{(0)}$ bestimmt wird:

$$\begin{aligned} O_I(t, t_0) &:= [U^{(0)}(t, t_0)]^\dagger O_s(t) U^{(0)}(t, t_0) \\ &= e^{iH^{(0)}(t-t_0)/\hbar} O_s(t) e^{-iH^{(0)}(t-t_0)/\hbar} \end{aligned} \quad (26.6)$$

Wie die Zeitabhängigkeit der Zustände zustande kommt wird klar, wenn wir den zeitabhängigen Erwartungswert einer Observablen aus dem Blickwinkel des Wechselwirkungsbilds betrachten:

$$\begin{aligned} \langle O \rangle(t) &= \langle \psi_0 | U^\dagger(t, t_0) O_s(t) U(t, t_0) | \psi_0 \rangle \\ &= \langle \psi(t_0) | U_I^\dagger(t, t_0) O_I(t, t_0) U_I(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle \\ &= \langle \psi(t) | O_I(t, t_0) | \psi_I(t) \rangle \end{aligned}$$

Satz 26.2 (Zustände im Wechselwirkungsbild)

Zustände im Wech-
selwirkungsbild

Im Wechselwirkungsbild erhält man die zeitliche Entwicklung eines Zustands $|\psi(t_0)\rangle$ durch das Anwenden des Operators $U_I(t, t_0)$:

$$|\psi_I(t)\rangle = U_I(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad (26.7)$$

Mithilfe von Gl. (26.5) sieht man, dass $|\psi_I(t)\rangle$ die Differentialgleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_I(t)\rangle = W_I(t, t_0) |\psi_I(t)\rangle \quad (26.8)$$

erfüllt.

Bemerkung 26.1 (Integralgleichung)

Die zu Gl. (26.5) äquivalente Integralgleichung lautet

$$U_I(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t W_I(\tau, t_0) U_I(\tau, t_0) d\tau \quad (26.9)$$

26.2 Zeitabh. Störungstheorie 1. Ordnung

Für kleine Störungen W können wir – ausgehend von Gl. (26.9) – eine iterative Lösung für den Zeitentwicklungsoperator $U_I(t, t_0)$ entwickeln:

$$\begin{aligned} U_I(t, t_0) &= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau W_I(\tau, t_0) \left(1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{\tau} d\tau' W_I(\tau', t_0) U_I(\tau', t_0) \right) \\ &= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau W_I(\tau, t_0) \\ &\quad - \frac{1}{\hbar^2} \int_{t_0}^t d\tau W_I(\tau, t_0) \int_{t_0}^{\tau} d\tau' W_I(\tau', t_0) + \mathcal{O}(W_I^3) \end{aligned} \quad (26.10)$$

Zeitentwicklungsoperator in zeitabhängiger Störungstheorie 1. Ordnung

Zeitabhängige Störungstheorie 1. Ordnung: $U_I(t, t_0)$

In zeitabhängiger Störungstheorie erster Ordnung ist der Zeitentwicklungsoperator $U_I(t, t_0)$ im Wechselwirkungsbild gegeben durch

$$U_I(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau W_I(\tau, t_0) \quad (26.11)$$

Bemerkung 26.2

Für zeitunabhängige Hamiltonoperatoren bleiben Eigenzustände in der Zeitentwicklung unverändert (stationäre Zustände). Zeitabhängige Störungen verursachen allerdings Übergänge zwischen verschiedenen Eigenzuständen. Solche Übergänge bezeichnet man auch also *Quantensprünge*.

26.3 Übergangswahrscheinlichkeit

Da die Eigenzustände eines zeitabhängigen Hamiltonoperators ebenfalls zeitabhängig sind, interessieren wir uns nun für die Zeitabhängigkeit der Messwahrscheinlichkeit:

Fragestellung

Das System sei zur Zeit $t = 0$ im Eigenzustand $|i\rangle$ des Hamiltonoperators $H^{(0)}$.

Übergangswahrscheinlichkeit

Wir schalten dann eine zeitabhängige Störung an. Mit welcher Wahrscheinlichkeit findet man das System zur Zeit t im Eigenzustand $|f\rangle$ von $H^{(0)}$ (O.B.d.A. können wir von $\langle i|f\rangle = 0$ ausgehen)?

$$\begin{aligned} p_{i \rightarrow f}(t) &= |\langle f|i(t)\rangle|^2 = |\langle f|U(t)|i\rangle|^2 = |\langle f|U_I(t)|i\rangle|^2 \\ &= \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t d\tau \langle f|e^{iH^{(0)}\tau/\hbar} W(\tau) e^{-iH^{(0)}\tau/\hbar}|i\rangle \right|^2 \\ &= \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t d\tau e^{i\omega_{fi}\tau} W_{fi}(\tau) \right|^2 \end{aligned} \quad (26.12)$$

mit folgenden Definitionen für ω_{fi} und W_{fi} :

Definition 26.3 (Übergangsfrequenz und Übergangsmatrixelement).

Def.:
Übergangsfrequenz,
Übergangsmatrix

Wir definieren die Übergangsfrequenz ω_{fi} zu

$$\omega_{fi} = \frac{E_f^{(0)} - E_i^{(0)}}{\hbar} \quad (26.13)$$

und das Übergangsmatrixelement

$$W_{fi}(\tau) = \langle f|W(\tau)|i\rangle \quad (26.14)$$

26.3.1 Spezialfall: Periodische Störungen

Periodische Störung

Sei nun speziell

$$W(t) = W \cos(\omega t) \quad (26.15)$$

damit ergibt sich für die Wahrscheinlichkeit $p_{i \rightarrow f}(t)$:

$$\begin{aligned} p_{i \rightarrow f}(t) &= \frac{1}{\hbar^2} |W_{fi}|^2 \left| \int_0^t d\tau e^{i\omega_{fi}\tau} \frac{e^{i\omega\tau} - e^{-i\omega\tau}}{2} \right|^2 \\ &= \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2} \left| \frac{e^{i(\omega_{fi}+\omega)t} - 1}{\omega_{fi} + \omega} + \frac{e^{i(\omega_{fi}-\omega)t} - 1}{\omega_{fi} - \omega} \right|^2 \end{aligned} \quad (26.16)$$

Im Folgenden wollen wir nur den Fall betrachten, dass die externen Frequenzen in der Nähe der Übergangsfrequenz sind, das heißt

$$\omega_{fi} + \omega \gg |\omega_{fi} - \omega| \quad (26.17)$$

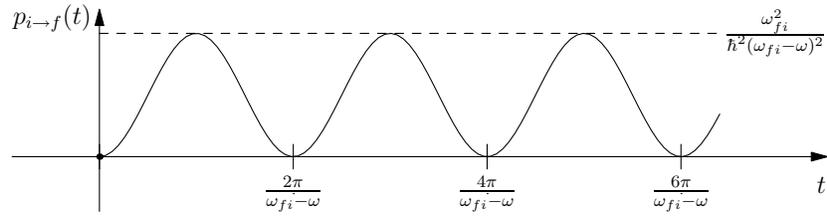


Abbildung 26.1: Periodische Übergangswahrscheinlichkeit bei periodischen Störungen

Dann erhalten wir

$$p_{i \to f}(t) = \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2} \frac{|e^{i(\omega_{fi}-\omega)t} - 1|^2}{(\omega_{fi} - \omega)^2} = \frac{|W_{fi}|^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2((\omega_{fi} - \omega)t/2)}{(\omega_{fi} - \omega)^2} \quad (26.18)$$

Bemerkung 26.3 (Beobachtungen)

- (i) Die Übergangswahrscheinlichkeiten sind nur zu bestimmten Zeiten maximal (Rabi-Oszillationen).
- (ii) Die Übergangswahrscheinlichkeiten sind in der Nähe der Resonanz (d.h. bei $\omega \approx \omega_{fi}$) am größten.
- (iii) Die hier behandelte Störungstheorie 1. Ordnung bricht zusammen, wenn $\frac{|W_{fi}|^2}{\hbar^2 (\omega_{fi} - \omega)^2}$ nicht mehr klein ist (bzw. falls das Maximum der Wahrscheinlichkeit größer 1 ist).

26.4 Emission und Absorption von Strahlen

26.4.1 Elektromagnetische Wellen

Bei der Wechselwirkung von elektromagnetischen Strahlen und Atomen, erfahren Elektronen ein zeitabhängiges elektrisches Feld $\mathbf{E}(t)$. Hier wollen wir speziell eine linear polarisierte monochromatische elektromagnetische Welle betrachten, die am Ort eines Elektrons das \mathbf{E} -Feld

$$\mathbf{E}(t) = E_0 \cos(\omega t) \mathbf{e}_z \quad (26.19)$$

bewirkt. Dies können wir mittels zeitabhängiger Störungstheorie behandeln, indem wir den entsprechenden Störterm

$$W(t) = -q\hat{z}E_0 \cos(\omega t) \quad (26.20)$$

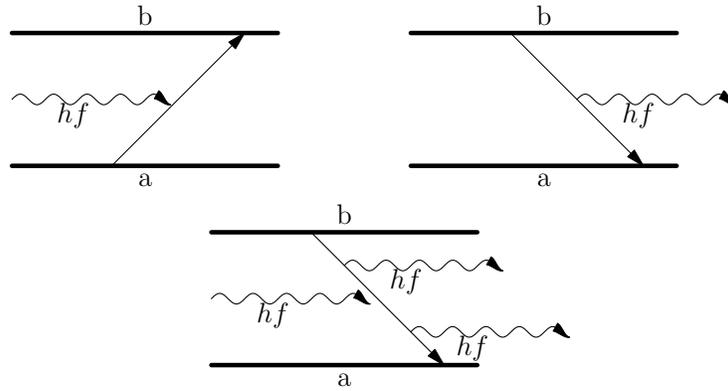


Abbildung 26.2: Absorption, stimulierte Emission und spontane Emission von Photonen.

einführen.

Übergangswahrscheinlichkeit

Die Wahrscheinlichkeit, um von einem niedrigeren Zustand $|\psi_a\rangle$ in einen höheren Zustand $|\psi_b\rangle$ überzugehen, ergibt sich aus (26.18) zu

$$p_{a \rightarrow b} = \left(\frac{|\mathcal{P}|E_0}{\hbar} \right)^2 \frac{\sin^2[(\omega_0 - \omega)t/2]}{(\omega_0 - \omega)^2} \quad (26.21)$$

Def.: elektrisches Dipolmoment

mit dem elektrischen Dipolmoment $\mathcal{P} = -q\langle\psi_b|\hat{z}|\psi_a\rangle$ und der Übergangsfrequenz $\omega_0 = \frac{E_b - E_a}{\hbar}$.

Absorption und Emission im Teilchenbild

Bemerkung 26.4 (Absorption und Emission)

Bei einem solchen Übergang spricht man im Teilchenbild von der Absorption eines Photons (vgl. Abb. 26.2). Der umgekehrte Prozess – die stimulierte Emission – besitzt dieselbe Übergangswahrscheinlichkeit $p_{b \rightarrow a} = p_{a \rightarrow b}$. Dabei wird durch ein einlaufendes Photon die Emission eines zusätzlichen Photons stimuliert. Allerdings gibt es einen zusätzlichen Übergang: Die spontane Emission. Dieser Prozess findet im Rahmen der Quantenmechanik keine Erklärung.

26.4.2 Auswahlregeln

Für kugelsymmetrische Hamiltonoperatoren haben die Eigenfunktionen folgende Struktur:

$$\psi(\mathbf{x}) = R_{n,l}(r)Y_l^m(\theta, \phi) \quad (26.22)$$

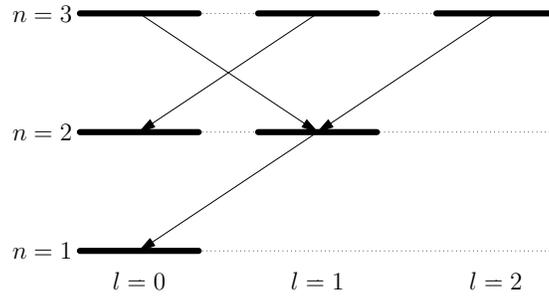


Abbildung 26.3: Mögliche Übergänge im Wasserstoffspektrum.

Damit lässt sich eine Proportionalität für das Dipolmoment feststellen:

$$\mathcal{P} \propto \int d\Omega Y_{l_b}^{m_b}(\theta, \phi) Y_1^0(\theta, \phi) Y_1^0(\theta, \phi) Y_{l_a}^{m_a}(\theta, \phi) \quad (26.23)$$

da $z = r \cos \theta = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r Y_1^0(\theta)$. Aus der Theorie über die Addition von Drehimpulsen wissen wir, dass $Y_1^0(\theta) Y_{l_a}^{m_a}(\theta, \phi)$ in Kugelflächenfunktionen mit $l = l_a + 1, l_a, l_a - 1$ zerlegt werden kann. Das Integral (26.23) ergibt aber nur für $l_b = l_a \pm 1$ und $m_b = m_a$ einen von Null verschiedenen Wert.

Auswahlregel

Damit erhalten wir Auswahlregel

$$\Delta l = l_b - l_a = \pm 1 \quad (26.24)$$

Das bedeutet: Es gibt keine einzelnen Übergänge innerhalb der Menge von Orbitalen mit gleicher Drehimpulsquantenzahl (vgl. Abb. 26.3).

26.4.3 Inkohärente Störungen

Die Energiedichte einer monochromatischen elektromagnetischen Welle im Vakuum ist gegeben durch $u = \frac{\epsilon_0}{2} E_0^2$. Damit können wir die Übergangswahrscheinlichkeit schreiben als

$$p_{a \rightarrow b} = \frac{2u}{\epsilon_0 \hbar^2} |\mathcal{P}|^2 \frac{\sin^2[(\omega_0 - \omega)t/2]}{(\omega_0 - \omega)^2} \quad (26.25)$$

Rabi-Oszillationen sind in der Regel nicht beobachtbar, weil Licht normalerweise nicht streng monochromatisch ist. Das heißt, die Energiedichte geht über in

$$u \rightarrow \rho(\omega) d\omega \quad (26.26)$$

Übergangswahrscheinlichkeit für polychromatische Wellen

Nehmen wir zusätzlich an, dass sich $\rho(\omega)$ bei Variation von ω im Vergleich zum

restlichen Integrand wenig ändert, dann erhalten wir für die Übergangswahrscheinlichkeit

$$p_{a \rightarrow b} = \frac{2\rho(\omega_0)}{\varepsilon_0 \hbar^2} |\mathcal{P}|^2 \int_0^\infty d\omega \frac{\sin^2[(\omega_0 - \omega)t/2]}{(\omega_0 - \omega)^2} = \frac{\pi\rho(\omega_0)}{\varepsilon_0 \hbar^2} |\mathcal{P}|^2 t \quad (26.27)$$

Übergangsrate

Die Übergangsrate $w_{a \rightarrow b} = \dot{p}_{a \rightarrow b}$ ist konstant:

$$w_{a \rightarrow b} = \frac{\pi\rho(\omega_0)}{\varepsilon_0 \hbar^2} |\mathcal{P}|^2 \quad (26.28)$$

26.5 Fermis Goldene Regel

Wir interessieren uns im Folgenden für den Übergang zwischen einem diskreten Niveau $|\psi_i\rangle$ und einem Zustand $|E_f\rangle$ aus einem kontinuierlichen Spektrum.

26.5.1 Konstante Störung

Zunächst schalten wir zur Zeit $t = 0$ eine konstante Störung W ein:

$$p_{i \rightarrow [f]} \stackrel{\omega \equiv 0}{=} \frac{|W_{fi}|^2}{\hbar^2} \frac{4 \sin^2(\omega_{fi}t/2)}{\omega_{fi}^2} \rho(E_f) dE_f$$

Dabei ist mit $[f]$ die Menge aller Zustände im Energieintervall $[E_f - \Delta E/2, E_f + \Delta E/2]$ gemeint und $\rho(E)$ ist die zugehörige Zustandsdichte¹. Im Grenzübergang für sehr lange Zeiten ($t \rightarrow \infty$) können wir schreiben

$$\begin{aligned} p_{i \rightarrow [f]} &\rightarrow \int_{E_f - \Delta E/2}^{E_f + \Delta E/2} \frac{|W_{fi}|^2}{\hbar^2} \pi t \delta\left(\frac{E'_f - E_i}{2\pi}\right) \rho(E'_f) dE'_f \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} t |W_{fi}|^2 \rho(E_f) \quad (\text{Für } E_f \neq E_i \text{ ist } p_{i \rightarrow [f]} = 0) \end{aligned} \quad (26.29)$$

Fermis Goldene Regel

Und für die Übergangsrate im Zustand gleicher Energie im Kontinuum ergibt sich

$$w_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |W_{fi}|^2 \rho(E_f) \quad (26.30)$$

¹Das Integral $\int_{E_f - \Delta E/2}^{E_f + \Delta E/2} \rho(E) dE$ gibt damit die Anzahl der Eigenzustände in diesem Intervall an.

26.5.2 Periodische Störung

Für eine periodische Störung $W(t) = W \cos(\omega t)$ ist

$$w_{i \rightarrow f} = \frac{\pi}{2\hbar} |W_{fi}|^2 \rho(E_f) \quad \text{mit } E_f = E_i \pm \hbar\omega \quad (26.31)$$

Teil VI

Variationsrechnung

Kapitel 27

Variationswellenfunktion

Wollen wir die Grundzustandsenergie E_g eines Systems berechnen, das durch den Hamiltonoperator H beschrieben wird, können aber die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung nicht analytisch lösen, so ist folgende Abschätzung hilfreich:

Satz 27.1 (Obere Schranke der Grundzustandsenergie)

Für alle normierten Zustandsvektoren $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ gilt

$$\langle \psi | H | \psi \rangle \geq E_g \quad (27.1)$$

Beweis: Wir können jeden Zustand $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ in die Eigenzustände $|\phi_n\rangle$ von H zerlegen:

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |\phi_n\rangle$$

Damit ist

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \sum_{n,m} E_m c_n^* c_m \langle \phi_n | \phi_m \rangle = \sum_n |c_n|^2 E_n \geq E_g \sum_n |c_n|^2 = E_g \quad \square$$

Beispiel 27.1 (Grundzustandsenergie des Heliumatoms)

Der Hamiltonoperator des Heliumatoms ist nach (22.1) gegeben durch

$$\begin{aligned} H &= -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{2}{r_1} + \frac{2}{r_2} - \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right) \\ &= H_1^{(0)} + H_2^{(0)} + V_{ee} \end{aligned}$$

Die separierten Hamiltonoperatoren $H_1^{(0)}$ und $H_2^{(0)}$ sind Hamiltonoperatoren eines Problems analog zum Wasserstoffatom mit Kernladungszahl $Z = 2$. Wie

in Abschnitt (22.1) bereits erwähnt, ist die Schrödinger-Gleichung mit dem Hamiltonoperator in dieser Form nicht analytisch geschlossen lösbar.

Experimenteller Wert

Wir suchen nun eine geeignete Variationswellenfunktion, um mit der oberen Grenze für die Grundzustandsenergie möglichst nahe an den experimentell gemessenen Wert von

$$E_{gs}^{He} \approx -78.98 \text{ eV} \quad (27.2)$$

heranzukommen.

1. Versuch:

1. Versuch:
Variation mit bekannter Wellenfunktion

Für den Hamiltonoperator $H_1^{(0)} + H_2^{(0)}$ kennen wir die Grundzustandswellenfunktion bereits. Die beiden ununterscheidbaren Fermionen müssen eine antisymmetrische Gesamtwellenfunktion besitzen, die aus der Spin- und Ortswellenfunktion besteht. Die Ortswellenfunktion im Grundzustand ψ_g muss – um normierbar zu bleiben – symmetrisch sein:

$$\psi_g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_{100}(\mathbf{r}_1)\psi_{100}(\mathbf{r}_2) \stackrel{(16.23)}{=} \frac{8}{\pi a_0^3} e^{-2(r_1+r_2)/a} \quad (27.3)$$

mit Bohrschem Radius a_0 und Kernladungszahl $Z = 2$. Wenden wir nun diese Variationswellenfunktion an:

$$\langle \psi_g | H | \psi_g \rangle = \langle \psi_g | H_1^{(0)} + H_2^{(0)} + V_{ee} | \psi_g \rangle = 8E_1 + \langle \psi | V_{ee} | \psi \rangle \quad (27.4)$$

Dabei wurde verwendet: $H_i^{(0)}\psi_{100}(\mathbf{r}_i) = Z^2 E_1 = 4E_1$ ($i = 1, 2$) mit der Grundzustandsenergie E_1 des Wasserstoffatoms¹. Die Berechnung des Erwartungswerts $\langle \psi_g | V_{ee} | \psi_g \rangle = -\frac{5}{2}E_1$ ist sehr mühsam, weshalb wir die Lösung ohne Rechnung angeben². Insgesamt erhalten wir als obere Grenze

Obere Grenze im 1. Versuch

$$E_{gs} \leq \frac{11}{2}E_1 \approx -75 \text{ eV} \quad (27.5)$$

Diese Abschätzung ist zwar nicht weit vom richtigen Wert entfernt, doch wollen wir uns noch nicht damit zufrieden geben.

2. Versuch:

2. Versuch:
Variation mit Parameter Z_{eff}

Oft kann man mit ein wenig physikalischer Intuition einen Ansatz für eine Variationswellenfunktion machen, die dem wirklichen Grundzustand sehr nahe kommt. Im vorliegenden Problem bewirkt die zusätzliche Elektron-Elektron-Wechselwirkung eine teilweise Abschirmung der Kernladung Z für eines der

¹Gl.(27.4) kann auch als Anwendung der Störungstheorie erster Ordnung für die Energieverschiebung im Grundzustand mit Störterm V_{ee} interpretiert werden.

²Eine Rechnung ist z.B. in *Introduction to Quantum Mechanics* von *David J. Griffiths* ab Seite 262 zu finden.

Elektronen. Deshalb wählen wir eine wasserstoffartige Wellenfunktion mit einer zunächst beliebigen Kernladungszahl Z_{eff} als Variationsparameter.

Variationswellenfunktion mit Parameter

Die symmetrische Ortswellenfunktion der beiden Elektronen im Grundzustand ist für beliebige Kernladungszahlen gegeben durch

$$\psi_0^{Z_{eff}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{Z_{eff}^3}{\pi a^3} e^{-Z_{eff}(r_1+r_2)/a_0} \quad (27.6)$$

In der Praxis würde man nun eine numerische Berechnung des Erwartungswerts $\langle H \rangle$ durchführen. Im vorliegenden Fall kann allerdings eine analytische Methode angewandt werden – was normalerweise eher selten der Fall ist.

Berechnung mithilfe eines analytischen Tricks

Zunächst zerlegen wir den Hamiltonoperator des Heliumatoms (22.1) in zwei Terme (eine Art Teleskopsumme):

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{Z_{eff}}{r_1} + \frac{Z_{eff}}{r_2} \right) \quad (=: H_{Z_{eff}}) \\ + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{Z_{eff}-2}{r_1} + \frac{Z_{eff}-2}{r_2} + \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right)$$

Für die Berechnung von $\langle \psi_0^{Z_{eff}} | H | \psi_0^{Z_{eff}} \rangle$ benötigen wir folgende Ausdrücke³

$$H_{Z_{eff}} \psi_0^{Z_{eff}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 2Z_{eff}^2 E_1 \psi_0^{Z_{eff}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \\ \langle \psi_0^{Z_{eff}} | \frac{1}{r} | \psi_0^{Z_{eff}} \rangle = \dots = \frac{Z_{eff}}{a_0} \\ \langle \psi_0^{Z_{eff}} | V_{ee} | \psi_0^{Z_{eff}} \rangle = \dots = -\frac{5}{4} Z_{eff} E_1$$

Damit ergibt sich

$$\langle \psi_0^{Z_{eff}} | H | \psi_0^{Z_{eff}} \rangle = \underbrace{\left(2Z_{eff}^2 - 4Z_{eff}(Z_{eff}-2) - \frac{5}{2} Z_{eff} \right)}_{=: f(Z_{eff})} E_1 \quad (27.7)$$

Wir suchen eine möglichst kleine obere Schranke, also wählen wir Z_{eff} so, dass dieser Erwartungswert minimal wird:

$$f'(Z_{eff}) = -4Z_{eff} + \frac{27}{4} \stackrel{!}{=} 0 \quad \Leftrightarrow \quad Z_{eff} = \frac{27}{16} \approx 1.69$$

Obere Grenze im 2. Versuch

Als Ergebnis der Abschätzung erhalten wir also

$$E_{gs} \leq f(Z_{eff} = 27/16) E_1 \approx -77.5 \text{ eV} , \quad (27.8)$$

womit wir schon näher an das experimentelle Ergebnis herangekommen sind.

³Die letzten beiden Rechnungen werden nicht ausgeführt. Das Ergebnis übernehmen wir aus der Literatur.

Teil VII

Streutheorie

Kapitel 28

Grundlagen

Klassische
Streutheorie

In Abb. (28.1) ist skizziert, wie die klassische Streutheorie den Fall axialsymmetrischer Potentiale behandelt. Man sucht dabei den Zusammenhang zwischen dem Stoßparameter b und Ablenkwinkel θ . Wichtige Größen sind dabei auch der *differenzielle Streuquerschnitt*

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}$$

und der *totale Streuquerschnitt*

$$\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega$$

Letzterer gibt die Fläche des einfallenden Strahls an, die gestreut wird.

Quanten-
mechanisches
Streuproblem

Einen Einblick darüber, wie man in der Quantenmechanik mit Streuproblemen umgeht, haben wir bereits in Kapitel 11 kennengelernt. Die Streulösung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung für ein Deltapotential in einer Dimension ist gegeben durch

$$\phi_k^\pm(x) = \begin{cases} e^{ikx} + r(k)e^{-ikx} & \text{für } x < 0 \\ t(k)e^{ikx} & \text{für } x > 0 \end{cases}$$

Die Superposition dieser Lösungen erlaubt die Beschreibung eines von links einlaufenden Teilchens.

Dreidimensionales
Streuproblem für
große Abstände
vom Streuzentrum

Im Folgenden suchen wir Eigenzustände im kontinuierlichen Spektrum von dreidimensionalen Systemen. Dazu betrachten wir eine von links einlaufende ebene Welle e^{ikz} (vgl. Abb. 28.2). Für große Abstände vom Streuzentrum können wir mit der Wellenfunktion

$$\psi(r, \theta) = e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (28.1)$$

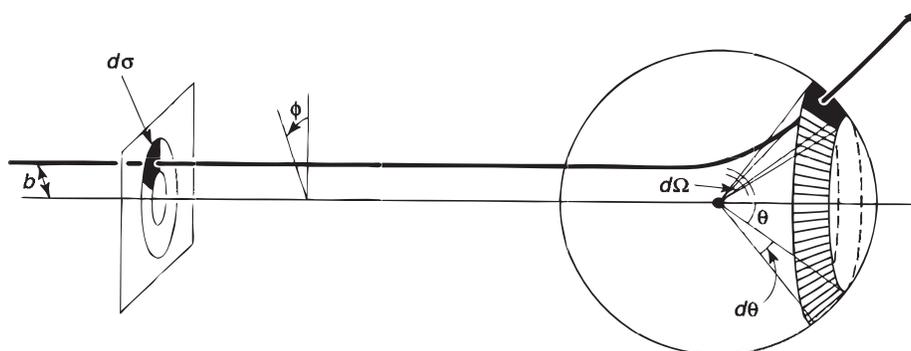


Abbildung 28.1: Klassische Streutheorie

ansetzen. Dies ist eine Eigenfunktion des Hamiltonoperators für große Abstände r , wie wir sehen, wenn wir sie in die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung einsetzen:

Der Laplace-Operator in Kugelkoordinaten ist gegeben durch

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$

Angewandt auf die obige Wellenfunktion erhalten wir

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(r, \theta) &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} e^{ikz} - \frac{\hbar^2}{2m} \left[f(\theta) \frac{-k^2}{r} e^{ikr} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{r^3}\right) \right] \\ &\stackrel{r \rightarrow \infty}{\equiv} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \left(e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \right) \end{aligned} \quad (28.2)$$

Streuwellenfunktion
und Eigenenergie

Also ist

$$\psi(r, \theta) = e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (28.3)$$

eine Eigenfunktion des Hamiltonoperators des dreidimensionalen Streuproblems mit Eigenenergie

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (28.4)$$

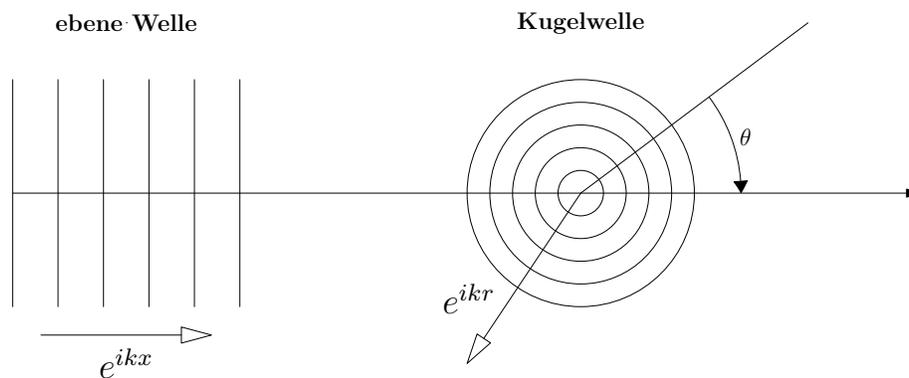


Abbildung 28.2: Dreidimensionales quantenmechanisches Streuprobem

Bemerkung 28.1

- (i) $f(\theta)$ wird als *Streuamplitude* bezeichnet, wobei $|f(\theta)|^2$ den differentiellen Streuquerschnitt $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ angibt.
- (ii) Wegen des Faktors $1/r$ bleibt die Gesamtwahrscheinlichkeit auch nach der Streuung erhalten.
- (iii) Man kann eine Abbildung von den einfallenden Zuständen $|\psi_{in}\rangle$ auf die ausfallenden Zustände $|\psi_{out}\rangle$ einführen:

$$S : |\psi_{in}\rangle \rightarrow |\psi_{out}\rangle := S|\psi_{in}\rangle \quad (28.5)$$

Diese sog. *S-Matrix* ist linear und unitär (Erhaltung der Gesamtwahrscheinlichkeit).

Kapitel 29

Bornsche Näherung

29.1 Integralform der zeitunabh. Schrödinger-Gleichung

29.1 Integralform der zeitunabh. Schrödinger-Gleichung

29.2 Erste Bornsche Näherung

Satz 29.1 (Integralform der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung)
Die Integralgleichung

Integralform der Schrödinger-Gleichung

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d\mathbf{r}' \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}') \quad (29.1)$$

mit $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ ist äquivalent zur zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung. $\psi_0(\mathbf{r})$ ist dabei eine beliebige Lösung der freien Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_0 = E\psi_0$$

Beweis: Folgender Ausdruck soll verschwinden

$$\begin{aligned} (H - E)\psi(\mathbf{r}) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V - E\right)\psi(\mathbf{r}) \\ &= V(\mathbf{r})\psi_0(\mathbf{r}) - \frac{\hbar^2}{2m}(\Delta + k^2) \left(\frac{-m}{2\pi\hbar^2}\right) \int d\mathbf{r}' \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}') \\ &\quad - V(\mathbf{r}) \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d\mathbf{r}' \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}') \end{aligned} \quad (29.2)$$

Hierfür stellen wir zunächst fest, dass gilt:

$$(\Delta + k^2) \frac{-e^{ikr}}{4\pi r} = \delta(\mathbf{r}) \quad (29.3)$$

Beweis: Für $r \neq 0$ ist die Gleichung erfüllt. Um dies auch für $r = 0$ zu zeigen, integrieren wir über eine kleine Kugel K mit Radius R am Ursprung:

$$\begin{aligned} \int_K d^3r (\Delta + k^2) \frac{-e^{ikr}}{4\pi r} &= k^2 \underbrace{\int_K d^3r \frac{-e^{ikr}}{4\pi r}}_{\rightarrow 0, R \rightarrow 0} - \underbrace{e^{ikR}}_{\approx 1} \int_K d^3r \Delta \frac{1}{4\pi r} \\ &= -\frac{1}{4\pi} \oint_{\partial K} d\mathbf{S} \cdot \nabla \frac{1}{r} \end{aligned}$$

Da die Projektion von $d\mathbf{S}$ auf die Einheitsvektoren der Kugelkoordinaten nur in Richtung \mathbf{e}_r einen Wert ungleich 0 ergibt, erhalten wir

$$\begin{aligned} -\frac{1}{4\pi} \oint_{\partial K} d\mathbf{S} \cdot \nabla \frac{1}{r} &= -\frac{1}{4\pi} \oint_{\partial K} d\mathbf{S} \cdot \mathbf{e}_r \frac{\partial}{\partial r} \frac{1}{r} \\ &= \frac{1}{4\pi R^2} \int_{\partial K} d\mathbf{S} \cdot \mathbf{e}_r \\ &= \frac{1}{4\pi R^2} \int_{\partial K} R^2 \sin\theta d\theta d\phi = 1 \end{aligned} \tag{29.4}$$

Somit hat $(\Delta + k^2) \frac{-e^{ikr}}{4\pi r}$ die selben Eigenschaften wie die Delta-Distribution $\delta(\mathbf{r})$. \square

Mithilfe dieses Ergebnisses erhalten wir für Gl. (29.2):

$$\begin{aligned} (H - E)\psi(\mathbf{r}) &= V(\mathbf{r})\psi_0(\mathbf{r}) - \int d\mathbf{r}' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') V(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}') \\ &\quad - V(\mathbf{r}) \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d\mathbf{r}' \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}') \\ &= V(\mathbf{r}) \left[\psi_0(\mathbf{r}) - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d\mathbf{r}' \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}') - \psi(\mathbf{r}) \right] = 0 \end{aligned}$$

Anwendung auf das Streuproblem

Anwendung der
Integralform:
Streuproblem

Wenden wir uns nun dem Streuproblem (Kap. 28) zu. Dazu sei die einlaufende Wellenfunktion gegeben durch $\psi_0(\mathbf{r}) = e^{ikz}$. Wir suchen nun das Verhalten von $\psi(\mathbf{r})$ für große Abstände vom Streuzentrum $|\mathbf{r}|$.

Da $V(\mathbf{r}')$ immer nur in der Nähe des Streuzentrum $\mathbf{r}' = 0$ nicht vernachlässigbare Werte annimmt, können wir $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ um \mathbf{r} entwickeln:

$$\begin{aligned} |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2 &\approx r^2 + r'^2 - 2\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}' \approx r^2 \left(1 - 2\frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}'}{r^2} \right) \\ \Rightarrow |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| &\approx r - \mathbf{e}_r \cdot \mathbf{r}' \end{aligned} \tag{29.5}$$

Damit ergibt sich mit $\mathbf{k} := k\mathbf{e}_r$ für große Abstände $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$

$$\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \approx \frac{e^{ikr}}{r} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}'} \tag{29.6}$$

Streulösung

Die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r})$ ist dann gegeben durch

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ikz} + \frac{e^{ikr}}{r} \underbrace{\frac{-m}{2\pi\hbar^2} \int d\mathbf{r}' e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}')}_{=f(\theta,\phi) \text{ (Streuamplitude)}} \quad (29.7)$$

29.2 Erste Bornsche Näherung

In der ersten Bornschen Näherung interessiert man sich für schwache Potentiale V im Vergleich zur Energie E . Das heißt die Wellenfunktion eines einlaufenden Teilchens wird durch das Potential nicht stark verändert:

$$\psi(\mathbf{r}') \approx \psi_0(\mathbf{r}') = e^{ikz'} =: e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'} \quad (29.8)$$

Erste Bornsche
Näherung

Die Streuamplitude nimmt dann folgende Form an:

$$f(\theta, \phi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d\mathbf{r}' e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \quad (29.9)$$

mit $\mathbf{k} = k\mathbf{e}_r$ (Streurichtung) und $\mathbf{k}' = k\mathbf{e}_z$ (Richtung des einlaufenden Strahls). Durch $\mathbf{k}' - \mathbf{k} =: \boldsymbol{\kappa}$, also $|\boldsymbol{\kappa}| = 2k \sin(\theta/2)$ (θ : von \mathbf{k}' und \mathbf{k} eingeschlossener Winkel) ist der Impulsübertrag durch die Streuung gegeben¹.

29.2.1 Langwellige Streuung

Spezialfall: geringe
Energien

Bei großen Wellenlängen, also geringen Energien E , variiert $e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}'}$ wenig in der Nähe des Streuzentrums:

$$f(\theta, \phi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int V(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (29.10)$$

29.2.2 Sphärisch symmetrisches Potential

Spezialfall:
kugelsymmetrisches
Potential

Ist $V(\mathbf{r}) = V(r)$, so können wir die Koordinatenachsen für das Integral über \mathbf{r}' so wählen, dass $\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}' = \kappa r' \cos(\theta_0)$. Damit ist

$$\begin{aligned} f(\theta) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_0^\infty dr' r'^2 \int_0^\pi d\theta' \sin\theta' e^{i\kappa r' \cos\theta'} V(r') \int_0^{2\pi} d\phi' \\ &= \frac{m}{\hbar^2} \int_0^\infty dr' r'^2 \frac{2 \sin(\kappa r')}{\kappa r'} V(r') \end{aligned}$$

¹Die Streuamplitude kann hier als Fouriertransformierte des Potentials beim Impulsübertrag $\boldsymbol{\kappa}$ interpretiert werden

Die erste Bornsche Näherung führt also im Falle von kugelsymmetrischen Potentialen zum Ausdruck für die Streuamplitude

$$f(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2 \kappa} \int_0^\infty r' V(r') \sin(\kappa r') dr' \quad (29.11)$$

29.2.3 Rutherford-Streuung

Rutherford-Streuung

Wir wollen nun konkret die Streuamplitude und den Streuquerschnitt im Coulomb-Potential bestimmen. Dazu benutzen wir zunächst das Yukawa-Potential

$$V(r) = \beta \frac{e^{-\mu r}}{r}, \quad (29.12)$$

welches für $\mu = 0, \beta = \frac{q_1 q_2}{4\pi \epsilon_0}$ in das Coulomb-Potential übergeht.

$$f(\theta) = -\frac{2m\beta}{\hbar^2 \kappa} \int_0^\infty dr e^{-\mu r} \sin(\kappa r) = -\frac{2m\beta}{\hbar^2 \kappa} \frac{\kappa}{\mu^2 + \kappa^2} \quad (29.13)$$

Damit erhalten wir im Coulomb-Potential für die Streuamplitude

$$f(\theta) = -\frac{2mq_1 q_2}{4\pi \epsilon_0 \hbar^2 \kappa^2} \quad (29.14)$$

und für den differentiellen Streuquerschnitt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left[\frac{q_1 q_2}{16\pi \epsilon_0 E \sin^2(\theta/2)} \right]^2 \quad (29.15)$$

Wir erhalten damit dasselbe Ergebnis wie in der klassischen Streutheorie.

Bemerkung 29.1 (Partialwellenzerlegung)

Partialwellenzerlegung

Die Streuamplitude kann in Legendre-Polynome zerlegt werden:

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) a_l P_l(\cos \theta) \quad (29.16)$$

mit der sogenannten *Partialwellenamplitude* a_l . Der differentieller Streuquerschnitt nimmt dann die Form an

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \sum_{l,l'} (2l+1)(2l'+1) a_l^* a_{l'} P_{l'}(\cos \theta) P_l(\cos \theta) \quad (29.17)$$

Damit erhält man den totalen Wirkungsquerschnitt zu

$$\sigma = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} = \sum_{l,l'} (2l+1) 4\pi \delta_{l,l'} a_l^* a_l = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |a_l|^2 \quad (29.18)$$

Teil VIII

Anhang

Anhang A

Übungsaufgaben

A.1 Blatt 0: Präsenzübung

A.1.1 Aufgabe A: Dirac Notation

Wir betrachten einen dreidimensionalen komplexen Vektorraum, der von der Orthonormalbasis $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle$ aufgespannt wird. Wir definieren zwei Kets

$$|\alpha\rangle = i|1\rangle - 4|2\rangle - 2i|3\rangle \quad , \quad |\beta\rangle = 2i|1\rangle + 2|3\rangle .$$

1. Geben Sie $\langle\alpha|$ und $\langle\beta|$ an.
2. Berechnen Sie $\langle\alpha|\alpha\rangle$, $\langle\alpha|\beta\rangle$ und $\langle\beta|\alpha\rangle$. Verifizieren Sie $\langle\beta|\alpha\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle^*$.
3. Geben Sie die Matrixelemente des Operators $A = |\alpha\rangle\langle\beta|$ in der obigen Basis an. Ist die zugehörige Matrix hermitesch?

A.1.2 Aufgabe B: Operatoreigenschaften

1. Zeigen Sie, dass die Summe zweier hermitescher Operatoren wieder hermitesch ist.
2. Der Operator A ist hermitesch und α eine komplexe Zahl. Wann ist αA hermitesch?
3. Zeigen Sie, dass für beliebige Operatoren A, B Folgendes gilt: $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$.
4. Wann ist das Produkt zweier hermitescher Operatoren wieder hermitesch?
5. Zeigen Sie, dass für beliebige Operatoren A, B, C Folgendes gilt:

$$[A, BC] = B[A, C] + [A, B]C$$

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

6. Zeigen Sie, dass allgemein $Tr(AB) = Tr(BA)$ gilt und folgern Sie daraus, dass die Spur basisunabhängig ist.
7. P_1 und P_2 seien zwei Projektoren auf Unterräume \mathcal{H}_1 und \mathcal{H}_2 des Hilbertraums \mathcal{H} . Zeigen Sie, dass $P_1 P_2$ genau dann ein Projektor ist, wenn $[P_1, P_2] = 0$ gilt. Zeigen Sie, dass $P_1 P_2$ dann auf die Schnittmenge $\mathcal{H}_1 \cap \mathcal{H}_2$ projiziert.
8. Zeigen Sie, dass die Eigenwerte λ eines unitären Operators betragsmäßig gleich 1 sind, $|\lambda| = 1$.

A.1.3 Aufgabe C: Exponentialfunktion von Operatoren

Wir betrachten die hermitesche Matrix

$$H = \begin{pmatrix} 1 & i & 0 \\ -i & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix}$$

1. Berechnen Sie die Eigenwerte und Eigenvektoren von H .
2. Unter Verwendung dieser Ergebnisse berechnen Sie nun explizit e^{iHt} , wobei t eine reelle Zahl ist.

A.2 Blatt 1

A.2.1 Aufgabe 1: Pauli-Matrizen

Wir betrachten die drei Pauli-Matrizen

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

1. Zeigen Sie, dass die Pauli-Matrizen hermitesch sind und geben Sie die Spur und die Eigenwerte an. Zeigen Sie, dass $\sigma_i^2 = I$ gilt, wobei I die 2x2 Einheitsmatrix ist.
2. Zeigen Sie, dass sich jede 2x2 Matrix M in der Form

$$M = m_0 I + \sum_{i=x,y,z} m_i \sigma_i$$

ausdrücken lässt. Wie kann man die Koeffizienten m_i direkt bestimmen?

A.2.2 Aufgabe 2: Zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

Sei

$$H = \begin{pmatrix} \epsilon & g \\ g & \epsilon \end{pmatrix}$$

mit reellen Konstanten ϵ, g . Lösen Sie die folgende Gleichung (die sog. zeitabhängige Schrödinger-Gleichung, beispielsweise zur Beschreibung von Neutrino-Oszillationen):

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

mit $|\psi(t)\rangle = a(t)|1\rangle + b(t)|2\rangle$, wobei

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Dabei sei die Anfangsbedingung $|\psi(0)\rangle = |1\rangle$. Geben Sie $|\psi(t)\rangle$ explizit an und zeigen Sie damit auch, dass die Norm von $|\psi(t)\rangle$ erhalten bleibt.

Hinweis: Analog zur Aufgabe C der Präsenzübung sollten Sie zunächst die Eigenwerte und Eigenvektoren von H bestimmen.

A.2.3 Aufgabe 3: Bohr-Sommerfeld-Quantisierungsregel

Einen historisch wichtigen Schritt in der Entwicklung der Quantenmechanik stellt die Bohr-Sommerfeld-Quantisierungsregel dar, die es für einfache Atome erlaubt, die diskreten Spektrallinien zu erklären. Diese Regel ist anwendbar für klassische periodische Systeme mit f Freiheitsgraden, d.h. jeder konjugierte Impuls $p_i, i = 1, \dots, f$, macht eine periodische Bewegung mit einer Frequenz ω_i . Weiterhin muss sich jeder Impuls ausschliesslich als Funktion der zugehörigen Koordinate und der anderen Impulse schreiben lassen: $p_i = p_i(q_i; p_1, p_{i-1}, p_{i+1}, p_f)$. Dann besagt die Quantisierungsregel:

$$\int_{\mathcal{C}} p_i dq_i = h n_i, \quad (\text{A.1})$$

wobei die Integration über eine volle Periode \mathcal{C} geht und n_i eine positive ganze Zahl oder Null ist. h ist das Plancksche Wirkungsquantum.

1. Wenden Sie die Bohr-Sommerfeld-Quantisierungsregel auf den eindimensionalen harmonischen Oszillator an. Welche Energien als Funktion von n_x sind erlaubt?
2. Wenden Sie die Bohr-Sommerfeld-Quantisierungsregel auf das Wasserstoffatom (Kepler-Problem) an. Dabei können Sie Ergebnisse aus der Klassischen Mechanik zitieren und die Bewegung des Elektrons von vorneherein auf eine Ebene einschränken. Welche Energien als Funktion von n_r und n_ϕ sind erlaubt? Drücken Sie diese Energien auch in eV aus.

Hinweis: Folgende Integrale sind nützlich:

$$\int_{-a}^a \sqrt{a^2 - x^2} = \frac{\pi a^2}{2}$$

$$\int_{r_-}^{r_+} \sqrt{-1 - \frac{a^2}{r^2} + \frac{1}{r}} dr = \frac{\pi}{2}(1 - 2a)$$

mit $r_{\pm} = \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{1 - 4a^2}$
 fuer $0 \leq a \leq 1/2$

Bemerkung: Die Bohr-Sommerfeld-Quantisierungsregel erklärt zwar das Wasserstoffspektrum korrekt, aber beispielsweise nicht die Grundzustandsenergie des harmonischen Oszillators. Weiterhin ist die Quantisierungsregel (A.1) so nur anwendbar auf integrable Systeme, d.h. z.B. nicht für das Heliumatom. Wir werden später in der Vorlesung sehen, dass die Bohr-Sommerfeld-Quantisierungsregel in ihrem eingeschränkten Anwendungsbereich konsistent mit der modernen Formulierung der Quantenmechanik ist.

A.2.4 Aufgabe 4: Dreidimensionaler Zustandsraum

Wir betrachten einen dreidimensionalen Hilbertraum mit der Orthonormalbasis $|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle$. Betrachten Sie lineare Operatoren L_z und S , die folgendermassen definiert sind:

$$\begin{aligned}L_z|u_1\rangle &= |u_1\rangle \quad , \quad L_z|u_2\rangle = 0 \quad , \quad L_z|u_3\rangle = -|u_3\rangle \\S|u_1\rangle &= |u_3\rangle \quad , \quad S|u_2\rangle = |u_2\rangle \quad , \quad S|u_3\rangle = |u_1\rangle \quad .\end{aligned}$$

1. Geben Sie in der obigen Basis die Matrizen an, welche die Operatoren L_z, L_z^2, S, S^2 repräsentieren. Sind diese Operatoren hermitesch?
2. Geben Sie die allgemeinste hermitesche Matrix an, welche mit L_z kommutiert. Analog für L_z^2 und S^2 .
3. Bilden L_z^2 und S einen vollständigen Satz von kommutierenden hermiteschen Operatoren? Geben Sie die gemeinsame Eigenbasis an. Analog für das Paar L_z^2 und S^2 .

A.3 Blatt 2

A.3.1 Aufgabe 5: Messungen

Wir betrachten den zweidimensionalen Hilbertraum mit der Basis $|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ und dem üblichen Skalarprodukt (siehe Vorlesung). Die Pauli-Matrizen aus Aufgabe 1 sind hermitesch und damit Observable in diesem Hilbertraum. Das Quantensystem sei in dem Zustand $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle)$, bevor wir nun eine Reihe von Messungen durchführen.

1. In einer ersten Messung messen wir σ_z . Mit welcher Wahrscheinlichkeit findet man welchen Messwert? Was ist der Erwartungswert der Messung?
2. Die erste Messung hat nun konkret den Messwert $+1$ geliefert. Wir messen danach in einer zweiten Messung die Observable $A = \sigma_x + \sigma_y + \sigma_z$. Mit welcher Wahrscheinlichkeit findet man welchen Messwert? Was ist der Erwartungswert der Messung?
3. Die erste Messung (σ_z) habe nun den Messwert $+1$ geliefert und die zweite Messung (von A) den Messwert $-\sqrt{3}$. Wir messen jetzt in einer dritten Messung wieder σ_z . Mit welcher Wahrscheinlichkeit findet man welchen Messwert? Was ist der Erwartungswert der Messung?
4. Wir messen jetzt in einer vierten Messung nochmals σ_z . Was können Sie über das Messergebnis sagen, wenn Sie das Messergebnis der dritten Messung kennen? In welchem Zustand ist dann jeweils das Quantensystem nach der vierten Messung?

A.3.2 Aufgabe 6: Unschärfereleation

Als Varianz der Messung einer Observablen A bezeichnet man den Erwartungswert von $(\Delta A)^2 \stackrel{\text{def}}{=} (A - \langle A \rangle)^2$, wobei $\langle A \rangle$ den Erwartungswert von A bezeichnet (d.h. ausführlicher: $\langle A \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \langle \psi | A | \psi \rangle$, wenn sich das Quantensystem in dem Zustand $|\psi\rangle$ befindet).

1. Zeigen Sie zunächst folgende Beziehung:

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

Wie gross ist die Varianz, wenn sich das Quantensystem in einem Eigenzustand der Observable A befindet?

2. Beweisen Sie nun die folgende fundamentale Beziehung, die man als *verallgemeinerte Unschärferelation* bezeichnet:

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle \langle (\Delta B)^2 \rangle \geq \frac{1}{4} |\langle [A, B] \rangle|^2$$

A und B sind hier beliebige Observable und die Ungleichung gilt für jeden beliebigen Quantenzustand.

Zum Beweis zeigen Sie zunächst die sogenannte Schwarzsche Ungleichung

$$\langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle \geq |\langle \alpha | \beta \rangle|^2 ,$$

wobei $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$ beliebige Vektoren des Hilbertraums sind (Tip: Analog zur Vorlesung können Sie von $\| \alpha + \lambda \beta \|^2 \geq 0$ für beliebige komplexe Zahlen λ ausgehen, um die Schwarzsche Ungleichung zu beweisen.) Verwenden Sie dann die Schwarzsche Ungleichung mit $|\alpha\rangle \stackrel{\text{def}}{=} (A - \langle A \rangle)|\psi\rangle$, $|\beta\rangle \stackrel{\text{def}}{=} (B - \langle B \rangle)|\psi\rangle$, wenn sich das Quantensystem in dem Zustand $|\psi\rangle$ befindet.

3. Wir wählen nun $A = \sigma_x$ und $B = \sigma_y$ mit den Pauli-Matrizen und dem Hilbertraum aus Aufgabe 5. Was besagt die Unschärferelation dann explizit? Konstruieren Sie explizit die Zustände, für die das Produkt der Unschärfen $\langle (\Delta A)^2 \rangle \langle (\Delta B)^2 \rangle$ maximal bzw. minimal wird.

A.3.3 Aufgabe 7: Exponentialfunktion von Operatoren

Das Rechnen mit Exponentialfunktionen von Operatoren spielt in der Quantenmechanik eine grosse Rolle. Zeigen Sie folgende Aussagen:

1. Für kommutierende Operatoren (d.h. $[A, B] = 0$) gilt

$$e^A e^B = e^B e^A = e^{A+B} .$$

2. Für die Exponentialfunktion der Pauli-Matrix σ_x gilt

$$e^{i\alpha\sigma_x} = I \cos \alpha + i\sigma_x \sin \alpha ,$$

wobei α eine beliebige reelle Zahl ist.

3. Zeigen Sie eine ähnliche Aussage für die Exponentialfunktion $e^{i\alpha\sigma_y}$.
4. Verallgemeinern Sie für $\Omega = \lambda\sigma_x + \mu\sigma_y$ mit $\lambda^2 + \mu^2 = 1$, $\lambda, \mu \in \mathfrak{R}$: Was ist $e^{i\alpha\Omega}$?
5. Berechnen Sie explizit $e^{2i\sigma_x}$ und $(e^{i\sigma_x})^2$. Sind diese beiden Matrizen identisch? Warum?

Berechnen Sie nun explizit $e^{i(\sigma_x + \sigma_y)}$ und $e^{i\sigma_x} e^{i\sigma_y}$. Sind diese beiden Matrizen identisch? Warum ist die Antwort offensichtlich?

A.4 Blatt 3

A.4.1 Aufgabe 8: Sequenz von Stern-Gerlach Experimenten

Wir betrachten eine Sequenz von drei Stern-Gerlach Experimenten mit Silberatomen wie in der Vorlesung, wobei die Flugrichtung der Atome in y -Richtung ist. Die erste Messung hat ein inhomogenes Magnetfeld in z -Richtung und akzeptiert nur Atome mit Messergebnis $\sigma_z = +1$ (Notation wie in der Vorlesung). Das Magnetfeld der zweiten Stern-Gerlach Apparatur ist in Richtung \hat{n} orientiert, wobei \hat{n} ein Einheitsvektor in der xz -Ebene ist, der den Winkel β mit der z -Achse bildet. Diese zweite Messung akzeptiert nur die Eigenwerte $+1$ des Operators $\hat{n} \cdot \vec{\sigma} = \hat{n}_x \sigma_x + \hat{n}_z \sigma_z$. In der dritten Messung ist das Magnetfeld wieder in z -Richtung orientiert und wir akzeptieren nur die Messergebnisse $\sigma_z = -1$.

Was ist die Intensität des Strahls nach der dritten Messung, wenn wir die Intensität nach der ersten Messung auf 1 normieren? Wie muss das Magnetfeld in der zweiten Messung orientiert sein, damit diese Intensität maximiert wird?

A.4.2 Aufgabe 9: Zeitentwicklung im dreidimensionalen Zustandsraum

Wir betrachten ein physikalisches System mit einem dreidimensionalen Zustandsraum, der von den Vektoren $|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle$ aufgespannt wird. In dieser Basis hat der Hamiltonoperator folgende Form

$$H = \hbar\omega \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

Zwei Observable A und B sind gegeben durch

$$A = a \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad B = b \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

ω, a, b sind positive reelle Konstante. Das System sei zur Zeit $t = 0$ in folgendem Zustand präpariert:

$$|\psi(t=0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|u_1\rangle + \frac{1}{2}|u_2\rangle + \frac{1}{2}|u_3\rangle$$

1. Wir messen zur Zeit $t = 0$ die Energie des Systems. Welche Werte kann man mit welchen Wahrscheinlichkeiten finden? Berechnen Sie auch den Erwartungswert der Energie und die Varianz.

2. Anstatt der Messung der Energie messen wir jetzt den Operator A zur Zeit $t = 0$. Welche Messergebnisse kann man mit welchen Wahrscheinlichkeiten finden? Was ist der Zustand des Systems unmittelbar nach der Messung?
3. Wir führen nun keine Messungen durch sondern betrachten die Zeitentwicklung mit der Schrödinger-Gleichung: Geben Sie den Zustand $|\psi(t)\rangle$ zur Zeit t an.
4. Berechnen Sie die Erwartungswerte von A und B zur Zeit t . Beobachtungen?
5. Welche Messergebnisse mit welchen Wahrscheinlichkeiten findet man, wenn man die Observable A zur Zeit t misst? Analog für B . Interpretation.

A.4.3 Aufgabe 10: Zwei-Zustandssystem

Ein Teilchen befindet sich in einer Box, die durch eine dünne Trennwand geteilt wird. Wenn wir mit Sicherheit wissen, dass das Teilchen in der linken Hälfte ist, wird sein Zustand durch den Ket $|L\rangle$ beschrieben. Analog für die rechte Hälfte mit $|R\rangle$. Der allgemeinste Quantenzustand ist eine lineare Superposition von $|L\rangle$ und $|R\rangle$. Die Dynamik wird durch den Hamiltonoperator

$$H = \Delta (|L\rangle\langle R| + |R\rangle\langle L|)$$

beschrieben, wobei Δ eine positive Energie ist.

1. Finden Sie die normierten Eigenzustände und Energie-Eigenwerte des Hamiltonoperators.
2. Lösen Sie die Schrödinger-Gleichung für einen beliebigen Anfangszustand $|\psi(t=0)\rangle$ zur Zeit $t = 0$, d.h. geben Sie $|\psi(t)\rangle$ in der Basis $|L\rangle, |R\rangle$ an.
3. Das Teilchen sei zur Zeit $t = 0$ mit Sicherheit in der linken Hälfte. Mit welcher Wahrscheinlichkeit findet man es dann zur Zeit t in der linken bzw. rechten Hälfte?

Bemerkung: Der Hamiltonoperator beschreibt eine häufige physikalische Situation, in der ein Teilchen zwischen zwei Zuständen tunnelt. Ein Beispiel ist das H_2^+ -Ion, wobei sich das Elektron in nullter Näherung entweder beim linken oder rechten Kern aufhalten kann (insbesondere wird die weitere räumliche Struktur in dieser Näherung ausser Acht gelassen). Tatsächlich gibt es aber eine Kopplung der beiden Zustände durch einen Hamiltonoperator vom Typ wie oben. Die Oszillationen in 3. bezeichnet man als Rabi-Oszillationen, die sich im Absorptions- und Emissionsspektrum bemerkbar machen. Viel mehr dazu später in der Vorlesung ...

A.4.4 Aufgabe 11: δ -Funktion

Die von Dirac eingeführte δ -Funktion hat die Eigenschaft, eine Funktion $f(x)$ auf einen bestimmten Funktionswert $f(x_0)$ abzubilden. Mathematisch gesehen ist die δ -Funktion eigentlich eine sog. Distribution, d.h. ein lineares Funktional auf einem geeigneten Raum von Funktionen. Verzichtet man auf mathematische Strenge, kann man die δ -Funktion definieren durch

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x - x_0) dx = f(x_0)$$

für eine bei x_0 stetige Funktion $f(x)$.

1. Die δ -Funktion lässt sich durch geeignete Funktionenfolgen $\delta_n(x)$ mit den Eigenschaften

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta_n(x) dx = 1, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta_n(x) dx = f(0)$$

darstellen. Zeigen Sie diese Eigenschaften für die beiden Funktionenfolgen

$$(A) \quad \delta_n(x) = \begin{cases} 0 & x \leq -1/2n \\ n & -1/2n < x < 1/2n \\ 0 & x \geq 1/2n \end{cases} \quad \text{und} \quad (B) \quad \delta_n(x) = \frac{n}{\sqrt{\pi}} e^{-n^2 x^2}$$

2. Zeigen Sie $\delta(a(x - x_0)) = \frac{1}{|a|} \delta(x - x_0)$.
3. Zeigen Sie für $f(x)$ mit $f'(x)$ stetig bei $x = 0$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta'(x) dx = -f'(0)$$

4. Zeigen Sie mit Hilfe der Funktionenfolgen, dass

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^x \delta_n(x) dx = \Theta(x),$$

wobei $\Theta(x)$ die Heaviside-Sprungfunktion ist; es gilt also $\Theta'(x) = \delta(x)$.

A.5 Blatt 4

A.5.1 Aufgabe 12: Wellenfunktion

Die Wellenfunktion eines Teilchens in einem eindimensionalen Problem sei

$$\psi(r) = N \frac{e^{ip_0 r/\hbar}}{\sqrt{a^2 + r^2}}$$

a, p_0 sind reelle Parameter und N die reelle Normierungskonstante.

1. Bestimmen Sie die Normierungskonstante N .
2. Der Ort des Teilchens wird gemessen. Mit welcher Wahrscheinlichkeit findet man es im Intervall $\left[-\frac{a}{\sqrt{3}}, \frac{a}{\sqrt{3}}\right]$?
3. Berechnen Sie die Erwartungswerte für Ort und Impuls des Teilchens.

A.5.2 Aufgabe 13 Ehrenfest Theorem

1. Orts- und Impulsoperator erfüllen die kanonische Vertauschungsrelation $[r, p] = i\hbar$. Beweisen Sie damit die folgenden Relationen:

$$\begin{aligned} [r, p^n] &= i\hbar n p^{n-1} \quad \text{für jede natürliche Zahl } n \\ [p, f(r)] &= -i\hbar f'(r) \quad \text{für eine beliebige Funktion } f(r) \end{aligned}$$

2. Der Hamiltonoperator eines eindimensionalen Problems sei gegeben durch

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

Beweisen Sie das sogenannte Ehrenfest Theorem:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle r \rangle &= \frac{1}{m} \langle p \rangle \\ \frac{d}{dt} \langle p \rangle &= -\langle V'(r) \rangle \end{aligned}$$

Bemerkung: Das Ehrenfest Theorem kann leicht auf Probleme in beliebigen Raumdimensionen verallgemeinert werden.

3. Diskutieren Sie die folgende Fragestellung: Erfüllt der Erwartungswert des Ortes die klassische Bewegungsgleichung? Begründen Sie, warum dies für i) ein freies Teilchen, ii) ein Teilchen mit konstanter Kraft und iii) den harmonischen Oszillator wahr ist, im allgemeinen Fall aber nicht.

A.5.3 Aufgabe 14: Virialsatz

1. Sei H der Hamiltonoperator und $|\phi_n\rangle$ eine normierte Eigenfunktion zum Energieeigenwert E_n . Zeigen Sie, dass für jeden beliebigen Operator A Folgendes gilt:

$$\langle \phi_n | [A, H] | \phi_n \rangle = 0$$

2. Betrachten wir für den Rest der Aufgabe nun konkret ein eindimensionales Problem mit

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

Berechnen Sie die Kommutatoren $[H, p]$, $[H, r]$ und $[H, r p]$.

3. Zeigen Sie, dass der Impulserwartungswert in einem Eigenzustand $|\phi_n\rangle$ verschwindet.
4. Stellen Sie eine Beziehung zwischen dem Erwartungswert der kinetischen Energie und dem Erwartungswert $\langle \phi_n | r V'(r) | \phi_n \rangle$ her. Leiten Sie daraus den Virialsatz der Quantenmechanik für Potentiale $V(r) = V_0 r^n$ ab, wobei n eine natürliche Zahl ist.

A.5.4 Aufgabe 15: Wellenpakete mit minimaler Unschärfe

Die verallgemeinerte Unschärferelation aus Aufgabe 6 impliziert für Impuls- und Ortsoperator die bekannte Heisenbergsche Unschärferelation für einen beliebigen Zustand

$$\Delta r \Delta p \geq \frac{\hbar}{2},$$

wobei

$$\Delta r \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\langle (\Delta r)^2 \rangle} \quad \text{und} \quad \Delta p \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\langle (\Delta p)^2 \rangle}.$$

Konstruieren Sie die eindimensionalen Wellenpakete mit minimaler Unschärfe, d.h. die Wellenpakete, für welche $\Delta r \Delta p = \hbar/2$ gilt. Sie sollten das folgende Ergebnis finden:

$$\psi(r) = N e^{i\langle p \rangle r / \hbar} \exp \left[- \left(\frac{r - \langle r \rangle}{2\Delta r} \right)^2 \right]$$

Dabei ist die Normierungskonstante N gegeben durch

$$N = (2\pi(\Delta r)^2)^{-1/4}$$

A Übungsaufgaben

Hinweis: Überlegen Sie sich allgemein, für welche Zustände die Schwarzsche Ungleichung als Gleichung erfüllt ist. Leiten Sie daraus eine Differentialgleichung für die Wellenfunktionen mit minimaler Unschärfe ab.

A.6 Blatt 5

A.6.1 Aufgabe 16: Freies Teilchen in einer Dimension

Die Wellenfunktion eines freien Teilchens in einer Dimension sei zur Zeit $t = 0$ gegeben durch

$$\psi(x, t = 0) = N \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-|k|/k_0} e^{ikx}$$

mit reellen positiven Konstanten k_0 und N .

1. Was ist die Wahrscheinlichkeit $P(p_1, t = 0)$, dass eine Impulsmessung zur Zeit $t = 0$ ein Messergebnis im Intervall $[-p_1, p_1]$ liefert? Skizzieren Sie die Funktion $P(p_1, t = 0)$.
2. Was ist die entsprechende Wahrscheinlichkeit $P(p_1, t)$ zur Zeit t ? Interpretieren Sie das Ergebnis.
3. Was ist die Form des Wellenpakets zur Zeit $t = 0$? Berechnen Sie das Produkt von Orts- und Impulsunschärfe $\Delta x \Delta p$ und interpretieren Sie Ihr Ergebnis. Beschreiben Sie qualitativ die weitere zeitliche Entwicklung des Wellenpakets.

A.6.2 Aufgabe 17: Zeitentwicklung eines Gaußschen Wellenpakets

Die Wellenfunktion eines freien Teilchens in einer Dimension sei zur Zeit $t = 0$ durch ein Gaußsches Wellenpaket gegeben

$$\psi(x, t = 0) = N e^{-ax^2} e^{ikx}$$

mit reellen positiven Konstanten a, k und N .

1. Normieren Sie die Wellenfunktion.
2. Berechnen Sie die Wellenfunktion $\psi(x, t)$ zur Zeit t .
3. Berechnen Sie das Betragsquadrat der Wellenfunktion und drücken Sie das Ergebnis mit Hilfe folgender Größe aus:

$$w(t) \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\frac{a}{1 + (2\hbar at/m)^2}}$$

Skizzieren Sie $|\psi(x, t)|^2$ zur Zeit $t = 0$ und für eine große Zeit t . Interpretieren Sie das Verhalten.

4. Berechnen Sie $\langle x \rangle$, $\langle p \rangle$, $\langle x^2 \rangle$, $\langle p^2 \rangle$, Δx und Δp als Funktionen der Zeit.
5. Gilt die Heisenbersche Unschärferelation? Zu welcher Zeit ist das Produkt der Unschärfen minimal? Vergleichen Sie Ihr Ergebnis mit Aufgabe 15.

A.6.3 Aufgabe 18: Teilchen mit konstanter Kraft

Wir betrachten ein eindimensionales Problem mit einem Teilchen in einem Potential $V(x) = -f x$ mit einer Konstanten $f > 0$. Dies beschreibt beispielsweise ein geladenes Teilchen in einem homogenen elektrischen Feld.

1. Was folgt aus dem Ehrenfest Theorem für die Erwartungswerte von Ort und Impuls des Teilchens? Lösen Sie diese Gleichungen und vergleichen Sie mit der klassischen Bewegung.
2. Berechnen Sie die Impulsunschärfe Δp als Funktion der Zeit.
3. Betrachten Sie die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung in der Impulsdarstellung. Leiten Sie eine Beziehung zwischen $\frac{\partial}{\partial t} |\langle p | \psi(t) \rangle|^2$ und $\frac{\partial}{\partial p} |\langle p | \psi(t) \rangle|^2$ her. Finden Sie die allgemeinste Lösung dieser Gleichung und interpretieren Sie das Ergebnis.

A.6.4 Aufgabe 19: Translationsoperator

1. Berechnen Sie den Kommutator $[x, T_a]$ mit

$$T_a \stackrel{\text{def}}{=} \exp\left(\frac{ip_x a}{\hbar}\right),$$

wobei a eine reelle Größe mit der Dimension einer Länge ist.

2. Zeigen Sie, dass

$$T_a |x'\rangle$$

wieder ein Eigenzustand des Ortsoperators ist. Was ist der dazugehörige Eigenwert?

Bemerkung: Dieser sogenannte Translationsoperator T_a wird später in der Vorlesung noch eine wichtige Rolle spielen.

A.7 Blatt 6

A.7.1 Aufgabe 20: Unendlich tiefer Potentialtopf: Stationäre Zustände

Berechnen Sie $\langle x \rangle$, $\langle x^2 \rangle$, $\langle p \rangle$, $\langle p^2 \rangle$, Δx und Δp für den n -ten stationären Zustand im unendlich tiefen Potentialtopf mit Breite a ($n = 1$ sei der Grundzustand). Verifizieren Sie die Gültigkeit der Heisenbergschen Unschärferelation. Für welchen Zustand ist das Produkt der Unschärfen minimal?

Aufgabe 21: Unendlich tiefer Potentialtopf: Dynamik

Wir betrachten wieder den unendlich tiefen Potentialtopf

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } 0 < x < a \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$

Die Wellenfunktion des Teilchens zur Zeit $t = 0$ sei eine Superposition der beiden ersten stationären Zustände:

$$\psi(x, t = 0) = N (\phi_1(x) + \phi_2(x))$$

1. Normieren Sie die Wellenfunktion.
2. Berechnen Sie die Wellenfunktion $\psi(x, t)$ und ihr Betragsquadrat zur Zeit t . Drücken Sie dabei $|\psi(x, t)|^2$ unter Verwendung der Frequenz $\omega = \pi^2 \hbar / 2ma^2$ aus.
3. Berechnen Sie den Erwartungswert des Ortes als Funktion der Zeit. Mit welcher Frequenz oszilliert dieser und mit welcher Amplitude? Vergleichen Sie mit der Amplitude eines klassischen Teilchens in einem Potentialkasten - Interpretation?
4. Was ist der Erwartungswert des Impulses?
5. Wir messen die Energie des Teilchens. Mit welcher Wahrscheinlichkeit findet man welchen Wert? Was ist der Erwartungswert der Energie?

A.7.2 Aufgabe 22: Endlich tiefer Potentialkasten: Gebundene Zustände

Wir betrachten den endlich tiefen Potentialkasten

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{für } |x| < a \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

mit $V_0 > 0$. Im Folgenden interessieren wir uns für die gebundenen Zustände, d.h. die stationären Zustände mit Eigenenergie $E < 0$.

1. In der Vorlesung wurden die Anschlussbedingungen für die symmetrischen Wellenfunktionen diskutiert. Zeigen Sie, dass sich damit die folgende Bedingung für die Eigenenergie E ergibt:

$$\tan z = \sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1} \quad (\text{A.2})$$

mit

$$z \stackrel{\text{def}}{=} a \frac{\sqrt{2m(E + V_0)}}{\hbar}$$

$$z_0 \stackrel{\text{def}}{=} a \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}$$

Zeigen Sie, wie man Gleichung (A.2) durch eine graphische Konstruktion lösen kann, wenn man die linke und rechte Seite der Gleichung als Funktion von z aufträgt.

2. Betrachten Sie den Limes eines sehr tiefen Potentialkastens, $V_0 \rightarrow \infty$. Diskutieren Sie, wie das Energiespektrum aus der graphischen Lösung mit dem bekannten Energiespektrum des unendlich tiefen Potentialtopfs übereinstimmt.
3. Betrachten Sie nun einen sehr flachen Potentialtopf. Gibt es immer einen gebundenen symmetrischen Zustand?
4. Leiten Sie eine analoge Gleichung zu (A.2) für die antisymmetrischen Wellenfunktionen her.
5. Diskutieren Sie anhand der graphischen Lösung dieser Gleichung, ob es immer einen gebundenen antisymmetrischen Zustand gibt.
6. Wie kann man durch einen geeigneten Grenzprozess aus dieser Aufgabe die gebundenen Zustände im δ -Potential $V(x) = -\alpha \delta(x)$, $\alpha > 0$ bestimmen? Welche gebundenen Zustände und Eigenenergien finden Sie?

A.7.3 Aufgabe 23: Halbunendlicher Potentialtopf

Ein Teilchen bewegt sich im Potential

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{für } x \leq 0 \\ -V_0 & \text{für } 0 < x < a \\ 0 & \text{für } x \geq a \end{cases}$$

mit $V_0 > 0$. Zeigen Sie, dass die stationären Zustände dieses Problems durch die stationären antisymmetrischen Wellenfunktionen des endlich tiefen Potentialkastens aus Aufgabe 22 gegeben sind, wenn man diese auf den Bereich $x \geq 0$ einschränkt. Gibt es immer einen gebundenen Zustand im obigen Potential?

A.8 Blatt 7

A.8.1 Aufgabe 24: Eindimensionaler harmonischer Oszillator: Eigenschaften der stationären Zustände

Berechnen Sie $\langle x \rangle$, $\langle x^2 \rangle$, $\langle p \rangle$, $\langle p^2 \rangle$, Δx , Δp und die Erwartungswerte von potentieller und kinetischer Energie für den n -ten stationären Zustand des eindimensionalen harmonischen Oszillators. Verwenden Sie dabei die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren und die Darstellung der stationären Zustände durch diese laut Vorlesung. Verifizieren Sie die Gültigkeit der Heisenbergschen Unschärfrelation. Vergleichen Sie Ihre Ergebnisse auch mit den Überlegungen aus Aufgabe 14.

A.8.2 Aufgabe 25: Eindimensionaler harmonischer Oszillator: Dynamik

Wir betrachten den eindimensionalen harmonischen Oszillator.

1. Die Wellenfunktion des Teilchens zur Zeit $t = 0$ sei folgende Superposition der beiden ersten (normierten) stationären Zustände:

$$\psi(x, t = 0) = N (4\psi_0(x) + 3\psi_1(x))$$

Normieren Sie die Wellenfunktion.

2. Berechnen Sie die Wellenfunktion $\psi(x, t)$ und ihr Betragsquadrat zur Zeit t . Skizzieren Sie die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens zur Zeit $t = 0$.
3. Berechnen Sie die Erwartungswerte von Ort und Impuls als Funktion der Zeit. Vergleichen Sie Ihr Ergebnis mit dem Ehrenfest Theorem laut Aufgabe 13.
4. Die Energie des Teilchens wird gemessen. Mit welcher Wahrscheinlichkeit findet man welche Ergebnisse?
5. Wiederholen Sie die obigen Aufgabenteile für die Anfangsbedingung

$$\psi(x, t = 0) = N (4\psi_0(x) + 3\psi_2(x))$$

A.8.3 Aufgabe 26: Eindimensionaler harmonischer Oszillator: Klassisch verbotener Bereich

Betrachten Sie den Grundzustand des eindimensionalen harmonischen Oszillators. Mit welcher Wahrscheinlichkeit findet man bei einer Messung das Teilchen im klassisch verbotenen Bereich? (Sprich: In dem Bereich, wo sich ein klassisches Teilchen mit der Grundzustandsenergie des quantenmechanischen harmonischen Oszillators nicht aufhalten kann.)

A.8.4 Aufgabe 27: Dreidimensionaler isotroper harmonischer Oszillator

Wir betrachten einen dreidimensionalen isotropen harmonischen Oszillator. Konstruieren Sie analog zur Vorlesung die Eigenfunktionen und Energieeigenwerte durch Einführung von geeigneten Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren. Was ist die Entartung des Grundzustandes, des ersten angeregten Zustands und des zweiten angeregten Zustands?

A.8.5 Aufgabe 28: Verschobener harmonischer Oszillator

Wir betrachten ein Teilchen mit Ladung q in einer Dimension in der Nähe einer Gleichgewichtslage (o.B.d.A. bei $x = 0$). Wir schalten nun zusätzlich ein schwaches elektrisches Feld E an.

1. Begründen Sie, warum der Hamiltonoperator

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 - q E x$$

das Teilchen beschreibt.

2. Bestimmen Sie die Eigenenergien und drücken Sie die Eigenfunktionen durch die des unverschobenen harmonischen Oszillators (sprich: des harmonischen Oszillators mit $E = 0$) aus.
3. Definieren Sie Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

$$a \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (i p + m\omega x) + \gamma$$
$$a^\dagger \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (-i p + m\omega x) + \gamma$$

mit einer geeigneten reellen Konstante γ , so dass sich die Eigenwerte des Hamiltonoperators direkt ablesen lassen.

A Übungsaufgaben

4. Berechnen Sie das elektrische Dipolmoment, sprich den Erwartungswert des Dipoloperators $D = qx$, als Funktion des elektrischen Feldes.

A.9 Blatt 8

A.9.1 Aufgabe 29: Endlich tiefer Potentialkasten: Streuzustände

Wir betrachten wieder den endlich tiefen Potentialkasten aus Aufgabe 22:

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{für } |x| < a \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

mit $V_0 > 0$. Im Folgenden interessieren wir uns für die Streuzustände, d.h. die stationären Zustände mit Energie $E > 0$.

1. Konstruieren Sie analog zur Vorlesung den Streuzustand zur Eigenenergie $E > 0$, den wir zur Beschreibung von von links einlaufenden Teilchen benötigen.
2. Berechnen Sie Transmissions- und Reflektionskoeffizient als Funktion der Energie. Sie sollten als Ergebnis finden:

$$T(E) = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(E + V_0)} \sin^2 \left(\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(E + V_0)} \right)}$$

3. Skizzieren Sie $T(E)$ und interpretieren Sie die Energien, wo der Potentialkasten vollständig transparent wird, indem Sie mit den Eigenenergien eines unendlich tiefen Potentialkastens der Breite $2a$ vergleichen.

A.9.2 Aufgabe 30: Potentialbarriere: Tunneleffekt

Wir betrachten nun eine Potentialbarriere

$$V(x) = \begin{cases} +V_0 & \text{für } |x| < a \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

mit $V_0 > 0$. Berechnen Sie die Streuzustände für dieses Problem und geben Sie Transmissions- und Reflektionskoeffizienten als Funktion der Energie an. Für $0 < E < V_0$ sollten Sie beispielsweise finden:

$$T(E) = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sinh^2 \left(\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} \right)}$$

Bemerkung: Die Beobachtung, dass auch für $E < V_0$ für die Transmissionswahrscheinlichkeit $T(E) > 0$ gilt, bezeichnet man als *Tunneleffekt*. In der klassischen Physik wäre die entsprechende Wahrscheinlichkeit gleich Null.

A.9.3 Aufgabe 31: Potentialstufe

Wir betrachten nun die Streuung an einer Potentialstufe

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

mit $V_0 > 0$.

1. Berechnen Sie den Reflektionskoeffizienten für Energien $E < V_0$ und interpretieren Sie Ihr Ergebnis.
2. Berechnen Sie den Reflektionskoeffizienten für Energien $E > V_0$.
3. Für dieses Potential gilt $V(x = -\infty) \neq V(x = +\infty)$ und daher ist die Geschwindigkeit des Teilchens links und rechts der Stufe unterschiedlich. Die Transmissionswahrscheinlichkeit ist deshalb nicht $|F|^2/|A|^2$ (Notation wie in der Vorlesung). Zeigen Sie, dass für $E > V_0$ tatsächlich Folgendes gilt:

$$T = \sqrt{\frac{E - V_0}{E}} \frac{|F|^2}{|A|^2}$$

Sie können dabei analog zur Vorlesung vorgehen oder mit der Wahrscheinlichkeitsstromdichte argumentieren.

4. Verifizieren Sie die Erhaltung der Gesamtwahrscheinlichkeit $T(E) + R(E) = 1$ für $E > V_0$.

A.10 Blatt 9

A.10.1 Aufgabe 32: Potential aus zwei δ -Funktionen

Wir betrachten ein eindimensionales Problem mit zwei attraktiven δ -Potentialen im Abstand ℓ :

$$V(x) = -\alpha\delta(x + \ell/2) - \alpha\delta(x - \ell/2)$$

Aus der Vorlesung kennen wir die Bindungsenergie eines einzelnen δ -Potentials mit Stärke α : $E_B = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}$.

1. Wir definieren $\rho = \sqrt{-2mE}/\hbar$, wobei E die Eigenenergie eines gebundenen Zustands im obigen Potential aus zwei δ -Funktionen ist. Zeigen Sie, dass die Eigenenergien durch die Lösungen der Gleichung

$$e^{-\rho\ell} = \pm \left(1 - \frac{2\rho}{\mu}\right)$$

mit $\mu \stackrel{\text{def}}{=} 2m\alpha/\hbar^2$ gegeben sind. Wie kann man diese Gleichung graphisch lösen?

2. Zeigen Sie, dass der Grundzustand gerade Parität hat und seine Bindungsenergie E_S kleiner als E_B ist. Interpretation? Zeichnen Sie die Wellenfunktion.
3. Zeigen Sie, dass für ℓ größer ein bestimmtes ℓ_c ein weiterer Eigenzustand existiert. Was passiert im Limes $\ell \rightarrow 0$? Wie groß ist ℓ_c ? Zeigen Sie, dass dieser erste angeregte Zustand ungerade Parität hat mit einer Eigenenergie $E_A > E_B$. Zeichnen Sie seine Wellenfunktion.

Bemerkung: Man kann dies als sehr vereinfachtes Modell des H_2^+ -Moleküls betrachten, wobei das Coulomb-Potential der beiden Kerne durch die δ -Potentiale ersetzt wurde und das Problem auf eine Dimension eingeschränkt ist. Man sieht, dass es immer einen Bindungszustand gibt mit einer Energie kleiner als die des dissoziierten Moleküls, $E_S < E_B$ (für eine korrekte Behandlung müssten wir hier zusätzlich noch die Coulomb-Abstossung der Kerne berücksichtigen). Man bezeichnet den entsprechenden Eigenzustand in der Molekülphysik als bonding state, obigen ersten angeregten Zustand als antibonding state.

A.10.2 Aufgabe 33: Unendlich tiefe Potentialmulde

Wir betrachten die Potentialmulde

$$V(\vec{r}) = \begin{cases} 0 & \text{für } |\vec{r}| < a \\ \infty & \text{für } |\vec{r}| \geq a \end{cases}$$

im dreidimensionalen Raum.

1. Berechnen Sie die erlaubten Energieeigenwerte und dazugehörigen Eigenfunktionen für Drehimpulsquantenzahl $l = 0$.
2. Leiten Sie für allgemeine Drehimpulsquantenzahlen l folgende Radialgleichung ab (Notation wie in der Vorlesung):

$$\frac{d^2 u}{dr^2} = \left(\frac{l(l+1)}{r^2} - k^2 \right) u(r)$$

mit $k \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{2mE}/\hbar$. Lösungen dieser Differentialgleichung sind beliebige Superpositionen

$$u(r) = c_1 r j_l(kr) + c_2 r n_l(kr) ,$$

wobei $j_l(x)$ eine sphärische Bessel-Funktion vom Grad l und $n_l(x)$ eine sphärische Neumann-Funktion vom Grad l ist. Schlagen Sie in einer geeigneten mathematischen Formelsammlung die Eigenschaften dieser Funktionen nach und zeigen Sie damit, dass die Eigenenergien allgemein durch

$$E_{nl} = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \beta_{nl}^2$$

gegeben sind, wobei β_{nl} die n -te Nullstelle von $j_l(x)$ ist.

A.10.3 Aufgabe 34: Endlich tiefe Potentialmulde

Wir betrachten nun die endlich tiefe Potentialmulde

$$V(\vec{r}) = \begin{cases} -V_0 & \text{für } |\vec{r}| < a \\ 0 & \text{für } |\vec{r}| \geq a \end{cases}$$

mit $V_0 > 0$ im dreidimensionalen Raum. Finden Sie den Grundzustand durch Lösung der Radialgleichung für Drehimpulsquantenzahl $l = 0$. Unter welcher Bedingung gibt es keinen gebundenen Zustand mehr? Vergleichen Sie mit Ihrem Ergebnis für den attraktiven Potentialkasten in einer Dimension.

Bemerkung: Man kann diese Potentialmulde als vereinfachtes Modell der Wechselwirkung von Proton und Neutron betrachten. Der entsprechende Bindungszustand mit $l = 0$ ist das Deuteron.

A.10.4 Aufgabe 35: Eigenschaften der Legendre-Polynome sowie der Kugelflächenfunktionen

In der Vorlesung wurden die Legendre-Polynome $P_l(x)$ sowie die Kugelflächenfunktionen als vollständige Systeme orthonormierter Funktionen eingeführt. Ersterer lassen sich nach der Formel von Rodriguez (1) darstellen und erfüllen die Orthogonalitätsrelation (2)

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

$$\int_{-1}^1 P_m(x) P_n(x) dx = \frac{2}{2n+1} \delta_{mn} \quad (2)$$

Kugelflächenfunktionen $Y_l^m(\theta, \phi) = C_l^m P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi}$ werden konstruiert aus den assoziierten Legendre-Polynomen (3) und erfüllen ebenfalls eine Orthogonalitätsbeziehung (4):

$$P_n^m(x) = (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_n(x) \quad (3)$$

$$\int_{-1}^1 P_l^m(x) P_{l'}^{m'}(x) dx = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (4)$$

1. Jede im Intervall $[-1, 1]$ stetige und beschränkte Funktion $f(x)$ kann nach Legendre-Polynomen entwickelt werden. Berechnen sie allgemein die Koeffizienten c_n einer solchen Entwicklung $f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n P_n(x)$ und stellen Sie $g(x) = 5x^3 + 6x^2 - 3x + 5$ explizit in dieser Basis dar.
2. Berechnen Sie allgemein den Koeffizienten C_l^m , so dass die Kugelflächenfunktionen normiert sind.
3. Jede auf der Kugelfläche beschränkte Funktion kann in eine Reihe nach den $Y_l^m(\theta, \phi)$ entwickelt werden. Führen Sie dies explizit für die Funktion $h(\theta, \phi) = (\sin(\theta)e^{i\phi} + 1)^2$ durch.

A.11 Blatt 10

A.11.1 Aufgabe 36: Eigenschaften des Wasserstoffatoms und der Kugelflächenfunktionen

1. Berechnen Sie $\langle r \rangle$ und $\langle r^2 \rangle$ für den Grundzustand des Wasserstoffatoms (r ist der Radius). Was ist der wahrscheinlichste Wert von r im Grundzustand? Drücken Sie die Ergebnisse in Einheiten des Bohrschen Radius aus.
2. Berechnen Sie $\langle x \rangle$ und $\langle x^2 \rangle$ für den Grundzustand des Wasserstoffatoms (Symmetrien ausnutzen und nicht blind losrechnen!).
3. Berechnen Sie $\langle x^2 \rangle$ für den Zustand $n = 2, l = 1, m = 1$.

A.11.2 Aufgabe 37: Dichteoperator für Spin-1/2 Systeme

1. Zeigen Sie, dass man die Dichtematrix eines Spin-1/2 Systems in der folgenden Form schreiben kann:

$$\rho = \frac{1}{2} I + \frac{1}{\hbar} \langle \vec{S} \rangle \cdot \vec{\sigma}$$

Dabei ist I die 2x2-Einheitsmatrix, σ_i sind die Pauli-Matrizen und $\langle \vec{S} \rangle$ ist der Erwartungswert des Spins.

2. Zeigen Sie, dass nur für einen maximal polarisierten Spin ein reiner Zustand vorliegt.

Eines der zentralen Ergebnisse der statistischen Physik ist die Aussage, dass ein Quantensystem im Kontakt mit einem Wärmebad der Temperatur T im Gleichgewicht durch den folgenden Dichteoperator beschrieben wird:

$$\rho = \frac{1}{Z} e^{-H/k_B T} \tag{A.3}$$

mit der sogenannten Zustandssumme $Z \stackrel{\text{def}}{=} \text{Tr}(e^{-H/k_B T})$

1. Betrachten Sie den Fall eines Spin-1/2 Teilchens mit gyromagnetischem Verhältnis γ , das sich in einem statischen Magnetfeld B in z -Richtung befindet. Geben Sie die Dichtematrix für das System bei Temperatur T laut (A.3) explizit an.
2. Berechnen Sie die Spinerwartungswerte in x , y und z -Richtung und weiterhin die magnetische Suszeptibilität in z -Richtung (Brillouin Formel).

A.11.3 Aufgabe 38: Identische Teilchen im Potentialkasten

Wir betrachten einen unendlich hohen Potentialkasten der Breite a , in dem sich zwei nicht miteinander wechselwirkende Teilchen befinden. Den Spin der Teilchen können Sie in dieser Aufgabe ignorieren. Geben Sie jeweils die Gesamtwellenfunktion, die Energie und die Entartung für den Grundzustand und den ersten angeregten Zustand an falls

1. die beiden Teilchen unterscheidbar sind.
2. die beiden Teilchen ununterscheidbare Bosonen sind.
3. die beiden Teilchen ununterscheidbare Fermionen sind.

Aufgabe 39: Addition von zwei Spin-1/2

Wir betrachten zwei unterscheidbare Spin-1/2 Teilchen mit den Spinoperatoren \vec{S}_1 und \vec{S}_2 . Die Operatoren \vec{S}_1^2 , \vec{S}_2^2 , S_{1z} und S_{2z} bilden einen vollständigen Satz von kommutierenden Observablen mit den Eigenvektoren

$$|+, +\rangle, \quad |+, -\rangle, \quad |-, +\rangle, \quad |-, -\rangle \quad (\text{A.4})$$

Dabei bezieht sich der erste Eintrag auf die magnetische Quantenzahl von Teilchen 1, der zweite Eintrag auf die magnetische Quantenzahl von Teilchen 2.

Der Gesamtspinoperator des Systems ist definiert als $\vec{S} \stackrel{\text{def}}{=} \vec{S}_1 + \vec{S}_2$. Zeigen Sie, dass \vec{S}_1^2 , \vec{S}_2^2 , \vec{S}^2 und S_z auch einen vollständigen Satz von kommutierenden Observablen bilden, indem Sie die entsprechenden Eigenvektoren explizit konstruieren,

$$\begin{aligned} \vec{S}_1^2 |S, M\rangle &= \vec{S}_2^2 |S, M\rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 |S, M\rangle \\ \vec{S}^2 |S, M\rangle &= S(S+1) \hbar^2 |S, M\rangle \\ S_z |S, M\rangle &= M \hbar |S, M\rangle, \end{aligned}$$

mit Quantenzahlen S, M , die Sie ausrechnen sollen. Was ist die Symmetrie dieser Zustände bei Vertauschung der beiden Teilchen?

Hinweis: Berechnen Sie explizit die Matrixdarstellung von \vec{S}^2 in der Basis (A.4).

A.12 Blatt 11

A.12.1 Aufgabe 40: Zwei Teilchen im unendlich tiefen Potentialkasten

Betrachten Sie zwei Teilchen der Masse m im unendlich tiefen Potentialkasten. Berechnen Sie den Erwartungswert $\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle$ als Funktion der Hauptquantenzahlen für folgende drei Fälle:

1. Die Teilchen sind unterscheidbar.
2. Die Teilchen sind ununterscheidbare Bosonen mit Spin 0.
3. Die Teilchen sind ununterscheidbare Fermionen mit Spin 1/2.

Hinweis: Folgende Integrale sind nützlich ($n, m \in \mathbb{N}$):

$$\begin{aligned}\int_0^a x \sin^2\left(\frac{\pi n}{a}x\right)dx &= \frac{a^2}{4} \\ \int_0^a x^2 \sin^2\left(\frac{\pi n}{a}x\right)dx &= \frac{a^3(-3 + 2\pi^2 n^2)}{12\pi^2 n^2} \\ \int_0^a x \sin\left(\frac{\pi n}{a}x\right) \sin\left(\frac{\pi m}{a}x\right)dx &= \frac{-2a^2 nm(1 + (-1)^{1+m+n})}{\pi^2(n^2 - m^2)^2} \quad \text{für } n \neq m\end{aligned}$$

Bemerkung: Sie werden sehen, dass allein aufgrund der Symmetrieüberlegungen (und ohne jede Wechselwirkung der Teilchen miteinander) die Teilchen für eine symmetrische Ortswellenfunktion im Mittel näher zusammen sind als für eine antisymmetrische Ortswellenfunktion. Im Wasserstoffmolekül H_2 sind die Elektronen im Grundzustand beispielsweise in einem Singulett-Zustand, weil dann die symmetrische Ortswellenfunktion der Elektronen zwischen den beiden Kernen über die Coulomb-Wechselwirkung die Kerne aneinanderrückt.

A.12.2 Aufgabe 41: Zwei wechselwirkende Teilchen im unendlich tiefen Potentialkasten

Wir betrachten das gleiche Problem wie in Aufgabe 40 mit einer zusätzlichen Wechselwirkung der beiden Teilchen miteinander mit dem Potential

$$V(x_1, x_2) = g \delta(x_1 - x_2) .$$

Berechnen Sie den Effekt der Wechselwirkung auf die Energie des Grundzustands und ersten angeregten Zustands (für die drei Fälle in Aufgabe 40) mittels Störungstheorie erster Ordnung.

A.12.3 Aufgabe 42: Anharmonischer Oszillator

Wir betrachten einen eindimensionalen harmonischen Oszillator mit einer kleinen anharmonischen Störung:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + g\hbar\omega x^3,$$

Berechnen Sie in erster und zweiter Ordnung Störungstheorie in g den Einfluss des anharmonischen Terms auf die Eigenenergien. Geben Sie insbesondere explizit die Energiedifferenz benachbarter Energieniveaus an.

Hinweis: Die Rechnung machen Sie am einfachsten durch Verwendung der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren.

A.12.4 Aufgabe 43: Feinstruktur des Wasserstoffatoms

Die Entartung der Energieniveaus mit gleicher Hauptquantenzahl aber unterschiedlicher Drehimpulsquantenzahl im Wasserstoffatom wird durch die sogenannte Feinstruktur (teilweise) aufgehoben. Der erste Beitrag zur Feinstruktur ist eine relativistische Korrektur. Zeigen Sie, dass die Entwicklung des relativistischen Ausdrucks für die kinetische Energie zu folgendem zusätzlichen Term im Hamiltonoperator führt:

$$H_{rel} = -\frac{p^4}{8m^3c^2}$$

Berechnen Sie damit in erster Ordnung Störungstheorie die relativistische Verschiebung der Energieniveaus. Dabei dürfen Sie folgendes Ergebnis unbewiesen verwenden:

$$\langle nlm | \frac{1}{r^2} | nlm \rangle = \frac{1}{(l+1/2)n^3a^2}$$

mit dem Bohrschen Radius a .

Bemerkung: Der zweite Beitrag zur Feinstruktur ist die sogenannte Spin-Bahn Kopplung, die bemerkenswerterweise zu einer ähnlichen Verschiebung der Energieniveaus wie die relativistische Korrektur führt. Das Gesamtergebnis ist dann

$$E_{n,j} = -\frac{13.6eV}{n^2} \left[1 + \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right) \right]$$

mit dem Gesamtdrehimpuls $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ und der Sommerfeld-Feinstrukturkonstante

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \approx \frac{1}{137}.$$

A.12.5 Aufgabe 44: Dreidimensionaler harmonischer Oszillator mit Störung

Wir betrachten einen dreidimensionalen isotropen harmonischen Oszillator mit dem Störterm

$$H_{anh} = g x^2 y z .$$

Berechnen Sie die Korrekturen in Ordnung g zur Grundzustandsenergie und zur Energie des ersten angeregten Zustands.

A.13 Blatt 12

A.13.1 Aufgabe 45: Drehimpulsalgebra und Clebsch-Gordan Koeffizienten

1. Der Vektoroperator \vec{J} sei eine Darstellung der Drehimpulsalgebra mit der üblichen Basis $|J, M\rangle$ laut Vorlesung. Zeigen Sie, dass für die Auf- und Absteigeoperatoren $J_{\pm} \stackrel{\text{def}}{=} J_x \pm iJ_y$ Folgendes gilt:

$$J_{\pm}|J, M\rangle = \hbar\sqrt{J(J+1) - M(M \pm 1)}|J, M \pm 1\rangle$$

2. Betrachten Sie die Addition zweier Drehimpulse \vec{J}_1 und \vec{J}_2 . Zeigen Sie, dass die Anzahl der Eigenvektoren $|J, M\rangle$ des Gesamtdrehimpulsoperators gleich der Dimension des Tensorproduktes der Hilberträume \mathcal{H}_1 und \mathcal{H}_2 ist (Notation wie in Vorlesung).
3. Betrachten Sie explizit die Addition eines ganzzahligen Bahndrehimpulses l und des Elektronenspins (wie im Wasserstoffatom). Berechnen Sie explizit die Clebsch-Gordan Koeffizienten für $J = l + 1/2$, $M = l - 1/2$ und für $J = l - 1/2$, $M = l - 1/2$.

A.13.2 Aufgabe 46: Yukawa Potential

Unter anderem in der Kernphysik spielt das Yukawa Potential eine wichtige Rolle:

$$V(\vec{r}) = -g \frac{e^{-\mu r}}{r}$$

Geben Sie durch Wahl einer geeigneten Variationswellenfunktion eine obere Schranke für die Bindungsenergie des Grundzustands an. Bei der Wahl der Variationsfunktion sollten Sie sich davon leiten lassen, dass Sie die Grundzustandsenergie des Wasserstoffatoms exakt reproduzieren (wobei es mehrere Möglichkeiten gibt, diese Randbedingung zu erfüllen: wählen Sie irgendeine aus).

Hinweis: Das Yukawa Potential wird auch als abgeschirmtes Coulomb Potential bezeichnet, wobei $\mu = m_{ex}c/\hbar$ und m_{ex} die Masse des Austauschteilchens ist.

A.13.3 Aufgabe 47: Zweizustandssystem

Betrachten Sie ein Zweizustandssystem mit einem Hamiltonoperator H_0 , der die normierten Eigenzustände $|\psi_a\rangle$ (mit Energie E_a) und $|\psi_b\rangle$ (mit Energie E_b)

hat. O.B.d.A. sei $E_a = -E_b$ (lässt sich durch Verschiebung des Energienullpunkts immer erreichen). Wir schalten nun eine Störung W mit den folgenden Matrixelementen an:

$$\begin{aligned}\langle \psi_a | W | \psi_a \rangle &= \langle \psi_b | W | \psi_b \rangle = 0 \\ \langle \psi_a | W | \psi_b \rangle &= \langle \psi_b | W | \psi_a \rangle = g\end{aligned}$$

1. Geben Sie die exakten Eigenenergien des gestörten Hamiltonoperators an.
2. Berechnen Sie die Eigenenergien des gestörten Systems in Störungstheorie zweiter Ordnung.
3. Geben Sie eine Schranke für die Grundzustandsenergie an, indem Sie die Variationswellenfunktion

$$|\psi\rangle = (\cos \phi) |\psi_a\rangle + (\sin \phi) |\psi_b\rangle$$

mit dem freien Parameter ϕ verwenden.

4. Vergleichen Sie die obigen Ergebnisse. Warum funktioniert die Variationsmethode hier so gut? Was passiert im Limes $E_b \rightarrow E_a$ mit Ihrem störungstheoretischen Ergebnis und warum?

A.13.4 Aufgabe 48: WKB Approximation

Eine wichtige Näherungsmethode bei der Behandlung eindimensionaler Probleme ist die WKB (Wentzel, Kramers, Brillouin) Approximation. Die Grundannahme dieser Approximation ist, dass sich das Potential $V(x)$ nur langsam auf der Skala der Wellenlänge des Teilchens verändert.

1. Machen Sie den folgenden Ansatz für die eindimensionale Wellenfunktion:

$$\psi(x) = A(x) e^{i\phi(x)}$$

mit zwei reellen Funktionen $A(x)$ und $\phi(x)$. Leiten Sie dann aus der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung mit einem Potential $V(x)$ durch Betrachtung von Real- und Imaginärteil zwei Differentialgleichungen für $A(x)$ und $\phi(x)$ ab. Machen Sie die Annahme, dass $A''(x)$ vernachlässigbar ist (gleichbedeutend mit einem langsam veränderlichen Potential) und zeigen Sie, dass die Lösung dieser Differentialgleichungen in einem klassisch erlaubten Bereich auf

$$\psi(x) \approx \frac{A}{\sqrt{p(x)}} e^{\pm i \int p(x) dx / \hbar}$$

führt und in einem klassisch verbotenen Bereich auf

$$\psi(x) \approx \frac{A}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\pm \int |p(x)| dx / \hbar} .$$

$p(x) \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{2m(E - V(x))}$ ist hier der klassische Impuls (im erlaubten Bereich) und A eine Proportionalitätskonstante.

2. Betrachten Sie nun das Tunneln eines von links einlaufenden Teilchens mit Energie E durch eine Barriere $V(x)$:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < 0 \\ v(x) > E & \text{für } 0 \leq x \leq a \\ 0 & \text{für } x > a \end{cases}$$

Leiten Sie für die Transmissionswahrscheinlichkeit T durch eine hinreichend breite oder hohe Barriere Folgendes ab:

$$T \propto e^{-2 \int_0^a |p(x)| dx / \hbar} \tag{A.5}$$

Dabei hängt die Proportionalitätskonstante nur schwach von den Parametern des Streuproblems ab. In der Berechnung von (A.5) dürfen Sie die Ableitung von $p(x)$ im Inneren des Intervalls $(0, a)$ vernachlässigen (konsistent mit der Bedingung langsam veränderliches Potential). Anwendungen dieser Art sind typisch für die WKB Näherung.

A.14 Probeklausur 1

A.14.1 Aufgabe 1:

[3 Punkte]

Die Wellenfunktion eines Teilchens in einer Dimension sei

$$\psi(x) = \frac{1}{(\pi a^2)^{1/4}} \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right)$$

Dabei ist a eine reelle positive Konstante. Wie gross ist die Wahrscheinlichkeit, bei einer Messung den Impuls im Intervall

$$[\hbar(k - \Delta k/2), \hbar(k + \Delta k/2)]$$

zu finden? Δk kann als klein angenommen werden.

Hinweis:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\lambda x^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \quad \text{für } \lambda > 0$$

A.14.2 Aufgabe 2:

[4 Punkte]

Von einem Teilchen mit Masse m in einer Dimension sei die Grundzustandswellenfunktion

$$\psi_0(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}} e^{-\alpha x^2}, \quad \alpha > 0$$

und die Grundzustandsenergie $E_0 = 0$ bekannt. In welchem Potential bewegt sich das Teilchen?

A.14.3 Aufgabe 3:

[4 Punkte]

Wir betrachten den zweidimensionalen Hilbertraum mit der Basis $|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. Das Quantensystem sei in dem Zustand $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle)$, bevor wir nun eine Reihe von Messungen durchführen.

1. In einer ersten Messung messen wir σ_z . Mit welcher Wahrscheinlichkeit findet man welchen Messwert? Was ist der Erwartungswert der Messung?
2. Die erste Messung hat nun konkret den Messwert -1 geliefert. Wir messen danach in einer zweiten Messung die Observable $A = \sigma_x + \sigma_y + \sigma_z$. Mit welcher Wahrscheinlichkeit findet man welchen Messwert? Was ist der Erwartungswert der Messung?

Hinweis: Die Pauli-Matrizen sind folgendermassen definiert:

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

A.14.4 Aufgabe 4:

[5 Punkte]

Wir betrachten ein Teilchen in einer Dimension in einem unendlich tiefen Potentialtopf:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } 0 < x < a \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$

1. Berechnen Sie die stationären Eigenzustände und Eigenenergien.
2. Zur Zeit $t = 0$ habe das Teilchen die Wellenfunktion

$$\psi(x, t = 0) = \begin{cases} 1/\sqrt{a} & \text{für } 0 < x < a \\ 0 & \text{sonst} \end{cases},$$

d.h. man findet es zur Zeit $t = 0$ an jedem Ort im Potentialkasten mit gleicher Wahrscheinlichkeit. Mit welchen Wahrscheinlichkeiten findet man bei einer Energiemessung dieses Teilchen in welchem Eigenzustand?

3. Geben Sie die Wellenfunktion für Zeiten $t > 0$ an.

A.14.5 Aufgabe 5:

[5 Punkte]

Wir betrachten die eindimensionale Streuung an einem repulsiven δ -Potential:

$$V(x) = \alpha \delta(x) \quad \text{mit } \alpha > 0$$

1. Geben Sie die Anschlussbedingung der Wellenfunktion bei $x = 0$ an und leiten Sie die Anschlussbedingung der Ableitung bei $x = 0$ ab.
2. Konstruieren Sie die Streulösung für ein von links einlaufendes Teilchen mit Energie E .
3. Bestimmen Sie daraus die Transmissionswahrscheinlichkeit $T(E)$.

A.14.6 Aufgabe 6:

[4 Punkte]

Wir betrachten den quantenmechanischen starren Rotator in einem Magnetfeld:

$$H = \frac{\vec{L}^2}{2\Theta} + \gamma \vec{B} \cdot \vec{L}$$

\vec{L} ist der quantenmechanische Drehimpulsoperator und Θ, γ sind systemspezifische Konstanten

(Θ = Trägheitsmoment, γ = gyromagnetisches Verhältnis).

1. Geben Sie die möglichen Energieeigenwerte für ein Magnetfeld in z -Richtung an, $\vec{B} = (0, 0, b)$.
2. Geben Sie die möglichen Energieeigenwerte für das Magnetfeld $\vec{B} = (b, 0, b)$ an.

Hinweis: Sie sollen sich in dieser Aufgabe auf ganzzahlige Darstellungen der Drehimpulsalgebra beschränken.

A.15 Probeklausur 2

A.15.1 Aufgabe 1:

[5 Punkte]

Betrachten Sie zwei Teilchen der Masse m in einem eindimensionalen harmonischen Oszillator. Geben Sie explizit die Gesamtwellenfunktion für den Grundzustand und den ersten angeregten Zustand für folgende Fälle an:

1. Die Teilchen sind unterscheidbar.
2. Die Teilchen sind ununterscheidbare Bosonen mit Spin 0.
3. Die Teilchen sind ununterscheidbare Fermionen mit Spin 1/2. (Vergessen Sie hier nicht, die Spinwellenfunktion mit anzugeben!)

Bei Entartung eines Zustands sollen Sie insbesondere alle möglichen Gesamtwellenfunktionen zu dieser Eigenenergie angeben. Normierungsfaktoren der Wellenfunktion dürfen Sie ignorieren.

Hinweis: Die (nicht normierte) Grundzustandswellenfunktion eines Teilchens im obigen harmonischen Oszillator lautet ($\ell \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\hbar/m\omega}$)

$$\psi_0(x) = e^{-x^2/2\ell^2} \quad \text{Eigenenergie: } E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega$$

und für den ersten angeregten Zustand

$$\psi_1(x) = \frac{x}{\ell} e^{-x^2/2\ell^2} \quad \text{Eigenenergie: } E_1 = \frac{3}{2} \hbar\omega$$

A.15.2 Aufgabe 2:

[7 Punkte]

Betrachten Sie einen Spin-1/2 Freiheitsgrad, der mit einem Störterm an einen harmonischen Oszillator gekoppelt ist:

$$H = \Delta \sigma_x + \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) + \lambda \sigma_z (a + a^\dagger)$$

Dabei sind $\Delta, \omega > 0$ und a^\dagger, a die Auf- und Absteigeoperatoren des harmonischen Oszillators. Die Pauli-Matrizen sind folgendermassen definiert:

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

Berechnen Sie die Grundzustandsenergie für $\lambda = 0$, in erster Ordnung Störungstheorie in λ und in zweiter Ordnung Störungstheorie in λ .

A.15.3 Aufgabe 3:

[2 Punkte]

Wir betrachten ein eindimensionales Problem mit einem Teilchen der Masse m in einem Potential $V(x) = -f x$ mit $f > 0$. Lösen Sie die Bewegungsgleichung für den Impulsoperator im Heisenberg-Bild. Was ist die Zeitabhängigkeit des Impulserwartungswertes eines beliebigen Anfangszustandes?

A.15.4 Aufgabe 4:

[4 Punkte]

Wir betrachten ein freies Teilchen der Masse m in einer Dimension mit einem attraktiven δ -Potential am Ursprung:

$$V(x) = -\alpha \delta(x), \quad \alpha > 0$$

Finden Sie eine obere Schranke für die Bindungsenergie des gebundenen Zustands, indem Sie das Variationsverfahren mit den Variationswellenfunktionen

$$\psi(x) = \left(\frac{2b}{\pi}\right)^{1/4} e^{-bx^2}$$

verwenden. Diese Wellenfunktionen sind bereits normiert und $b > 0$ ist Ihr Variationsparameter.

Hinweis:

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-2bx^2} dx = \frac{\sqrt{2\pi}}{8b^{3/2}}$$

A.15.5 Aufgabe 5:

[4 Punkte]

1. Die Dichtematrix eines Spin-1/2 Systems sei in der Eigenbasis von σ_z durch

$$\rho = \begin{pmatrix} 3/4 & i/4 \\ -i/4 & 1/4 \end{pmatrix}$$

gegeben. Was sind die Erwartungswerte bei der Messung von $S_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x$ bzw. $S_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z$? (Die Definitionen der Pauli-Matrizen finden Sie in Aufgabe 2). Liegt ein reiner Zustand vor?

2. Die Zeitentwicklung eines Dichteoperators ist im Schrödinger-Bild durch

$$\rho(t) = U(t, t_0) \rho(t_0) U^\dagger(t, t_0)$$

gegeben, wobei $U(t, t_0)$ der Zeitentwicklungsoperator ist. Zeigen Sie damit, dass aus einem gemischten Zustand niemals ein reiner Zustand werden kann.

A.15.6 Aufgabe 6:

[3 Punkte]

Betrachten Sie zwei unterscheidbare Teilchen mit Spin s_1 und Spin s_2 (o.B.d.A. $s_1 \geq s_2$). Die Wechselwirkung dieser beiden Teilchen wird durch den Hamiltonoperator

$$H = J \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \quad , \quad J > 0$$

beschrieben, wobei \vec{S}_1, \vec{S}_2 die Spinoperatoren der beiden Teilchen sind. Was ist die kleinste bzw. größte Eigenenergie dieses Hamiltonoperators? Was ist jeweils die Entartung dieser Zustände?

Anhang B

Lösungen zu den Übungsaufgaben

B.1 Blatt 0 Präsenzübung

B.1.1 Aufgabe A

Sei \mathbb{K} ein komplexer 3-dimensionaler VR,

Ket $|i\rangle \in \mathbb{K}$ sind dessen Elemente

Bra $\langle j|$ werden definiert als lineare Funktionale $\mathbb{K} \rightarrow \mathbb{C}$

$$\langle j | [|i\rangle] = \langle j | i \rangle \text{ Skalarprodukt}$$

\Leftrightarrow Die Menge der Bras $\langle j|$ bildet den Dualraum \mathbb{K}^D zu \mathbb{K} , beide sind zueinander isomorph. Insbesondere induziert eine ONB in \mathbb{K} eine in \mathbb{K}^D .

Die lineare Abbildung $\langle \alpha|$ wird durch ihre Werte auf Basiselementen bestimmt.

$$\underbrace{\langle \alpha | [|1\rangle]}_{\text{Abbildung angewendet auf } |1\rangle} = \underbrace{\langle \alpha | 1 \rangle}_{\text{Skalarprodukt der Elemente } |\alpha\rangle, |1\rangle \text{ aus } \mathbb{K}} = \underbrace{\langle 1 | \alpha \rangle^*}_{\text{Eigenschaft des SKP}} = (i)^* = -i$$

analog $\langle \alpha | 2\rangle, \langle \alpha | 3\rangle$. Entsprechend stellt man $\langle \alpha|$ in der induzierten Basis $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ dar.

$$1. \begin{aligned} \langle \alpha | &= -i\langle 1| & -4\langle 2| & +2i\langle 3| \\ \langle \beta | &= -2i\langle 1| & & +2\langle 3| \end{aligned}$$

$$2. \begin{aligned} \langle \alpha | \alpha \rangle &= 1 + 16 + 4 = 21 \\ \langle \alpha | \beta \rangle &= 2 + 4i \\ \langle \beta | \alpha \rangle &= 2 - 4i = \langle \alpha | \beta \rangle^* \end{aligned}$$

$$3. A = |\alpha\rangle\langle\beta| = \begin{pmatrix} 2|1\rangle\langle 1| & +2i|1\rangle\langle 3| \\ +8i|2\rangle\langle 1| & -8|2\rangle\langle 3| \\ -4|3\rangle\langle 1| & -4i|3\rangle\langle 3| \end{pmatrix}, \quad \langle i | A | j \rangle_{ij} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 2i \\ 8i & 0 & -8 \\ -4 & 0 & -4i \end{pmatrix}$$

B.1.2 Aufgabe B

\Leftrightarrow Wir betrachten nur endlich dimensionale Operatoren, die sich durch Matrizen darstellen lassen.

$A = (a_{ij})_{i,j}$, $A^\dagger = (a_{ji})^*$, hermitescher Operator: $A = A^\dagger$

- $(A+B)^\dagger = (a_{ij} + b_{ij})^\dagger = ((a_{ji})^* + (b_{ji})^*) = (a_{ij})^* + (b_{ij})^* = A^\dagger + B^\dagger$ für A, B hermitesch
- $(\alpha A)^\dagger = (\alpha a_{ij})^\dagger = \alpha^* (a_{ji})^* = \alpha^* A^\dagger \stackrel{!}{=} \alpha A$ mit A hermitesch ($A^\dagger = A$)
 $\Rightarrow \alpha^* = \alpha$ reell

3. $(AB)^\dagger = (a_{ij}b_{jk})^\dagger_{ik} = (a_{kj}^*b_{ji}^*) = (a_{jk}^{*T}b_{ij}^{*T}) = (b_{ij}^{*T}a_{jk}^{*T}) = B^\dagger A^\dagger$
 N.B. Einstein-Notation, d.h. es wird über j summiert!
4. $(AB)^\dagger \stackrel{!}{=} B^\dagger A^\dagger \stackrel{!}{=} (AB)$
 Produkt soll hermitesch sein $\Leftrightarrow [A,B] = 0$ kommutieren
5. Durch explizites Anschreiben
 - $B[A,C] + [A,B]C = BAC - BCA + ABC - BAC = ABC - BCA = [A,BC]$
 - $(ABC - ACB - BCA + CBA) + (BCA - BAC - CAB + ACB) + (CAB - CBA - ABC + BAC) = 0$
6. $\text{Tr}(AB) = \sum_{ij} (a_{ij}b_{ji}) = \sum_{ij} (b_{ji}a_{ij}) = \text{Tr}(BA)$ (Vertauschung von äußerem Spur- und innerem Index der Matrixmultiplikation)
7.
 - Es gelte $P_1^2 = P_1, P_2^2 = P_2, [P_1, P_2] = 0$
 $\Rightarrow (P_1P_2)^2 = P_1P_2P_1P_2 = P_1^2P_2^2 = P_1P_2$
 - $P_1^2 = P_1, P_2^2 = P_2, (P_1P_2)^2 = P_1P_2$ und $(P_1P_2)^\dagger = (P_1P_2)$
 Wir verwenden: Ein Projektor ist immer hermitesch:
 $[P_1P_2] = P_1P_2 - P_2P_1 = P_1P_2 - P_2^\dagger P_1^\dagger = P_1P_2 - (P_1P_2)^\dagger$
 $= P_1P_2 - P_1P_2 = 0 \Rightarrow [P_2, P_1] = 0$
 - Mit $x \in \mathcal{H} \Rightarrow P_2(x) \in \mathcal{H}_2$ und $P_1(y) \in \mathcal{H}_1$ für $y \in \mathcal{H}_2 \subset \mathcal{H}$
 $P_1P_2(x) = P_1(P_2(x)) \in \mathcal{H}_1 \cap \mathcal{H}_2$
8. Darstellung in der Diagonalbasis, $U^\dagger = U^{-1}$ unitär

$$\begin{pmatrix} \lambda_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \lambda_n \end{pmatrix}^\dagger = \begin{pmatrix} \lambda_1^* & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \lambda_n^* \end{pmatrix} \stackrel{!}{=} \begin{pmatrix} \lambda_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \lambda_n \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\lambda_1} & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \frac{1}{\lambda_n} \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \lambda_i^* \lambda_i = 1, |\lambda_i|^2 = 1 \quad \forall i$$

B.1.3 Aufgabe C

$$1. \left\| \begin{pmatrix} (1-\lambda) & i & 0 \\ -i & (1-\lambda) & 0 \\ 0 & 0 & (4-\lambda) \end{pmatrix} \right\| = (1-\lambda)^2(4-\lambda) - (4-\lambda) = (4-\lambda)(\lambda^2 - 2\lambda)$$

$$\stackrel{!}{=} 0$$

$$\Rightarrow \text{EW } \lambda_1 = 0, \lambda_2 = 2 \text{ und } \lambda_3 = 4$$

EV:

$$\begin{aligned} \underline{\lambda_1 = 0} \\ 0 = x + iy \\ 0 = -ix + y \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \underline{\lambda_2 = 2} \\ 0 = -x + iy \\ 0 = -ix - y \end{aligned}$$

$$\underline{\lambda_3 = 4}$$

$$\begin{aligned}
 0 &= 4z & 0 &= 2z & & \\
 \Rightarrow v_1 &= \begin{pmatrix} \mu \\ i\mu \\ 0 \end{pmatrix} & \Rightarrow v_2 &= \begin{pmatrix} \mu \\ -i\mu \\ 0 \end{pmatrix} & \Rightarrow v_3 &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \mu \end{pmatrix} \\
 \text{bzw. } \hat{v}_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix} & \text{bzw. } \hat{v}_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ 0 \end{pmatrix} & \text{bzw. } \hat{v}_3 &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 2. \quad e^{iHt} &:= \sum_n \frac{1}{n!} (iHt)^n \\
 &= U^{-1} \sum_n \frac{1}{n!} (it)^n (H^{diag})^n U \leftarrow \text{diagonalisierende Matrix ergänzt } \mathbb{1} = UU^{-1} \\
 &= U^{-1} \sum_n \frac{1}{n!} (it)^n \begin{pmatrix} \lambda_1^n & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2^n & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3^n \end{pmatrix} U \\
 &= U^{-1} \begin{pmatrix} e^{i\lambda_1 t} & 0 & 0 \\ 0 & e^{i\lambda_2 t} & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\lambda_3 t} \end{pmatrix} U \quad \text{Setze } a_j = e^{i\lambda_j t}
 \end{aligned}$$

Bilde diagonalisierende Matrix aus den EV, beachte $\det U \stackrel{!}{=} 1$

$$\begin{aligned}
 U^{-1} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ i & -i & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \end{pmatrix}, \quad U = (U^{-1})^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -i & 0 \\ 1 & i & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \end{pmatrix} \\
 \Rightarrow e^{iHt} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ i & -i & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 & 0 & 0 \\ 0 & a_2 & 0 \\ 0 & 0 & a_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -i & 0 \\ 1 & i & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\
 &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} a_1 + a_2 & i(a_2 - a_1) & 0 \\ i(a_1 - a_2) & (a_1 + a_2) & 0 \\ 0 & 0 & a_3 \end{pmatrix} \text{ mit } a_1 = 1, a_2 = e^{2it} \text{ und } a_3 = 2e^{4it} \\
 &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + e^{2it} & i(e^{2it} - 1) & 0 \\ i(e^{2it} - e^{4it}) & (1 + e^{2it}) & 0 \\ 0 & 0 & 2e^{4it} \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

B.2 Blatt 1

B.2.1 Aufgabe 1: Pauli-Matrizen

- $\sigma_i = \sigma_i^\dagger$, $\text{Tr}(\sigma_i) = 0$, $\lambda_{1/2} = \pm 1$ sind Eigenwerte (durch Nachrechnen)
- Ansatz:

$$\begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_0 & 0 \\ 0 & m_0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & m_x \\ m_x & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -im_y \\ im_y & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} m_z & 0 \\ 0 & -m_z \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} m_0 + m_z & m_x - im_y \\ m_x + im_y & m_0 - m_z \end{pmatrix}$$

aus $m_0 + m_z = \alpha$ und $m_0 - m_z = \delta$ folgt $m_0 = \frac{\alpha + \delta}{2}$ und $m_z = \frac{\alpha - \delta}{2}$

aus $m_x - im_y = \beta$ und $m_x + im_y = \gamma$ folgt $m_x = \frac{\beta + \delta}{2}$ und $m_y = \frac{\gamma - \beta}{2i}$

B.2.2 Aufgabe 2: Zeitabhängige SGL

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

$$|\psi(t)\rangle = a(t) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + b(t) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} \text{ und } |\psi(0)\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

- Diagonalisierung: $0 \stackrel{!}{=} \det \begin{pmatrix} \epsilon - \lambda & g \\ g & \epsilon + \lambda \end{pmatrix} = \lambda^2 - 2\lambda\epsilon + (\epsilon^2 - g^2) \Rightarrow \lambda_{1/2} = \epsilon \pm g$ sind Eigenwerte
- Eigenvektoren:

$$\lambda_1 = \epsilon + g$$

$$\lambda_2 = \epsilon - g$$

$$g \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = 0 \quad g \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = 0$$

$$\Rightarrow x = y$$

$$\Rightarrow x = -y$$

$$\Rightarrow v_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow v_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

- Diagonalisierende Transformation: $U^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$, $U = (U^{-1})^\dagger = U^{-1}$
- Lösung der SGL in der Eigenbasis: $i\hbar \frac{d}{dt} U^{-1} U |\psi(t)\rangle = U^{-1} \underbrace{U H U^{-1}} U |\psi(t)\rangle$

mit $U |\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} c(t) \\ d(t) \end{pmatrix}$, Multiplik. U von links

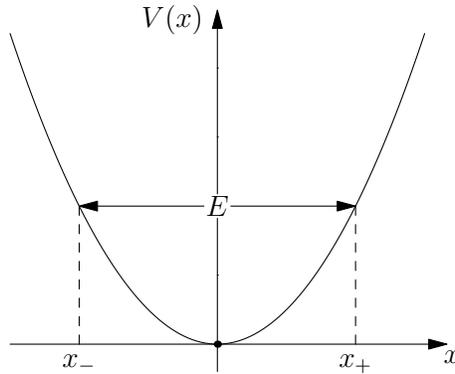


Abbildung B.1: Potential des harmonischen Oszillators

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{c}(t) \\ \dot{d}(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \epsilon + g & 0 \\ 0 & \epsilon - g \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c(t) \\ d(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \epsilon + g & c(t) \\ \epsilon - g & d(t) \end{pmatrix}$$

(Bewegungsgleichungen für $c(t)$ und $d(t)$ entkoppeln)

$$\text{I: } \frac{dc(t)}{c(t)} = \frac{-i}{\hbar}(\epsilon + g)dt \Rightarrow c(t) = \mathcal{C}e^{-i\frac{\epsilon+g}{\hbar}(t-t_0)}$$

$$\text{Analog } d(t) = \mathcal{C}e^{-i\frac{\epsilon-g}{\hbar}(t-t_0)}$$

- Lösung in ursprünglicher Basis: $|\psi(t)\rangle = U^{-1} \begin{pmatrix} c(t) \\ d(t) \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c(t) \\ d(t) \end{pmatrix}$
 $= \frac{\mathcal{C}}{\sqrt{2}}e^{-i\frac{\epsilon}{\hbar}(t-t_0)} \begin{pmatrix} e^{-ig\frac{(t-t_0)}{\hbar}} + e^{ig\frac{(t-t_0)}{\hbar}} \\ e^{-ig\frac{(t-t_0)}{\hbar}} - e^{ig\frac{(t-t_0)}{\hbar}} \end{pmatrix}$
 $= \mathcal{C}\sqrt{2}e^{-i\frac{\epsilon}{\hbar}(t-t_0)} \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{g(t-t_0)}{\hbar}\right) \\ -i\sin\left(\frac{g(t-t_0)}{\hbar}\right) \end{pmatrix}$

$$\text{Mit Randbedingungen } |\psi(0)\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow t_0 = 0, \mathcal{C} = \frac{1}{\sqrt{2}} \text{ und } |\psi(t)\rangle = e^{-i\frac{\epsilon}{\hbar}t} \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{gt}{\hbar}\right) \\ -i\sin\left(\frac{gt}{\hbar}\right) \end{pmatrix}$$

B.2.3 Aufgabe 3: Bohr-Sommerfeld-Quantisierung

1. Harmonischer Oszillator:

B Lösungen zu den Übungsaufgaben

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = E \leftarrow \text{klassische Hamiltonfunktion}$$

$$\text{klassische Umkehrpunkte: } p = 0 \Rightarrow x^2 = \frac{2E}{m\omega^2}, x_{\pm} = \pm\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} =: \pm x_0$$

Quantisierungsregel: $\int_C p dx \stackrel{!}{=} \hbar n_x \rightarrow$ Wegintegral über eine volle Periode

$$\int_C = 2 \int_{x_-}^{x_+}$$

Darstellung von p: $p = \pm\sqrt{2m(E - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2)}$ ($p > 0$ auf dem gewählten Weg $x_- \rightarrow x_+$)

$$2 \int_{x_-}^{x_+} \sqrt{2m(E - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2)} dx = 2 \int_{-x_0}^{+x_0} m\omega \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2} - x^2} dx = 2\pi \frac{2E}{\omega} \stackrel{!}{=} \hbar n_x$$

$$\text{mit } \frac{2E}{m\omega^2} = x_0^2$$

$$\Rightarrow E = \hbar\omega n_x, n_x \in \mathbb{N}_0$$

(Quantisierende Energien des H.O. ohne Grundzustandsenergie; damit wird das Spektrum allerdings korrekt beschrieben)

2. Klassische Mechanik (Kepler-Problem) für das Wasserstoffatom Idee: Die Bohr-Sommerfeld-Regel wählt aus allen möglichen Lösungen des klassischen Zentralkraftproblems die (im Sinne einer Quantentheorie) zulässigen Lösungen aus.

$$H = \frac{1}{2m}(p_r^2 + \underbrace{\frac{L^2}{r^2}}_{\text{Zentrifugalterm}}) - \underbrace{\frac{e^2}{r}}_{\text{Coulombpotential}} = E$$

klassische Hamiltonfunktion, $L > 0$ Drehimpuls, $E < 0$ gebundene Zust.

Sommerfeldbedingungen

(a) $\int_C L d\varphi \stackrel{!}{=} \hbar h$, da φ zyklische Variable $\Rightarrow L = l\hbar$ (Drehimpulsquantisierung)

(b) $\int_C p_r dr \stackrel{!}{=} n_r \hbar$

- klassische Umkehrpunkte ($p_r = 0$):

$$r_{1/2} = \frac{-2me^2 \pm \sqrt{4m^2 e^4 + 8mEL^2}}{4mE} = \frac{e^2}{2E} \left(-1 \pm \sqrt{1 + \frac{2EL^2}{me^4}}\right)$$

- Darstellung von $p_r(r)$:

$$p_r^2(r) = 2mE + \frac{2me^2}{r} - \frac{L^2}{r^2} = 2mE\left(1 + \frac{e^2}{Er} - \frac{L^2}{2mEr^2}\right)$$

$$2 \int_{r_1}^{r_2} p_r dr = 2 \int_{r_1}^{r_2} \sqrt{2m|E|} \left(-1 + \frac{e^2}{|E|r} - \frac{L^2}{2m|E|r^2}\right)^{\frac{1}{2}} dr$$

Substitution:

$$r = \frac{e^2}{|E|} r', \quad dr = \frac{e^2}{|E|} dr', \quad r'_{1/2} = \frac{|E|}{e^2} r_{1/2} = \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \sqrt{1 - 4a^2} \quad \text{mit } a^2 = \frac{|E|L^2}{2me^4}$$

$$\rightsquigarrow = 2\sqrt{\frac{2me^4}{|E|}} \int_{r'_1}^{r'_2} \sqrt{-1 + \frac{1}{r'} - \frac{a^2}{r'^2}} dr' = 2\sqrt{\frac{2me^4}{|E|}} \frac{\pi}{2} (1 - 2\sqrt{\frac{|E|L^2}{2me^4}}) \stackrel{!}{=} \hbar n_r$$

$$= \pi \sqrt{\frac{2me^4}{|E|}} - 2\pi \sqrt{L^2} = \sqrt{\frac{me^4}{2|E|}} - \underbrace{|L|}_{\hbar n_\phi} = \hbar n_r$$

$$\hbar(n_r + n_\phi) = \sqrt{\frac{me^4}{2|E|}}$$

Energieniveaus im H-Atom:

$$E_n = \frac{me^4}{2\hbar^2 n^2} \quad \text{mit } n = (n_r + n_\phi)$$

B.2.4 Aufgabe 4: 3D Zustandsraum

$$1. \quad L_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad L_z^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$S = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad S^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Da $\sigma^\dagger = \sigma \Rightarrow$ Hermitesche Matrizen

$$2. \quad \bullet [M, L_z] \stackrel{!}{=} 0 \Leftrightarrow M = \begin{pmatrix} m_{11} & 0 & 0 \\ 0 & m_{22} & 0 \\ 0 & 0 & m_{33} \end{pmatrix}$$

$$\bullet [N, L_z^2] \stackrel{!}{=} 0 \Leftrightarrow N = \begin{pmatrix} n_{11} & 0 & n_{13} \\ 0 & n_{22} & 0 \\ n_{31} & 0 & n_{33} \end{pmatrix}$$

$$\bullet [\sigma, S^2] \stackrel{!}{=} 0 \text{ offensichtlich für alle } P \text{ (da } S^2 = \mathbb{1})$$

- Ein Satz von Operatoren heißt vollständig, wenn eine gemeinsame Basis von Eigenvektoren existiert, auf der die Tupel der Eigenwerte (λ_i, μ_j) nicht entarten.

L_z^2, S^2 :

- Gemeinsamer EV $|v_2\rangle =: |q_1\rangle$
- Im verbleibenden Unterraum $\underbrace{\{|v_1\rangle, |v_3\rangle\}}_U$

Diagonalisierung von S

$$\Rightarrow |q_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|v_1\rangle + |v_3\rangle) \text{ und } |q_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|v_1\rangle - |v_3\rangle)$$

gemeinsame
Eigenbasis

QZ von L_z^2 ,

S

$|q_1\rangle$

0

+1

$|q_2\rangle$

+1 \setminus \text{ent-}

+1 \setminus \text{aufge-}

$|q_3\rangle$

+1 / \text{artet}

-1 / \text{hoben}

L_z^2, S^2 :

Da $S^2 = 1$ sind im Unterraum U die EV von L_z^2, S^2 gleichermaßen entartet, d.h. L_z^2, S^2 nicht vollständig

B.3 Blatt 2

B.3.1 Aufgabe 5

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

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

Axiome der QM: (Sketch)

1. Zustand einer QSystems beschreiben Kets $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ (Hilbertraum)
2. Messbare Größen werden durch hermitesche Operatoren auf \mathcal{H} (Observable) dargestellt
3. Messwerte können nur Eigenwerte λ_i der Observablen sein
4. Wahrscheinlichkeit für Messung des EW λ_i eines normierten Zustandes $|\psi\rangle$ folgt aus der Projektion auf den zugehörigen Eigenraum

$$P(\lambda_i) = |\langle v(\lambda_i)|\psi\rangle|^2 \text{ (diskret, nicht entartet)}$$

$$dP(\alpha) = |\langle v(\alpha)|\psi\rangle|^2 d\alpha \text{ (kontinuierlich)}$$

$$P(\lambda_i) = \sum_j |\langle v_j(\lambda_i)|\psi\rangle|^2 \text{ (entartet, } v_j \text{ sind z.B. ONB im Eigenraum zu } \lambda_i)$$

5. Messung impliziert Projektoren auf EZ der Observable: $|\psi\rangle \rightarrow \frac{P_n|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|P_n|\psi\rangle}}$
(Kollaps der WF)

Lösung der Aufgabe:

1. Messung $\hat{=}$ Projektion von $|\psi\rangle$ auf EV von σ_z

$$\lambda_1 = 1, v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \lambda_2 = -1, v_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

$$P_{\sigma_z}(\lambda_1 = 1) = |\langle\psi|v_1\rangle|^2 = \frac{1}{2}, P_{\sigma_z}(\lambda_1 = -1) = \frac{1}{2},$$

$$\langle\psi|\sigma_z|\psi\rangle = \frac{1}{2}(1 \quad 1) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = 0 = \sum_i \lambda_i P(\lambda_i)$$

2. 1. Messung $\hat{=}$ Präparation im EZ $|\psi_2\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1-i \\ 1+i & -1 \end{pmatrix} \text{ Diagonalisierung}$$

$$(1 - \lambda)(-1 - \lambda) - (1 + i)(1 - i) = \lambda^2 - 1 - 2 \stackrel{!}{=} 0$$

$$\Rightarrow \lambda_{1/2} = \pm\sqrt{3}, y_\lambda = -\frac{1}{2}(1 - \lambda)(1 + i)x_\lambda$$

$$\text{EV: } (3 - \lambda)^{-\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{1}{2}(1 - \lambda)(1 + i) \end{pmatrix} = a_\lambda$$

$$P_A(\lambda = \sqrt{3}) = |\langle \psi_2 | a_{\sqrt{3}} \rangle|^2 = \frac{1}{3 - \sqrt{3}}$$

$$P_A(\lambda = -\sqrt{3}) = |\langle \psi_2 | a_{-\sqrt{3}} \rangle|^2 = \frac{1}{3 + \sqrt{3}}$$

$$\Rightarrow \sum P_A = 1 \quad \checkmark$$

Erwartungswert:

$$\frac{\sqrt{3}}{3 - \sqrt{3}} - \frac{\sqrt{3}}{3 + \sqrt{3}} = \frac{\sqrt{3}(3 + \sqrt{3} - 3 + \sqrt{3})}{6} = 1 = \langle \psi_2 | A | \psi_2 \rangle$$

3. Die zweite Messung initiiert das System in

$$|\psi_3\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{1}{2}(1 + \sqrt{3})(1 + i) \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3 + \sqrt{3}}}$$

$$P_{\sigma_z}(\lambda = 1) = |\langle \psi_3 | v_1 \rangle|^2 = \frac{1}{3 + \sqrt{3}}, |\psi_3\rangle \rightarrow v_1$$

$$P_{\sigma_z}(\lambda = -1) = |\langle \psi_3 | v_2 \rangle|^2 = \frac{1}{3 + \sqrt{3}} \left| -\frac{1}{2}(1 - \sqrt{3})(1 + i) \right|^2 = \frac{(\sqrt{3} - 1)^2}{2(3 + \sqrt{3})} = \frac{\sqrt{3} + 2}{\sqrt{3} + 3},$$

$$|\psi_3\rangle \rightarrow v_2$$

$$\text{EW: } \langle \psi_3 | \sigma_z | \psi_3 \rangle = \frac{3 - \sqrt{3}}{2(3 + \sqrt{3})}$$

4. Durch die Messung in 3. ist das System in einem EZ von σ_z übergegangen. Die 4. Messung liefert also das selbe Ergebnis wie die dritte, $\lambda_{1/2} = \pm 1$, $|\psi_4\rangle = v_{1/2}$

B.3.2 Aufgabe 6

$$1. \langle (\Delta A)^2 \rangle = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \underbrace{\langle A^2 - 2A\langle A \rangle + \langle A \rangle^2 \rangle}_{\langle \cdot \rangle \text{ ist linear, ziehe } \langle A \rangle \text{ heraus}} = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$$

Sei $A|\alpha\rangle = \lambda|\alpha\rangle$, $|\alpha\rangle$ EZ von A

$$\langle \alpha | (\Delta A)^2 | \alpha \rangle = \langle \alpha | A^2 | \alpha \rangle - \langle \alpha | A | \alpha \rangle^2 = \lambda^2 - (\lambda)^2 = 0$$

N.B. ΔA ist hermitescher Operator

$$2. \text{ z.z. } \langle (\Delta A)^2 \rangle \langle (\Delta B)^2 \rangle \geq \frac{1}{4} |\langle [A, B] \rangle|^2$$

- Schwarzsche Ungleichung (sei $\lambda \in \mathbb{C}$)

$$0 \leq \|\alpha + \lambda\beta\|^2 = \langle \alpha + \lambda\beta | \alpha + \lambda\beta \rangle = \langle \alpha | \alpha \rangle + \lambda^* \langle \beta | \alpha \rangle + \lambda \langle \alpha | \beta \rangle + |\lambda|^2 \langle \beta | \beta \rangle$$

$$\text{Wähle } \lambda = -\frac{\langle \beta | \alpha \rangle}{\langle \beta | \beta \rangle}, 0 \leq \langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle - 2\langle \alpha | \beta \rangle \langle \beta | \alpha \rangle + \langle \alpha | \beta \rangle \langle \beta | \alpha \rangle$$

$$\Rightarrow \langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle \geq |\langle \alpha | \beta \rangle|^2 \quad (\text{S})$$

- einsetzen in (S)

$$|\alpha\rangle = (A - \langle A \rangle)|\psi\rangle \text{ und } |\beta\rangle = (B - \langle B \rangle)|\psi\rangle$$

$$\Rightarrow \langle \psi | (\Delta A)^2 | \psi \rangle \langle \psi | (\Delta B)^2 | \psi \rangle \geq |\langle \psi | \Delta A \Delta B | \psi \rangle|^2 = |\langle \psi | \frac{1}{2} [\Delta A, \Delta B] + \frac{1}{2} \{ \Delta A, \Delta B \} | \psi \rangle|^2$$

$$[\Delta A, \Delta B] = [A, B] = AB - BA = \text{mit } A, B \text{ hermitsch} = A^\dagger B^\dagger - B^\dagger A^\dagger = (BA - AB)^\dagger = -[A, B]^\dagger$$

d.h. Kommutator hermitescher Operatoren ist anti-hermitesch, d.h. der Erwartungswert $\langle [A, B] \rangle$ rein imaginär
 analog $\langle A, B \rangle$ reell

$$= \frac{1}{4} \underbrace{\langle \psi | [A, B] | \psi \rangle}_{\text{rein imaginär}} + \underbrace{\langle \psi | \{A, B\} | \psi \rangle}_{\text{rein reell}} \geq \frac{1}{4} |\langle \psi | [A, B] | \psi \rangle|^2$$

$$\text{N.B. } \mathbb{C} \ni z = a + ib \Rightarrow |z|^2 = |a|^2 + |b|^2 \geq |b|^2$$

3. $[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z$, nutze $\sigma_i^2 = \mathbb{1}$ für $i = x, y, z$
 $\langle (\Delta\sigma_x)^2 \rangle \langle (\Delta\sigma_y)^2 \rangle \geq |\langle \sigma_x \rangle|^2 \geq 0$

$$\text{Ansatz: } |\psi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \text{ (N)}$$

Extremale Unschärfe:

$$\langle (\Delta\sigma_x)^2 \rangle = 1 - \left((\alpha, \beta) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \right)^2 = 1 - 4(\alpha\beta)^2$$

$$\langle (\Delta\sigma_y)^2 \rangle = 1 - \left((\alpha, \beta) \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \right)^2 = 1 - 0 = 1$$

$$\langle (\Delta\sigma_x)^2 \rangle \langle (\Delta\sigma_y)^2 \rangle \stackrel{(N)}{=} 1 - 4\alpha^2(1 - \alpha^2) (*)$$

$$\frac{d}{d\alpha} (*) \stackrel{!}{=} 0$$

$$\Rightarrow -8\alpha + 16\alpha^3 = 0 \Rightarrow \alpha_1 = 0 \text{ (Maximum)}, \alpha_{2/3} = \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \text{ (Minimum)}$$

\hookrightarrow weiteres Maximum für $\alpha = 1$ am Rand des Intervalls $\alpha \in [0; 1]$

- Zustände maximaler Unschärfe $|\psi_1^{max}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|\psi_2^{max}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$
 sind EZ von σ_z

- Zustände minimaler Unschärfe $|\psi_{1/2}^{min}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \pm 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ vgl. Teilaufgabe 1.

B.3.3 Aufgabe 7: Exponentialoperatoren

$$1. e^{A+B} = \sum_i \frac{1}{i!} (A+B)^i = \sum_i \sum_{j=0}^i \frac{i!}{j!(i-j)!} A^j B^{(i-j)}$$

(Binomialentwicklung, verlangt $[A, B] = 0$)
 Vergleich mit Cauchy-Produkt-Darstellung

$$e^A e^B = \left(\sum_i \frac{1}{i!} A^i \right) \left(\sum_i \frac{1}{i!} B^i \right) = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^i \frac{A^j B^{i-j}}{j!(i-j)!} = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{i!} \underbrace{\sum_{j=0}^i \frac{i!}{j!(i-j)!} A^j B^{i-j}}_{(A+B)^i}$$

$$= e^{A+B} = e^{B+A} = e^B e^A$$

- Cauchy-Produkt-Formel: (vgl. Analysis I) Es seien $\sum a_n, \sum b_n$ absolut konvergente Reihen. Dann gilt:

$$\left(\sum_0^{\infty} a_n \right) \left(\sum_0^{\infty} b_n \right) = \sum_0^{\infty} \left(\sum_{i=0}^n a_i b_{n-i} \right)$$

Binomialentwicklung: (für $[A, B] = 0$)

$$(A+B)^n = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} A^k B^{n-k}$$

$$2. \text{ Mit } \sigma_x^2 = \mathbb{1}$$

$$e^{i\alpha\sigma_x} = \sum_n \frac{1}{n!} (i\alpha)^n \sigma_x^n = \text{Aufspalten in gerade und ungerade Potenzen}$$

$$= \sum_{n=2k} \frac{1}{n!} (i\alpha)^n \mathbb{1} + \sum_{n=2k+1} \frac{1}{n!} (i\alpha)^n \sigma_x = \cos(\alpha)\mathbb{1} + i \sin(\alpha)\sigma_x$$

(Reihendarstellung von $\sin x, \cos x$)

$$3. e^{i\alpha\sigma_y} = \dots \cos(\alpha)\mathbb{1} + i \sin(\alpha)\sigma_y = \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix}$$

$$4. [\sigma_x, \sigma_y] \neq 0, \text{ d.h. keine triviale Zerlegung des Exponentialoperators}$$

$$\Omega = \lambda\sigma_x + \mu\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & \lambda - i\mu \\ \lambda + i\mu & 0 \end{pmatrix}$$

$$\Omega^2 = \begin{pmatrix} \lambda^2 + \mu^2 & 0 \\ 0 & \lambda^2 + \mu^2 \end{pmatrix} = \mathbb{1}, \text{ da } \lambda^2 + \mu^2 = 1 \text{ n.V.}$$

$$e^{i\alpha\Omega} = \cos(\alpha)\mathbb{1} + i \sin(\alpha)\Omega$$

$$5. \text{ (a) } e^{2i\sigma_x} = \sum_n \frac{1}{n!} (2i)^n \sigma_x^n = \sum_{n=2k+1} \frac{1}{n!} (2i)^n \sigma_x + \sum_{n=2k} \frac{1}{n!} (2i)^n$$

$$= i \sin(2)\sigma_x + \cos(2)\mathbb{1}$$

$$e^{i\sigma_x} = \dots i \sin(1)\sigma_x + \cos(1)\mathbb{1} \text{ analog}$$

$$(e^{i\sigma_x})^2 = \begin{pmatrix} \cos(1) & i \sin(1) \\ i \sin(1) & \cos(1) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(1) & i \sin(1) \\ i \sin(1) & \cos(1) \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \cos^2(1) - \sin^2(1) & 2i \sin(1) \cos(1) \\ 2i \sin(1) \cos(1) & -\sin^2(1) + \cos^2(1) \end{pmatrix} = (\text{Additionstheoreme})$$

$$= \begin{pmatrix} \cos(2) & i \sin(2) \\ i \sin(2) & \cos(2) \end{pmatrix} = e^{2i\sigma_x} \checkmark$$

(offensichtlich, da σ_x mit sich selbst vertauscht!)

(b) $\Omega' = \sigma_x + \sigma_y \hat{=} \lambda = 1, \mu = 1$ in (4.)

$$\Omega'^2 = \begin{pmatrix} 0 & 1+i \\ 1-i & 0 \end{pmatrix}^2 = 2\mathbb{1}$$

$$e^{i\Omega'} = \sum_{n=2k} \frac{1}{n!} (2i)^n \mathbb{1} + \sum_{n=2k+1} (2i)^n \Omega' \frac{1}{2} = \cos(2)\mathbb{1} + \frac{1}{2}i \sin(2)\Omega'$$

Vergleich mit

$$\begin{aligned} e^{i\sigma_x} e^{i\sigma_y} &= [i \sin(1)\sigma_x + \cos(1)\mathbb{1}] + [i \sin(1)\sigma_y + \cos(1)\mathbb{1}] \\ &= -\sin^2(1)2i\sigma_z + i \sin(1) \cos(1) \underbrace{(\sigma_x + \sigma_y)}_{\Omega'} + \cos^2(1)\mathbb{1} \\ &= [\cos^2(1)\mathbb{1} - i \sin^2(1)\sigma_z] + \frac{1}{2}i \sin(2)\Omega' \end{aligned}$$

Die beiden Matrizen sind nicht identisch, da $[\sigma_x, \sigma_y] \neq 0$ und die Operatorzerlegung aus 1. somit nicht gilt.

B.4 Blatt 3

B.4.1 Aufgabe 8: Sequenz von Stern-Gerlach Experimenten

1. Messung: Nur Atome im Zustand $\begin{pmatrix} \sigma_{zi^+} \\ \sigma_{zi^-} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ werden

$$\text{durchgelassen} \Rightarrow |\psi_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

2. Messung: $\hat{n} \cdot \vec{\sigma} = \begin{pmatrix} n_z & n_x \\ n_x & -n_z \end{pmatrix}$ ist zu diagonalisieren

$$-(n_z - \lambda)(n_z + \lambda) - n_x^2 = \lambda^2 - (n_z^2 + n_x^2) = \lambda^2 - 1 \stackrel{!}{=} 0$$

wobei $(n_z^2 + n_x^2) = 1$, da \vec{n} Einheitsvektor $\Rightarrow \lambda_{1,2} = \pm 1$

$$\text{EV zum EW } \lambda = +1 \text{ sei } v_+ = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_z - 1 & n_x \\ n_x & -n_z - 1 \end{pmatrix} = 0,$$

$$\Rightarrow (n_z - 1)x + n_x y = 0 \text{ und } n_x x - (n_z + 1)y = 0 \Rightarrow x = \frac{n_z + 1}{n_x} y$$

$$v_+ = \frac{1}{\sqrt{2(n_z + 1)}} \begin{pmatrix} n_z + 1 \\ n_x \end{pmatrix} \text{ mit } \vec{n} = \begin{pmatrix} n_x \\ n_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin \beta \\ \cos \beta \end{pmatrix}$$

\rightarrow dies ist der Systemzustand nach der 2. Messung $|\psi_2\rangle = v_+$

$$\rightarrow P(\text{„}\lambda = +1 \text{ gemessen in 2. Messung“}) =: P_2 = |\langle \psi_1 | v_+ \rangle|^2 = \frac{n_z + 1}{2}$$

3. Messung: Es wird $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ gemessen

$$\text{im EW } \lambda^{\sigma_z} = -1, v_-^{\sigma_z} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$P(\text{„}\lambda^{\sigma_z} = -1 \text{ in der 3. Messung“}) =: P_3 = |\langle \psi_2 | v_-^{\sigma_z} \rangle|^2 = \left| \frac{n_x}{\sqrt{2(n_z + 1)}} \right|^2$$

Transmittierte Intensität:

$$I = \underbrace{I_0}_{=1} \cdot P_2 \cdot P_3 = \frac{n_z + 1}{2} \cdot \frac{n_x^2}{2(n_z + 1)} \quad \vec{n} = \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin \beta \\ \cos \beta \end{pmatrix}$$

$$I = \frac{1}{4} \sin^2 \beta \text{ maximal für } \beta = \pm \frac{\pi}{2}$$

⇒ maximale Transmission, falls die 2. Messung ausschließlich σ_x misst.

B.4.2 Aufgabe 9: Zeitentwicklung im dreidimensionalen Zustandsraum

1. $t = 0$:

$$E(|u_1\rangle) = \hbar\omega \text{ und } E(|u_2\rangle) = E(|u_3\rangle) = 2\hbar\omega$$

$$P(E = \hbar\omega) = |\langle v_1 | \psi(t=0) \rangle|^2 = \frac{1}{2} \text{ und}$$

$$P(E = 2\hbar\omega) = |\langle \frac{1}{\sqrt{2}}(\langle u_2 | + \langle u_3 |) | \psi(t=0) \rangle|^2 = \frac{1}{2}$$

mit $\frac{1}{\sqrt{2}}(\langle u_2 | + \langle u_3 |) =$ Einheitsvektor im UVR zu $E = 2\hbar\omega$

$$\langle E \rangle = \hbar\omega(\frac{1}{2} + 2 \cdot \frac{1}{2}) = \frac{3}{2}\hbar\omega \text{ und}$$

$$\text{Var}E = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = [(\hbar\omega)^2 \cdot \frac{1}{2}(1+4) - \frac{9}{4}\hbar^2\omega^2] = \frac{(\hbar\omega)^2}{4}$$

N.B. Völlig identisch: Matrix-Formalismus

$$\langle E \rangle = (\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \frac{3}{2}, \text{ etc.}$$

2. Diagonalisiere A/α (sonst: Achte auf Faktoren a)

$$(1-\lambda)\lambda^2 - (1-\lambda) = (1-\lambda)(\lambda^2 - 1) = (1-\lambda)^2(1+\lambda) \stackrel{!}{=} 0$$

$$\Rightarrow \lambda_{1,2} = +1 \text{ (entarteter EW) und } \lambda_3 = -1$$

EV zum EW $\lambda_3 = -1$:

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow \begin{matrix} x = 0 \\ y + z = 0 \end{matrix}, \quad v_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$P(„\lambda_3 = -1 \text{ gemessen}“) = |\langle v_- | \psi(t=0) \rangle|^2 =$$

$$= \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} \right|^2 = 0$$

$$\Rightarrow P(„\lambda_{1,2} = +1“) = P(„Wert +1 \cdot a gemessen“) = 1$$

Da $|\psi(t=0)\rangle$ ein Zustand aus dem Untervektorraum zum Eigenwert $\lambda = +1$ ist, ist der Zustand nach der Messung unverändert.

3. Zeitentwicklung für den Zustand $|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} u_1(t) \\ u_2(t) \\ u_3(t) \end{pmatrix}$

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

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} u_1(t) \\ u_2(t) \\ u_3(t) \end{pmatrix} = \hbar\omega \begin{pmatrix} u_1(t) \\ 2u_2(t) \\ 2u_3(t) \end{pmatrix} \Rightarrow \text{3 DGL's entkoppeln} \\ (H \text{ diagonal})$$

$$\frac{du_1}{u} = -i\omega dt \Rightarrow u_1(t) = e^{-i\omega t} \frac{1}{\sqrt{2}} \leftarrow \text{Randbedingung aus } |\psi(t=0)\rangle$$

$$\text{analog } u_{2,3}(t) = e^{-2i\omega t} \frac{1}{2}$$

4. $|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} u_1(t) \\ u_2(t) \\ u_3(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-i\omega t} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ e^{-2i\omega t} \frac{1}{2} \\ e^{-2i\omega t} \frac{1}{2} \end{pmatrix}$

$$\begin{aligned} \frac{1}{a} \langle A \rangle &= \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle = (u_1^*(t), u_2^*(t), u_3^*(t)) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1(t) \\ u_2(t) \\ u_3(t) \end{pmatrix} \\ &= |u_1^2(t)|^2 + u_2^*(t)u_3(t) + u_3^*(t)u_2(t) = \frac{1}{2} + \frac{1}{4} + \frac{1}{4} \\ &= 1 \quad (\text{zeitunabhängig}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{b} \langle B \rangle &= \langle \psi(t) | B | \psi(t) \rangle = (u_1^*(t), u_2^*(t), u_3^*(t)) \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1(t) \\ u_2(t) \\ u_3(t) \end{pmatrix} \\ &= u_1^*(t)u_2(t) + u_2^*(t)u_1(t) + |u_3(t)|^2 = e^{-i\omega t} \frac{1}{2\sqrt{2}} + e^{i\omega t} \frac{1}{2\sqrt{2}} + \frac{1}{4} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \cos(\omega t) + \frac{1}{4} \quad (\text{oszillierend}) \end{aligned}$$

5. Messung von A:

→ ergibt stets die Eigenwerte von A, ± 1

$$P(„Messung von A ergibt $-1a$ “) = $|\langle v_- | \psi(t) \rangle|^2$$$

$$= \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u_1(t) \\ u_2(t) \\ u_3(t) \end{pmatrix} \right|^2 = 0$$

$$P(\text{„Messung von } A \text{ ergibt } +1a\text{“}) = 1,$$

d.h. $|\psi(t)\rangle$ ist aus dem Eigenvektorraum (UVR) von A zum EW +1 zu allen Zeiten

Messung von B:

$$\lambda^2(1-\lambda) - (1-\lambda) = (1-\lambda)(\lambda+1)(\lambda-1) \stackrel{!}{=} 0 \Rightarrow \lambda_{1,2} = 1, \lambda_3 = -1$$

Eigenvektor zum Eigenwert $\lambda = -1$:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow -x = y \Rightarrow v_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$P(\text{„Messung von } B \text{ ergibt } -1 \cdot b\text{“}) = |\langle v_- | \psi(t) \rangle|^2 =$$

$$= \left| \frac{1}{2} e^{-i\omega t} - \frac{1}{2\sqrt{2}} e^{-2i\omega t} \right|^2 = \frac{1}{4} + \frac{1}{8} - \frac{1}{4\sqrt{2}} (e^{-i\omega t} + e^{i\omega t}) = \frac{3}{8} - \frac{1}{\sqrt{8}} \cos(\omega t)$$

$$P(\text{„Messung von } B \text{ ergibt } +1 \cdot b\text{“}) = \frac{5}{8} - \frac{1}{\sqrt{8}} \cos(\omega t)$$

Interpolation:

Da $[A, H] = 0$ sind die Erwartungswerte von A zeitunabhängig; dieses gilt nicht für $[B, H] \neq 0$.

B.4.3 Aufgabe 10: Zwei-Zustands-System

$$|L\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} : \text{Teilchen sicher links,} \quad |R\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} : \text{Teilchen sicher rechts}$$

$$H = \Delta(|L\rangle\langle R| + |R\rangle\langle L|), \quad \Delta > 0$$

$$1. H = \Delta \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \text{EW: } \lambda = \pm 1, \quad \text{Eigenenergien } \pm \Delta$$

$$v_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad v_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \text{ sind EV}$$

$$|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \end{pmatrix} \text{ sei zeitabh. Zustand}$$

Lösung der SGL in der Diagonalebasis

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = \begin{pmatrix} \tilde{c}_1(t) \\ \tilde{c}_2(t) \end{pmatrix} = U^+ |\psi(t)\rangle$$

$$U^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \text{ ist diagonalisierende Transformation (hier } U = U^+)$$

$$\underline{\text{SGL:}} \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \tilde{c}_1(t) \\ \tilde{c}_2(t) \end{pmatrix} = \Delta \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{c}_1(t) \\ \tilde{c}_2(t) \end{pmatrix} = \Delta \begin{pmatrix} \tilde{c}_1(t) \\ -\tilde{c}_2(t) \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \tilde{c}_1(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta(t-t_0)} \tilde{c}_1(t_0) \text{ und } \tilde{c}_2(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\Delta(t-t_0)} \tilde{c}_2(t_0)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow |\psi(t)\rangle &= U |\tilde{\psi}(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta(t-t_0)} \tilde{c}_1(t_0) \\ e^{\frac{i}{\hbar}\Delta(t-t_0)} \tilde{c}_2(t_0) \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta(t-t_0)} \tilde{c}_1(t_0) + e^{\frac{i}{\hbar}\Delta(t-t_0)} \tilde{c}_2(t_0) \\ e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta(t-t_0)} \tilde{c}_1(t_0) - e^{\frac{i}{\hbar}\Delta(t-t_0)} \tilde{c}_2(t_0) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

2. Randbedingung $\psi(t=0) \stackrel{!}{=} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ erfüllt, falls $t_0 = 0$,

$$\tilde{c}_1(0) = \tilde{c}_2(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}, \text{ damit } |\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\frac{\Delta}{\hbar}t) \\ -i \sin(\frac{\Delta}{\hbar}t) \end{pmatrix}$$

$$P(\text{„Teilchen links“}) = |\langle L|\psi(t)\rangle|^2 = \cos^2(\frac{\Delta}{\hbar}t)$$

$$P(\text{„Teilchen rechts“}) = |\langle R|\psi(t)\rangle|^2 = \sin^2(\frac{\Delta}{\hbar}t)$$

\Rightarrow Das Teilchen „oszilliert“ zwischen den beiden Zuständen $|L\rangle$ und $|R\rangle$; dabei beobachtet man die Oszillation in der Besetzungszahl ($\hat{=}$ hier Wahrscheinlichkeit) (*Rabi-Oszillation*)

B.4.4 Aufgabe 11: δ -Funktion

1. A)

- $\int \delta_n(x) dx = \int_{-\frac{1}{2n}}^{\frac{1}{2n}} n dx = n \left| \frac{1}{2n} + \frac{1}{2n} \right| = 1$
- $\lim_{n \rightarrow \infty} \int f(x) \delta_n(x) dx = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\frac{1}{2n}}^{\frac{1}{2n}} f(x) n dx$
 $= \lim_{n \rightarrow \infty} n \left(\frac{1}{2n} - \frac{-1}{2n} \right) f(\xi) = f(0),$
 $\xi \in \left[-\frac{1}{2n}, \frac{1}{2n}\right]$ Mittelwertsatz (verlangt $f(x)$ stetige Testfunktion)

B)

- $\int \delta_n(x) dx = \frac{n}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-n^2 x^2} dx = \frac{2n}{\sqrt{\pi}} \frac{\sqrt{\pi}}{2n} = 1 \checkmark$
 vgl. Bronstein $\int_0^{\infty} e^{-a^2 x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2a}$

- Am einfachsten ist der Rückgriff auf die Eigenschaften der Normalverteilung

$$P_{NV}(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \text{ (Wahrscheinlichkeitsverteilung)}$$

$$\Phi(x) = \int_{-\infty}^x P_{NV}(x') dx \text{ (Kumulative Verteilungsfunktion)}$$

Mit $\sigma = \frac{1}{\sqrt{2n}}$ ergibt sich die Aufgabe

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int f(x) P(x; \sigma = \frac{1}{n\sqrt{2}}) dx \rightarrow \int f(x) P(x; \sigma \rightarrow 0) dx = f(0)$$

(Theorie der Normalverteilung)

2. Integriere gegen eine Testfunktion:

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

$$\stackrel{A}{=} \lim_{k \rightarrow \infty} \int_{-\frac{k}{a}}^{\frac{k}{a}} f\left(\frac{y}{a}\right) \delta(y - y_0) \frac{dy}{a}$$

Fallunterscheidung in den Integrationsgrenzen:

$$\stackrel{a \geq 0}{=} \int_{-\infty}^{\infty} f\left(\frac{y}{a}\right) \delta(y - y_0) \frac{dy}{a} = \frac{1}{|a|} f(x_0)$$

Erwartungswert
einer beliebig scharf
um 0 konzentrierten
Normalverteilung

Substitution:
 $y = ax$ und
 $y_0 = ax_0$

$$\stackrel{a \leq 0}{=} - \int_{-\infty}^{\infty} f\left(\frac{y}{a}\right) \delta(y - y_0) \frac{dy}{a} = \frac{1}{|a|} f(x_0)$$

$$\Rightarrow = \frac{1}{|a|} \int f(x) \delta(x - x_0) dx$$

3. Partielle Integration für Funktionenfolge

$$f(x) \delta'_n(x) f'(x) \delta_n(x)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta'(x) dx = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta'(x) dx$$

$$= \lim_{n \rightarrow \infty} \left[\underbrace{f(x) \delta_n(x)}_{\substack{\text{Randterme} \\ \text{verschwinden}}} \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int f'(x) \delta_n(x) dx \right] \stackrel{!}{=} -f'(0)$$

$$4. \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^x \delta_n(x') dx' \stackrel{A}{=} \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\underbrace{]-\infty, x] \cap \left[\frac{-1}{2n}, \frac{1}{2n}\right]}_{\Omega} ndx$$

Fallunterscheidung:

$$x < \frac{-1}{2n} : \rightarrow 0 \quad \text{und} \quad x > \frac{1}{2n} : \quad \int_{\Omega} ndx = n\left(\frac{1}{2n} - \frac{-1}{2n}\right) = 1,$$

$$x \in \left[-\frac{1}{2n}, \frac{1}{2n}\right] \rightarrow (n \rightarrow \infty) \rightarrow x = 0 \quad \int_{\Omega} ndx = n\left(0 - \frac{-1}{2n}\right) = \frac{1}{2}$$

$$\Rightarrow = \Theta(x)$$

(B) Hier kann man beispielweise weitere Eigenschaften der Normalverteilung benutzen:

Kumulative Verteilungsfunktion

$$\Phi(x) = \int_{-\infty}^x P_{NV}^{\sigma}(x') dx' = \frac{1}{2} \left(1 + \operatorname{erf} \frac{x}{\sigma\sqrt{2}}\right)$$

$$\text{mit } \operatorname{erf}(x) := \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt \quad \text{Gauß'sche Fehlerfunktion}$$

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \operatorname{erf}(x) = \pm 1, \quad \operatorname{erf}(0) = 0, \quad \text{setze } \sigma = \frac{1}{\sqrt{2n}}$$

$$\stackrel{B}{=} \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^x \frac{n}{\sqrt{\pi}} e^{-n^2 x'^2} dx' = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{2} (1 + \operatorname{erf}(n \cdot x)) =$$

$$= \left\{ \begin{array}{ll} 1 & \forall x > 0 \\ \frac{1}{2} & \text{für } x = 0 \\ 0 & \forall x < 0 \end{array} \right\} = \Theta(x)$$

Eine diskrete Berechnung funktioniert genauso:

Substitution:
 $y = nx'$

$$\stackrel{B}{=} \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^x \frac{n}{\sqrt{\pi}} e^{-n^2 x'^2} dx' = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{nx} \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-y^2} dy$$

Es verbleibt nur eine Diskussion der Grenzen:

$$= \left\{ \begin{array}{ll} 1 & \forall x > 0 \\ \frac{1}{2} & \text{für } x = 0 \text{ s.o.} \\ 0 & \forall x < 0 \end{array} \right\} = \Theta(x)$$

B.5 Blatt 4

B.5.1 Aufgabe 12: Wellenfunktion

$$1. 1 \stackrel{!}{=} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(r)|^2 dr = N^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{a^2+r^2} dr \stackrel{r' \equiv \frac{r}{a}}{=} N^2 \frac{1}{a} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{1+r'^2} dr' = \frac{N^2}{a} \underbrace{\arctan(r') \Big|_{-\infty}^{\infty}}_{\pi}$$

$$\Rightarrow N = \sqrt{\frac{a}{\pi}}$$

$$2. P(\text{„Aufenthalt im Ortsintervall } [-\frac{a}{\sqrt{3}}, \frac{2}{\sqrt{3}}]\text{“}) = \int_{-\frac{a}{\sqrt{3}}}^{\frac{2}{\sqrt{3}}} |\psi(r)|^2 dr =$$

$$= \frac{a}{\pi} \frac{1}{a} \arctan(r') \Big|_{-\frac{1}{\sqrt{3}}}^{\frac{2}{\sqrt{3}}} = \frac{1}{3}$$

3.

$$\langle r \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} r |\psi(r)|^2 dr = 0 \quad (\text{Antisymmetrie})$$

$$\langle p \rangle = \langle \psi | -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} | \psi \rangle$$

$$= N^2 \int_{-\infty}^{\infty} dr \frac{e^{-ip_0 \frac{r}{\hbar}}}{\sqrt{a^2+r^2}} (-i\hbar) \left[\frac{i \frac{p_0}{\hbar} e^{+ip_0 \frac{r}{\hbar}}}{\sqrt{a^2+r^2}} - e^{ip_0 \frac{r}{\hbar}} \frac{r}{\sqrt{a^2+r^2}^3} \right] = p_0 + 0 = p_0$$

B.5.2 Aufgabe 13: Ehrenfest Theorem

1. • Durch Induktion:

$$(a) [r, p^1] = i\hbar$$

$$(b) \text{ Annahme: } [r, p^n] = i\hbar n p^{n-1}$$

$$(c) \text{ Induktionsschluss} \quad [A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$$

$$[r, p^{n+1}] = [r, p^n]p + p^n[r, p] = i\hbar n p^n + i\hbar p^n = i\hbar(n+1)p^{(n+1)-1} \checkmark$$

$$\text{Analog für } [p, r^n] = -i\hbar n r^{n-1}$$

• Beweis für Taylor-entwickelbare Funktionen

$$- f(r) = \sum_n \frac{1}{n!} f^{(n)}(0) r^n$$

$$- f'(r) = \sum_n \frac{1}{n!} (n f^{(n)}(r)) r^{n-1}$$

$$\begin{aligned} - [p, f(r)] &= \sum_n \frac{1}{n!} f^{(n)}(0) [p, r^n] = \\ &= \sum_n \frac{1}{n!} f^{(n)}(0) (-i\hbar n r^{n-1}) = -i\hbar f'(r) \end{aligned}$$

Analog für $[r, f(p)] = i\hbar f'(p)$

Allgemeiner gilt auch \forall Testfunktionen $\psi(r)$:

$$\begin{aligned} [-i\hbar \frac{d}{dr}, f(r)]\psi(r) &= -i\hbar (\frac{\partial}{\partial r}(f(r)\psi(r)) - f(r)\frac{\partial}{\partial r}\psi(r)) = \\ &= -i\hbar (\frac{df}{dr}\psi + f\frac{\partial\psi}{\partial r} - f\frac{\partial\psi}{\partial r}) = -i\hbar f'\psi \quad \forall\psi \end{aligned}$$

2. Im Schrödingerbild:

SGL: $i\hbar|\dot{\psi}(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle$

$$\langle\dot{\psi}(t)| = i\frac{H}{\hbar}\langle\psi(t)| \text{ (herm. Konj.)}$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle\psi(t)|r|\psi(t)\rangle &= \langle\dot{\psi}(t)|r|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|r|\dot{\psi}(t)\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle\psi(t)|Hr - rH|\psi(t)\rangle = \\ &= \frac{i}{\hbar}\langle\psi(t)|[H, r]|\psi(t)\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle\psi(t)|\frac{1}{2m}[p^2, r] + 0|\psi(t)\rangle = \frac{1}{m}\langle p \rangle \end{aligned}$$

wobei $[p^2, r] = -2i\hbar p$ nach 13.1(1)

analog:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle p \rangle &= \frac{d}{dt}\langle\psi(t)| - i\hbar \frac{\partial}{\partial r} |\psi(t)\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle\psi(t)|[H, \frac{\partial}{\partial r}]|\psi(t)\rangle = \\ &= \langle\psi(t)| - \frac{\partial}{\partial r} V(r) |\psi(t)\rangle = -\langle V'(r) \rangle \end{aligned}$$

wegen „Kettenregel für Operatoren“:

$$[H, \frac{\partial}{\partial r}] = H \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\partial}{\partial r}(H \cdot \dots) = H \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\partial H}{\partial r} - H \frac{\partial}{\partial r} \dots = -\frac{\partial H}{\partial r} = -\frac{\partial V(r)}{\partial r}$$

N.B.: Folgt aus Definition der Operatorableitung über beliebige Testfunktionen, vgl. 13.1.(2)

3. Ehrenfest:

Die Mittelwerte von Ort- und Impulsunschärfe scheinen klassischen Bewegungsgleichungen zu genügen

Vorsicht: Mittelwertbildung!

Quasiklassische Trajektorie eines Wellenpaketes sinnvoll beschreiben durch Mittelwert des Ortsoperators

$$r_{\text{klassisch}} = \langle \hat{r} \rangle$$

$$F_{\text{klassisch}} = [-\nabla V(r)]_{r=\langle \hat{r} \rangle} \quad \begin{array}{l} \text{Quasiklassische Kraft} \\ \text{(ausgewertet für} \\ \text{quasiklassische Bahn)} \end{array}$$

i. allg.

$$\underbrace{\langle \nabla V(\hat{r}) \rangle}_{\text{Operator}} \neq \underbrace{[\nabla V(r)]}_{\text{Kraft auf klass. Bahn}} \quad r = \underbrace{\langle \hat{r} \rangle}_{\text{Mittelwert} \cong \text{klassische Bahn}}$$

qm Mittelwert

Vergleich der Mittelwertbildungen:

$$\text{Sei } V(r) = \lambda r^n, \quad V(\langle r \rangle) = \lambda \langle r \rangle^n,$$

$$\left[\frac{dV}{dr} \right]_{r=\langle r \rangle} = \lambda n \langle r \rangle^{n-1}, \quad \text{i. allg. } \langle r^{n-1} \rangle \neq \langle r \rangle^{n-1}$$

Gleichheit gilt nur für die Fälle

- $n = 0$ (freies Teilchen)
- $n = 1$ (uniformes Kraftfeld)
- $n = 2$ (H.O.)

B.5.3 Aufgabe 14: Virialsatz

$$1. H|\Phi_n\rangle = E_n|\Phi_n\rangle \quad \Phi_n \text{ Eigenfunktion}$$

$$\langle \Phi_n | A \underbrace{H} |\Phi_n\rangle - \underbrace{\langle \Phi_n | H} A |\Phi_n\rangle = E_n \langle \Phi_n | A |\Phi_n\rangle - E_n^* \langle \Phi_n | A |\Phi_n\rangle = 0 \quad (0)$$

da Hamiltonoperatoren hermitesche Operatoren mit reellen Eigenwerten sind.

$$2. [H, p] = [V(r), p] = i\hbar V'(r) \quad (13.1.2)$$

$$[H, r] = \left[\frac{p^2}{2m}, r \right] = \frac{1}{m} (-i\hbar) p \quad (1)$$

$$[H, rp] = \left[\frac{p^2}{2m}, r \right] p + r [V(r), p] = -i\hbar \frac{p^2}{m} + i\hbar r V'(r) \quad (2)$$

$$3. \langle \Phi_n | p |\Phi_n\rangle \stackrel{(1)}{=} -\frac{i\hbar}{m} \langle \Phi_n | [H, r] |\Phi_n\rangle \stackrel{(0)}{=} 0$$

$$4. \langle \frac{p^2}{2m} \rangle \stackrel{(2)}{=} \frac{-1}{2i\hbar} \langle [H, rp] - i\hbar rV'(r) \rangle \stackrel{(0)}{=} \frac{1}{2} \langle rV'(r) \rangle$$

$$\text{Für } V(r) = V_0 r^n, V'(r) = nV_0 r^{n-1}$$

$$\Rightarrow \langle \frac{p^2}{2m} \rangle = \frac{n}{2} \langle V_0 r^n \rangle = \frac{n}{2} \langle V(r) \rangle, \text{ d.h. } \langle E_{KIN} \rangle = \frac{n}{2} \langle E_{POT} \rangle$$

B.5.4 Aufgabe 15: Wellenpakete mit minimaler Unschärfe

Schwarz: $\langle \Phi | \Phi \rangle \langle \psi | \psi \rangle \geq |\langle \Phi | \psi \rangle|^2$

Aufg. 6, Blatt 2: Darstellung durch Kommutator

$$\langle \psi | (\Delta A)^2 | \psi \rangle \cdot \langle \psi | (\Delta B)^2 | \psi \rangle \geq |\langle \psi | \frac{1}{2} [\Delta A, \Delta B] + \frac{1}{2} \{ \Delta A, \Delta B \} | \psi \rangle|^2$$

Für den Orts- und Impulsoperator gilt mit $[r, p] = i\hbar : \Delta r \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$

Definition:

- $|\Phi\rangle = (\hat{x} - \langle x \rangle) |\Phi\rangle \Rightarrow \langle \Phi | \Phi \rangle = (\Delta x)^2$
- $|\psi\rangle = (\hat{p} - \langle p \rangle) |\psi\rangle \Rightarrow \langle \psi | \psi \rangle = (\Delta p)^2$

Ansatz für ein minimales Wellenpaket: Wähle $|\xi\rangle = \frac{|\Phi\rangle}{\Delta x} + i \cdot \frac{|\psi\rangle}{\Delta p}$

Motivation für diese Wahl:

$$\begin{aligned} 0 \leq \langle \xi | \xi \rangle &= \left(\frac{\langle \Phi |}{\Delta x} - i \cdot \frac{\langle \psi |}{\Delta p} \right) \left(\frac{|\Phi\rangle}{\Delta x} + i \cdot \frac{|\psi\rangle}{\Delta p} \right) = 2 - i \frac{\langle \psi | \Phi \rangle}{\Delta p \Delta x} + i \frac{\langle \Phi | \psi \rangle}{\Delta p \Delta x} = 2 + i \frac{1}{\Delta x \Delta p} \langle \Omega | [x, p] | \Omega \rangle = \\ &= 2 - \frac{|\langle \psi | \Phi \rangle|}{\Delta x \Delta p} \quad (\text{vgl. Blatt 2, Aufg. 6 mit } \{A, B\} = 0) \end{aligned}$$

Falls $|\xi\rangle = |0\rangle$ gilt diese Ungleichung scharf. Dann gilt aber auch die Schwarz'sche Ungleichung scharf:

$$\Delta x \cdot \Delta p = |\langle \psi | \Phi \rangle|$$

D.h. wir konstruieren das Wellenpaket mit minimaler Unschärfe aus $|\xi\rangle = 0$

Die Ortsdarstellung von $|\xi\rangle$ führt zu einer DGL für das Matrixelement $\langle r | \xi \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle r | \frac{\hat{x} - \langle x \rangle}{\Delta x} | \Omega \rangle + i \langle r | \frac{(-i\hbar \frac{\partial}{\partial r} - \langle p \rangle)}{\Delta p} | \Omega \rangle &= 0 \\ \frac{r - \langle x \rangle}{\Delta x} \langle r | \Omega \rangle + \hbar \frac{d}{dr} \langle r | \Omega \rangle - i \langle p \rangle \langle r | \Omega \rangle &= 0 \end{aligned}$$

$$\frac{d\langle r|\Omega\rangle}{\langle r|\Omega\rangle} = \frac{\left(-\frac{r-\langle x\rangle}{\Delta x} + i\langle p\rangle\right)}{\hbar} dr$$

$$\ln\langle r|\Omega\rangle = -\frac{\Delta p}{\Delta x \cdot \hbar} \left(\frac{r^2}{2} - r\langle x\rangle\right) + i\langle p\rangle \frac{r}{\hbar}$$

Für minimales WP: $\Delta x \cdot \Delta p = \hbar$

$$\langle r|\Omega\rangle = e^{-\frac{(r-\langle x\rangle)^2}{2(\Delta x)^2} + i\langle p\rangle \frac{r}{\hbar} + \frac{\langle x\rangle^2}{2(\Delta x)^2}}$$

d.h. das Gauß'sche Wellenpaket hat minimale Unschärfe

Normierung führt zum angegebenen Ergebnis

B.6 Blatt 5

B.6.1 Aufgabe 16: Freies Teilchen in einer Dimension

Darstellungen qm Zustände:

$|\psi\rangle$ allg. Vektor im Hilbertraum

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle x|\psi\rangle |x\rangle, \quad \psi(x) = \langle x|\psi\rangle \quad \text{Ortsdarstellung}$$

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} dx \langle p|\psi\rangle |p\rangle, \quad \psi(p) = \langle p|\psi\rangle \quad \text{Impulsdarstellung}$$

durch Einfügen von $\mathbf{1} = \int d\mu_i |i\rangle\langle i|$ in der jeweils gewählten Basis.

Übergang durch Fouriertransformation:

$$\underbrace{\langle x|\psi\rangle}_{\text{Ortsdarstellung von } |\psi\rangle} = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \underbrace{\langle x|p\rangle}_{\text{Ortsdarstellung der } |p\rangle\text{-Basis}} e^{\frac{ipx}{\hbar}} \underbrace{\langle p|\psi\rangle}_{\text{Impulsdarstellung von } |\psi\rangle}$$

1. Ablesen der Impulsdarstellung von $|\psi\rangle$ aus der Angabe ($p = \hbar k$):

$$\psi(x, t=0) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{ikx} \underbrace{[N \cdot 2\pi \cdot e^{-\frac{|k|}{k_0}}]}_{\psi(k, t=0)}$$

$$\begin{aligned} P(k \in [-p_1, p_1], t=0) &= \int_{-p_1}^{p_1} \frac{dk}{2\pi} |\psi(k, t=0)|^2 \\ &= 2\pi N^2 \int_{-p_1}^{p_1} dk e^{-\frac{2|k|}{k_0}} \\ &= 2\pi N^2 \left[\int_0^{p_1} dk e^{-\frac{2k}{k_0}} + \int_{-p_1}^0 dk e^{\frac{2k}{k_0}} \right] \\ &= 2\pi N^2 \frac{k_0}{2} \left[-e^{-\frac{2p_1}{k_0}} + 1 + 1 - e^{-\frac{2p_1}{k_0}} \right] \\ &= 2\pi N^2 k_0 \left[1 - e^{-\frac{2p_1}{k_0}} \right] \end{aligned}$$

2. Schrödinger-Gleichung für freie Teilchen

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \hat{H} \psi(x, t) \text{ mit } \hat{H}_{\text{freie Teilchen}} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$$

Lösungen haben die Form ebener Wellen:

$$\psi(x, t) = e^{i(k \cdot x - \frac{E t}{\hbar})}$$

→ Einfache Zeitentwicklung der Basiselemente einer Fourierzerlegung

$$\begin{aligned} \Rightarrow \psi(x, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \underbrace{e^{-i\frac{E t}{\hbar}} \psi(k, t=0)}_{\psi(k, t)} \\ \Rightarrow P(p_1, t) &= \int_{-p_1}^{p_1} \frac{dk}{2\pi} |\psi(k, t)|^2 = \int_{-p_1}^{p_1} \frac{dk}{2\pi} |\psi(k, 0)|^2 \text{ ist zeitunabhängig!} \end{aligned}$$

3.

$$\begin{aligned} \psi(x, t=0) &= N \left(\int_0^{\infty} dk e^{(-\frac{1}{k_0} + ix)k} + \int_{-\infty}^0 dk e^{(\frac{1}{k_0} + ix)k} \right) \\ &= N \left(\frac{0-1}{-\frac{1}{k_0} + ix} + \frac{1}{\frac{1}{k_0} + ix} \right) \\ &= N \left(\frac{\frac{1}{k_0} + ix + \frac{1}{k_0} - ix}{\left(\frac{1}{k_0}\right)^2 + x^2} \right) \\ &= N \left(\frac{\frac{2}{k_0}}{\left(\frac{1}{k_0}\right)^2 + x^2} \right) \end{aligned}$$

Lorentzkurve

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 x \, dx \\ &= N^2 \frac{4}{k_0^2} \int dx \frac{x}{\left(\left(\frac{1}{k_0}\right)^2 + x^2\right)^2} \\ &= N^2 \frac{4}{k_0^2} \left. \frac{-1}{2 \left(\left(\frac{1}{k_0}\right)^2 + x^2\right)} \right|_{-\infty}^{\infty} \\ &= 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle x^2 \rangle &= \dots \frac{4N^2}{k_0^2} \left(-\frac{x}{2\left(\frac{1}{k_0^2} + x^2\right)} + \frac{k_0}{2} \arctan(k_0 x) \right) \Big|_{-\infty}^{\infty} \\ &= N^2 \frac{2}{k_0} \pi\end{aligned}$$

Mit Normierung im Ortsraum

$$\begin{aligned}1 &= \int dx \psi^*(x, t=0) \psi(x, t=0) \\ &= \int dx N^2 \int dk e^{-\frac{|k|}{k_0}} e^{-ikx} \int dk' e^{-\frac{|k'|}{k_0}} e^{ik'x} \\ &= N^2 \int dk \int dk' e^{-\frac{(|k|+|k'|)}{k_0}} \underbrace{\int dx e^{-i(k-k')x}}_{2\pi\delta(k-k')} \\ &= 2\pi N^2 \int_0^{\infty} dk e^{-2\frac{k}{k_0}} \\ &= 2\pi N^2 k_0 \quad \Rightarrow N = \frac{1}{\sqrt{2\pi k_0}}\end{aligned}$$

Weitere Erwartungswerte:

$$\begin{aligned}\Delta x &= \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = N \sqrt{\frac{2\pi}{k_0}} = \frac{1}{k_0} \\ \langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(p)|^2 p \frac{dp}{2\pi\hbar} = 2\pi N^2 \hbar \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\frac{|k|}{k_0}} k dk = 0 \\ \langle p^2 \rangle &= 4\pi N^2 \hbar^2 \int_0^{\infty} e^{-2\frac{k}{k_0}} k^2 dk = \frac{2\hbar^2}{k_0} \left(\frac{2}{k_0}\right)^{-3} = \frac{k_0^2 \hbar^2}{4} \\ \Delta p &= \frac{\hbar k_0}{2} \quad \Rightarrow \Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2} \quad \text{Heisenberggleichung gilt scharf!}\end{aligned}$$

B.6.2 Aufgabe 17: Zeitentwicklung eines Gaußsches Wellenpakets

$$1. 1 \stackrel{!}{=} N^2 \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t=0)|^2 dx = N^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2ax^2} dx = N^2 \sqrt{\frac{\pi}{2a}} \Rightarrow N = \sqrt[4]{\frac{2a}{\pi}}$$

2. Zeitentwicklung: Berechnung in Impulsdarstellung

$$\underbrace{\langle x | \psi(x, t) \rangle}_{\psi(x, t) \text{ Ortsd.}} = \int \frac{dk'}{2\pi} \underbrace{\langle x | k' \rangle}_{e^{ik'x}} \underbrace{e^{-i\frac{E}{\hbar}t}}_{\text{Zeitentw. für ebene Wellen}} \underbrace{\langle k' | \psi(0) \rangle}_{\psi(k', 0)} \quad (*)$$

Impulsdarstellung von $|\psi(t=0)\rangle$:

$$\begin{aligned}\psi(k', 0) &= \langle k' | \psi(0) \rangle = \int dx' \langle k' | x' \rangle \langle x' | \psi(0) \rangle \\ &= \int dx' e^{-ik'x'} N e^{-ax'^2 + ikx'} \\ &= N \int dx' e^{-a(x'^2 - 2\frac{i(k-k')}{2a}x' - \frac{(k-k')^2}{4a^2} + \frac{(k-k')^2}{4a^2})} \\ (I) &= N \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{-\frac{(k-k')^2}{4a}}\end{aligned}$$

es gilt: $e^{-a(x'^2 - 2\frac{i(k-k')}{2a}x' - \frac{(k-k')^2}{4a^2} + \frac{(k-k')^2}{4a^2})}$...Gauß'sches Integral = $\sqrt{\frac{\pi}{a}}$
(Fouriertransformation des Wellenpakets)

Einfache Zeitabhängigkeit in der Impulsdarstellung (Propagation ebener Wellen)

$$\psi(k', t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \psi(k', 0) = e^{-\frac{i\hbar k'^2 t}{2m}} \psi(k', 0)$$

mit $E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m}$ für freie Teilchen

Rücktransformation in die Ortsdarstellung:

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= \langle x | \psi(x, t) \rangle \quad \text{nach(*)} \\ &= N \sqrt{\frac{\pi}{a}} \int \frac{dk'}{2\pi} e^{ik'x} e^{-i\hbar k'^2 \frac{t}{2m}} e^{-\frac{(k-k')^2}{4a}} \\ &= N \sqrt{\frac{\pi}{a}} \int \frac{dk'}{2\pi} e^{-(\frac{1}{4a} + \frac{i\hbar t}{2m})k'^2 + (ix + \frac{1}{2a}k)k'} e^{-\frac{k^2}{4a}}\end{aligned}$$

Setze $b = (\frac{1}{4a} + \frac{i\hbar t}{2m})$, $4ab = 1 + i\frac{2\hbar a}{m}t$ und $c = (ix + \frac{1}{2a}k)$

$$\begin{aligned}&= N \sqrt{\frac{\pi}{a}} \int \frac{dk'}{2\pi} e^{-b[k'^2 - 2\frac{c}{2b}k' + \frac{c^2}{4b^2} - \frac{c^2}{4b^2}] - \frac{k^2}{4a}} \\ &= N \sqrt{\frac{\pi}{a}} \left(\frac{\sqrt{\pi}}{2\pi\sqrt{b}} \right) e^{\frac{c^2}{4b} - \frac{k^2}{4a}}\end{aligned}$$

wobei $e^{-b[k'^2 - 2\frac{c}{2b}k' + \frac{c^2}{4b^2}]}$...Gauß'sches Integral und

$$\frac{1}{4b}(c^2 - \frac{k^2}{a}b) = \frac{1}{4b}(-x^2 + \frac{1}{a}ikx + \frac{k^2}{4a^2} - \frac{k^2}{4a^2} - i\frac{k^2\hbar t}{2ma}) = \frac{1}{4ab}(-ax^2 + ikx - i\frac{k^2\hbar t}{2m})$$

$$\Rightarrow \psi(x, t) = \sqrt[4]{\frac{2a}{\pi}} \frac{1}{2\sqrt{a}} \frac{1}{\sqrt{b}} e^{\frac{a(-x^2 + ikx - i\frac{k^2\hbar t}{2m})}{1 + i\frac{2\hbar a}{m}t}}$$

$$3. |\psi(x, t)|^2 = \sqrt{\frac{2a}{\pi}} \frac{1}{4a} 2\sqrt{a} \frac{1}{\sqrt{1+(\frac{2\hbar a}{m}t)^2}} e^{-2\frac{a(x^2 - 2\frac{\hbar}{m}ktx + \frac{k^2\hbar^2}{m^2}t^2)}{1+(\frac{2\hbar}{m}at)^2}} = \frac{1}{\sqrt{2a\pi}} \omega(t) e^{-2\omega^2(t)(x - \frac{\hbar kt}{m})^2}$$

4. Die gesuchten Erwartungswerte lassen durch Vergleich mit der allg. Gauß'verteilung
 $\sim \frac{1}{2(\Delta x)} e^{-\frac{(x-\langle x \rangle)^2}{2(\Delta x)^2}}$ ablesen:

$$\langle x \rangle = \frac{\hbar k}{m} t = vt \quad (v: \text{Geschwindigkeit des Gauß-Wellenpakets})$$

$$(\Delta x) = \frac{1}{2\omega(t)}$$

$$\Rightarrow \langle x^2 \rangle = (\Delta x)^2 + \langle x \rangle^2 = \frac{1}{4\omega^2(t)} + v^2 t^2$$

$$\text{Analog aus } |\psi(k', t)|^2 = |\psi(k', 0)|^2 = \sqrt{\frac{2a}{\pi}} \frac{\pi}{a} e^{-\frac{(k-k')^2}{2a}}$$

$$(\Delta p) = \hbar(\Delta k) = \sqrt{a} \hbar, \quad \langle p \rangle = k\hbar$$

$$\langle p^2 \rangle = (\Delta p)^2 + \langle p \rangle^2 = \hbar^2 a + k^2 \hbar^2$$

$$5. (\Delta p)(\Delta x) = \frac{\hbar\sqrt{a}}{2\omega(t)} = \frac{\hbar}{2} \sqrt{1 + (\frac{2\hbar at}{m})^2}$$

→ minimale Unschärfe $(\Delta p)(\Delta x)$ für $t=0$

$t = 0$:

$(\Delta p)(\Delta x) = \frac{\hbar}{2}$ gilt exakt → WP minimaler Unschärfe, vgl. Aufgabe 15

$t > 0$:

$$(\Delta p)(\Delta x) > \frac{\hbar}{2}$$

($t \gg 0$: Dispersion des Wellenpakets!)

B.6.3 Aufgabe 18: Teilchen mit konstanter Kraft

1. Ehrenfest:

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{1}{m} \langle p \rangle \quad \text{und} \quad \frac{d}{dt} \langle p \rangle = -\langle \vec{\nabla} V(x) \rangle$$

Mit $-\langle \vec{\nabla} V(x) \rangle = -\langle \frac{\partial}{\partial x}(-fx) \rangle = f = const \rightarrow \langle x \rangle, \langle p \rangle$ genügen den klassischen Bewegungsgleichungen:

$$\langle p \rangle = ft + \langle p_0 \rangle, \quad \langle x \rangle - \langle x_0 \rangle = \frac{f}{2m}t^2 + \frac{\langle p_0 \rangle}{m}t$$

(vgl. Newton: $v = at + v_0$, $x = \frac{1}{2}at^2 + vt + x_0$)

2.

$$\begin{aligned} \langle p^2 \rangle &= \langle 2m(H - V) \rangle = 2mE + 2mf\langle x \rangle \\ &= 2mE + f^2t^2 + 2\langle p_0 \rangle ft + 2mf\langle x_0 \rangle \end{aligned} \tag{B.1}$$

$$\begin{aligned} (\Delta p)^2 &= \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 = 2mE + 2mf\langle x_0 \rangle - \langle p_0 \rangle^2 \\ &= \underbrace{\langle p_0^2 \rangle - 2mf\langle x_0 \rangle}_{\text{Energieerhalt: } E=E_0} - 2m\left(\frac{\langle p_0 \rangle^2}{2m} - f\langle x_0 \rangle\right) \\ &= \underbrace{(\Delta p_0)^2}_{\text{Varianz zeitunabhängig, d.h. } \forall t(\Delta p)(t)=(\Delta p)(0)} \end{aligned}$$

3. SGL: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(p, t) = \left[\frac{p^2}{2m} + V(i\hbar \frac{\partial}{\partial p}) \right] \psi(p, t)$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle p | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) | p \rangle &= \langle p | \dot{\psi}(t) \rangle \langle \psi(t) | p \rangle + \langle p | \psi(t) \rangle \langle \dot{\psi}(t) | p \rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar} \left(\left[\frac{p^2}{2m} - fi\hbar \frac{\partial}{\partial p} \right] \psi(p, t) \right) \psi^*(p, t) - \frac{1}{i\hbar} \psi(p, t) \left(\left[\frac{p^2}{2m} + fi\hbar \frac{\partial}{\partial p} \right] \psi^*(p, t) \right) \\ &= -f \left(\frac{\partial}{\partial p} \psi(p, t) \right) \psi^*(p, t) - f \psi(p, t) \left(\frac{\partial}{\partial p} \psi^*(p, t) \right) \\ &= -f \frac{\partial}{\partial p} |\psi(p, t)|^2 \\ &= -f \frac{\partial}{\partial p} |\langle p | \psi(t) \rangle|^2 \quad (*) \end{aligned}$$

Allgemeine Lösung:

$$\psi(p, t) = g(ft - p)e^{i\phi}$$

für beliebige Funktion $g(x)$

$$\frac{\partial}{\partial p} (g^2(ft - p)) = 2g \frac{\partial g}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial p} = 2gg'(-1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (g^2(ft - p)) = 2g \frac{\partial g}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial t} = 2gg'f \quad (\Rightarrow *)\sqrt{\quad}$$

Eine beliebige Wellenfunktion $\psi(p, t)$ propagiert im Impulsraum linear in der Zeit (vgl. allg. Lösung z.B. zur Wellengleichung)

B.6.4 Aufgabe 19: Translationsoperator

1.

$$\begin{aligned}
 [\hat{x}, e^{i\hat{p}_x \frac{a}{\hbar}}] &= \sum_n \frac{1}{n!} \left(i \frac{a}{\hbar}\right)^n \underbrace{[x, \hat{p}_x^n]}_{i\hbar n \hat{p}_x^{n-1} \text{ (vgl. Blatt 4)}} \\
 &= -a \sum_n \frac{1}{(n-1)!} \left(i \frac{a}{\hbar}\right)^{n-1} \hat{p}_x^{n-1} \\
 &= -a e^{i\frac{\hat{p}_x a}{\hbar}} \\
 &= -a \hat{T}_a
 \end{aligned}$$

2. Sei $\hat{x}|x'\rangle = x'|x'\rangle$, d.h. $|x'\rangle$ EZ mit EW x'

$$\begin{aligned}
 \hat{x}[\hat{T}_a|x'\rangle] &= (\hat{T}_a \hat{x} + [\hat{x}, \hat{T}_a])|x'\rangle \\
 &= (\hat{T}_a \hat{x} - a \hat{T}_a)|x'\rangle \\
 &= \hat{T}_a(x' - a)|x'\rangle && \text{da } |x'\rangle \text{ EZ zu } \hat{x} \\
 &= (x' - a)[\hat{T}_a|x'\rangle]
 \end{aligned}$$

d.h. $[\hat{T}_a|x'\rangle]$ ist Eigenzustand von \hat{x}

B.7 Blatt 6

B.7.1 Aufgabe 20: Unendlich tiefer Potentialtopf: Stationäre Zustände

Stetigkeitsbedingungen der Wellenfunktion:

$$\psi(0) = \psi(a) = 0 \Rightarrow \text{Sinusfunktionen } \psi \sim \sin(k_n x)$$

$$\text{Impulsquantisierung: } k_n = n \frac{2\pi}{2a} = n \frac{\pi}{a}$$

$$\text{Energie: } E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad E_n = \frac{\hbar^2 n^2}{8ma^2}$$

$$\text{Normierung: } \int_0^a \sin^2(k_n x) dx = \frac{a}{2} - \frac{1}{4k_n} \sin(2k_n x) \Big|_0^a$$

$$\text{Wellenfunktion: } \psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(k_n x) & \text{für } x \in [0, a] \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

•

$$\begin{aligned} \langle x \rangle_n &= \int_0^a |\psi_n(x)|^2 x dx \\ &= \int_0^a x \frac{2}{a} \sin^2\left(\underbrace{n \frac{\pi}{a} x}_z\right) dx \\ &= \frac{2}{a} \left(\frac{a}{n\pi}\right)^2 \int_0^{n\pi} z \sin^2(z) dz \\ &= \frac{2}{a} \left(\frac{a}{n\pi}\right)^2 \left[\frac{1}{4}(z^2 + \sin^2(z)) - \frac{z}{2} \sin z \cos z \right]_0^{n\pi} \\ &= \frac{2}{a} \frac{a^2}{4} \\ &= \frac{a}{2} \quad \text{unabhängig von } n \end{aligned}$$

•

$$\langle x^2 \rangle_n = \int_0^a |\psi_n(x)|^2 x^2 dx$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{2}{a} \left(\frac{a}{n\pi} \right)^3 \int_0^{n\pi} z^2 \sin^2(z) \, dz \\
 &= \frac{2}{a} \left(\frac{a}{n\pi} \right)^3 \left[\frac{n^2\pi^3}{6} + \frac{n\pi}{4} - \frac{n\pi}{2} \cos^2(n\pi) \right] \\
 &= \left(\frac{a}{n\pi} \right)^2 \left[\frac{n^2\pi^2}{3} - \frac{1}{2} \right] \\
 (\Delta x)_n &= \sqrt{\langle x^2 \rangle_n + \langle x \rangle_n^2} \\
 &= \sqrt{\frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{2n^2\pi^2} - \frac{a^2}{4}} \\
 &= a \sqrt{\frac{1}{12} - \frac{1}{2n^2\pi^2}}
 \end{aligned}$$

•

$$\begin{aligned}
 \langle p \rangle_n &= \frac{2}{a} \int_0^a \sin(k_n x) (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) \sin(k_n x) \, dx \\
 &= -i\hbar \frac{2}{a} k_n \int_0^a \sin(k_n x) \cos(k_n x) \, dx \\
 &= -i\hbar \frac{2}{a} k_n \frac{1}{2k_n} \sin^2(k_n x) \Big|_0^a \\
 &= 0
 \end{aligned}$$

•

$$\begin{aligned}
 \langle p^2 \rangle_n &= 2m \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle_n \\
 &= 2m E_n \\
 &= \frac{\hbar^2 n^2}{4a^2}
 \end{aligned}$$

⇒

$$\begin{aligned}
 (\Delta p)_n &= \frac{\hbar n}{2a} \\
 (\Delta x)_n &= a \sqrt{\frac{1}{12} - \frac{1}{2n^2\pi^2}} \\
 (\Delta x)_n (\Delta p)_n &= \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{n^2}{12} - \frac{1}{2\pi^2}} \quad \text{minimal für } n=1
 \end{aligned}$$

**B.7.2 Aufgabe 21: Unendlich tiefer Potentialtopf:
Dynamik (vgl. Aufgabe 20)**

$$1. \quad \left. \begin{aligned} \phi_1(x) &= \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) \\ \phi_2(x) &= \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right) \end{aligned} \right\} \Rightarrow \psi(x, t=0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1(x) + \phi_2(x))$$

$$\left(\text{da } \int_0^a \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right) dx = 0 \text{ wegen Symmetrie}\right)$$

$$\psi(x, t=0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) + \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right) \right]$$

$$2. \text{ SGL für Eigenmoden: } i\hbar \frac{d}{dt} \phi_n(t) = E_n \phi_n(t)$$

$$\text{Ansatz: } \phi_n(t) = \sin(k_n x) e^{-i\omega_n t} \text{ mit } \omega_n = \frac{\hbar \pi^2}{2ma^2} n^2 =: \omega n^2, \omega = \frac{\hbar \pi^2}{2ma^2}$$

$$\Rightarrow \psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_1(x) e^{-i\omega t} + \phi_2(x) e^{-4i\omega t})$$

$$= \frac{1}{\sqrt{a}} \left[\sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) e^{-i\omega t} + \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right) e^{-4i\omega t} \right]$$

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{a} \left[\sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right) + \sin^2\left(\frac{2\pi}{a}x\right) + 2 \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right) \cos(3\omega t) \right]$$

$$\begin{aligned} \langle x \rangle_{\psi(x,t)} &= \frac{1}{a} \int_0^a dx \, x \sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right) + \frac{1}{a} \int_0^a dx \, x \sin^2\left(\frac{2\pi}{a}x\right) + \frac{2}{a} \cos(3\omega t) \int_0^a dx \, x \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right) x \\ &= \frac{1}{a} \frac{a^2}{4} + \frac{1}{a} \frac{a^2}{4} + \frac{2}{a} \cos(3\omega t) \left(\frac{-8a^2}{9\pi^2} \right) \\ &= \frac{a}{2} - \frac{16a}{9\pi^2} \cos(3\omega t) \end{aligned}$$

Vergleich mit klass. Teilchen der Energie E:

$$\text{aus } E = \frac{1}{2}mv^2 \Rightarrow v = \sqrt{\frac{2E}{m}}, T = \frac{2a}{v} \text{ (Periode)}$$

(bei konstanter Reflexion an Wänden)

$$\omega_{kl.} = \frac{2\pi}{T} = \frac{\pi}{a} \sqrt{\frac{2E}{m}}, \quad \omega_{QM} = \frac{E_n}{\hbar}$$

lineare Bahn des kl. Teilchens:

$$x(t) = \begin{cases} vt & \text{für } t \in [0, \frac{T}{2}] \\ (a - vt) & t \in [\frac{T}{2}, T] \end{cases}$$

Oszillation des qm. Ortserwartungswertes („ $\hat{=}$ Mittelpunkt des Wellenpakets“)

$$\langle x \rangle(t) = \frac{a}{2} \left(1 - \underbrace{\frac{32}{9\pi^2}}_A \cos(3\omega t) \right)$$

$\langle x \rangle$ oszilliert NICHT im gesamten Kasten, $A < 1!$

$$\begin{aligned} \langle p \rangle_{\psi(x,t)} &= \int_0^a dx \psi^*(x) (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x)) = \\ &= \frac{-i\hbar}{a} \frac{\pi}{a} \int_0^a dx \left[\sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)e^{i\omega t} + \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right)e^{4i\omega t} \right] \left[\cos\left(\frac{\pi}{a}x\right)e^{-i\omega t} + 2 \cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right)e^{-4i\omega t} \right] \\ &= \frac{-i\hbar\pi}{a^2} \int_0^a dx \left[2 \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) \cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right)e^{-3i\omega t} + \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right) 2 \cos\left(\frac{\pi}{a}x\right)e^{3i\omega t} \right] \end{aligned}$$

(wegen Orthogonalität von $\sin x$ und $\cos x$)

$$\begin{aligned} &= \frac{-i\hbar\pi}{a^2} \left[2 \left(\frac{-2a}{3\pi}\right) e^{-3i\omega t} + \left(\frac{4a}{3\pi}\right) e^{3i\omega t} \right] \\ &= \frac{8\hbar}{3a} \sin(3\omega t) \end{aligned}$$

3. ϕ_1, ϕ_2 sind Energieeigenfunktionen

$$P(„E_1 gemessen“) = |\langle \phi_1 | \psi(x, t) \rangle|^2 = \frac{1}{2}$$

$$P(„E_2 gemessen“) = |\langle \phi_2 | \psi(x, t) \rangle|^2 = \frac{1}{2}$$

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2}\hbar(1 \cdot \omega + 4 \cdot \omega) = \frac{5}{2}\hbar\omega = \frac{5}{2} \frac{\hbar^2}{8ma^2}$$

B.7.3 Aufgabe 22: Endlich tiefer Potentialkasten: Gebundene Zustände

Sei $E < 0$ (gebundene Zustände) stationäre Zustände, d.h. zeitunabhängige SGL

„Außen“ ($|x| > a$):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \Leftrightarrow \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \kappa^2\psi(x), \kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$$

$$\text{Lösung: } \psi(x) = B e^{-\kappa|x|}$$

„Innen“ ($|x| < a$):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - V_0\psi(x) = E\psi(x) \Leftrightarrow \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -l^2\psi(x), l = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}$$

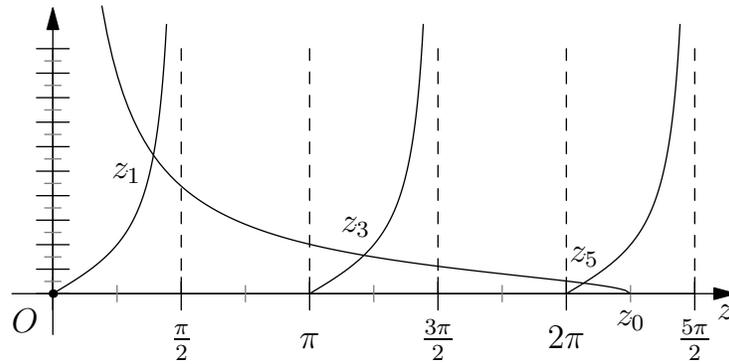


Abbildung B.2: Graphische Lösung der transzendenten Gleichung (symmetrisch)

$$\text{Lösung: } \psi(x) = C \sin(lx) + D \cos(lx)$$

Anschlussbedingungen:

↔ Stetig- und Differenzierbarkeit von $\psi(x)$ an $x = \pm a$

↔ Legen die Koeffizienten B, C, D fest

1. Symmetrische Lösungen: C=0:

$$\text{(I) } \psi(a)_{\text{innen}} \stackrel{!}{=} \psi(a)_{\text{außen}} : D \cos(la) = B e^{-\kappa a}$$

$$\text{(II) } \psi'(a)_{\text{innen}} \stackrel{!}{=} \psi'(a)_{\text{außen}} : -lD \sin(la) = -\kappa B e^{-\kappa a}$$

$$\frac{\text{II}}{\text{I}} : l \tan(la) = \kappa$$

$$\underline{\text{Def.:}} z=la, z_0 = \frac{a}{\hbar} \sqrt{2mV_0}, \text{ damit } \tan(z) = \frac{\kappa}{l} = \sqrt{\frac{-2mE}{2m(E+V_0)}} = \sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1}$$

2. Grenzfall $V_0 \rightarrow \infty \Rightarrow z_0 \Rightarrow \infty$

damit wird $\sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1}$ „groß“ und schneidet den Tangens nahe an den Polen: $z_n \approx n\frac{\pi}{2}$, n ungerade

$$\Rightarrow \left(n\frac{\pi}{2}\right)^2 = \left(\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1\right) \text{ (nur ungerade Lösungen diskutiert)}$$

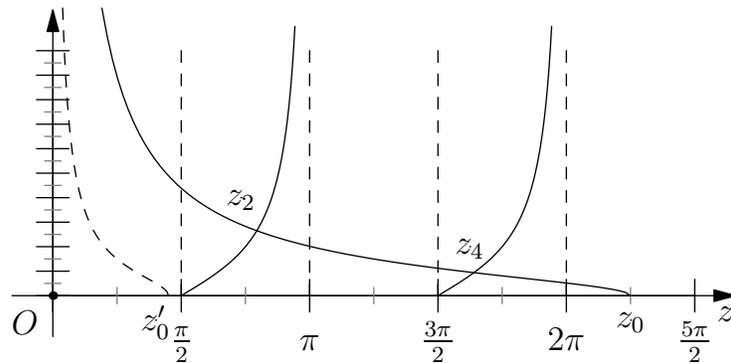


Abbildung B.3: Graphische Lösung der transzendenten Gleichung (antisymmetrisch)

$$\Rightarrow \underbrace{E_n + V_0}_{\text{Energie über Boden des Pot.-Topfes}} \cong \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m(2a)^2} \sqrt{\quad}$$

3. Es gehe nun $V_0 \rightarrow 0 \Rightarrow z_0 \Rightarrow 0$

\Leftrightarrow aus dem Verlauf der Kurven von $\tan(z)$, $\sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1}$ sieht man: es gibt immer mindestens eine symmetrische Lösung!

4. Antisymmetrische Lösungen: $D=0$

$$\text{(I) } \psi(a)_{\text{innen}} \stackrel{!}{=} \psi(a)_{\text{außen}} : C \sin(la) = B e^{-\kappa a}$$

$$\text{(II) } \psi'(a)_{\text{innen}} \stackrel{!}{=} \psi'(a)_{\text{außen}} : -lC \cos(la) = -\kappa B e^{-\kappa a}$$

$$-\cot(la) = \frac{\kappa}{l} \text{ und } \cot(z) = \sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1}$$

Für sehr flache Potentialtöpfe mit $z_0 < \frac{\pi}{2}$ gibt es keinen gebundenen antisymmetrischen Zustand.

5. Delta-Potential: $V(x) = -\alpha \delta(x)$

\Leftrightarrow Darstellung der δ -Funktion mit Rechtecksfolge $\delta_n(x)$

- Flächeninhalt: $a_n V_n = \text{const} = \alpha$
- Grenzprozeß

$$\left. \begin{array}{l} a \rightarrow 0 \\ V_0 \rightarrow \infty \end{array} \right\} \text{ wobei } 2aV_0 = \alpha = \text{const}$$

↪ Diskussion von z und z_0 im Grenzfalle

$$\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 = \frac{V_0}{E+V_0} = 1 - \frac{E}{V_0} \rightarrow 1 \text{ für } V_0 \rightarrow \infty$$

d.h. das δ -Potential entspricht (trotz seiner ∞ hohen Potentialwand) nur einem schwachen Potentialtopf.

Es hat daher nur einen gebundenen symmetrischen Zustand ($n=1$)

$$\psi(x) = B e^{-\kappa|x|}$$

$$\rightarrow \text{Aus Normierung } 1 \stackrel{!}{=} B^2 \int_0^\infty e^{-2\kappa x} dx \Rightarrow B = \sqrt{\kappa}$$

(hier gelten andere Anschlussbedingungen für die Wellenfunktionen!)

Die Energie des gebundenen Zustands ergibt sich aus $\tan(z) = \sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1}$

↪ Da z_0, z klein \Rightarrow Linearisierung:

$$\tan(z) \approx z, z^2 = \left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1, z^4 + z^2 - z_0^2 = 0, z_{1,2}^2 = \frac{-1 \pm \sqrt{1+4z_0^2}}{2} \approx z_0^2 - z_0^4$$

$$\frac{\alpha^2}{\hbar^2}(2m(E + V_0)) = \frac{\alpha^2}{\hbar^2}(2mV_0) - \left(\frac{\alpha^2}{\hbar^2}\right)^2 (2m)^2 V_0,$$

$$2mE = -\frac{\alpha^2}{\hbar^2}(2m)^2 V_0^2,$$

$$E = -\frac{(\alpha V_0)^2}{\hbar^2} 2m = -\frac{\alpha^2}{\hbar^2} \frac{m}{2} \text{ mit } \alpha = \underbrace{(2a)}_{\text{Potentialtopf}} V_0$$

B.7.4 Aufgabe 23: Halbunendlicher Potentialtopf

Randbedingungen:

(1) Stetigkeit von $\psi(x), \psi'(x)$ an $x = a$ (vgl. Aufgabe 22)

(2) $\psi(0) = 0$

Die Rechnung aus Aufgabe 22) kann identisch übernommen werden. Mit der Randbedingung (2) sind jedoch nur die antisymmetrischen Lösungen verträglich. Für flache Potentialtöpfe gibt es also keinen gebundenen Zustand.

B.8 Blatt 7

B.8.1 Aufgabe 24: Eindimensionaler harmonischer Oszillator: Eigenschaften der stationären Zustände

Darstellung durch Erzeuger und Vernichter

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a^\dagger + a)$$

$$p = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(a^\dagger - a)$$

$$|\psi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n|\psi_0\rangle$$

$$\langle x \rangle_n = \langle \psi_n | x | \psi_n \rangle = \frac{1}{n!} \left\langle \psi_0 \left| a^n \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a^\dagger + a) a^{\dagger n} \right| \psi_0 \right\rangle$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{n+1} [\langle \psi_n | \psi_{n+1} \rangle + \langle \psi_{n+1} | \psi_n \rangle]$$

$$= 0 \quad \text{wg. Orthogonalität der stationären Zustände}$$

$$\langle x^2 \rangle_n = \frac{\hbar}{2m\omega} \frac{1}{n!} \langle \psi_0 | a^n (a^{\dagger 2} + a^\dagger a + a a^\dagger + a^2) a^{\dagger n} | \psi_0 \rangle$$

$$\text{mit } [a, a^\dagger] = a a^\dagger - a^\dagger a = 1 \Rightarrow a^\dagger a + a a^\dagger = 2a^\dagger a + 1 = 2\hat{n} + 1$$

$$\text{und } \langle \psi_0 | a^n (a^\dagger)^{n+2} | \psi_0 \rangle = \langle \psi_0 | a^{n+2} (a^\dagger)^n | \psi_0 \rangle = 0$$

$$= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \psi_n | 2\hat{n} + 1 | \psi_n \rangle$$

$$= \frac{(2n+1)\hbar}{2m\omega}$$

$$\langle p \rangle_n = 0 \quad \text{analog}$$

$$\langle p^2 \rangle_n = -\frac{\hbar m\omega}{2} \frac{1}{n!} \langle \psi_0 | a^n (a^{\dagger 2} - a^\dagger a - a a^\dagger + a^2) a^{\dagger n} | \psi_0 \rangle$$

$$= \frac{\hbar m\omega}{2} (2n+1)$$

$$\langle \Delta x \rangle_n = \sqrt{\langle x^2 \rangle_n - \langle x \rangle_n^2} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{2n+1}$$

$$(\Delta p)_n = \sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}} \sqrt{2n+1}$$

Gilt scharf für GZ
(n=0), dieser ist
Gaußförmig

$$\Rightarrow (\Delta x)_n (\Delta p)_n = \frac{\hbar}{2} (2n+1) \geq \frac{\hbar}{2}$$

Für Potentiale $V(r) = V_0 r^k$ gilt nach Aufgabe 14 (Virialsatz der QM):

$$E_{KIN} = \langle \frac{p^2}{2m} \rangle = \frac{n}{2} E_{POT} = \frac{k}{2} \langle V(r) \rangle$$

Im harmonischen Oszillator: $V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$ ($k=2$)

$$\langle \frac{p^2}{2m} \rangle_n = \frac{\hbar \omega}{4} (2n+1) \stackrel{?}{=} \frac{k}{2} \frac{1}{2} m \omega^2 \frac{\hbar}{2m\omega} (2n+1) \rightarrow \text{ist erfüllt } \checkmark$$

B.8.2 Aufgabe 25: Eindimensionaler harmonischer Oszillator: Dynamik

1. $\langle \psi | \psi \rangle = N^2 (16 \langle \psi_0 | \psi_0 \rangle + 9 \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle) \Rightarrow N = \frac{1}{5}$ ($\langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{ij}$, orthonormal)

2. $|\psi(x, t)\rangle = \frac{4}{5} e^{-i \frac{E_0 t}{\hbar}} |\psi_0\rangle + \frac{3}{5} e^{-i \frac{E_1 t}{\hbar}} |\psi_1\rangle$

$$E_n = \hbar \omega (n + \frac{1}{2})$$

$$\begin{aligned} |\psi(x, t)|^2 &= \left[\frac{4}{5} e^{\frac{1}{2} i \omega t} \psi_0^*(x) + \frac{3}{5} e^{\frac{3}{2} i \omega t} \psi_1^*(x) \right] \cdot \left[\frac{4}{5} e^{-\frac{1}{2} i \omega t} \psi_0(x) + \frac{3}{5} e^{-\frac{3}{2} i \omega t} \psi_1(x) \right] \\ &= \left(\frac{4}{5} \right)^2 |\psi_0(x)|^2 + \left(\frac{3}{5} \right)^2 |\psi_1(x)|^2 + \frac{12}{25} \psi_0(x) \psi_1(x) 2 \cos(\omega t) \quad \text{da } \psi_n(x) \text{ reell} \end{aligned}$$

3. Berechnung der Ortsdarstellungen:

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$$

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= \langle x | a^\dagger | \psi_0 \rangle = \left\langle x \left| \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (-i\hat{p} + m\omega\hat{x}) \right| \psi_0 \right\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \left(m\omega x - \hbar \frac{d}{dx} \right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \\ &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} 2x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\psi(x, t = 0) &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \left(\frac{4}{5} + \frac{3}{5} 2\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x\right) \\ |\psi(x, t = 0)|^2 &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-2\left(\frac{x}{x_0}\right)^2} \left(\frac{4}{5} + \frac{3}{5} 2\frac{x}{x_0}\right)^2\end{aligned}$$

4.

$$\begin{aligned}\langle x(t) \rangle_\psi &= \left\langle \psi(t) \left| \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a^\dagger + a) \right| \psi(t) \right\rangle \\ &= \left\langle \psi_0 \left| \left(\frac{4}{5} e^{\frac{1}{2}i\omega t} + \frac{3}{5} e^{\frac{3}{2}i\omega t} a \right) \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a^\dagger + a) \left(\frac{4}{5} e^{-\frac{1}{2}i\omega t} + \frac{3}{5} e^{-\frac{3}{2}i\omega t} a^\dagger \right) \right| \psi_0 \right\rangle \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \\ &= \left\langle \psi_0 \left| \frac{12}{25} e^{-i\omega t} a a^\dagger + \frac{12}{25} e^{i\omega t} a a^\dagger \right| \psi_0 \right\rangle \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \\ &= \frac{24}{25} \cos(\omega t) \langle \psi_0 | a^\dagger a + 1 | \psi_0 \rangle \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \\ &= \frac{24}{25} \cos(\omega t) \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle p(t) \rangle_\psi &= \left\langle \psi(t) \left| i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (a^\dagger - a) \right| \psi(t) \right\rangle \\ &= i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \frac{12}{25} \langle \psi_0 | -e^{-i\omega t} a a^\dagger + e^{i\omega t} a a^\dagger | \psi_0 \rangle \\ &= -\frac{24}{25} \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \sin(\omega t) \quad (\text{analoge Schritte})\end{aligned}$$

Ehrenfest:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle x \rangle &= \frac{1}{m}\langle p \rangle \rightarrow \text{wird erfüllt } \checkmark \\ \frac{d}{dt}\langle p \rangle &= -\langle \nabla V(x) \rangle = -\left\langle \frac{1}{2}m\omega^2(2x) \right\rangle = -m\omega^2\langle x \rangle \rightarrow \text{wird erfüllt } \checkmark\end{aligned}$$

$$5. \quad \left. \begin{aligned}P(E = \frac{\hbar\omega}{2}) &= \left(\frac{4}{5}\right)^2 \\ P(E = \frac{3\hbar\omega}{2}) &= \left(\frac{3}{5}\right)^2\end{aligned} \right\} \Rightarrow \langle E \rangle = \frac{43}{50}\hbar\omega$$

6. Analoge Rechnung für $\psi(x, t) = \frac{1}{5}(4\psi_0(x) + 3\psi_2(x))$

$$(3) \quad \psi(x, t) = \frac{4}{5} e^{-\frac{1}{2}i\omega t} \psi_0(x) + \frac{3}{5} e^{-\frac{5}{2}i\omega t} \psi_2(x)$$

Konstruktion von $\psi_2(x)$:

$$\begin{aligned}\psi_2(x) &= \left\langle x \left| \frac{a^{\dagger 2}}{\sqrt{2}} \right| \psi_0 \right\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}\hbar m\omega} \langle x | (-i\hat{p} + m\omega\hat{x})^2 | \psi_0 \rangle \\ &= \frac{1}{2\sqrt{2}\hbar m\omega} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \left(m\omega x - \hbar \frac{d}{dx} \right)^2 e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{m\omega}{2\hbar} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \left(4x^2 - 2\frac{\hbar}{m\omega} \right)^2 e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \\ \psi_0(x) &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\psi(x, t=0) &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \left(\frac{4}{5} + \frac{3}{5} \frac{m\omega}{\sqrt{2}\hbar} \left(2x^2 - \frac{\hbar}{m\omega} \right) \right) \\ |\psi(x, t=0)|^2 &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{m\omega}{\hbar} x^2} \left(\frac{4}{5} + \frac{3}{5} \frac{m\omega}{\sqrt{2}\hbar} \left(2x^2 - \frac{\hbar}{m\omega} \right) \right)^2\end{aligned}$$

$$(5) P(E = \frac{5\hbar\omega}{2}) = \left(\frac{3}{5}\right)^2, \quad P(E = \frac{\hbar\omega}{2}) = \left(\frac{4}{5}\right)^2 \quad \Rightarrow \quad \langle E \rangle_\psi = \frac{61}{50}\hbar\omega$$

(4)

$$\begin{aligned}\langle x(t) \rangle_\psi &= \left\langle \psi(t) \left| \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a^\dagger + a) \right| \psi(t) \right\rangle \\ &= \left\langle \psi_0 \left| \left(\frac{4}{5} e^{\frac{1}{2}i\omega t} + \frac{3}{5\sqrt{2}} e^{\frac{3}{2}i\omega t} a^2 \right) \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a^\dagger + a) \left(\frac{4}{5} e^{-\frac{1}{2}i\omega t} + \frac{3}{5\sqrt{2}} e^{-\frac{3}{2}i\omega t} a^{\dagger 2} \right) \right| \psi_0 \right\rangle \\ &= 0\end{aligned}$$

$$\langle p(t) \rangle_\psi = 0$$

→ keine nichtverschwindenden Operatorprodukte der Form $(a^\dagger a)^l \dots$

N.B. Orts- und Impulsoperator koppeln nur Zustände ψ_n und $\psi_{n\pm 1}$

B.8.3 Aufgabe 26: Eindimensionaler harmonischer Oszillator: Klassisch verbotener Bereich

$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$ Grundzustandsenergie

→ Umkehrpunkte einer klassischen Bewegung mit derselben Energie:

$$E_{POT} = \frac{1}{2}m\omega^2 x_1^2 \stackrel{!}{=} E_0 \Rightarrow x_1 = \pm \sqrt{\frac{2E_0}{m\omega^2}}$$

Die qm Grundzustands-Wellenfunktion erstreckt sich auch außerhalb dieses Bereichs:

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

Aufenthaltswahrscheinlichkeit im klassisch verbotenen Bereich: (symmetrisch für $x \leq 0$)

$$\begin{aligned} P &= 2 \int_{-\infty}^{-x_1} |\psi(x)|^2 dx = 2 \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{-x_1} e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} dx \\ &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{-1} e^{-y^2} dy = 1 - \text{erf}(1) \approx 15,7\% > 0 \end{aligned}$$

wobei $y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$ und $-y_1 = -\sqrt{\frac{\hbar\omega}{m\omega^2}} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$

bzw. Ablesen aus tabellierter Verteilungsfunktion der Normalverteilung

B.8.4 Aufgabe 27: Dreidimensionaler isotroper harmonischer Oszillator

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{1}{2}m\omega\vec{x}^2 = \sum_{i=x,y,z} \frac{p_i^2}{2m} - \frac{1}{2}m\omega x_i^2$$

d.h. 3-D Oszillator zerfällt in die Summe aus 3 unabhängigen 1-dim. Oszillatoren.

$$H = \hbar\omega \sum_i (a_i^\dagger a_i + \frac{1}{2}) \quad \Rightarrow E_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega$$

mit a_i, a_i^\dagger definiert wie in Aufgabe 24↑.

aus (*) $a_i|\psi_0\rangle = 0 \quad \forall i$ folgt analog zur Vorlesung

$$\begin{aligned} 0 &= \langle x|a_x|\psi_0^x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \langle x| \underbrace{i\hat{p}_x}_{\hbar\frac{\partial}{\partial x}} + m\omega\hat{x}|\psi_0\rangle \\ &\Rightarrow \frac{d\psi_0(x)}{dx} = -\frac{m\omega}{\hbar} x \psi_0(x) \end{aligned}$$

$$\psi_0^x(x) = N e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}, \quad N = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}$$

Um (*) für alle i zu erfüllen muss

$$\psi_0(x, y, z) = \psi_0^x(x)\psi_0^y(y)\psi_0^z(z)$$

als Produkt darstellbar sein.

$$\psi_0(\vec{x}) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{3}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}\vec{x}\cdot\vec{x}} \quad \text{Grundzustand}$$

Allgemeine Wellenfunktion:

$$|\psi_{(n_x, n_y, n_z)}(\vec{x})\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_x!n_y!n_z!}} (a_x^\dagger)^{n_x} (a_y^\dagger)^{n_y} (a_z^\dagger)^{n_z} |\psi_0(\vec{x})\rangle$$

Quantenzahlen: (n_x, n_y, n_z)

Energie

Entartung

$\frac{3}{2}\hbar\omega$	<i>Grundzustand</i>	$(0, 0, 0)$	<i>keine</i>
$\frac{5}{2}\hbar\omega$	<i>1. Anregung</i>	$\left. \begin{array}{l} (1, 0, 0) \\ (0, 1, 0) \\ (0, 0, 1) \end{array} \right\}$	<i>3-fach entartet</i>
$\frac{7}{2}\hbar\omega$	<i>2. Anregung</i>	$\left. \begin{array}{l} (1, 1, 0) \\ \dots \\ (2, 0, 0) \\ \dots \end{array} \right\}$	<i>6-fach entartet</i>

B.8.5 Aufgabe 28: Vershobener harmonischer Oszillator

1. klassische Elektrodynamik:

$$F_{el} = qE = -\text{grad } V(x) \Rightarrow V(x) = -qEx$$

$V(x)$ ist zusätzliches Potential im Hamiltonoperator.

2.

$$\begin{aligned} H &= \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \left(x^2 - \frac{2qE}{m\omega^2}x + \left(\frac{qE}{m\omega^2}\right)^2 - \left(\frac{qE}{m\omega^2}\right)^2 \right) \\ &= \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \underbrace{\left(x - \frac{qE}{m\omega^2} \right)^2}_{y^2} - \underbrace{\frac{q^2 E^2}{2m\omega^2}}_{\Delta E} \end{aligned}$$

dies ist ein harmonischer Oszillator mit

- $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} + \Delta E = \frac{\hbar\omega}{2} - \frac{q^2 E^2}{2m\omega^2}$
- Verschiebenem Potential um $x_{min} = \frac{qE}{m\omega^2}$
- derselben Frequenz ω
- Eigenfunktionen $\psi_n^{V0}(x)$ des verschobenen Oszillators

$$\psi_n^{V0}(x) = \psi_n(y) = \psi_n\left(x - \frac{qE}{m\omega^2}\right)^2$$

wobei $\psi_n(x)$: Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators

3. Bestimmung von γ :

Schreibe \tilde{H} für die neuen Erzeuger-/Vernichteroperatoren und vergleiche mit H

$$\begin{aligned} \tilde{H} &= \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) \\ &= \hbar\omega\left(\left[\frac{-ip + m\omega x}{\sqrt{2\hbar m\omega}} + \gamma\right]\left[\frac{ip + m\omega x}{\sqrt{2\hbar m\omega}} + \gamma\right] + \frac{1}{2}\right) \\ &= \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \frac{i}{2\hbar}[x, p] + \gamma\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\hbar\omega x + \hbar\omega\left(\gamma^2 + \frac{1}{2}\right) \end{aligned}$$

Vergleich mit Angabe wird γ bestimmt:

$$\begin{aligned} \tilde{H} - \hbar\omega\gamma^2 &= H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \underbrace{\gamma\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\hbar\omega x}_{=:-qE} \\ \Rightarrow \gamma &= -\frac{qE}{\hbar\omega}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}, \quad -\hbar\omega\gamma^2 = -\frac{q^2 E^2}{2m\omega^2} \text{ ist Energieverschiebung} \end{aligned}$$

Alternativer Lösungsweg: Einsetzen in H und Auflösen nach x, p :

$$\begin{aligned} \left. \begin{aligned} x &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a^\dagger + a - 2\gamma) \\ p &= i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(a^\dagger - a) \end{aligned} \right\} \text{ in } H \\ H^{V0} &= \frac{\hbar\omega}{2}(a^\dagger a + \frac{1}{2}) - \hbar\omega\gamma(a^\dagger + a) - qE\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a^\dagger + a) + 2\gamma qE\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \\ \Rightarrow \gamma &= -\frac{qE}{\hbar\omega}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \text{ läßt Terme } \sim (a^\dagger + a) \text{ verschwinden} \end{aligned}$$

$$H^{VO} = H^{HO} - \frac{q^2 E^2}{m\omega^2}$$

Die Eigenfunktionen des verschobenen Oszillators sind gleich denen des harmonischen Oszillators, die Eigenenergien sind verschoben um ΔE .

4. $\langle qx \rangle = \left\langle q \left(y + \frac{qE}{m\omega^2} \right) \right\rangle = \frac{q^2 E}{m\omega^2} \neq 0$ (resultierendes Dipolmoment)

da $\langle y \rangle = 0$ im harmonischen Oszillator

B.9 Blatt 9

B.9.1 Aufgabe 32: Potential aus zwei δ -Funktionen

$$V(x) = -\alpha[\delta(x + \frac{l}{2}) + \delta(x - \frac{l}{2})]$$

Einzelnes δ -Potential: $E_B = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}$ Bindungszustand

1. Ansatz für die Wellenfunktion:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{+(x+\frac{l}{2})\rho} & x < -\frac{l}{2} & (= I) \\ Be^{-(x+\frac{l}{2})\rho} + Ce^{(x-\frac{l}{2})\rho} & x \in [-\frac{l}{2}, \frac{l}{2}] & (= II) \\ De^{-(x-\frac{l}{2})\rho} & x > \frac{l}{2} & (= III) \end{cases}$$

(1) Stetigkeitsbedingung der Wellenfunktion an $x = \pm\frac{l}{2}$:

$$x = -\frac{l}{2}: \quad A = B + Ce^{-l\rho} \quad (1)$$

$$x = +\frac{l}{2}: \quad D = Be^{-l\rho} + C \quad (2)$$

(2) Unstetigkeitsbedingungen der Ableitung:

\hookrightarrow folgen aus Integration der SGL in einer Umgebung um $\pm\frac{l}{2}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) - \alpha[\delta(x + \frac{l}{2}) + \delta(x - \frac{l}{2})] \psi(x) = E\psi(x)$$

$$x = \pm\frac{l}{2}: \quad -\frac{\hbar^2}{2m} (\psi'(\pm\frac{l}{2} + \epsilon) - \psi'(\pm\frac{l}{2} - \epsilon)) - \alpha\psi(\pm\frac{l}{2}) = 2\epsilon E\psi(\pm\frac{l}{2}) \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} 0$$

\Rightarrow Unstetigkeitsbedingung:

$$\psi'(\pm\frac{l}{2})_- = \psi'(\pm\frac{l}{2})_+ + \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi(\pm\frac{l}{2})$$

Unstetigkeitsbedingungen:

$$x = -\frac{l}{2}: \quad A\rho = -B\rho + C\rho e^{-l\rho} + \frac{2m\alpha}{\hbar^2} A \quad | \cdot \frac{1}{\rho} \quad (3)$$

$$x = +\frac{l}{2}: \quad -B\rho e^{-l\rho} + C\rho = -D\rho + \frac{2m\alpha}{\hbar^2} D \quad | \cdot \frac{1}{\rho} \quad (4)$$

Lösung des Gleichungssystems (1)-(4):

$$(1) + (3) \quad (2 - \frac{\mu}{\rho})A - C2e^{-l\rho} = 0 \quad \Rightarrow \quad C = (1 - \frac{\mu}{2\rho})e^{l\rho}A$$

$$(3) - (1) \quad -\frac{\mu}{\rho}A + 2B = 0 \quad \Rightarrow \quad B = \frac{\mu}{2\rho}A$$

$$(4) - (2) \quad -2Be^{-l\rho} + (2 - \frac{\mu}{\rho})D = 0 \quad \Rightarrow \quad D = \frac{B}{(1 - \frac{\mu}{2\rho})}e^{-l\rho} = \frac{\frac{\mu}{2\rho}A}{(1 - \frac{\mu}{2\rho})}e^{-l\rho}A$$

(A verbleibt als allg. Konstante der Wellenfunktion)

Einsetzen der Lösung in (2) gibt die gesuchte Beziehung

$$\frac{-\frac{\mu}{2\rho}}{(1-\frac{\mu}{2\rho})}e^{-l\rho} + \frac{\mu}{2\rho}e^{-l\rho} + (1-\frac{\mu}{2\rho})e^{l\rho} = 0$$

$$e^{-l\rho}\left(-\frac{\mu}{2\rho} + (1-\frac{\mu}{2\rho})\frac{\mu}{2\rho}\right) + (1-\frac{\mu}{2\rho})^2e^{l\rho} = 0 \quad | \cdot e^{-l\rho} \frac{1}{-(\frac{\mu}{2\rho})^2}$$

$$\Rightarrow e^{-2l\rho} = (1-\frac{2\rho}{\mu})^2 \text{ bzw. } e^{-l\rho} = \pm(1-\frac{2\rho}{\mu})$$

Transzendente Gleichung für die Eigenenergien.

Graphische Lösung:

ρ_0 : Schnittpunkt von $y_+ = 1 - \frac{2}{\mu}\rho$ und $y_- = \frac{2}{\mu}\rho - 1$

$$\rho_0 = \frac{\mu}{2} \Rightarrow E_0 = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} = E_B$$

Da $E = -\frac{\hbar^2\rho^2}{2m}$ entspricht ρ_1 der (kleinstmöglichen) Energie des Grundzustandes $E_S = -\frac{\hbar^2\rho_1^2}{2m} < E_B$

2. Diskussion der graphischen Lösung:

(a) Parität des GZ

$$E_{GZ} = -\frac{\hbar^2\rho_1^2}{2m} \text{ und } e^{-l\rho} = -(1-\frac{2\rho}{\mu})$$

einsetzen in die Lösungen für B, C und D

$$\left. \begin{aligned} C^{GZ} &= -\frac{1-\frac{\mu}{2\rho}}{1-\frac{2\rho}{\mu}}A = \frac{\mu}{2\rho}A \\ B^{GZ} &= \frac{\mu}{2\rho}A \\ D^{GZ} &= \frac{-(1-\frac{2\rho}{\mu})}{(\frac{2\rho}{\mu}-1)}A = A \end{aligned} \right\} \psi^{GZ}(x) = \dots\psi^{GZ}(-x),$$

d.h. gerade Parität

$$(b) \psi^{GZ}(x) = A \begin{cases} e^{(x+\frac{1}{2})\rho} \\ \frac{\mu}{\rho}e^{-l\frac{\mu}{2}} \cosh(\rho x) \\ e^{-(x-\frac{1}{2})\rho} \end{cases}$$

$$\left(\frac{\mu}{\rho_1}\right)^2 = \frac{4m^2\alpha^2}{\hbar^2(-2mE_S)} = 4\frac{E_B}{E_S} > 1$$

3. Aus der graphischen Lösung sieht man, dass y_+ nur dann einen nichttrivialen Schnittpunkt mit $e^{-l\rho}$ hat, wenn es eine Sekante dieser Kurve über

$[0, \infty[$ ist. Der Grenzfall liegt also vor, wenn y_+ Tangente an $e^{-l\rho}$ in $\rho = 0$ ist:

$$\Rightarrow -\frac{2}{\mu} = -l_c, l_c = \frac{2}{\mu}$$

$l > l_c$: Weiterer EZ mit Energie $E_A = -\frac{\hbar^2 \rho_2^2}{2m} > E_B$ mit $e^{-l\rho} = +(1 - \frac{2\rho}{\mu})$ zeigt man analog zu oben die Antisymmetrie der Wellenfunktion: $C^A = -C^{GZ}, D^A = -D^{GZ}$

$$\psi^A(x) = A \begin{cases} e^{(x+\frac{1}{2})\rho} \\ -\frac{\mu}{\rho} i e^{-l\frac{\rho}{2}} \sin(\rho x) \\ -e^{-(x-\frac{1}{2})\rho} \end{cases}$$

Grenzfall $l \rightarrow 0$: $e^{-l\rho} \approx 1, \rho_1 = 2\rho_0, E_S = -\frac{4\hbar^2 \rho_0^2}{2m} = -4E_B = -\frac{m(2\alpha)^2}{2\hbar^2}$, d.h. es existiert nur der einzige gebundene Zustand in einem δ -Potential der Stärke (2α) .

B.9.2 Aufgabe 33: Unendlich tiefe Potentialmulde

Thema: Zentralpotentiale in der QM: $V(x, y, z) = V(r)$ (vgl. Kepler-Problem)

Koordinatensystem: Polar- bzw. sphärische Koordinaten

Konzept:

- Separation der Winkelvariablen aus der SGL durch Darstellung des Laplace-Operators:

$$\Delta\psi = \underbrace{\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r})}_{\text{radialer}} + \underbrace{\frac{1}{r^2 \sin(\vartheta)} \frac{\partial}{\partial \vartheta} (\sin \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta}) + \frac{1}{r^2 \sin^2(\vartheta)} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2}}_{\text{Winkelanteil}}$$

Mit Definition:

$$\hat{L} = (\hat{L}_x \hat{x} \hat{f}) \text{ (Drehimpuls-Vektoroperator) und}$$

$$\hat{p}_r = -i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \text{ (Radialimpuls)}$$

$$\Rightarrow \text{Operatoridentität: } -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta(r, \vartheta, \varphi) = \hat{p}^2(r, \vartheta, \varphi) = \hat{p}_r^2(r) + \frac{\hat{L}^2(\vartheta, \varphi)}{r^2}$$

SGL:

$$H\psi(r, \vartheta, \varphi) = \left[\widehat{p}_r^2(r) + V(r) + \underbrace{\frac{\widehat{L}^2(\vartheta, \varphi)}{r^2}}_* \right] \psi(r, \vartheta, \varphi)$$

* winkelabh. Problem unabhängig vom genauen Potentialverlauf

• Lösung des winkelabhängigen Problems:

– Separationsansatz:

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = R^l(r) Y_l^m(\vartheta, \varphi)$$

– Eigenfunktionen des Drehimpulsoperators:

$$\widehat{L}^2 Y_l^m(\vartheta, \varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m(\vartheta, \varphi) \text{ Kugelflächenfunktionen}$$

↔ Einsetzen in die SGL und „Heraus kürzen“ von $Y_l^m(\vartheta, \varphi)$ (auf dieses wirken nun keine Operatoren mehr) führt zur radialen SGL

• Lösung der radialen SGL:

$$\left(\frac{\widehat{p}_r^2}{2m} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r) - E \right) R^l(r) = 0 \quad (\text{rSGL})$$

mit $\widehat{p}_r^2 = -\hbar^2 \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r$ (einziger Differentialoperator)

Idee: Multipliziere (rSGL) von links mit r

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \underbrace{\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r)}_{V^{eff}(r)} - E \right) \underbrace{r \cdot R^l(r)}_{v_l(r)} = 0 \quad (I)$$

d.h. für die Größe $v_l(r) = r \cdot R^l(r)$ ergibt sich die bekannte 1-dim SGL in einem effektiven, um einen Zentrifugalterm ergänzten Potential

Einsicht:

Die einfachsten Lösungen der rSGL sind die für $l = 0$ (kein Zentrifugalterm). Diese Lösungen $R^0(r) = \frac{v_0(r)}{r}$ ähneln denen für die 1-dim SGL, haben aber eine zusätzliche $\frac{1}{r}$ -Abhängigkeit!

Ausblick: Dies führt zur Struktur der allg. Besselfunktion

Teilaufgabe 1): Sei $l = 0$

RB: $\psi(0) = \psi(a) = 0$ (Stetigkeit der WF) (\hat{p}_r ist ein komplizierter Operator mit vielen Feinheiten. Wenn man fordert, dass er hermitesch ist: $0 \stackrel{!}{=} \langle \psi | \hat{p}_r | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{p}_r | \psi \rangle^*$ muss er eingeschränkt werden auf Funktionen $\psi(r)$, für die gilt

$$\lim_{r \rightarrow \infty} r\psi(r) = 0$$

(ggf. in Kugelkoordinaten die $\langle \dots \rangle$ ausintegrieren) Daraus folgt die Bedingung $y(r=0) = 0$)

\hookrightarrow für $v_0(r)$ ist dies das Problem des 1-dim ∞ -tiefen Potentialtopfes

$$k_n = \frac{\pi}{a} \cdot n, \quad v_{0,n} = \sin(k_n r), \quad E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2}$$

$$R_n^0(r) = \frac{v_{0,n}(r)}{r} = \frac{\sin(k_n r)}{r}$$

Teilaufgabe 2):

Im Inneren des Potentialtopfes ist $V(r) = 0$, somit wird (I) zu

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right) v_l(r) = 0, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Lösungen: $v_l(r) = r \cdot [c_1 j_l(kr) + c_2 n_l(kr)]$

Eigenschaften:

sphärische Besselfunktion *sphärische Neumannfunktion*

Definition $j_l(r) = (-r)^l \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right)^l \frac{\sin r}{r}$ $n_l(r) = -(-r)^l \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right)^l \frac{\cos r}{r}$

Asymptotik $\lim_{r \rightarrow 0} j_l(r) = \frac{r^l}{\underbrace{(2l+1)!!}_{1 \cdot 3 \cdot 5 \dots (2l+1)}} \rightarrow 0$ $\lim_{r \rightarrow 0} n_l(r) = \frac{(2l-1)!!}{r^{l+1}} \rightarrow \infty$

Anwenden der Randbedingungen:

1.) $0 \stackrel{!}{=} v_l(r=0) \rightarrow \frac{c_1 r^{l-1}}{(2l+1)!!} + \frac{(2l+1)!! c_2}{r^l} \Rightarrow \forall l \neq 0$ ist $c_2^l = 0$

Fall $l = 0$ wurde bereits gelöst, $c_2^0 = 0 \Rightarrow c_2 = 0$

2.) $0 \stackrel{!}{=} v_l(r=a) = ac_1 j_l(ka) \Rightarrow j_l(ka) \stackrel{!}{=} 0$ Transzendente Gleichung

Es sei $\beta_{l,n}$ die n-te Nullstelle von $j_l(ka)$

$$\Rightarrow ka = \beta_{l,n}, \quad k_{l,n} = \frac{1}{a}\beta_{l,n}$$

$$E_{l,n} = \frac{\hbar^2 k_{l,n}^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\beta_{l,n}^2$$

Zwei Quantenzahlen:

l: Drehimpulsquantenzahl
n: radiale Quantenzahl

B.9.3 Aufgabe 34: Endlich tiefe Potentialmulde

↔ Analoge Lösung zum 1-dim Potentialtopf, hier in etwas anderer Sprache:

Es sei $l = 0$.

in I: oszillierende Lösung (aus Besselfunktion)

in II: exponentiell abfallende Lösung (Kombination von Bessel- und Neumannfunktion mit imaginärem Argument)

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \begin{pmatrix} q^2 \\ -\kappa^2 \end{pmatrix} \right] R(r) = 0 \quad \begin{pmatrix} \text{in I} \\ \text{in II} \end{pmatrix} \quad \begin{matrix} q = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E + V_0)} \\ \kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(-E)} \end{matrix}$$

Bedingungen:

1.) $R(0)$ soll nicht divergieren:
⇒ in I kein Anteil einer Neumannfunktion

$$R_I(r) = c_1 j_0(qr) = c_1 \frac{\sin(qr)}{qr}$$

2.) $R(r)$ soll normierbar sein, d.h.
⇒ in II nur exponentiell abfallende Lösung, diese sind gegeben durch Hankel-Funktionen

$$h_l(\tilde{r}) = j_l(\tilde{r}) + in_l(\tilde{r}) \quad \tilde{r} = i\kappa r$$

$$h_0(\tilde{r}) = \frac{\sin \tilde{r}}{\tilde{r}} - i \frac{\cos \tilde{r}}{\tilde{r}} = \frac{e^{i\tilde{r}}}{i\tilde{r}} = \frac{e^{-\kappa r}}{\kappa r}$$

$$R_{II}(r) = c_2 \frac{e^{-\kappa r}}{\kappa r}$$

3.) Stetigkeitsbedingungen an $r = a$:

$$(a) R_I(a) = R_{II}(a) : c_1 \frac{\sin(qa)}{qa} = c_2 \frac{e^{-\kappa a}}{\kappa a} \Rightarrow \frac{c_2}{c_1} = \frac{\kappa}{q} \sin(qa) e^{\kappa a}$$

$$(b) R'_I(a) = R'_{II}(a) : c_1 \frac{q^2 r \cos(qr) - q \sin(qr)}{(qr)^2} \Big|_{r=a} = c_2 e^{-\kappa r} \frac{-\kappa^2 r - \kappa}{(\kappa r)^2} \Big|_{r=a}$$

↔ Einsetzen von $\frac{c_2}{c_1}$ aus (a) und auflösen ergibt

$$\tan(qa) = -\frac{q}{\kappa}$$

Transzendente Gleichung graphisch lösen

$$\tan(z) = -\frac{1}{\sqrt{\frac{-E}{E+V_0}}} = \frac{-1}{\sqrt{-1 + \frac{V_0}{E+V_0}}} = \frac{-1}{\underbrace{\sqrt{-1 + \left(\frac{z_0}{z}\right)^2}}_*}$$

* hat Polstelle bei $z_0 = \frac{a}{\hbar} \sqrt{2mV_0}$

→ Eine Lösung gibt es immer dann, wenn $z_0 > \frac{\pi}{2}$

vgl. Aufgabe 22), Potentialkasten in 1-D:

- Der 1-dim Potentialkasten hat stets einen gebundenen Zustand (symmetrische Lösung).
- Für die asymmetrischen Lösungen gilt dieselbe transzendente Gleichung und dieselbe Bedingung ($z_0 > \frac{\pi}{2}$) für die Existenz asymmetrischer Lösungen wie im Problem der radialsymmetrischen Potentialmulde.

Wichtiger Unterschied:

Hinreichend flache Potentialmulden haben keinen gebundenen Zustand!

B.9.4 Aufgabe 35: Legendre-Polynome und Kugelflächenfunktionen

1. Darstellung: $f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n P_n(x)$

$$\int_{-1}^1 P_m(x) f(x) dx = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \int_{-1}^1 P_m(x) P_n(x) dx = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \frac{2}{2n+1} \delta_m^n = c_m \frac{2}{2m+1}$$

$$\Rightarrow c_m = \frac{2m+1}{2} \int_{-1}^1 P_m(x) f(x) dx = \frac{2m+1}{2} \frac{1}{2^m m!} \int_{-1}^1 \left[\frac{d^m}{dx^m} (x^2 - 1)^m \right] f(x) dx$$

m	P_m	$c_m(g(x))$
$m = 3$	$P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x)$	$c_3 = 2$
$m = 2$	$P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$	$c_2 = 4$
$m = 1$	$P_1(x) = x$	$c_1 = 0$
$m = 0$	$P_0(x) = 1$	$c_0 = 7$

2. Normierung der $Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} d\Omega Y_{l',m'}^*(\vartheta, \varphi) Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) &= |c_{l,m}|^2 \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi e^{i(m-m')\varphi}}_{2\pi\delta_{mm'}} \underbrace{\int_{-1}^1 P_{l'}^{m'}(x) P_l^m(x) dx}_{\frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta_{l'l} \delta_{mm'}} \\ &= |c_{lm}|^2 \frac{4\pi}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta_{l'l} \delta_{mm'} \stackrel{!}{=} \delta_{l'l} \delta_{mm'} \end{aligned}$$

wegen Orthonormalität der beiden Funktionen $Y_{l'm'}$ und Y_{lm}

$$\Rightarrow c_{l,m} = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}}$$

3. Darstellung von $h(\vartheta, \varphi)$:

$$h(\vartheta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l d_{lm} Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

$$d_l^m = \int_{\Omega} d\Omega h(\vartheta, \varphi) Y_{lm}^*$$

$$Y_{22}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \vartheta e^{2i\varphi} \Rightarrow d_{22} = \sqrt{\frac{32\pi}{15}}$$

$$Y_{11}(\vartheta, \varphi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta e^{i\varphi} \Rightarrow d_{11} = -2\sqrt{\frac{8\pi}{3}}$$

$$Y_{00}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \Rightarrow d_{00} = \sqrt{4\pi}$$

alle anderen = 0

B.10 Blatt 10

B.10.1 Aufgabe 36: H-Atom und Kugelflächenfunktionen

1.) Radiale Wellenfunktion des Wasserstoffatoms im Grundzustand:

$$R_{n=1,l=0}(r) = 2a^{-\frac{3}{2}}e^{-\frac{r}{a}}, \quad a = \frac{\hbar^2}{me^2} \approx 0,5 \cdot 10^{-10}m \text{ („Bohr-Radius“)}$$

$$\Rightarrow \psi_{n=1}^{l=0}(r, \vartheta, \varphi) = R_{n=1,l=0}(r)Y_{l=0}^{m=0}(\vartheta, \varphi)$$

•

$$\begin{aligned} \langle r \rangle &= \int d\Omega \int_0^\infty dr \, r^2 \psi^*(r, \vartheta, \varphi) \, r \, \psi(r, \vartheta, \varphi) \\ &= \underbrace{\left[\int d\Omega \, |Y_{l=0}^{m=0}(\vartheta, \varphi)|^2 \right]}_{=1 \, da \, Y_{l=0}^{m=0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}} \cdot \underbrace{\left[\int_0^\infty dr \, 4a^{-3}r^3 e^{-\frac{2r}{a}} \right]}_{= \frac{4}{a^3} \left(\frac{3!}{a}\right)^4 = \frac{3}{2}a} = \frac{3}{2}a \end{aligned}$$

•

$$\begin{aligned} \langle r^2 \rangle &= 1 \cdot \left[\int_0^\infty dr \, 4a^{-3}r^4 e^{-\frac{2r}{a}} \right] \\ &= \frac{4}{a^3} \frac{4!}{\left(\frac{2}{a}\right)^5} = 3a^2 \end{aligned}$$

- wahrscheinlichster Wert (i.s.v. Ort mit der höchsten Wahrscheinlichkeitsdichte in einem kleinen Testvolumen $4\pi r^2 \Delta r$)

$$\max_{r \in [0, \infty]} r^2 |\psi(r)|^2 = \max\{r_0 = 0, r_1 = a\} = \{r_1 = a\}$$

Nullstellen der Ableitung

\hookrightarrow das Elektron hat seine größte Wahrscheinlichkeitsdichte auf der „Bohr’schen Bahn“ $r = a$

2.) Wegen sphärischer Symmetrie des s-Orbitals ($n = 1, l = 0$)

$$\langle x \rangle = 0, \quad \langle x^2 \rangle = \frac{1}{3} \langle x^2 + y^2 + z^2 \rangle = \frac{1}{3} \langle r^2 \rangle = a^2$$

3.) $\psi_{n=2}^{l=1,m=1}(r, \vartheta, \varphi) = R_{n=2,l=1}(r)Y_{l=1}^{m=1}(\vartheta, \varphi)$ mit

$$R_{n=2}^{l=1}(r) = \frac{1}{\sqrt{24}} a^{-5/2} r e^{-r/2a}, \quad Y_{l=1}^{m=1}(\vartheta, \varphi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta e^{i\varphi} \quad \text{und } x = r \sin \vartheta \cos \varphi$$

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &= \left[\int_0^\pi \sin \vartheta d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{3}{8\pi} \sin^2 \vartheta \sin^2 \vartheta \cos^2 \varphi \right] \cdot \left[\int_0^\infty dr \underbrace{r^2}_{\text{aus Diff.}} \frac{1}{24} \frac{1}{a^5} \underbrace{r^2}_{x^2} \underbrace{r^2}_{|\psi|^2} e^{-r/a} \right] \\ &= \frac{3}{8\pi} \underbrace{\left[\int_0^{2\pi} d\varphi \cos^2 \varphi \right]}_\pi \underbrace{\left[\int_0^\pi d\vartheta (\sin \vartheta)^5 \right]}_{\frac{16}{15}} \frac{1}{24a^5} \underbrace{\left[\int_0^\infty dr r^6 e^{-r/a} \right]}_{6!a^7} \\ &= 12a^2 \quad (\text{ausgedehntes } p\text{-Orbital}) \end{aligned}$$

B.10.2 Aufgabe 37: Dichteoperator für Spin- $\frac{1}{2}$ Systeme

1.) Darstellung einer 2x2-Matrix durch Pauli-Matrizen:

(vgl. Blatt 1, Aufgabe 1)

$$\begin{aligned} M &= \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} \\ &= \frac{m_{11} + m_{22}}{2} \mathbb{1} + \frac{m_{11} - m_{22}}{2} \sigma_z + \frac{m_{12} + m_{21}}{2} \sigma_x + i \frac{m_{12} - m_{21}}{2} \sigma_y \\ &= a_0 \mathbb{1} + \vec{a} \cdot \vec{\sigma} \end{aligned}$$

wobei $a_0 = \frac{1}{2} \text{Tr}(M)$ und $\vec{a} = \frac{1}{2} \text{Tr}(M \cdot \vec{\sigma})$

Für $M = \rho$ gilt $\text{Tr}(\rho) = 1$, $\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$, $\frac{1}{2} \text{Tr}(\rho \cdot \vec{\sigma}) = \frac{1}{\hbar} \text{Tr}(\rho \vec{S}) = \frac{1}{\hbar} \langle \vec{S} \rangle$

damit $\rho = \frac{1}{2} \mathbb{1} + \frac{1}{\hbar} \langle \vec{S} \rangle \cdot \vec{\sigma}$

2.) Reiner Zustand: $\rho^2 = \rho$

$$\rho^2 = \frac{1}{4} \mathbb{1} + \frac{1}{\hbar} \langle \vec{S} \rangle \cdot \vec{\sigma} + \frac{1}{\hbar^2} \langle \vec{S} \rangle^2 \mathbb{1}$$

$$\text{N.B. } \sigma_j \sigma_k = i \sum_l \epsilon_{jkl} \sigma_l + \delta_{jk} \mathbb{1}$$

$$\text{aus } \rho^2 = \rho \Rightarrow \frac{1}{\hbar^2} \langle \vec{S} \rangle^2 = \frac{1}{4}$$

nur erfüllt für maximal polarisierten Spin:

Darstellung eines (beliebig im Raum) polarisierten Spins:

$|\psi_{spinpolarized}\rangle = \cos \frac{\vartheta}{2} e^{-i\frac{\varphi}{2}} |+\rangle + \sin \frac{\vartheta}{2} e^{+i\frac{\varphi}{2}} |-\rangle$ geschrieben in der Eigenbasis von S_z :

$$|+\rangle \hat{=} EW + \frac{\hbar}{2} \quad \text{und} \quad |-\rangle \hat{=} EW - \frac{\hbar}{2}$$

$$\vec{S} \cdot \vec{v} = S_x \sin \vartheta \cos \varphi + S_y \sin \vartheta \sin \varphi + S_z \cos \vartheta = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \vartheta & \sin \vartheta e^{-i\varphi} \\ \sin \vartheta e^{i\varphi} & -\cos \vartheta \end{pmatrix}$$

Spin-Observable in der $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ Basis

Diagonalisierung gibt die Form der (in bel. Richtung) maximal spinpolarisierten Zustände in der $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ Basis von S_z :

\rightarrow für $EW + \frac{\hbar}{2}$: EV $\frac{x}{y} = \frac{\cos \vartheta + 1}{\sin \vartheta e^{i\varphi}}$ entspricht der oben angeg. Form $|\psi_{spinpolarized}\rangle$

Dieser hat eine Dichtematrix der Form:

$$\rho = \begin{pmatrix} \cos^2 \frac{\vartheta}{2} & \sin \frac{\vartheta}{2} \cos \frac{\vartheta}{2} e^{-i\varphi} \\ \sin \frac{\vartheta}{2} \cos \frac{\vartheta}{2} e^{i\varphi} & \sin^2 \frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix}$$

$$\text{Nachrechnen zeigt } \langle \vec{S} \rangle = [Tr(\rho \vec{S})]^2 = \frac{\hbar^2}{4}$$

Thermisches Quantensystem:

$$\rho = \frac{1}{Z} e^{-\frac{H}{k_B T}}, \quad Z = Tr[e^{-\frac{H}{k_B T}}]$$

1. Hamilton-Operator

$$H = -\vec{M} \cdot \vec{B} = -(\gamma \mu_B \vec{S}) \cdot \vec{B} = -\gamma \mu_B S_z B \quad \text{da } \vec{B} \parallel \vec{Z} \Rightarrow \rho = \dots$$

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} \approx 5,8 \cdot 10^{-5} \frac{eV}{T} \quad \text{Bohr'sches Magneton}$$

$$2. \quad Z = Tr(e^{\frac{\gamma \mu_B B}{k_B T} S_z}) = e^{\frac{\gamma \mu_B B}{k_B T} \frac{\hbar}{2}} + e^{-\frac{\gamma \mu_B B}{k_B T} \frac{\hbar}{2}} = 2 \cosh\left(\frac{\hbar \gamma \mu_B B}{2 k_B T}\right) =: 2 \cosh(a)$$

$$\begin{aligned} \langle S_x \rangle &= \frac{\hbar}{2Z} Tr[\rho \cdot \sigma_x] = \frac{\hbar}{4 \cosh(a)} Tr[e^{a\sigma_z} \sigma_x] \\ &= \frac{\hbar}{4 \cosh(a)} Tr \left[\sum \frac{1}{n!} a^n \sigma_z^n \sigma_x \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{\hbar}{4 \cosh(a)} \text{Tr} \left[\sum_{n=2l} \frac{1}{n!} a^n \sigma_x + \sum_{n=2l+1} \frac{a^n}{n!} \sigma_y \right] \\
 &= 0 \text{ (da alle Pauli-Matrizen spurlos)}
 \end{aligned}$$

$$\langle S_y \rangle = 0 \text{ (analog)}$$

$$\begin{aligned}
 \langle S_z \rangle &= \frac{\hbar}{4 \cosh(a)} \text{Tr} \left[\sum_{n=2l} \frac{1}{n!} a^n \sigma_z + \sum_{n=2l+1} \frac{a^n}{n!} \right] \\
 &= \frac{\hbar \sinh(a)}{2 \cosh(a)} = \frac{\hbar}{2} \tanh(a)
 \end{aligned}$$

$$x_{mag} = \left\langle \frac{\partial M(B)}{\partial H_{mag}} \right\rangle = \mu_0 \gamma_{\mu_B} \frac{\partial \langle S_z \rangle}{\partial B} = \frac{\hbar^2 \mu_0 \gamma_{\mu_B}^2 B^2}{4 k_B T} \frac{1}{\cosh^2(a)}$$

B.10.3 Aufgabe 38: Identische Teilchen im Potentialkasten

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

Einteilchenenergien: $E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} = n^2 k$

1.) Unterscheidbare Teilchen (ohne weitere Einschränkung):

↔ Gesamtwellenfunktion ist Produkt der Einzelwellenfunktionen

$$\psi_{n_1 n_2}(x_1, x_2) = \psi_{n_1}(x_1) \psi_{n_2}(x_2)$$

$$E_{n_1 n_2} = (n_1^2 + n_2^2)k$$

GZ: $\psi_{11} = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{\pi x_1}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi x_2}{a}\right)$, $E_{11} = 2k$ (keine Entartung des GZ)

1.AZ:

$$\left. \begin{aligned}
 \psi_{12} &= \frac{2}{a} \sin\left(\frac{\pi x_1}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi x_2}{a}\right) \\
 \psi_{21} &= \frac{2}{a} \sin\left(\frac{2\pi x_1}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi x_2}{a}\right)
 \end{aligned} \right\} \text{doppelt entartet, } E_{12} = E_{21} = 5k$$

2.) Bosonen:

↔ der Zustand muss symmetrisch unter Vertauschung $x_1 \leftrightarrow x_2$ sein

GZ: $\psi_{GZ}^B = \psi_{11}$ ist symmetrisch, $E_{GZ}^B = E_{11} = 2k$

1.AZ: Symmetrische Kombination

$\psi_{1AZ}^B = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{12} + \psi_{21})$, $E_{1AZ}^B = 5k$ (die Entartung aus (1) ist aufgehoben)

3.) Fermionen:

↔ der Zustand muss antisymmetrisch unter Vertauschung $x_1 \leftrightarrow x_2$ sein

→ Aus ψ_{11} ist ein solcher Zustand nicht zu konstruieren

GZ: $\psi_{GZ}^F = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{12} - \psi_{21})$, $E_{GZ}^F = 5k$

1.AZ:

$\psi_{1AZ}^F = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{13} - \psi_{31})$, $E_{1AZ}^F = 10k$ (nicht entartet)

B.10.4 Aufgabe 39: Drehimpulsaddition

Basiswechsel zwischen 2 vollständigen Sätzen kommutierender Observablen bzw. zwischen deren Eigenbasen

$$O_1 = \{\vec{S}_1^2, S_{1z}, \vec{S}_2^2, S_{2z}\} \rightarrow \{\vec{S}_1^2, \vec{S}_2^2, \vec{S}^2, S_z\} = O_2$$

$$B_1 = \{|\epsilon_1, \epsilon_2\rangle | \epsilon_i = \pm\} \rightarrow \{|S, M\rangle\} = B_2$$

wobei $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$, $S_z = S_{1z} + S_{2z}$

1. Nachweis, dass \vec{S} ein Drehimpulsoperator ist (erfüllt die Drehimpulsalgebra)

$$\begin{aligned} [S_x, S_y] &= [S_{1x} + S_{2x}, S_{1y} + S_{2y}] \\ &= [S_{1x}, S_{1y}] + [S_{2x}, S_{2y}] \text{ (wegen } O_1) \\ &= i\hbar S_{1z} + i\hbar S_{2z} \text{ (da } \vec{S}_1, \vec{S}_2 \text{ Drehimp.)} \\ &= i\hbar S_z \text{ (andere analog)} \end{aligned}$$

2. Nachweis, dass die Observablen der neuen Basis kommutieren:

$$[\vec{S}^2, \vec{S}_1^2] = [\vec{S}^2, \vec{S}_2^2] = 0 \text{ da } [\vec{S}_i, \vec{S}_j] = 0$$

$$[S_z, \vec{S}_1^2] = [S_z, \vec{S}_2^2] = 0$$

$$\text{Mit } \vec{S}^2 = \vec{S}_1^2 + \vec{S}_2^2 + 2\vec{S}_1\vec{S}_2$$

$$\begin{aligned} [\vec{S}^2, S_{1z}] &= 2[\vec{S}_1\vec{S}_2, S_{1z}] = -[\vec{S}^2, S_{2z}] \text{ damit ist } [\vec{S}, S_z] = 0 \\ &= 2[S_{1x}S_{2x} + S_{1y}S_{2y}, S_{1z}] \\ &= 2i\hbar(-S_{1y}S_{2x} + S_{1x}S_{2y}) \end{aligned}$$

3. Vollständigkeit des Satzes O_2 :

Wir konstruieren explizit die Eigenvektoren $|S, M\rangle$ als Linearkombinationen der Basisvektoren $|\epsilon_1, \epsilon_2\rangle_{\epsilon=\pm}$

(a) Da die Observablen \vec{S}_1^2 und \vec{S}_2^2 bezüglich aller Basisvektoren den Eigenwert $\frac{3}{4}\hbar^2$ haben überträgt sich diese Eigenschaft auf deren Linearkombination $|S, M\rangle$

$$\begin{aligned} \vec{S}_1^2|\epsilon_1, \epsilon_2\rangle &= \vec{S}_2^2|\epsilon_1, \epsilon_2\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\epsilon_1, \epsilon_2\rangle \quad \forall \epsilon_{1,2} \\ \Rightarrow \vec{S}_1^2|S, M\rangle &= \vec{S}_2^2|S, M\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|S, M\rangle \end{aligned}$$

(b) Da $S_z = S_{1z} + S_{2z}$ mit allen Observablen in O_1 vertauscht, sind die Basisvektoren $|\epsilon_1, \epsilon_2\rangle$ auch Eigenzustände von S_z (*)

$$S_z|\epsilon_1, \epsilon_2\rangle = (S_{1z} + S_{2z})|\epsilon_1, \epsilon_2\rangle = \underbrace{\frac{\hbar}{2}(\epsilon_1 + \epsilon_2)}_{\hbar M \text{ (Magnetquantenzahl zu } \vec{S})} |\epsilon_1, \epsilon_2\rangle$$

Zulässige Werte für M:

aus $\epsilon_i = \pm 1 \Rightarrow M = -1, 0, 1$

$M = 1$: EZ $|+, +\rangle$
 $M = -1$: EZ $|-, -\rangle$ } nicht entartet

$M = 0$: EZ $|-, +\rangle, |+, -\rangle$ } 2-fach entartet

\Rightarrow Darstellung von S_z in der Basis B_1 :

$$S_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \hbar \quad \text{vgl. (*), } S_z \text{ ist also bereits diagonal!}$$

(c) Darstellung und anschließende Diagonalisierung der Observable \vec{S}^2 :

i.) Darstellung von \vec{S}^2 durch Leiteroperatoren:

$$\text{Mit } \vec{S}^2 = \vec{S}_1^2 + \vec{S}_2^2 + 2\vec{S}_1\vec{S}_2$$

$$S_{i\pm} = S_{ix} \pm iS_{iy}, S_+|+\rangle = S_-|-\rangle = 0 \text{ etc.}$$

$$\vec{S}^2 = \vec{S}_1^2 + \vec{S}_2^2 + 2S_{1z}S_{2z} + 2S_{1+}S_{2-} + 2S_{1-}S_{2+}$$

$$S^2|+, +\rangle = 2\hbar^2|+, +\rangle$$

$$S^2|+, -\rangle = \left(\frac{3}{4}\hbar^2 + \frac{3}{4}\hbar^2\right)|+, -\rangle - \frac{\hbar^2}{2}|+, -\rangle + \hbar^2|-, +\rangle = \hbar^2[|+, -\rangle + |-, +\rangle]$$

$$S^2|-, +\rangle = \dots = \hbar^2[|-, +\rangle + |+, -\rangle]$$

$$S^2|-, -\rangle = \dots = 2\hbar^2|-, -\rangle$$

Matrixdarstellung in der $|\epsilon_1, \epsilon_2\rangle$ -Basis:

$$(\vec{S}^2) = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \hbar^2 \rightarrow \text{nicht diagonal}$$

\hookrightarrow Diagonalisierung von (\vec{S}^2) führt zur Eigenbasis B_2 der $|S, M\rangle$

ii.) Diagonalisierung der Untermatrix:

$$(\vec{S}^2)_0 = \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \text{ im Unterraum } \begin{pmatrix} |+, -\rangle \\ |-, +\rangle \end{pmatrix}$$

$$(1 - \lambda)^2 - 1 = 0 \Rightarrow \lambda_1 = 0 \text{ und } \lambda_2 = 2$$

EW:

$$2\hbar^2 \hat{=} EV \frac{1}{\sqrt{2}}[|+, -\rangle + |-, +\rangle]$$

$$0 \hat{=} \frac{1}{\sqrt{2}}[|+, -\rangle - |-, +\rangle]$$

EV zu \vec{S}^2, S_z :

$$S = 2\hbar^2 :$$

Triplet

$$M = 1 \quad |1, 1\rangle = |+, +\rangle$$

$$M = 0 \quad |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|+, -\rangle + |-, +\rangle]$$

$$M = -1 \quad |1, -1\rangle = |-, -\rangle$$

$$S = 0 :$$

Singulett

$$M = 0 \quad |0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|+, -\rangle - |-, +\rangle]$$

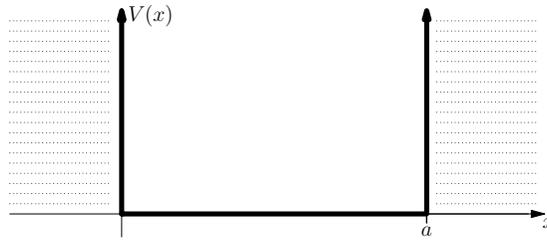


Abbildung B.4: Potentialkasten

B.11 Blatt 11

B.11.1 Aufgabe 40: Zwei Teilchen im unendlich tiefen Potentialkasten (vgl. Aufgabe 38)

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle = \langle x_1^2 \rangle + \langle x_2^2 \rangle - 2\langle x_1 x_2 \rangle$$

Einteilchenzustände im ∞ -tiefen Potentialtopf: $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$

1. Unterscheidbare Teilchen:

$$\psi_{n_1 n_2}(x_1, x_2) = \psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2)$$

$$\begin{aligned} \langle x_1^2 \rangle &= \int_0^a x_1^2 |\psi_{n_1}(x_1)|^2 dx_1 \underbrace{\int_0^a |\psi_{n_2}(x_2)|^2 dx_2}_{1 \text{ wegen Normierung}} \\ &= \frac{2}{a} \int_0^a x_1^2 \sin^2\left(\frac{n_1\pi}{a}x_1\right) dx_1 \\ &= \frac{2}{a} \frac{1}{12} \frac{a^3}{\pi^2 n_1^2} (-3\pi n_1 + 2\pi^3 n_1^3) \\ &= \frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{2\pi^2 n_1^2} \\ \langle x_2^2 \rangle &= \dots = \frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{2\pi^2 n_2^2} \\ \langle x_1 x_2 \rangle &= \int_0^a x_1 |\psi_{n_1}(x_1)|^2 dx_1 \int_0^a x_2 |\psi_{n_2}(x_2)|^2 dx_2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= \left[\frac{a}{2}\right]^2 = \frac{a^2}{4} \\ \langle (x_1 - x_2)^2 \rangle &= a^2 \left[\frac{2}{3} - \frac{1}{2\pi^2 n_1^2} - \frac{1}{2\pi^2 n_2^2} - \frac{1}{2} \right] \end{aligned}$$

2. Ununterscheidbare Bosonen mit Spin 0:

Gesamtwellenfunktion symmetrisch (+):

[Rechnung zugleich für $\begin{matrix} \text{symmetrischen} & (+) \\ \text{antisymmetrischen} & (-) \end{matrix}$ Fall]

$$\psi_{n_1 n_2}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2) \pm \psi_{n_1}(x_2)\psi_{n_2}(x_1))$$

$$\begin{aligned} \langle x_1^2 \rangle &= \frac{1}{2} \left[\int_0^a x_1^2 |\psi_{n_1}(x_1)|^2 dx_1 \cdot 1 + \int_0^a x_1^2 |\psi_{n_2}(x_1)|^2 dx_1 \cdot 1 \pm \right. \\ &\quad \left. \pm \int_0^a x_1^2 \psi_{n_1}^*(x_1)\psi_{n_2}(x_1) dx_1 \int_0^a \psi_{n_2}^*(x_2)\psi_{n_1}(x_2) dx_2 \pm \int_0^a x_1^2 \psi_{n_2}^*(x_1)\psi_{n_1}(x_1) dx_1 \int_0^a \psi_{n_1}^*(x_2)\psi_{n_2}(x_2) dx_2 \right] \\ &= \frac{1}{2} \left[\frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{2\pi^2 n_1^2} + \frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{2\pi^2 n_2^2} \pm 0 \pm 0 \right] = \langle x_2^2 \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle x_1 x_2 \rangle &= \frac{1}{2} \left[\int_0^a x_1 |\psi_{n_1}(x_1)|^2 dx_1 \int_0^a x_2 |\psi_{n_2}(x_2)|^2 dx_2 + \int_0^a x_1 |\psi_{n_2}(x_1)|^2 dx_1 \int_0^a x_2 |\psi_{n_1}(x_2)|^2 dx_2 \pm \right. \\ &\quad \left. \pm \int_0^a x_1 \psi_{n_1}^*(x_1)\psi_{n_2}(x_1) dx_1 \int_0^a x_2 \psi_{n_2}^*(x_2)\psi_{n_1}(x_2) dx_2 \pm \int_0^a x_1 \psi_{n_2}^*(x_1)\psi_{n_1}(x_1) dx_1 \int_0^a x_2 \psi_{n_1}^*(x_2)\psi_{n_2}(x_2) dx_2 \right] \\ &= \frac{1}{2} \left[\left[\frac{a}{2}\right]^2 + \left[\frac{a}{2}\right]^2 \pm 2 \left(\frac{4an_1 n_2}{\pi^2}\right)^2 \frac{(1-(-1)^{n_1+n_2})^2}{(n_1^2-n_2^2)^2} \right] \end{aligned}$$

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle = a^2 \left[\frac{2}{3} - \frac{1}{2\pi^2 n_1^2} - \frac{1}{2\pi^2 n_2^2} - \frac{1}{2} \mp 2 \left(\frac{4an_1 n_2}{\pi^2}\right)^2 \frac{(1-(-1)^{n_1+n_2})^2}{(n_1^2-n_2^2)^2} \right]$$

3. Ununterscheidbare Fermionen mit Spin $\frac{1}{2}$:

$$\Psi_{n_1 n_2}(x_1, x_2, s_1, s_2) = \psi_{n_1 n_2}(x_1, x_2)\chi(s_1, s_2)$$

Gesamtwellenfunktion, muss für Fermionen antisymmetrisch sein

Im Spinsektor:

- (a) Singulett: $\chi(s_1, s_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_1 \downarrow_2\rangle - |\downarrow_1 \uparrow_2\rangle)$ ist antisymmetrisch
 $\Rightarrow \psi_{n_1 n_2}(x_1, x_2)$: symmetrisch (+)
- (b) Triplett: $\chi(s_1, s_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_1 \downarrow_2\rangle + |\downarrow_1 \uparrow_2\rangle)$

$$\Rightarrow \psi_{n_1 n_2}(x_1, x_2) : \text{antisymmetrisch (-)}$$

Vergleich der beiden Zustände:

$$\begin{array}{ccc} \underline{\text{Symmetrische Orts-WF}} & & \underline{\text{Antisymmetrische Orts-WF}} \\ \langle (x_1 - x_2)^2 \rangle_{sym} & < & \langle (x_1 - x_2)^2 \rangle_{antisym} \end{array}$$

d.h. die Fermionen sind im Singulett-Zustand näher beieinander als im Triplett-Zustand

Im H_2 -Molekül beschreibt man so bindende und antibindende Singulett, Triplett Elektronenzustände.

B.11.2 Aufgabe 41: Zwei wechselwirkende Teilchen im unendlich tiefen Potentialkasten

In Störungstheorie erster Ordnung gilt

$$\Delta E = \langle \psi_{n_1 n_2}(x_1, x_2) | V(x_1, x_2) | \psi_{n_1 n_2}(x_1, x_2) \rangle$$

$$1. \psi_{11}(x_1, x_2) = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{\pi}{a}x_1\right) \sin\left(\frac{\pi}{a}x_2\right) \quad (GZ)$$

$$\begin{aligned} \Delta E^{GZ} &= g \int_0^a dx_1 dx_2 |\psi_{11}(x_1, x_2)|^2 \delta(x_1 - x_2) \\ &= g \int dx_1 |\psi_{11}(x_1, x_1)|^2 \\ &= g \frac{4}{a^2} \int dx_1 \sin^4\left(\frac{\pi}{a}x_1\right) = \frac{3}{2} \frac{g}{a} \end{aligned}$$

1. angeregter Zustand:

$$\left. \begin{array}{l} \psi_{12}(x_1, x_2) = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{\pi}{a}x_1\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a}x_2\right) = \phi_1 \\ \psi_{21}(x_1, x_2) = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{2\pi}{a}x_1\right) \sin\left(\frac{\pi}{a}x_2\right) = \phi_2 \end{array} \right\} \text{2-fach entartet}$$

Darstellung der WF im entarteten Unterraum

$$\begin{pmatrix} \langle \phi_1 | V | \phi_1 \rangle & \langle \phi_1 | V | \phi_2 \rangle \\ \langle \phi_2 | V | \phi_1 \rangle & \langle \phi_2 | V | \phi_2 \rangle \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}}_M \cdot I$$

$$I = \frac{4g}{a^2} \int \sin^2\left(\frac{\pi}{a}x_1\right) \sin^2\left(\frac{2\pi}{a}x_1\right) dx_1$$

Diagonalisierung von M ergibt

$$\hat{e}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 + \phi_2), \hat{e}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 - \phi_2)$$

In den Zuständen \hat{e}_1 und \hat{e}_2 wird nun Störungstheorie betrieben:

$$\Delta E_{\hat{e}_1}^{1,AZ} = \langle \hat{e}_1 | V(x_1, x_2) | \hat{e}_1 \rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 \cdot 4 \cdot I = 2\frac{g}{a}, \quad \Delta E_{\hat{e}_2}^{1,AZ} = 0$$

d.h. es findet eine Aufspaltung zuvor entarteter Niveaus statt.

2. Bosonen:

$$\hookrightarrow \psi_B^{GZ}(x_1, x_2) = \psi_{11}(x_1, x_2) \Rightarrow \Delta E^{GZ} = \frac{3}{2}\frac{g}{a} \text{ s.o.}$$

$$\hookrightarrow \psi_B^{AZ}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{12} + \psi_{21}) \Rightarrow \Delta E^{AZ} = 2\frac{g}{a} \text{ s.o.}$$

3. Fermionen mit Spin $\frac{1}{2}$:

$$\underbrace{\Psi(x_1, x_2)}_{\text{GesamtWF}} = \underbrace{\psi(x_1, x_2)}_{\text{OrtsWF}} + \underbrace{\chi(x_1, x_2)}_{\text{SpinWF}} \text{ muss antisym. unter } 1 \leftrightarrow 2 \text{ sein.}$$

GZ:

$\chi_S(s_1, s_2) | \uparrow\downarrow \rangle - | \downarrow\uparrow \rangle$ Singulett (antisymmetrisch)

$$\psi_F^{GZ}(x_1, x_2) = \underbrace{\psi_{11}(x_1, x_2)}_{\text{symm. WF mit niedrigster Energie}} \Rightarrow \Delta E^{GZ} = \frac{3}{2}\frac{g}{a} \text{ s.o.}$$

1.AZ:

$$\psi_F^S(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{12} + \psi_{21}) \underbrace{\chi_S(s_1, s_2)}_{\text{Singulett}} \Rightarrow \Delta E^S = 2\frac{g}{a} \text{ s.o. (symm. OrtsWF)}$$

$$\psi_F^T(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{12} - \psi_{21}) \underbrace{\chi_T(s_1, s_2)}_{\text{Triplet (symm.)}} \Rightarrow \Delta E^T = 0 \text{ (antis. OrtsWF)}$$

$$\left(\begin{array}{l} |\uparrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle, \\ |\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle \end{array} \right)$$

B.11.3 Aufgabe 42: Anharmonischer Oszillator

Verwende Erzeuger-/Vernichtoperatoren des HO:

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} - \frac{ip}{\sqrt{2m\hbar\omega}}, \quad a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} + \frac{ip}{\sqrt{2m\hbar\omega}}$$

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a^\dagger + a) \quad [a, a^\dagger] = 1$$

$$\begin{aligned} x^3 &= \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{3}{2}} (a^\dagger + a)^3 \\ &= \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{3}{2}} (a^{\dagger 3} + 2a^\dagger a a^\dagger + a^2 a^\dagger + a^\dagger + a^{\dagger 2} a + 2a^\dagger a^2 + a + a^3) \\ &= \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{3}{2}} (a^{\dagger 3} + 3N a^\dagger + a^3 + 3(N+1)a) \end{aligned}$$

$$H_{int} = g\hbar\omega x^3, \quad E_n = E_n^0 + \delta E_n^{(1)} + \delta E_n^{(2)} + \dots$$

Energieverschiebung in 1.Ordnung:

$$\delta E^{(1)} = \langle \psi_n | g\hbar\omega x^3 | \psi_n \rangle = 0 \text{ da } x^3 \text{ keine Anzahloperatoren enthält.}$$

Energieverschiebung in 2.Ordnung:

$$\delta E^{(2)} = \sum_{n \neq n'} \frac{|\langle \psi_{n'} | H_{int} | \psi_n \rangle|^2}{E_n^0 - E_{n'}^0}$$

<i>koppelnde Matrixelemente:</i>	$E_n^0 - E_{n'}^0$
$g\hbar\omega \underbrace{\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{3}{2}} \langle \psi_{n+3} a^{\dagger 3} \psi_n \rangle}_C = C \cdot \sqrt{n+1}\sqrt{n+2}\sqrt{n+3}$ <p>mit $a^\dagger \psi_n\rangle = \sqrt{n+1} \psi_{n+1}\rangle, a \psi_n\rangle = \sqrt{n} \psi_{n-1}\rangle$</p>	$-3\hbar\omega$
<i>Analog:</i>	
$\langle \psi_{n-3} C a^3 \psi_n \rangle = C \sqrt{n}\sqrt{n-1}\sqrt{n-2}$	$3\hbar\omega$
$\langle \psi_{n+1} 3N a^\dagger \psi_n \rangle = 3C \sqrt{n+1}(n+1)$	$-\hbar\omega$
$\langle \psi_{n-1} 3(N+1)a \psi_n \rangle = 3C \sqrt{nn}$	$\hbar\omega$

$$\begin{aligned}\delta E_n^{(2)} &= \frac{1}{\hbar\omega} C^2 \left[-\frac{1}{3}(n+1)(n+2)(n+3) + \frac{1}{3}n(n-1)(n-2) - 2(n+1)^3 + 3n^3 \right] \\ &= \frac{1}{\hbar\omega} C^2 [-3n^2 - 3n - 2 - 27n^2 - 27n - 9] \\ &= -\frac{C^2}{\hbar\omega} 30\left(n^2 + n + \frac{1}{4}\right) - \frac{C^2}{\hbar\omega} \frac{7}{2}\end{aligned}$$

Explizite Energiedifferenz zweier benachbarter Niveaus E_n, E_{n+1} :

$$\Delta E_n := E_{n+1} - E_n = E_{n+1}^0 - E_n^0 + \delta E_{n+1}^{(2)} - \delta E_n^{(2)} = \Delta E_n^0 - \frac{C^2}{\hbar\omega} 30(2n+2)$$

B.11.4 Aufgabe 43: Feinstruktur des Wasserstoffatoms

Entwicklung der kin. Energie in Potenzen des relativistischen Impulses $p = m\gamma v$

Relativistische Energie-Impuls-Beziehung:

$$E^2 = p^2 c^2 + E_0^2, T = E - E_0 \text{ (kinetische Energie T)}$$

$$\Rightarrow T = \sqrt{p^2 c^2 + E_0^2} - E_0 = E_0 \sqrt{1 + \frac{p^2 c^2}{E_0^2}} - E_0$$

$$\approx E_0 \left(1 + \frac{1}{2} \frac{p^2 c^2}{E_0^2} - \frac{1}{8} \frac{p^4 c^4}{E_0^4} + \dots - 1 \right) \approx \frac{1}{2} \frac{p^2}{m} - \frac{1}{8} \frac{p^4}{m^3 c^2}$$

$$H_{rel} = -\frac{1}{8} \frac{p^4}{m^3 c^2} \text{ ist der erste Korrekturterm}$$

Störungstheorie in 1. Ordnung:

$$\Delta E_{rel}^{(1)} \stackrel{1.Ord}{=} \langle \psi | H_{rel} | \psi \rangle = -\frac{1}{8m^3 c^2} \langle \psi | \hat{p}^2 | \hat{p}^2 \psi \rangle$$

(da \hat{p}^2 Operator der kinetischen Energie (ohne rel. Korrekturen) ist läßt sich schreiben $p^2 = 2m(E - V)$, $V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$ (H-Atom))

$$\Rightarrow \Delta E_{rel}^{(1)} = -\frac{1}{2mc^2} \langle (E - V)^2 \rangle = -\frac{1}{2mc^2} (E^2 - 2E\langle V \rangle + \langle V^2 \rangle)$$

Auswertung der Erwartungswerte in den ungestörten Eigenfunktionen $|nlm\rangle$

$$\langle V \rangle = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0} \langle \frac{1}{r} \rangle = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{n^2 a}$$

(Aus Virialsatz der QM: Sei $H = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r})$ mit $V(\vec{r})$ nur vom Ort abhängig. Dann $[H, \vec{x} \cdot \vec{p}] = -i\hbar \left(\frac{p^2}{m} - \vec{x} \cdot \vec{\nabla} V(\vec{x}) \right)$)

Da für Eigenfunktionen $|\psi_n\rangle$ von H

$$\langle \psi_n | [H, \vec{x} \cdot \vec{p}] | \psi_n \rangle = 0 \Rightarrow \langle \psi_n | \frac{p^2}{m} | \psi_n \rangle - \langle \psi_n | \vec{x} \cdot \vec{\nabla} V(\vec{x}) | \psi_n \rangle = 0 \text{ (Virialsatz)}$$

für Coulomb-Potential: $\vec{\nabla} \frac{1}{r} = \frac{-\vec{x}}{r^3}$

$$\Rightarrow 2\langle nlm | H | nlm \rangle + \langle nlm | \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} | nlm \rangle = 0 \text{ mit } E_n = \frac{-1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{2an^2}, a = 4\pi\epsilon_0 \frac{\hbar^2}{me^2} \text{ (Bohr-Radius)}$$

$$\text{damit } \langle nlm | \frac{1}{r} | nlm \rangle = \frac{1}{n^2 a} \Rightarrow \langle V \rangle$$

$$\text{Angabe: } \langle nlm | \frac{1}{r^2} | nlm \rangle = \frac{1}{(l+\frac{1}{2})n^3 a^2} \Rightarrow \langle V^2 \rangle$$

$$\Rightarrow \Delta E_{rel}^{(1)} = \frac{-1}{2mc^2} \left[E_n^2 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{2E_n}{n^2 a} + \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{1}{(l+\frac{1}{2})n^3 a^2} \right] = \frac{-E_n^2}{2mc^2} \left[\frac{4n}{l+\frac{1}{2}} - 3 \right]$$

B.11.5 Aufgabe 44: 3-dim HO mit Störung (vgl. Aufgabe 27)

1. Störungstheorie für Grundzustand: (nicht entartet)

$$\Delta E_{GZ}^{(0)} = \langle \psi_0 | H_{anh} | \psi_0 \rangle$$

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a_x^\dagger + a_x), x^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} (a_x^{\dagger 2} + 2a_x^\dagger a_x + 1 + a_x^2)$$

y, z analog \rightarrow wegen der Terme y, z verschwinden alle GZ-Matrixelemente, $\Delta E_{GZ}^{(0)} = 0$

2. Störungstheorie für angeregten Zustand: (3-fach entartet)

Darstellung von H_{anh} im Unterraum der Zustände 1. Anregung:

$$|\psi_i^{1.Anr.}\rangle = a_i^\dagger |0\rangle, i = x, y, z$$

$$H_{anh} = \begin{pmatrix} \langle 0 | a_x \\ \langle 0 | a_y \\ \langle 0 | a_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_x^\dagger |0\rangle & a_y^\dagger |0\rangle & a_z^\dagger |0\rangle \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \hbar\omega g$$

Vordiagonalisierung im yz -Unterraum:

$$\hat{e}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_y^\dagger + a_z^\dagger)|0\rangle \quad (\lambda = +1)$$

$$\hat{e}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_y^\dagger - a_z^\dagger)|0\rangle$$

Störungstheorie in 1. Ordnung bzgl. der Zustände \hat{e}_1 und \hat{e}_2 :

$$\begin{aligned} \Delta E_{\hat{e}_1}^{(1)} &= \frac{g}{2} \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2} \underbrace{\langle 0|(a_y + a_z)}_{\langle \hat{e}_1|} \cdot \underbrace{1}_{\text{Betrag aus } x} (a_y^\dagger + a_y)(a_z^\dagger + a_z) \underbrace{\langle a_y^\dagger + a_z^\dagger|0\rangle}_{|\hat{e}_1\rangle} \\ &= \frac{\hbar^2 g}{8m^2\omega^2} (1 + 1) = \frac{\hbar^2 g}{4m^2\omega^2} \\ \Delta E_{\hat{e}_2}^{(1)} &= \frac{g}{2} \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2} \underbrace{\langle 0|(a_y - a_z)}_{\langle \hat{e}_2|} \cdot 1 (a_y^\dagger + a_y)(a_z^\dagger + a_z) \underbrace{\langle a_y^\dagger - a_z^\dagger|0\rangle}_{|\hat{e}_2\rangle} \\ &= -\frac{\hbar^2 g}{4m^2\omega^2} \end{aligned}$$

d.h. es findet eine Aufspaltung der Unterniveaus statt.

B.12 Blatt 12

B.12.1 Aufgabe 45: Drehimpulsalgebra und Clebsch-Gordan-Koeffizienten

Wiederholung:

Eigenschaften von Drehimpulsen: (allg)

- $[J_i, J_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}J_k$ mit J_i Komponenten des Vektoroperators \vec{J}
- $[\vec{J}^2, J_i] = 0, i = 1, 2, 3$ d.h. \vec{J}^2 und ein J_i (z.B. J_z) sind gleichzeitig diagonalisierbar. In dieser Eigenbasis gilt
- $\vec{J}^2|J, M\rangle = \hbar^2 J(J-1)|J, M\rangle, J_z|J, M\rangle = \hbar M|J, M\rangle$ wobei

J : „Drehimpulsquantenzahl“ und M : „magnetische Quantenzahl“

- Definition von Leiteroperatoren: $J_{\pm} := J_x \pm iJ_y$

1. Normierung des Zustandes $J_-|J, M\rangle$:

Es seien $|J, M\rangle$ normierte Eigenzustände

(a) $|\psi\rangle = J_-|J, M\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle J, M|J_+ \underbrace{J_-|J, M\rangle}_{\psi} &= \langle J, M|(J_x + iJ_y)(J_x - iJ_y)|J, M\rangle \\ &= \langle J, M|J_x^2 + i[J_y, J_x] + J_y^2|J, M\rangle \\ &= \langle J, M|J^2 - J_z^2 + \hbar J_z|J, M\rangle \\ &= \hbar^2(J^2 - M(M-1)) \underbrace{\langle J, M|J, M\rangle}_1 \end{aligned}$$

\Rightarrow Aussage

(b) $|\psi\rangle = J_+|J, M\rangle$ analog.

2. Addition von Drehimpulsen:

$$\text{VSKO1: } \{\vec{J}_1^2, \vec{J}_2^2, J_{1,z}, J_{2,z}\} \rightarrow \text{VSKO2: } \underbrace{\{\vec{J}_1^2, \vec{J}_2^2\}}_* \underbrace{\{\vec{J}, J_z\}}_{**}, \vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$$

- *) unveränderte QZ, werden i. allg. nicht notiert
- **) „Charakterisierende“ QZ (in den Zuständen notiert)

„Abzählen“ der zulässigen Eigenvektoren:

(I) Im VSKO1:

Teilchen 1: \vec{J}_1 habe QZ j_1 : $m_1 = -j_1 \dots j_1 \hat{=} 2j_1 + 1$

Teilchen 2: \vec{J}_2 habe QZ j_2 : $m_2 = -j_2 \dots j_2 \hat{=} 2j_2 + 1$

\Rightarrow Anzahl der Produktzustände $|\{|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle\}| = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$

(II) Im VSKO2:

Zulässige Werte für J, M : $|j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2, -J \leq M \leq J$

Abzählen aller möglichen Paare (J, M)

$$\begin{aligned} \sum_{J, M \text{ zulaessig}} \cdot 1 &= \sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (2J+1) \quad \text{setze } j_1 \geq j_2, J = j_1 - j_2 + i \\ &= \sum_{i=0}^{2j_2} [2(j_1 - j_2 + i) + 1] \\ &= [2(j_1 - j_2) + 1](2j_2 + 1) + 2 \frac{2j_2(2j_2 + 1)}{2} \\ &= (2j_2 + 1)(2j_1 + 1) \checkmark \end{aligned}$$

3. Addition: $|l, \frac{1}{2}, m_l, m_s\rangle \rightarrow |l, \frac{1}{2}, J, M\rangle, m_l = -l \dots l, m_s = \pm \frac{1}{2}$

(a) Für Zustand $|J = l + \frac{1}{2}, M = l - \frac{1}{2}\rangle$:

Maximal ausgerichteter Zustand:

$$(*) \left| J = l + \frac{1}{2}, M = l - \frac{1}{2} \right\rangle = \left| l, \frac{1}{2}, l, \frac{1}{2} \right\rangle$$

Konstruktion der weiteren Zustände durch Anwenden von

$$\underbrace{J_-}_{\text{auf linke Seite}} = \underbrace{L_- \otimes \mathbb{1}_s + \mathbb{1}_l \otimes S_-}_{\text{auf rechte Seite von (*)}}$$

$$j(j+1) - m(m-1) = (j+m)(j-m+1)$$

$$\hbar\sqrt{2l+1} |J = l + \frac{1}{2}, M = l - \frac{1}{2}\rangle = \hbar\sqrt{2l} |l, \frac{1}{2}, l-1, \frac{1}{2}\rangle + \hbar |l, \frac{1}{2}, l, -\frac{1}{2}\rangle$$

$$|J = l + \frac{1}{2}, M = l - \frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{2l}{2l+1}} |l, \frac{1}{2}, l-1, \frac{1}{2}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2l+1}} |l, \frac{1}{2}, l, -\frac{1}{2}\rangle$$

Clebsch-Gordan-Koeffizienten:

$$\langle l, \frac{1}{2}, l-1, \frac{1}{2} | J = l + \frac{1}{2}, M = l - \frac{1}{2} \rangle = \sqrt{\frac{2l}{2l+1}} \text{ und}$$

$$\langle l, \frac{1}{2}, l, -\frac{1}{2} | J = l + \frac{1}{2}, M = l - \frac{1}{2} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2l+1}}$$

(b) Für den Zustand $|J = l - \frac{1}{2}, M = l - \frac{1}{2}\rangle$:

Ansatz für den maximalen Zustand:

- zu $M = l - \frac{1}{2}$ korrespondieren die Zustände

$$|l, \frac{1}{2}, l, -\frac{1}{2}\rangle, |l, \frac{1}{2}, l-1, \frac{1}{2}\rangle$$

- Deren Linearkombinationen $\alpha |l, \frac{1}{2}, l, -\frac{1}{2}\rangle + \beta |l, \frac{1}{2}, l-1, \frac{1}{2}\rangle$, die

– normiert ($|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$) und

– orthogonal zu dem Zustand $|J = l + \frac{1}{2}, M = l - \frac{1}{2}\rangle$ (s.o.) ist

$$\alpha^* \sqrt{\frac{1}{2l+1}} + \beta^* \sqrt{\frac{2l}{2l+1}} \stackrel{!}{=} 0 \text{ (globale Phase irrelevant)}$$

ergibt den gesuchten Zustand

$$|J = l - \frac{1}{2}, M = l - \frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{2l}{2l+1}} |l, \frac{1}{2}, l, -\frac{1}{2}\rangle - \sqrt{\frac{1}{2l+1}} |l, \frac{1}{2}, l-1, \frac{1}{2}\rangle$$

Die gesuchten Clebsch-Gordan-Koeffizienten können direkt abgelesen werden:

$$\langle l, \frac{1}{2}, l, -\frac{1}{2} | J = l - \frac{1}{2}, M = l - \frac{1}{2} \rangle = \sqrt{\frac{2l}{2l+1}} \text{ und}$$

$$\langle l, \frac{1}{2}, l-1, \frac{1}{2} | J = l - \frac{1}{2}, M = l - \frac{1}{2} \rangle = -\frac{1}{\sqrt{2l+1}}$$

B.12.2 Aufgabe 46: Yukawa Potential

Ansatz für eine mögliche Klasse von Funktionen $\psi_\alpha(r)$, auf der durch Variation ein Minimum der Grundzustandsenergie gesucht wird

Motivation: GZ-WF im H-Atom:

$$R_{n=1,l=0}(r) = 2a^{-\frac{3}{2}}e^{-\frac{r}{a}}, \quad a: \text{Bohr-Radius}$$

$$\psi_\alpha(r) = N(\alpha)a^{-\frac{3}{2}}e^{-\alpha\frac{r}{a}}$$

(diese Variationsfunktion reproduziert also -für $\alpha = 1$ - im Wasserstoffatom die korrekte Grundzustandsenergie)

Sie ist radialsymmetrisch ($l = 0$).

Normierung: $1 \stackrel{!}{=} N^2(\alpha)a^{-3} \int dr \, r^2 4\pi e^{-2\alpha\frac{r}{a}} \Rightarrow N = \frac{\alpha^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}}$

Variationsverfahren:

Das Minimum des Energiefunktional $\epsilon[\psi_\alpha(r)] = \langle \psi_\alpha | H | \psi_\alpha \rangle = \epsilon(\alpha)$ beschreibt eine obere Schranke an die Grundzustandsenergie

Vgl. „Konkurrenz“ von kinetischer Energie (stets > 0) und potentieller Energie (< 0 für bindende Potentiale) im Zustand $|\psi_\alpha\rangle$ mit dem Ziel einer Energieminimierung

$$\begin{aligned} \langle \psi_\alpha | V(\vec{r}) | \psi_\alpha \rangle &= \text{Energie der Wechselwirkung} \\ &= -g \left(\frac{\alpha}{a}\right)^3 4\frac{\pi}{\pi} \int_0^\infty dr \, r^2 e^{-(2\frac{\alpha}{a} + \mu)r} \frac{1}{r} \stackrel{P.I.}{=} \\ &= -4g \left(\frac{\alpha}{a}\right)^3 \left(- \int_0^\infty dr \, \frac{1}{-(2\frac{\alpha}{a} + \mu)} e^{-(2\frac{\alpha}{a} + \mu)r} \right) \\ &= -4g \left(\frac{\alpha}{a}\right)^3 \frac{1}{(2\frac{\alpha}{a} + \mu)^2} \end{aligned}$$

kinetische Energie (für Zustand mit $l = 0$)

$$\left\langle \psi_\alpha \left| \frac{p_r^2}{2m} \right| \psi_\alpha \right\rangle = \frac{-\hbar^2}{2m} \left\langle \psi_\alpha \left| \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \right| \psi_\alpha \right\rangle$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{-\hbar^2}{2m} \int dr \, 4\pi r^2 \psi(r) \frac{1}{r^2} \left[\underbrace{2r \frac{\partial \psi}{\partial r}}_{(-\frac{\alpha}{a})\psi(r)} + r^2 \underbrace{\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2}}_{(-\frac{\alpha}{a})^2 \psi(r)} \right] \\
 &= \frac{-4\pi \hbar^2}{2m} \left(-\frac{\alpha}{a}\right) \frac{N^2}{a^3} \int dr \, e^{-2\frac{\alpha}{a}r} \left(2r - r^2 \frac{\alpha}{a}\right) \quad \text{Mit } \int_0^\infty x^n e^{-ax} = \frac{n!}{a^{n+1}} : \\
 &= \frac{-4\pi \hbar^2}{2m} \left(-\frac{\alpha}{a}\right) \left(\frac{\alpha}{a}\right)^3 \frac{1}{\pi} \left[2 \frac{1}{\left(2\frac{\alpha}{a}\right)^2} - \frac{2\frac{\alpha}{a}}{\left(2\frac{\alpha}{a}\right)^3} \right] \\
 &= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\alpha^2}{a^2}
 \end{aligned}$$

Energiefunktional $\epsilon(\alpha) = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m a^2} - 4g \frac{\alpha^3}{a^3} \frac{1}{\left(2\frac{\alpha}{a} + \mu\right)^2}$

Minimierung des Energiefunktional: $0 \stackrel{!}{=} \frac{\partial \epsilon(\alpha)}{\partial \alpha}$

Diese Bedingung führt i.allg. auf eine aufwändig zu lösende algebraische Gleichung vom Grad 3

↔ wir betrachten daher nur den Grenzfall

Diskussion für $\mu = 0$ (H-Potential):

$$\begin{aligned}
 \epsilon_{\mu=0}(\alpha) &= \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m a^2} - \frac{g \alpha}{a}, \quad 0 \stackrel{!}{=} \frac{\partial \epsilon_{\mu=0}}{\partial \alpha} = \frac{\hbar^2 \alpha}{m a^2} - \frac{g}{a} \\
 \frac{\alpha_2}{a} = \frac{gm}{\hbar^2} &\Rightarrow \epsilon(\alpha_2) = \left(\frac{1}{2}g - g\right) \frac{gm}{\hbar^2} = -\frac{1}{2} \frac{m}{\hbar^2} g^2
 \end{aligned}$$

mit $g = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$ ist dies genau die Grundzustandsenergie des Wasserstoffatoms und

$$\alpha_2^{\mu=0} = \frac{gm}{\hbar^2} \underbrace{\left(\frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2}\right)}_{\text{Bohr-Radius}} = 1$$

d.h. $\psi_1(r)$ ist -wie erwartet- die Wellenfunktion, für die die Gesamtenergie auf der Klasse der Funktionen $\psi_\alpha(r)$ minimiert wird.

B.12.3 Aufgabe 47: Zweizustandssystem

$$H = H_0 + W = \begin{pmatrix} E_a & 0 \\ 0 & E_b \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & g \\ g & 0 \end{pmatrix}$$

(Dargestellt in der Eigenbasis von H_0 , $\{|\psi_a\rangle, |\psi_b\rangle\}$)

1. Exakte Lösung durch Diagonalisierung:

$$\det \begin{pmatrix} E_a - \lambda & g \\ g & E_b - \lambda \end{pmatrix} \stackrel{!}{=} 0$$

$$\lambda_{1,2} = \frac{(E_a + E_b) \pm \sqrt{(E_a - E_b)^2 + 4g^2}}{2} = E_{1,2}^g \text{ (exakte Energien)}$$

2. Störungstheorie in 2. Ordnung:

\leftrightarrow 1. Ordnung verschwindet offensichtlich

$$\Delta E_a^{(2)} = \sum_{m=b} \frac{|\langle \psi_a | W | \psi_m \rangle|^2}{E_a - E_m} = \frac{g^2}{E_a - E_b} \text{ und } \Delta E_b^{(2)} = \frac{g^2}{E_b - E_a} = -\Delta E_a^{(2)}$$

3. Variationsverfahren: $E_a = -E_b$

$$\begin{aligned} \langle \psi_\phi | H | \psi_\phi \rangle &= E_a \cos^2 \phi + E_b \sin^2 \phi + 2g \sin \phi \cos \phi \\ &= E_a \cos(2\phi) + g \sin(2\phi) =: \epsilon(\phi) \end{aligned}$$

$$\frac{\partial \epsilon(\phi)}{\partial \phi} = -2E_a \sin(2\phi) + 2g \cos(2\phi) \stackrel{!}{=} 0, \tan(2\phi_0) = \frac{g}{E_a}$$

$$\Rightarrow \epsilon(\phi_0) = E_a \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{g^2}{E_a^2}}} + g \frac{\frac{g}{E_a}}{\sqrt{1 + \frac{g^2}{E_a^2}}} = E_a \sqrt{1 + \frac{g^2}{E_a^2}}$$

4. Da die Schar von Zuständen $|\psi_\phi\rangle$ alle Zustände und damit auch den exakten Grundzustand beschreibt liefert das Variationsverfahren die exakte Grundzustandsenergie.

Für $E_b \rightarrow E_a$ sind beide Niveaus entartet, es ist dann entartete Störungstheorie anzuwenden und die Matrix W „vordiagonalisieren“. In diesem Fall erübrigt sich allerdings Störungstheorie im Unterraum der entarteten Energien $E_a = E_b$, da das Problem durch die Vordagonalisierung schon exakt gelöst ist.

B.12.4 Aufgabe 48: WKB Approximation

(\cong Trennung von zwei Ortsskalen)

- kleinräumige QM Oszillationen
- große Skala der Potentialschwankungen

daher: Ansatz motiviert von Lösung im konstanten Potential + Einführung einer zusätzlichen schwachen Ortsabhängigkeit in Amplitude und Phase. Diese müssen konsistent mit der SGL berechnet werden.

1. Ansatz für WF: $\psi(x) = A(x)e^{i\phi(x)}$

$$\text{SGL: } \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right) \psi(x) = E\psi(x)$$

$$\text{Ortsabhängiger Impuls: } p(x) = \sqrt{2m[E - V(x)]}$$

$E \geq V$: klassisch erlaubt, $p(x) > 0$, reell

$E < V$: klassisch verboten, $p(x) = i|p(x)|$, rein imaginär

Bestimmung von $A(x), \phi(x)$:

$\psi(x)$ in SGL:

$$\frac{d\psi}{dx} = (A' + iA\phi')e^{i\phi(x)}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = (A'' + 2iA'\phi' + iA\phi'' - A\phi'^2)e^{i\phi(x)}$$

$$\Rightarrow (A'' + 2iA'\phi' + iA\phi'' - A\phi'^2) = -\frac{2m(E-V(x))}{\hbar^2}A$$

Separation von Real- und Imaginärteil:

$$\underline{R:} \quad A'' = A(\phi'^2 - \frac{p^2}{\hbar^2}) \quad (1)$$

$$\underline{I:} \quad 2A'\phi' + A\phi'' = 0 \Leftrightarrow (A^2\phi')' = 0 \quad (2)$$

$$\text{Aus (2)} \Rightarrow A^2\phi' = C^2, \quad A = \frac{C}{\sqrt{\phi'}} \quad (*)$$

Näherung in (1):

Schwache Veränderung von $A(x)$ erlaubt $A''(x) \approx 0$, damit wird (1) zu

$$\phi'^2 - \frac{p^2}{\hbar^2} = 0 \Rightarrow \phi'(x) \stackrel{(*)}{=} \pm \frac{p(x)}{\hbar}, \quad (*)A(x) = \pm \frac{A_0}{p(x)}$$

$$\phi(x) = \pm \int dx \frac{p(x)}{\hbar}$$

Damit ergeben sich die beiden Lösungen

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{C}{\sqrt{p(x)}} e^{\pm i \int p(x) \frac{dx}{\hbar}} & \text{für } x : E \geq V(x) \\ \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\pm \int |p(x)| \frac{dx}{\hbar}} & \text{für } x : E < V(x) \end{cases}$$

2. von links einlaufendes Teilchen:

$$I : \quad \psi_I(x) = D_1 e^{ip_0 \frac{x}{\hbar}} + D_2 e^{-ip_0 \frac{x}{\hbar}} \quad x < 0 \quad \text{frei osz.}$$

$$II : \quad \psi_{II}(x) = \underbrace{\frac{C_1}{\sqrt{|p(x)|}} e^{+\int_0^x |p(\tilde{x})| \frac{d\tilde{x}}{\hbar}} + \frac{C_2}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\int_0^x |p(\tilde{x})| \frac{d\tilde{x}}{\hbar}}}_{(*)} \quad 0 \leq x \leq a \quad \text{exp. gedämpft}$$

$$III : \quad \psi_{III}(x) = D_3 e^{ip_0 \frac{x}{\hbar}} \quad x > a \quad \text{frei osz.}$$

(*) kann für große (hoch oder weit) Barrieren vernachlässigt werden

Anschlussbedingungen:

Stetigkeit der WF:

$$\text{an } x = 0 : \quad D_1 + D_2 = \frac{C_1}{\sqrt{|p(0^+)|}} \quad (1), \quad p_0 = \hbar \sqrt{2mE}$$

$$\text{an } x = a : \quad \frac{C_2}{\sqrt{|p(a)|}} e^{-\int_0^a |p(\tilde{x})| \frac{d\tilde{x}}{\hbar}} = D_3 e^{ip_0 \frac{a}{\hbar}} \quad (2)$$

Stetigkeit der Ableitung:

$$\psi'_{II}(x) = -\frac{1}{2} \frac{C_2 |p'(x)|}{(|p(x)|^{\frac{3}{2}})} e^{-\int_0^x |p(\tilde{x})| \frac{d\tilde{x}}{\hbar}} - \frac{C_2}{\sqrt{|p(x)|}} \frac{|p(x)|}{\hbar} e^{-\int_0^x |p(\tilde{x})| \frac{d\tilde{x}}{\hbar}}$$

Annahme:

Schwach veränderliches Potential bedeutet $|p'(x)|$ klein \rightarrow vernachlässigbar

$$\psi'_{II}(0) = -C_2 \frac{\sqrt{|p(0^+)|}}{\hbar}$$

$$\text{an } x = 0 : \quad \frac{ip_0}{\hbar} (D_1 - D_2) = -C_2 \frac{\sqrt{|p(0^+)|}}{\hbar} \quad (3)$$

Aus (1) und (2) folgt

B Lösungen zu den Übungsaufgaben

$$\frac{C_2}{D_1} = \frac{2}{\left[\frac{1}{\sqrt{|p(0)|}} - \frac{\sqrt{|p(0)|}}{ip_0} \right]}$$

Transmissionskoeffizient

$$t = \frac{D_3}{D_1} \stackrel{(2)}{=} \frac{C_2}{D_1} \frac{1}{\sqrt{|p(a)|}} e^{-\int_0^a |p(\tilde{x})| \frac{d\tilde{x}}{\hbar}} e^{-ip_0 \frac{a}{\hbar}} = \frac{2}{\left[\sqrt{\frac{p(a)}{p(0)}} + i \frac{\sqrt{|p(0)||p(a)|}}{p_0} \right]} e^{-\int_0^a |p(\tilde{x})| \frac{d\tilde{x}}{\hbar}} e^{-ip_0 \frac{a}{\hbar}}$$

Damit

$$T = |t|^2 \approx e^{-2 \int_0^a |p(\tilde{x})| \frac{d\tilde{x}}{\hbar}}$$

B.13 Probeklausur 1

B.13.1 Aufgabe 1:

$$(1) \quad P(\text{„Impuls im Intervall } [\hbar(k - \frac{\Delta k}{2}), \hbar(k + \frac{\Delta k}{2})]\text{“}) = \int_{\hbar(k - \frac{\Delta k}{2})}^{\hbar(k + \frac{\Delta k}{2})} |\psi(\tilde{k})|^2 d\tilde{k}$$

Berechnung der Fouriertransformierten

$$\begin{aligned} \psi(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx \psi(x) e^{-ikx} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt[4]{\pi a^2}} \int dx e^{-\frac{x^2 - 2ia^2k - a^4k^2 + a^4k^2}{2a^2}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt[4]{\pi a^2}} e^{-\frac{a^2k^2}{2}} \underbrace{\int dx e^{-\frac{(x - ia^2k)^2}{2a^2}}}_{\sqrt{2\pi a^2}} \\ &= \frac{\sqrt{a}}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-\frac{a^2k^2}{2}} \end{aligned}$$

(1,5)

Ergebnis

$$(0,5) \quad P(p \in [\hbar(k - \frac{\Delta k}{2}), \hbar(k + \frac{\Delta k}{2})]) = \frac{a}{\sqrt{\pi}} \int_{\hbar(k - \frac{\Delta k}{2})}^{\hbar(k + \frac{\Delta k}{2})} e^{-a^2\tilde{k}^2} d\tilde{k} \approx \frac{a}{\sqrt{\pi}} e^{-a^2\tilde{k}^2} \Delta k$$

Σ^3

B.13.2 Aufgabe 2:

(2) Idee: Einfaches Einsetzen in die SGL

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}_0 \right) \psi_0(x) = E_0 \psi_0(x) = 0$$

Ausführung:

$$\begin{aligned} V_0 \psi_0 &= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}} (\alpha^2 4x^2 - 2\alpha) e^{-\alpha x^2} \end{aligned}$$

$$= \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m}(\alpha^2 4x^2 - 2\alpha)}_{V_0} \psi_0(x)$$

(2)

$\Sigma 4$

N.B. Der Bepunktungsvorschlag ist natürlich unverbindlich, ggf. erweist sich bei der Korrektur eine andere Bepunktung als sinnvoller!

B.13.3 Aufgabe 3:

1. $|\psi_1\rangle = |\psi\rangle$, σ_z bereits diagonal

(1)

$$P(„+“) = P(„-“) = \frac{1}{2}, \text{ EW} = 0$$

2. $|\psi_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, $A = \begin{pmatrix} 1 & 1-i \\ 1+i & -1 \end{pmatrix}$

Diagonalisierung von A:

$$-(1-\lambda)(1+\lambda) - (1+i)(1-i) = \lambda^2 - 1 - 2 \stackrel{!}{=} 0 \Rightarrow \lambda_{1,2} = \pm\sqrt{3}$$

EV: $(1-\lambda)x + (1-i)y = 0$

$$y_\lambda = \frac{1-\lambda}{i-1}x = \frac{1}{2}(\lambda-1)(1+i)$$

(1)

EV: $\vec{e}_\lambda = \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{2}\lambda^2 - \lambda + \frac{3}{2}}} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1}{2}(\lambda-1)(1+i) \end{pmatrix}$

$$P(„Messwert + \sqrt{3}“) = |\langle \vec{e}_{\sqrt{3}} | \psi_2 \rangle|^2 = \frac{\frac{1}{2}(\sqrt{3}-1)^2}{3-\sqrt{3}}$$

(1)

$$P(„Messwert - \sqrt{3}“) = \frac{\frac{1}{2}(-\sqrt{3}-1)^2}{3+\sqrt{3}}$$

(1)

EW: $\frac{1(\sqrt{3}-1)^2}{2(3-\sqrt{3})}\sqrt{3} - \frac{1(\sqrt{3}+1)^2}{2(3+\sqrt{3})}\sqrt{3} = \frac{1}{2}\sqrt{3} \frac{(4-2\sqrt{3})(3+\sqrt{3}) - (4+2\sqrt{3})(3-\sqrt{3})}{(9-3)} = -1$

(Einfache Überprüfung: $\langle \psi_2 | A | \psi_2 \rangle = \underbrace{\langle \psi_2 | \sigma_x | \psi_2 \rangle}_0 + \underbrace{\langle \psi_2 | \sigma_y | \psi_2 \rangle}_0 + \underbrace{\langle \psi_2 | \sigma_z | \psi_2 \rangle}_{-1}$)

für EZ von σ_z mit EW -1)

$\Sigma 4$

B.13.4 Aufgabe 4:

1. Quantisierung: $\lambda = \frac{2a}{n}$, $n \in \mathbb{N}$

$$(1) \quad k_n = \frac{\pi}{a}n, \quad E_n = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2 \quad (\text{freie SGL in } [0, a])$$

Randbedingungen: Knoten bei $x = 0, a$

$$\psi_n(x) = \begin{cases} N \sin(k_n x) & x \in [0, a] \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Normierung:

$$N^2 \int_0^a \sin^2(k_n x) dx \stackrel{!}{=} 1 = N^2 \int_0^{n\pi} \sin^2(y) \frac{dy}{k_n} = N^2 \frac{n\pi}{2k_n} = N^2 \frac{a}{2}$$

$$(1) \quad \Rightarrow N = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(k_n x), \quad x \in [0, a]$$

2.

$$\begin{aligned} P(\text{„Energie des Teilchens betraegt } E_n\text{“}) &= |\langle \psi(x, t=0) | \psi_n(x) \rangle|^2 \\ &= \left| \int_0^a \frac{1}{\sqrt{a}} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(k_n x) dx \right|^2 \\ &= \frac{2}{a^2} \left| \int_0^{n\pi} \sin(y) \frac{dy}{k_n} \right|^2 \\ &= \frac{2}{\pi^2 n^2} \underbrace{|[-\cos(y)]_0^{n\pi}|^2}_{=4 \text{ falls } n \text{ ungerade, sonst } 0} \\ &= \begin{cases} \frac{8}{\pi^2 n^2} & \text{falls } n \text{ ungerade} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \end{aligned}$$

(2)

$$(1) \quad 3. \quad \psi(x, t) = \sum_n \frac{4}{n\pi\sqrt{a}} \sin(k_n x) e^{iE_n \frac{t}{\hbar}}$$

(offensichtlich verifizierbar durch Einsetzen in SGL)

$\sum 5$

B.13.5 Aufgabe 5:

1. • Freie Lösungen für die WF für $x \geq 0$
- keine rücklaufende Welle in II
- $k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}$ (freie SGL für $x \neq 0$)

Ansatz:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & \text{in I } x < 0 \\ Ce^{ikx} & \text{in II } x > 0 \end{cases}$$

(a) Stetigkeit der WF an $x = 0$:

$$(1) \quad A + B = C \quad (1)$$

(b) Unstetigkeit der Ableitung folgt aus der SGL:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \alpha \delta(x) \psi(x) = E \psi(x) \quad \left| \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \right.$$

\hookrightarrow Integration in Umgebung von 0 mit $\epsilon \rightarrow 0$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} [\psi'(\epsilon) - \psi'(-\epsilon)] + \alpha \psi(0) = 0$$

$$(2) \quad ik[-Ae^{-ik\epsilon} + Be^{ik\epsilon} + Ce^{ik\epsilon}] = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} C \Rightarrow C \left(1 - \frac{2m\alpha}{ik\hbar^2}\right) = A - B \quad (2)$$

$$2. (1) + (2): C \left(2 - \frac{2m\alpha}{ik\hbar^2}\right) = 2A \Rightarrow C = \frac{A}{1 - \frac{m\alpha}{ik\hbar^2}}$$

$$(1) \quad B = C - A = A \frac{1 - 1 + \frac{m\alpha}{ik\hbar^2}}{\left(1 - \frac{m\alpha}{ik\hbar^2}\right)} \text{ damit ist } \psi(x) \text{ konstruiert}$$

$$(1) \quad 3. T(E) = \left| \frac{C(k(E))}{A} \right|^2 = \frac{1}{1 + \frac{m^2 \alpha^2}{k^2 \hbar^4}} = \frac{1}{1 + \frac{m\alpha^2}{2E\hbar^2}}$$

$\sum 5$

B.13.6 Aufgabe 6:

$$1. H = \frac{\hat{L}^2}{2\Theta} + \gamma b \hat{L}_z$$

\hookrightarrow gemeinsame Eigenbasis von \hat{L}^2 und L_z sind Kugelflächenfunktionen mit

$$L^2\psi_l^m = \hbar^2(l+1)l\psi_l^m \quad l \geq 0 \text{ und } L_z\psi_l^m = \hbar m\psi_l^m \quad -l \leq m \leq l$$

$$(2) \quad E_l^m = \langle \psi_l^m | H | \psi_l^m \rangle = \frac{\hbar^2(l+1)l}{2\Theta} + \gamma b \hbar m$$

2. Rotation der Quantisierungsachse:

- Normiere $\vec{B} = (b\sqrt{2}) \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right)$
- Rotation so dass $\hat{z}_{neu} \parallel \vec{B}$ (dies lässt \vec{L}^2 invariant)

$$(2) \quad E_l^m = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\Theta} + \gamma b \sqrt{2} \hbar m$$

Σ^4