

Theoretische Physik III

Quantenmechanik

Vorlesung von Prof. Dr. Andreas Buchleitner im Sommersemester 2019

Markus Österle Damian Lanzenstiel

2. Juli 2019

Inhaltsverzeichnis

0	Einleitung	2
0.1	Wichtige Infos	2
0.2	Programm	2
0.3	Litaratur	2
I	Quantenmechanik - Intro	4
I.1	Wave-particle duality at the double-slit	5
I.1.1	Consequences and terminology	6
I.2	Measure, filtering and spectral decomposition	7
II	Messungen, Zustände, Operatoren im Hilbertraum	9
II.1	Zustände und Projektoren im Hilbertraum	9
II.2	Lineare, normale hermitesche, selbstadjungierte Operatoren	11
II.3	Der Spektralsatz für Normaloperatoren	13
II.4	Observablen, vollständige Sätze von Observablen, Tensorräume	14
II.4.1	Beispiele:	16
II.4.2	Tensor spaces	17
III	Dynamik	23
III.1	Die Schrödinger-Gleichung	23
III.1.1	Heisenberg- vs. Schrödinger-Bild	24
III.1.2	Das Wechselwirkungsbild	26
III.2	Dynamik eines Zweiniveausystems unter dem Einfluss einer Störung	27
III.2.1	Geometrische Interpretation - die Bloch-Kugel	30
IV	Darstellungen	33
IV.1	kontinuierliche Eigenwerte	33
IV.2	Ortsdarstellung quantenmechanischer Zustände und Operatoren	35
IV.3	Impulsdarstellung	36
IV.4	Vertauschungsrelation für Ort und Impuls, Unschärferelation	38
V	Zustände und Dynamik in einfachen Potentialproblemen	40
V.1	Gebundene Zustände im eindimensionalen Kastenpotential	40
V.2	Paritätsoperator	44
V.3	Ungebundene Zustände des Kastenpotentials	45

Kapitel 0

Einleitung

0.1 Wichtige Infos

Professor Andreas Buchleitner Zi. 901

`abu@uni-freiburg.de`

`buchleitner_office@physik.uni-freiburg.de`

Sekretäre Gislinde Bühler & Susanne Trantke Zi. 804

Übungsleiter Eduardo Carnio, Zi. 910

`eduardo.carnio@physik.uni-freiburg.de`

ILLIAS Theorie III: Password: TPIIIss19

Klausur 15. Juli 13:00 - 16:00 Uhr im großen Hörsaal

0.2 Programm

- Proseminar (BSc) zus. mit MSc-Seminar
QM für Liebhaber & Interpretation of QM
- Kolloquium montags 17:15 Uhr 27. Mai Göttinger Erklärung, CF v. W.
- 23.-27. September DPG Fall Meeting, Quantum Sciences and IT

0.3 Litaratur

(auch auf ILLIAS gelistet)

- C. Cohen-Tannodji, B. Diu, F. Lafoë, Mécauque quantique, F,D,E, Vol I + II
- O. Hittmeier Lehrbuch d. Quantenmechanik, Thienig 1972
- B. - G. Engert, Lectures on quantum mechanics, I - IV, World Scientific 2006
- M. Bartelmann et al, Theoretische Physik, Springer 2015
- J.J. Sakurai, Modern Quantummechanics, Addison-Wesley 1995
- A. Peres, Quantum Theory: Concepts and Methods, Kluwer 1995
- M.A. Nielson, I. L. Chang, Quantum Computation & Quantum Information, Cambridge University Press 2000

- Landau & Lifschitz, Lehrbuch der Theoretischen Physik Bd. III

Formelsammlung: Bronstein & Semendiciev. Taschenbuch d. Mathematik

Kapitel I

Quantenmechanik - Intro

Quantenmechanik (QM) beschreibt den Mikrokosmos (im Gegensatz zum Makrokosmos).

- im CD-Player
- im Handy
- Kernspin
- Zeitstandards

QM ist „merkwürdig“ insofern, als anthropomorpher Anschauung unangepasst. \Rightarrow Sie sorgt noch heute für hitzige und kontroverse Debatten.

→ siehe Podcasts PI - Kolloquium, z.B. Nicoles Gisin 15.04.2009, Reinhard Werner 24.12.2007

→ mathematischer Rahmen relativ einfach, doch Interpretation schwierig
 \Rightarrow Feynman: „Shut up and calculate!“

Historische Genese: Wie (fast?) alle physikalischen Theorien aus experimenteller Evidenz, die mit der „klassischen“ Theorie nicht vereinbar war.

Aus **theoretischer „Notlage“ angesichts bestehender Experimente:**

Balmer-Linien (1885), Franck-Hertz-Versuch (1913), Photoeffekt (Hallweds 1888 & Einstein 1905), Schwarzkörperspektrum (Planck 1900), Compton-Effekt (1921), Kernspaltung (Halm, Meitner und Strassmann 1939), Stern-Gerlach-Versuch (1921).

Große Namen: N. Bohr, W. Heisenberg, E. Schrödinger, M. Born, John v. Neumann, A. Sommerfeld, L. de Broglie, P. Dirac, W. Pauli, L. Szilárd, R. Oppenheimer, Gamow, Siegelt, Hellmann, Ettore Majorana.

Zu Majorana: Leonardo Sciascia: La Scomparsa di Majorana (Das Verschwinden des Majorana).

Buchempfehlung: Richard Rhodes: Die Atombombe oder die Geschichte des 8. Schöpfungstages

Weitere Quantenmechaniker: E. Teller, A. Sacharov, L. Landau, J. Belt, M. Gutzwiller.

Korrespondenzprinzip: Wie korrespondieren die QM-Theorien mit den klassischen Theorien? Wie sieht der Übergang vom diskreten zu einem kontinuierlichen Spektrum aus?

Beispiel: Atommodell mit quantisierten Elektronen-Orbitalen von Bohr und dem Klassischen Modell von Rutherford und kontinuierlichen Kepler-Orbitalen.

Die Energieniveaus eines Wasserstoff Atoms sind: $E = \frac{1}{2n^2}$. Daraus folgt, dass höhere Energieniveaus immer näher aneinander liegen. Die Energiedifferenzen $E_{n+1} - E_n \sim \hbar\omega_{\text{Kepler}}$ werden also immer geringer. Die Umlauffrequenz kann also mit zunehmender Hauptquantenzahl immer genauer bestimmbar.

I.1 Wave-particle duality at the double-slit

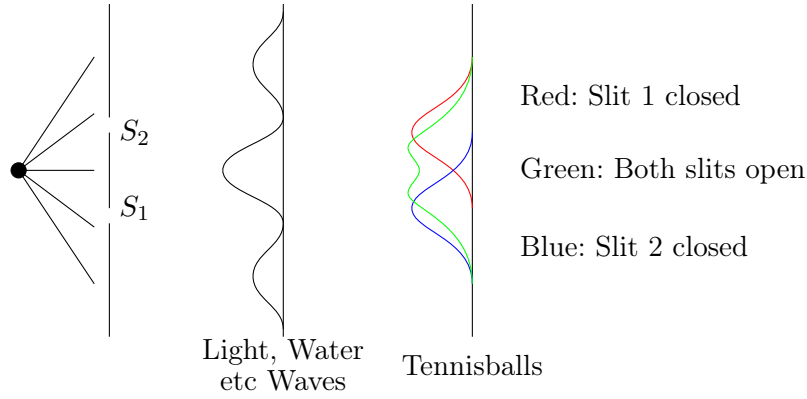


Abbildung I.1: Double-slit Experiment by Young (1803)

For Waves the complex amplitudes $E_1(x)$ and $E_2(x)$ coming from slits 1 and 2 and arriving at point x on the screen add up

$$E(x) = E_1(x) + E_2(x) \quad (\text{I.1})$$

The corresponding intensity reads:

$$I(x) \propto |E(x)|^2 = \underbrace{|E_1(x)|^2 + |E_2(x)|^2}_{\substack{\text{"classical" intensities} \\ \text{e.g. with Tennis balls} \\ \text{ladder contribution}}} + \underbrace{2\Re(E_1^*(x)E_2(x))}_{\substack{\text{interference term} \\ \sim \cos(\varphi_2(x) - \varphi_1(x)) \\ \text{contains phase information} \\ \text{cross term}}} \quad (\text{I.2})$$

$$|E_1 + E_2|^2 = (E_1 + E_2)(E_1^* + E_2^*) = |E_1|^2 + |E_2|^2 + 2\Re(E_1^*E_2)$$

ladder contribution	cross contribution
$\begin{array}{c} \overbrace{E_1 \text{ --- } E_1^*} \\ E_2 \text{ --- } E_2^* \\ \underbrace{\hspace{1.5cm}} \end{array}$	$\begin{array}{c} \overbrace{E_1 \text{ --- } E_2^*} \\ E_2 \text{ --- } E_1^* \\ \underbrace{\hspace{1.5cm}} \end{array}$
$ E_1 ^2 + E_2 ^2$	$+ \quad 2\Re(E_1^*E_2)$

→ **Light is a wave phenomenon**

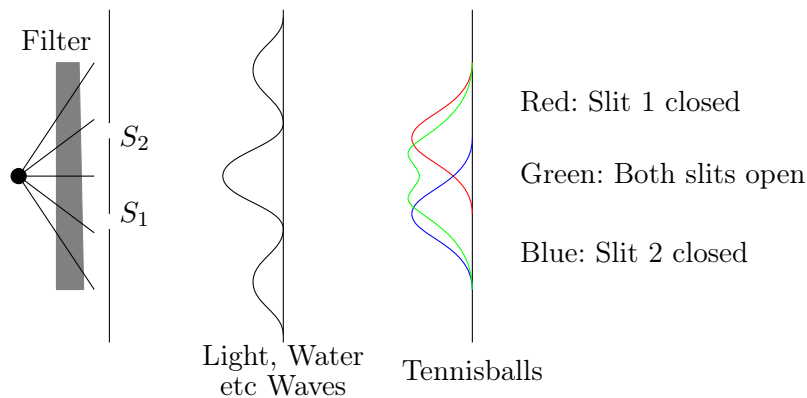


Abbildung I.2: T3 Doppelspalt mit Filter

If we make the source weaker and weaker and have a sufficiently sensitive screen/detector, we observe the arrival of **single point-like** photons on the screen (photo-electric effect Einstein (1905) (\rightarrow corpusculan hypothesis))

By making the source sufficiently weak, we can ensure that at most 1 photon is present in the interferometer at a given time. \rightarrow no possible interaction between photons!

If we **integrate** over many single detection events, we recover the interference pattern.

We can make statistical predictions about the position of individual detection events (the integrated signal forms a probabilistic distribution) but the individual photons clearly don't have a deterministic trajectory (otherwise no interference).

Summary

- Upon detection, light behaves like an assembly of particles.
- The density of detection events reproduces the predictions of the wave picture (classical electromagnetism).
- We cannot explain the appearance of an interference pattern if we treat the photons as classical particles. Each photon goes through both slits 1 and 2: two classically exclusive alternatives.

I.1.1 Consequences and terminology

The agreement of the probability distribution for individual detections events with the predictions of optics (classical field theory) justifies referring to $E(x, t)$ as a **probability amplitude** of the photons. $|E(x, t)|^2$ is the corresponding **probability density** (normalized, real, other attributes ...) for detection at point x and time t . Later on, we use $\psi(x, t)$ instead of $E(x, t)$ for the **wavefunction**.

The appearance of both wave and particle properties in the behavior of microscopic objects is known as **wave-particle duality**.

This raises the question of the “**critical scale**” below which these phenomenon take place and above which our classical representations hold.

Remarks:

- I) In optics, interference follows from the superposition principle, which is a consequence of the linearity of the field equations.

Correspondingly the equations of QM are also linear and the superpositions principle applies.

- II) The probabilistic predictions of the wave picture can only be accessed by accumulating many individual detection events, i.e. by repeating the same experiment.

Individual events are not predictable, QM only makes statistical predictions.

- III) There is a strong effect to push this critical scale function into the macroscopic world (e.g. experiments M. Arndt, Vienna interference of C_{60} molecules).

I.2 Measure, filtering and spectral decomposition

(Messung, Filterung und spektrale Zerlegung)

Classical field:

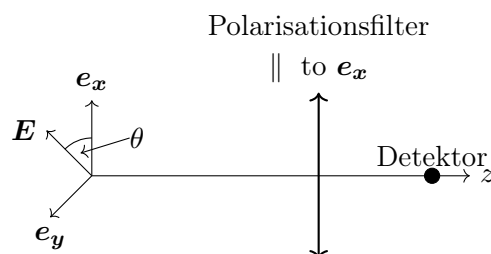


Abbildung I.3: Linearly polarized beam of monochromatic light

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = E_0 \hat{e}_p e^{i(kz - \omega t)} \quad (\text{I.3})$$

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = & E_0 \cos \theta \mathbf{e}_x e^{i(kz - \omega t)} \\ & + E_0 \sin \theta \mathbf{e}_y e^{i(kz - \omega t)} \end{aligned}$$

After the filter

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = E_0 \cos \theta \mathbf{e}_x e^{i(kz - \omega t)}$$

Intensity:

$$I' \propto |E'|^2 \quad I \propto |E|^2$$

Malus' law

$$I' = I \cos^2 \theta \quad (\text{I.4})$$

What happens if we weaken the source to obtain single photons?

→ 2 possible options:

- a single photon passes completely (click on detector): event "1"
- or it does not pass at all (no click): event "0"

For each photon, the outcome cannot be predicted with certainty.

Upon averaging over a large number of photons, the fraction which makes it through is:

$$\frac{N_1}{n_1 + n_0} \rightarrow \cos^2 \theta$$

in accordance with Malus' law (I.4).

E.g.: 10010001110101

Special cases:

- $\theta = 0^\circ \rightarrow$ all photons go through: 1111...1
- $\theta = 90^\circ \rightarrow$ no photon goes through: 0000...0

\Rightarrow in this case the output is certain but experiment must be repeated many times to prove that this is the case.

In these cases, we say that the photon finds itself in an **eigenstate**. One state: $|1\rangle$ for \hat{e}_x polarized and one state $|0\rangle$ for \hat{e}_y polarized which is associated with the particular outcomes for **eigenvalues** 1 and 0.

Sichere (Quanten-) Ereignisse gibt es allein für $\hat{e}_p = \hat{e}_x$ bzw. $\hat{e}_p = \hat{e}_y$. Diese Polarisationsrichtungen definieren die **Eigenzustände** $|1\rangle$ (\hat{e}_x) bzw. $|0\rangle$ (\hat{e}_y) zu den **Eigenwerten** 1 bzw. 0.

Für eine allgemeine Wahl von \hat{e}_p haben wir die Orthogonalzerlegung

$$\hat{e}_p = \hat{e}_x \cos \theta + \hat{e}_y \sin \theta \quad (\text{I.5})$$

Die Wahrscheinlichkeit für „0“ **oder** „1“ ergibt sich als:

$$\cos^2 \theta + \sin^2 \theta = 1 \quad (\text{I.6})$$

wie gewünscht.

(I.5) kann als „**spektrale Zerlegung**“ des Polarisationszustandes \hat{e}_p in die durch den Mesapparat/Filter definierten Eigenzustände \hat{e}_x und \hat{e}_y bzw. $|1\rangle$ und $|0\rangle$.

Lässt man Photonen, die durch F transmittiert werden, durch einen weiteren Filter F' der selben Orientierung wie F gehen, so folgt ein **sicheres** Ereignis, da das Photon durch F im Eigenzustand \hat{e}_x von F' **präpariert** wurde.

In diesem Sinne: Zustandspräparation \equiv Filterung (-smessung)

Bemerkung

- (1) Um sich davon zu überzeugen, dass das System in einem Eigenzustand präpariert wurde, muss Statistik über viele ($N \gg 1$) Photonen betrieben werden.
- (2) (I.5) und (I.6) legen bereits die essentielle Vektorraumstruktur des QM mit vorzugsweise orthonormierten Basisvektoren fest.
- (3) Systeme, die sich mit $|0\rangle$ und $|1\rangle$ vollständig beschreiben lassen heißen: **Zweiniveausysteme**

Kapitel II

Messungen, Zustände, Operatoren im Hilbertraum

Nun die etwas mathematischere Fassung, die letztlich (streng) durch die Theorie selbst-adjungierter Operatoren im Hilbertraum gegeben ist ¹. Ziel der mathematischen Darstellung, ist letztlich eine geometrische Anschauung des Hilbertraums.

II.1 Zustände und Projektoren im Hilbertraum

Zustandsvektor, abstrakt geschrieben: $|\psi\rangle^2$ (stellt \hat{e}_p), entsprechend $|1\rangle$ statt \hat{e}_x , $|0\rangle$ statt \hat{e}_y , c_1 statt $\cos\theta$, c_0 statt $\sin\theta$ in (I.5),

$$\Rightarrow |\psi\rangle \stackrel{(I.5)}{=} c_0|0\rangle + c_1|1\rangle \quad (II.1)$$

wobei wir außerdem c_0 und c_1 kompaktwertig wählen ³

Gemäß (II.1) ist $|\psi\rangle$ ein Vektor in einem komplexen, zweidimensionalen Vektorraum, der zusätzlich mit dem **kanonischen Skalarprodukt** (\cdot, \cdot) verziert sein soll.

$$\begin{aligned} c_0 &= (|0\rangle, |\psi\rangle) =: \langle 0|\psi\rangle & c_1 &= (|1\rangle, |\psi\rangle) =: \langle 1|\psi\rangle \\ |c_0|^2 + |c_1|^2 &= 1 \quad (\text{s.o. (I.5) und (I.6)}) & \langle 0|1\rangle &= \langle 1|0\rangle = 0 \end{aligned} \quad (II.2)$$

Verallgemeinerung dieser Struktur auf Vektorraum \mathcal{H} mit abzählbarer Dimension $\dim \mathcal{H} =: d_{\mathcal{H}}$, das zusätzlich vollständig⁴⁵ bzgl. des durch das iobige Skalarprodukt induzierter Norm:

$$\|\cdot\| = (\cdot, \cdot)^{1/2} \quad (II.3)$$

sein soll. Ein solcher Vektorraum heißt **Hilbertraum**.

Weitere Schreibweisen für $|\varphi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}$:

$$\begin{aligned} (|\varphi\rangle, |\psi\rangle) &= \left((\varphi_1, \dots, \varphi_{d_{\mathcal{H}}})^{\top}, (\psi_1, \dots, \psi_{d_{\mathcal{H}}})^{\top} \right) = (\varphi_1^*, \dots, \varphi_{d_{\mathcal{H}}}^*) \cdot \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_{d_{\mathcal{H}}} \end{pmatrix} \\ &= \sum_{j=1}^{d_{\mathcal{H}}} \varphi_j^* \psi_j = \langle \varphi | \psi \rangle \end{aligned} \quad (II.4)$$

¹s. linear Operations in Hilbertspace, Joachim Weidmann, Springer-Vlg

²Diese Schreibweise kommt aus der notation von „maps to“ \mapsto und wurde später zu $|\dots\rangle$.

³siehe Übungsaufgabe zu ellipisch polarisierten EM-Wellen

⁴d.h. alle Cauchy-Folgen konvergieren in \mathcal{H} .

⁵s. z. B. Barner, Flohr, Analysis I, S1199, Analysis II, S145

Damit festgelegt:

$$|\psi\rangle = (\psi_1 \ \dots \ \psi_{d_{\mathcal{H}}})^{\top} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_{d_{\mathcal{H}}} \end{pmatrix}$$

$$\langle\varphi| = (\varphi_1^* \ \dots \ \varphi_{d_{\mathcal{H}}}^*) = \left(|\varphi\rangle^{\top}\right)^* =: |\varphi\rangle^{\dagger} \quad (\text{II.5})$$

$|\varphi\rangle^{\dagger} = \langle\varphi|$ heißt der zu $|\varphi\rangle$ **adjungierte** Vektor, „†“ wird „kreuz“, „cross“, „dagger“ gelesen. Analog zu (II.1) können wir jedem Zustand $|\psi\rangle$ in der zugehörigen Orthonormalbasis (ONB) die Darstellung:

$$|\psi\rangle = \sum_{j=1}^{d_{\mathcal{H}}} \langle j|\psi\rangle |j\rangle \quad (\text{II.6})$$

Wir fordern die Normierung der Wellenfunktion ψ :

$$\langle\psi|\psi\rangle = ||\psi||^2 = 1 \quad (\text{II.7})$$

$$(\text{II.6}) \quad \hat{=} \quad \sum |j\rangle\langle j|\psi\rangle \quad \forall |\psi\rangle$$

zuordnen.

$$|\psi\rangle = \sum |j\rangle\langle j|\psi\rangle \quad \forall |\psi\rangle$$

Zerlegung der Eins / Vollständigkeitsrelation

$$\Rightarrow \sum \underbrace{|j\rangle\langle j|}_{\text{Projektor}} = \mathbb{1} = (\text{id}) \quad (\text{II.8})$$

Die Zerlegung der Eins \equiv Identität in die „**Projektionsoperatoren**“

$$|j\rangle\langle j||j\rangle\langle j| = |j\rangle\langle j|j\rangle\langle j| = |j\rangle\langle j|$$

$|j\rangle\langle j|$ nennt man auch das **dyadische Produkt** von $|j\rangle$ mit sich selbst.

$$P_j = |j\rangle\langle j| \quad (\text{II.9})$$

Man sieht leicht, dass die „**Idempotenz**“ der P_j :

$$P_j^2 = P_j \quad \forall j \quad (\text{II.10})$$

Zu jedem P_j definieren wir die „**Orthogonalprojektion**“

$$Q_j := 1 - P_j \quad (\text{II.11})$$

Hier gilt häufig $1 := \mathbb{1} = \text{id}$

Eine andere Schreibweise für $\langle j|\psi\rangle$ ist $\psi = \sum_j (\hat{e}_j, \psi) \hat{e}_j$. Außerdem gilt: $\langle\phi|\psi\rangle = (|\phi\rangle, |\psi\rangle)$

$$P_j \cdot Q_j = Q_j \cdot P_j = P_j - \underbrace{P_j^2}_{\substack{(\text{II.10}) \\ P_j}} = 0 \quad (\text{II.12})$$

Vollständig konsistent mit der geometrischen Anschauung orthogonaler Projektionen.

Gleiches lässt sich für Summen von Projektoren sagen:

$$P = \sum_{j=1}^M P_j \quad Q = 1 - P = \sum_{j=M+1}^{s_{\mathcal{H}}} P_j \quad (\text{II.13})$$

$$P^2 = P \quad Q^2 = Q \quad PQ = QP = 0 \quad (\text{II.14})$$

Man erinnere sich an das Beispiel in (I.2)

★hier fehlt eine Grafik★

Bemerkungen

- (a) Die abstrakte Schreibweise $|\psi\rangle$ bzw. $\langle\psi|$ geht auf Dirac zurück, daher auch „**Dirac- Notation**“ genannt.
- (b) $|\psi\rangle$ nennt auch (Zustands-) „**Ket**“ (-Vektor), $\langle\psi|$ entsprechend „**Bra**“ (\rightarrow Bracket /Klammer). In etwas mathematischerer Weise wird $\langle\psi|$ auch als das zu $|\psi\rangle$ gehörende lineare Funktional im zu Hilbertraum \mathcal{H} dualen Raum aufgefasst, das vermöge (II.4) jedem Ket $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ die Zahl $(|\psi\rangle, |\phi\rangle \stackrel{(II.4)}{=} \langle\psi|\phi\rangle)$ zuordnet ^{6 7}.
- (c) In (II.1, 4-6, 8) haben wir ein bestimmtes, durch vorgegebene, orthogonale Filterstellungen definiertes Basissystem $\{|0\rangle, |1\rangle, \dots, |j\rangle, \dots\}$ gewählt. Dies entspricht den Eigenvektoren unseres Messoperators (siehe (I.2)) die auf ein eindeutiges Messresultat führen. Durch die (a priori beliebige) Wahl einer bestimmten ONB wählt man eine bestimmte „**Darstellung**“⁸, die man natürlich wechseln kann (z.B. durch Drehung des Basissystems).

II.2 Lineare, normale hermitesche, selbstadjungierte Operatoren

Die oben eingeführten Projektoren P_j sind offenbar **lineare** Operatoren, denn es gilt:

$$P_j(\lambda|\phi\rangle + \mu|\psi\rangle) = \lambda P_j|\phi\rangle + \mu P_j|\psi\rangle \quad \forall \lambda, \mu \in \mathbb{C}, |\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H} \quad (II.15)$$

Im Folgenden werden wir es ganz allgemein mit linearen Operatoren auf Hilberträumen zu tun haben, die auf Kets gemäß

$$A|u\rangle = |v\rangle \quad (II.16)$$

und auf Bras gemäß

$$\langle s|B = \langle t| \quad (II.17)$$

operieren. Man sagt A wirkt in (II.16) „nach rechts“ und B in (II.17) „nach links“. Interessiert man sich für die Wirkung von A aus (II.16) für einen Bra $\langle w|$, so verschafft man sich zunächst die Wirkung von A auf eine vollständige (Ket-) Basis:

$$A|j\rangle = |j'\rangle \quad \forall j = 1, \dots, d_{\mathcal{H}} \quad (II.18)$$

daraus, die „**Matrixelemente**“

$$\langle w|A|j\rangle = \langle w|j'\rangle \quad (II.19)$$

(wird auch als A_{wj} geschrieben) was die Darstellung:

$$\langle w|A = \sum_j \langle w|A|j\rangle \langle j| \quad (II.20)$$

Bei $*$ spricht man auch vom Einsetzen/Anwenden von rechts „der Eins“. Entsprechend gilt:

$$A|u\rangle = \sum_j |j\rangle \langle j|A|u\rangle \quad (II.21)$$

Daher gilt:

$$\langle w|A|u\rangle \stackrel{(II.20)}{=} \sum_j \langle w|A|j\rangle \langle j|u\rangle \stackrel{(II.21)}{=} \sum_j \langle w|j\rangle \langle j|A|u\rangle \quad (II.22)$$

⁶Cohen-Tannodji, TI Chap. II B2 b, p110

⁷Sakurai, p.13

⁸ \rightarrow Analogie „darstellende Matrix“ in Lin. Algebra, z.B. Fischer, Vieweg 1984 p.186 f.

Der zu A in (II.16) „**adjungierte**“ Operator A^\dagger ist dadurch definiert, dass er auf $\langle u|$ genauso operiert wie A auf $|u\rangle$, d.h. für beliebige $|u\rangle, |v\rangle$ in (II.16):

$$\langle u|A^\dagger = \langle v| \quad (II.23)$$

Dies impliziert wegen (II.5)

$$\begin{aligned} \langle v| &\stackrel{(II.5)}{=} \left(|v\rangle^\top \right)^* \stackrel{(II.16)}{=} \left((A|u\rangle)^\top \right)^* \stackrel{(II.21)}{=} \left(\sum_j |j\rangle \langle j| A|u\rangle \right)^{\top*} \\ &= \left(\sum_j \langle j| A|u\rangle |j\rangle^\top \right)^* = \sum_j \langle j| A|u\rangle^* \langle j| \\ &\stackrel{(II.8)}{=} \sum_j \langle u| A^\dagger |j\rangle \langle j| \quad \text{und insbesondere für} \quad \langle u| A = \langle v| \end{aligned} \quad (II.24)$$

$$\langle j| A|u\rangle^* = \langle u| A|j\rangle \quad (II.25)$$

d.h. die Matrixdarstellung von A geht durch Transposition und komplexe Konjugation in sich selbst über, bzw. die Matrixdarstellung von A ist bis auf komplexe Konjugation symmetrisch (bzgl. Spiegelung an der Diagonalen).

Kürzer:

$$A^\dagger \stackrel{(II.4)}{=} \stackrel{(II.5)}{=} (A^\top)^* = (A^*)^\top = A \quad (II.26)$$

A heißt dann „**hermitesch**“.

kurze Wiederholung

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum \langle j|\psi\rangle |j\rangle \quad \begin{pmatrix} \langle 1|\psi\rangle \\ \langle 2|\psi\rangle \\ \vdots \\ \langle d_{\mathcal{H}}|\psi\rangle \end{pmatrix} \\ \langle j| A|u\rangle &\stackrel{(II.25)}{=} \langle u| A|j\rangle \\ A_{ju}^* &\quad A_{uj} \end{aligned}$$

Bemerkung:

- (a) Häufig wird „**hermitesch**“ synonym mit dem Begriff „selbsadjungiert“ gebraucht, was jedoch nur in endlichdimensionalen Hilberträumen korrekt ist. D.h. es ist gut für viele aber eben nicht für alle Anwendungen⁹. I.a. muss für Selbstadjungiertheit noch fordern, dass der Definitionsbereich von A mit jedem von A^\dagger übereinstimmt¹⁰.

Etwas formale Definition (nach ⁹)

Sei A ein Operator auf \mathcal{H} mit dem Definitionsbereich $D(A)$ dicht in \mathcal{H} . $D(A^\dagger) \equiv$ die Menge aller $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ zu denen ein $|\eta\rangle \in \mathcal{H}$ existiert, derart, dass (s.o. (II.4)). **★hier fehlt was★**

$$(|\phi\rangle, A|\psi\rangle) = (|\eta\rangle, |\psi\rangle) \quad \forall |\psi\rangle \in D(A)$$

★hier fehlt was★

⁹M. Reed, B Simon, Methods in Modern Mathematical Physics, Academie Press, Vol I-IV.

¹⁰→ z.B. R- S, Vol I, p.255; I.a. $D(A) \subset D(A^\dagger)$

- (b) Statt „hermitesch“ wird in der mathematischen Literatur auch der Begriff „**symmetrisch**“ gebraucht.
- (c) In der mathematischen Literatur wird statt A^\dagger auch häufig A^* geschrieben, was zwingend zu Durcheinander führen muss¹¹.
- (d) Wir fassen die Wirkung der Operation „ \dagger “ (Adjunktion) auf Skalare, Vektoren und Operatoren zusammen:

$$\begin{aligned}\langle u|v\rangle^\dagger &\stackrel{\text{Skalar}}{=} \langle u|v\rangle^* \stackrel{\text{Skalarprodukt}}{=} \langle v|u\rangle \\ |u\rangle^\dagger &= \langle u| \\ (AB|u\rangle)^\dagger &= \left[(AB|u\rangle)^\top\right]^* = \left[(|u\rangle)^\top B^\top A^\top\right]^* \stackrel{\text{(II.26)}}{=} \langle u|B^\dagger A^\dagger\end{aligned}\quad (\text{II.27})$$

- (e) Die Projektoren P_j aus (II.9) sind offenbar selbsadjungiert

$$\begin{aligned}P_j &= |j\rangle\langle j| \\ \left((P_j)^\top\right)^* &= \left[(|j\rangle\langle j|)^\top\right]^* = \left[(\langle j|)^\top (|j\rangle)^\top\right]^* = |j\rangle\langle j|\end{aligned}$$

- (f) Eine etwas größere Klasse von Operatoren sind die sogenannten „**Normaloperatoren**“, die durch die Eigenschaft:

$$AA^\dagger = A^\dagger A \quad \left[A, A^\dagger\right] = AA^\dagger - A^\dagger A = 0 \quad (\text{II.28})$$

definiert sind.

- (g) Ein linearer Operator A heißt „**invertierbar**“ mit dem **inversen Operator** A^{-1} , wenn die durch (II.16) definierte Abbildung **eindeutig umkehrbar** ist. Es also einen Operator A^{-1} mit der Eigenschaft:

$$|u\rangle = A^{-1}|v\rangle \quad \forall |u\rangle, |v\rangle \in \mathcal{H} \quad \text{im Sinne von (II.16)}$$

gibt.

II.3 Der Spektralsatz für Normaloperatoren

Der womöglich zentralste Satz der Funktionalanalysis für die Quantenmechanik:

Jeder Normaloperator A lässt sich schreiben als:

$$A = \sum_a a|a\rangle\langle a| = \sum_a aP_a \quad (\text{II.30})$$

mit Eigenvektoren $|a\rangle$ von A d.h.

$$A|a\rangle = a|a\rangle \quad P_a = |a\rangle\langle a| \quad (\text{II.31})$$

Jede in eine Potenzreihe entwickelbare Funktion $f(A)$ von A ist dann darstellbar als:

$$f(A) = \sum_a f(a)|a\rangle\langle a| = \sum_a f(a)P_a \quad (\text{II.32})$$

¹¹→ RS I, p.252

Zur Verdeutlichung: Es gilt allgemein dass:

$$|a\rangle = \sum_j \langle j|a\rangle |j\rangle$$

Z.B.:

$$|\psi_t\rangle = \exp(-i\mathcal{H}t/\hbar)|\psi_0\rangle = \sum_j \exp(-iE_j t/\hbar)|E_j\rangle \langle E_j|\psi_0\rangle$$

Beweisskizze:

[A Normaloperator \Rightarrow (II.30); „ \Leftarrow “ in den Übungen]

Sei $|a_1\rangle$ ein (normierter) Eigenvektor von A zum Eigenwert a_1 ,

$$A|a_1\rangle = a_1|a_1\rangle \quad (\text{i})$$

Aus (II, 5, 16, 23)

$$\langle a_1|A^\dagger = \langle a_1|a_1^* \quad (\text{ii})$$

Also gilt $\langle a_1|A|a_1\rangle = a_1$ und $\langle a_1|A^\dagger|a_1\rangle = a_1^*$. Aus der letzteren Gleichung folgt (siehe (II.11))

$$A^\dagger|a_1\rangle = a_1^*|a_1\rangle + |b\rangle \quad (\text{iii})$$

mit

$$\langle a_1|b\rangle = 0 \quad (\text{iv})$$

Nach Voraussetzung ist A normal, d.h.

$$\begin{aligned} \langle a_1|AA^\dagger - A^\dagger A|a_1\rangle &= \langle a_1|AA^\dagger|a_1\rangle - \underbrace{\langle a_1|A^\dagger A|a_1\rangle}_{|a_1|^2 \langle a_1|a_1\rangle = |a_1|^2} \\ &\stackrel{(*)}{=} (\langle a_1|a_1 + \langle b|)(a_1^*|a_1\rangle + |b\rangle) - |a_1|^2 \\ &= |a_1|^2 + \langle b|b\rangle - |a_1|^2 = \langle b|b\rangle \\ &\stackrel{\text{L.S.}}{=} [A, A^\dagger] = 0 \end{aligned}$$

Bei (*) wurden die Gleichungen (i), (ii), (iii) und (iv) verwendet.

$$\Rightarrow |b\rangle = 0, \quad A^\dagger|a_1\rangle = a_1^*|a_1\rangle \quad \text{bzw} \quad \langle a_1|A = \langle a_1|a_1$$

Im nächsten Schritt definieren wir $A' := A - a_1|a_1\rangle\langle a_1|$. Dann verschwindet A' auf $|a_1\rangle$ und auf $\langle a_1|$ wegen (iv). Sei $|a_2\rangle$ Eigenvektor von A' mit Eigenwert a_2 und $\langle a_1|a_2\rangle = 0$. Danach Verfahren wie oben mit $|a_1\rangle$, etc, um schließlich die Darstellung $A - \sum_l a_l|a_l\rangle\langle a_l| = 0$ zu gewinnen \rightarrow Behauptung.

II.4 Observablen, vollständige Sätze von Observablen, Tensorräume

Bisher: Hilbertraumstruktur erschlossen aus der Wirkung von Polarisationsfiltern auf Photon wohldefinierter Eingangspolarisation, daraus folgte die Dimension des Hilbertraums.

Jetzt **allgemeiner:** Selbstadjungierte Operatoren A , deren Eigenvektoren eine Orthonormalbasis des Hilbertraums \mathcal{H} darstellen, mit anderen Worten: der Vollständigkeitsrelation (II.8) genügen, bezeichnen wir als „**Observable**“.

Dies stellt jedoch nicht sicher, dass die Basisvektoren von \mathcal{H} durch das Eigenwertspektrum von A eindeutig unterscheidbar sind, da letztere entartet sein können.

Daher bedarf es i.d.R. eines „**vollständigen Satzes von Observablen**“ A, B, C, \dots derart, dass:

- a) A, B, C, \dots paarweise **kommutieren** (oder auch „vertauschen“), d.h. $AB = BA$, $AC = CA$, $BC = CB$, ... oder, in der üblichen **Kommutator-Schreibweise** $[A, B] = 0$, $[A, C] = 0$, $[B, C] = 0$... mit

$$[A, B] = 0 = AB - BA \quad (\text{II.33})$$

Die Vertauschbarkeit impliziert, dass A, B, C, \dots gleichzeitig diagonalisierbar sind, d.h. eine gemeinsame Eigenbasis besitzen (Beweis s.u.).

- b) Die Eigenwerte $\{a_j, b_j, c_j, \dots\}$ von A, B, C, \dots erlauben die **eindeutige** Identifikation jedes Eigenvektors. $\{a_j, b_j, c_j, \dots\}$ heißen dann für den jeweiligen Eigenzustand charakteristische „**Quantenzahlen**“.

Beweis

Beweis der Äquivalenz von Vertauschbarkeit und Existenz einer gemeinsamen Basis zweier selbstadjungierten Operatoren A und B .

- (i) **gemeinsames Eigenbasis \Rightarrow Vertauschbarkeit**

Sei $|c\rangle$ Eigenvektor von A und B , mit $A|c\rangle = a|c\rangle$ und $B|c\rangle = b|c\rangle$ so folgt:

$$AB|c\rangle = bA|c\rangle = ba|c\rangle = ab|c\rangle = aB|c\rangle = Ba|c\rangle = BA|c\rangle$$

Gilt dies (nach Voraussetzung) für alle Eigenvektoren von A und B , dann auch für alle Vektoren in \mathcal{H} .

- (ii) **Vertauschbarkeit \Rightarrow Existenz einer gemeinsamen Eigenbasis**

Zunächst sollen A und B jeweils nichtentartete Spektren haben. Dann folgt aus $A|a\rangle = a|a\rangle$ und $AB = BA$, dass $AB|a\rangle = BA|a\rangle = aB|a\rangle$, d.h. $B|a\rangle$ ist Eigenvektor von A ($A(B|a\rangle) = a(B|a\rangle)$) zum selben Eigenwert a , d.h. wegen Nichtentartung der Spektren, $B|a\rangle = \lambda|a\rangle$, daher $|a\rangle$ auch Eigenvektor von B .

Ist dagegen a ein entarteter Eigenwert von A . Dann lässt sich jeder Eigenvektor $|a_n\rangle$ von A aus dem zu a gehörigen, entarteten Unterraum schreiben als

$$|a_n\rangle = \sum_b \langle b|a_n\rangle |b\rangle$$

mit $B|b\rangle = b|b\rangle$. Da $|a_n\rangle$ Eigenvektor von A zum Eigenwert a , folgt

$$\sum_b (A - a) \langle b|a_n\rangle |b\rangle = 0$$

Angenommen, $(A - a)|b\rangle \neq 0$, dann gilt, wegen $AB = BA$,

$$B(A - a)|b\rangle = (A - a)B|b\rangle = b(A - a)|b\rangle$$

, d.h. $(A - a)|b\rangle$ ist Eigenvektor von B , also $(A - a)|b\rangle$ linear unabhängig $\forall |b\rangle \Rightarrow \langle b|a_n\rangle = 0 \Rightarrow \nexists$

Ergo $(A - a)|b\rangle = 0 \forall |b\rangle \Rightarrow |b\rangle$ ist Eigenvektor von A zum Eigenwert a . $\Rightarrow \{|b\rangle\}$ definiert eine gemeinsame Basis von A und B !

Es wurde die folgende Schreibweise als Abkürzung benutzt:

$$„A - a“ \hat{=} A - a\mathbb{1}$$

[Verallgemeinerung für Observablen A, B, C, \dots analog (paarweise)]

(inspiriert durch die sogenannte Λ -Konfiguration z.B. in Ionen-fallen-Physik/ion trap physics)

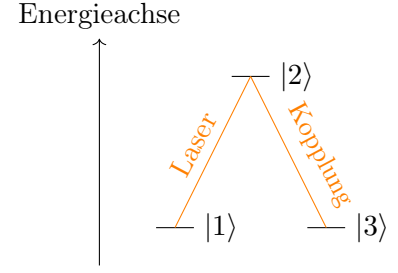


Abbildung II.1: Beispielhafte Darstellung der Zustände eines Quantensystems.

II.4.1 Beispiele:

Wir betrachten einen dreidimensionalen Hilbertraum mit Basisvektoren $|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle$ (Euklidische Orthonormalbasis), sowie Operatoren H und B mit folgender Matrixdarstellung (in der gegebenen Basis)

$$H = \hbar\omega_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad B = b \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{II.34})$$

\hbar, ω_0, b reell

- (a) Offenbar sind B und H selbstadjungiert (siehe (II.26))
- (b) Aus der Matrixdarstellung von H und B in $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$ folgt sofort, dass $|u_1\rangle$ ein H und B gemeinsamer Eigenvektor ist; entsprechend:

$$HB|u_1\rangle = BH|u_1\rangle \quad (\text{II.35})$$

Beispiel zu (b)

$$\begin{aligned} H &= \hbar\omega_0 (|u_1\rangle\langle u_1| - |u_2\rangle\langle u_2| - |u_3\rangle\langle u_3|) \\ B &= b (|u_1\rangle\langle u_1| + |u_2\rangle\langle u_3| + |u_3\rangle\langle u_2|) \end{aligned}$$

Bleibt nun noch der durch $|u_2\rangle$ und $|u_3\rangle$ aufgespannte, orthogonale Unterraum zu untersuchen: $\mathcal{H}_2 = \text{span}\{|u_2\rangle, |u_3\rangle\}$

Der Projektor auf \mathcal{H}_2

$$P_2 := |u_2\rangle\langle u_2| + |u_3\rangle\langle u_3| \quad (\text{II.36})$$

(Vergleiche (II.13))

erlaubt die Einschränkung von H und B auf \mathcal{H}_2 vermöge

$$P_2 H P_2 = -\hbar\omega_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = -\hbar\omega_0 \mathbb{1}_2 \quad (\text{II.37})$$

$$P_2 B P_2 = b \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{II.38})$$

Wegen (II.37) kommutieren H und B somit auf ganz \mathcal{H} .

Man überzeugt sich leicht davon, dass

$$\begin{aligned} |p_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|u_2\rangle + |u_3\rangle) \\ |p_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|u_2\rangle - |u_3\rangle) \end{aligned}$$

orthogonale Eigenvektoren von $P_2 B P_2$ mit Eigenwerten b und $-b$ sind.

	Eigenwert von H	Eigenwert von B
$ u_1\rangle$	$\hbar\omega_0$	b
$ p_2\rangle$	$-\hbar\omega_0$	b
$ p_3\rangle$	$-\hbar\omega_0$	$-b$

II.4.2 Tensor spaces

$\mathcal{H}_A, \mathcal{H}_B, \mathcal{H}_C$ Hilbert spaces

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B \otimes \mathcal{H}_C \quad \text{Hilbert space}$$

$$\begin{aligned} A|a\rangle &= a|a\rangle \quad , \quad |a\rangle \in \mathcal{H}_A \\ B|b\rangle &= b|b\rangle \quad , \quad |b\rangle \in \mathcal{H}_B \\ C|c\rangle &= c|c\rangle \quad , \quad |c\rangle \in \mathcal{H}_C \end{aligned}$$

$$|a\rangle \otimes |b\rangle \otimes |c\rangle := |a\rangle|b\rangle|c\rangle := |a, b, c\rangle \quad (\text{II.44})$$

Auch genannt „tripatit“ oder „multipatit“ und auf englisch „multipartition“. Erweiterungen von A, B tec. auf \mathcal{H} :

$$\begin{aligned} A &\rightarrow A \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \dots \\ B &\rightarrow \mathbb{1} \otimes B \otimes \mathbb{1} \dots \end{aligned}$$

- \mathcal{H} is a vector space

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$$

$$\begin{aligned} \lambda(|a\rangle \otimes |b\rangle) &= (\lambda|a\rangle) \otimes |b\rangle \quad \forall \lambda \in \mathbb{C} \\ &= |a\rangle \otimes (\lambda|b\rangle) \quad \forall |a\rangle \in \mathcal{H}_A, \forall |b\rangle \in \mathcal{H}_B \\ (|a_1\rangle + |a_2\rangle) \otimes |b\rangle &= |a_1\rangle \otimes |b\rangle + |a_2\rangle \otimes |b\rangle \\ |a\rangle \otimes (|b_1\rangle + |b_2\rangle) &= |a\rangle \otimes |b_1\rangle + |a\rangle \otimes |b_2\rangle \end{aligned}$$

- $\dim \mathcal{H} = ?$

$$\dim \mathcal{H} = \dim \mathcal{H}_A \cdot \dim \mathcal{H}_B$$

$$\text{Basis } \mathcal{H}_A : \{|a_j\rangle\}_{j=1 \dots \dim \mathcal{H}_A}$$

$$\mathcal{H}_B : \{|a_k\rangle\}_{k=1 \dots \dim \mathcal{H}_A}$$

$$\text{Basis } \mathcal{H} : \{|a_j\rangle \otimes |b_k\rangle\}_{j=1 \dots \dim \mathcal{H}_A, k=1 \dots \dim \mathcal{H}_B}$$

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= |\phi\rangle \otimes |\chi\rangle & |\phi\rangle &\in \mathcal{H}_A \\ & & |\chi\rangle &\in \mathcal{H}_B \end{aligned}$$

$$|\phi\rangle = \sum_j c_j |a_j\rangle$$

$$|\chi\rangle = \sum_k d_k |b_k\rangle$$

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \left(\sum_j c_j |a_j\rangle \right) \otimes \left(\sum_k d_k |b_k\rangle \right) \\ &= \sum_{jk} c_j d_k |a_j\rangle \otimes |b_k\rangle \end{aligned}$$

Example Polarizer $\mathcal{H} = \text{span}\{|0\rangle, |1\rangle\}$

$$\mathcal{H} \otimes \mathcal{H} = \text{span}\{|0\rangle \otimes |0\rangle, |0\rangle \otimes |1\rangle, |1\rangle \otimes |0\rangle, |1\rangle \otimes |1\rangle\}$$

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle \otimes |0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \otimes |1\rangle$$

- Scalar product:

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B \\ |\psi\rangle &= |\phi\rangle \otimes |\chi\rangle \\ |\xi\rangle &= |\eta\rangle \otimes |\zeta\rangle \\ \langle\psi|\xi\rangle &= (\langle\phi| \otimes \langle\chi|)(|\eta\rangle \otimes |\zeta\rangle) = \langle\phi|\eta\rangle \cdot \langle\chi|\zeta\rangle \\ |\psi\rangle &= \sum_{jk} c_{jk} |a_j\rangle \otimes |b_k\rangle \\ |\xi\rangle &= \sum_{lm} d_{lm} |a_l\rangle \otimes |b_m\rangle \\ \langle\psi|\xi\rangle &= \left(\sum_{jk} c_{jk}^* \langle a_j| \otimes \langle b_k| \right) \left(\sum_{lm} d_{lm} |a_l\rangle \otimes |b_m\rangle \right) \\ &= \sum_{jklm} c_{jk}^* d_{lm} \underbrace{\langle a_j|a_l\rangle}_{\delta_{jl}} \underbrace{\langle b_k|b_m\rangle}_{\delta_{km}} = \sum_{jk} c_{jk}^* d_{jk} \\ \langle\psi|\xi\rangle &= \langle\phi|\eta\rangle \cdot \langle\chi|\zeta\rangle\end{aligned}$$

- **Operators** A acts on \mathcal{H}_A , B acts on \mathcal{H}_B

$$\begin{aligned}A &\rightarrow (A \otimes \mathbb{1}_B) \\ B &\rightarrow (\mathbb{1}_A \otimes B)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}(A \otimes \mathbb{1}_B)|\phi\rangle \otimes |\chi\rangle &= (A|\phi\rangle) \otimes |\chi\rangle \\ (\mathbb{1}_A \otimes B)|\phi\rangle \otimes |\chi\rangle &= |\phi\rangle \otimes (B|\chi\rangle)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}A|a\rangle &= a|a\rangle \\ B|b\rangle &= b|b\rangle \\ (A \otimes \mathbb{1}_B)|a\rangle \otimes |b\rangle &= a|a\rangle \otimes |b\rangle \\ (\mathbb{1}_A \otimes B)|a\rangle \otimes |b\rangle &= |a\rangle \otimes b|b\rangle \\ (A \otimes B)|\phi\rangle \otimes |\chi\rangle &= (A|\phi\rangle) \otimes (B|\chi\rangle) \\ &= (A \otimes \mathbb{1}_B)(\mathbb{1}_A \otimes B)|\phi\rangle \otimes |\chi\rangle \\ &= (A \otimes \mathbb{1}_B)[|\phi\rangle \otimes (B|\chi\rangle)]\end{aligned}$$

General form:

$$\begin{aligned}R &= \sum_j S_j^A \otimes T_j^B \\ |\psi\rangle &= \sum_{jk} c_{jk} |\phi_j\rangle \otimes |\chi_k\rangle \quad \phi \in \mathcal{H}_A, \chi \in \mathcal{H}_B\end{aligned}$$

General $|\psi\rangle \neq |\phi\rangle \otimes |\chi\rangle$ “Entangled”

$\begin{array}{c} \backslash \mathcal{H}_A \\ \mathcal{H}_B \end{array}$	$ \phi_1\rangle, \quad \phi_2\rangle, \quad \dots$
$ \chi_1\rangle$	$ \phi_1\rangle \otimes \chi_1\rangle \quad \dots$
$ \chi_2\rangle$	\cdot
\cdot	\cdot
\cdot	
\cdot	

Bemerkungen:

- (1) war der Rest der letzten Vorlesung über Tensorräume
- (2) Für einen Operator der Form $O = A + B + C$ mit $A|a\rangle = a|c\rangle \dots$ gilt:

$$O|a, b, c\rangle = (a + b + c)|a, b, c\rangle \quad (\text{II.60})$$

Beispiel:

Helium-Atom ohne e-e-Wechselwirkung

Anregung:

$$H_{He} = H_{Z=2}^{(1)} + H_{Z=2}^{(2)} = -\frac{1}{2n_1^2} - \frac{1}{2n_2^2}$$

Die $H_{Z=2}$ Terme sind klassische Wasserstoffähnliche Atome.

Allgemeinster (Zustands-) Vektor im bipartitem Hilbertraum $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$

$$|\psi\rangle = \sum_{jk} c_{jk} |\varphi_j\rangle \otimes |\chi_k\rangle$$

$|\varphi_j\rangle$ und $|\chi_k\rangle$ sind beliebig und nicht notwendig Basisvektoren !

$$|\psi\rangle \neq |\varphi\rangle \otimes |\chi\rangle \quad , \quad \forall |\varphi\rangle \in \mathcal{H}_A, |\chi\rangle \in \mathcal{H}_B$$

heißt **verschränkt** oder **nicht-separabel** | entangled or non-entangled.

Wichtiges Hilfsmittel zur Charakterisierung des Verschänkungsgehalts bipartiter Systeme:

Schmidt-Zerlegung $\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ gibt es eine ONB $\{|j_A\rangle\}, \{|j_B\rangle\}$ von \mathcal{H}_A und \mathcal{H}_B , sowie Koeffizienten:

$$\lambda_j \in \mathbb{R}_0^+, \sum \lambda_j^2 = 1$$

Schmidt-Zerlegung

$$|\psi\rangle = \sum_j \lambda_j |j_A\rangle \otimes |j_B\rangle \quad (\text{II.61})$$

Dies ist eine erhebliche Vereinfachung gegenüber II.49 und II.57

Bisher: Einbettung der Elemente der Faktorräume in den Tensorraum.

Jetzt: umgekehrte Richtung - lassen sich $|\psi\rangle$ aus \mathcal{H} in eindeutiger Weise mit Zuständen der Faktorräume identifizieren ?

Sei $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, dann ist gemäß (II.9) der Projektor auf $|\psi\rangle$ durch:

$$P_{|\psi\rangle} \stackrel{(II.9)}{=} |\psi\rangle\langle\psi| \stackrel{(II.61)}{=} \sum_{jj'} \lambda_j \lambda_{j'} |j_A\rangle\langle j'_A| \otimes |j_B\rangle\langle j'_B| \quad (II.62)$$

Zunächst nehmen wir an, $|\psi\rangle$ besitze nur einen nichtverschwindenden Schmidt-Koeffizienten, d.h. $\lambda_j = \delta_{jk}$, womit folgt:

$$|\psi\rangle\langle\psi| = |k_A\rangle\langle k_A| \otimes |k_B\rangle\langle k_B| \quad (II.63)$$

Bilden wir die **partielle Spur** dieses Projektionsoperators über eine vollständige Basis von \mathcal{H}_B , so erhalten wir:

$$\begin{aligned} \underset{\substack{\uparrow \\ \text{„trace“}}}{\text{tr}_B} |\psi\rangle\langle\psi| &= \underset{\substack{\uparrow \\ \text{„Spur“}}}{\text{Sp}_B} |\psi\rangle\langle\psi| = \sum_m {}_B\langle m|\psi\rangle\langle\psi|m\rangle_B \\ &= \sum_m {}_B\langle m| \left[|k_A\rangle\langle k_A| \otimes |k_B\rangle\langle k_B| \right] |m\rangle_B \\ &\stackrel{(II.63)}{=} \sum_m |k_A\rangle\langle k_A| {}_B\langle m|k_B\rangle\langle k_B|m\rangle_B \\ &= |k_A\rangle\langle k_A| \sum_m \langle k_B|m\rangle_B \langle m|k_B\rangle \\ &= |k_A\rangle\langle k_A| \underbrace{\sum_m {}_B\langle m|k_B\rangle\langle m|k_B\rangle}_{=1: \text{Vollständigkeit!}} = |k_A\rangle\langle k_A| \underbrace{\langle k_B|k_B\rangle}_{\stackrel{(II.61)}{=} 1} \\ &= |k_A\rangle\langle k_A| \end{aligned}$$

wobei ${}_B\langle m|$ und $|m\rangle_B$ ONB-Vektoren aus \mathcal{H}_B sind.

Es gilt also:

$$\text{tr}_B |\psi\rangle\langle\psi| = |k_A\rangle\langle k_A| \quad (II.64)$$

Dies liefert also eine eindeutige Zuordnung zwischen $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ (mit der Voraussetzung $\lambda_j = \delta_{jk}$!!!) und $|k_A\rangle \in \mathcal{H}_A$ (nach Aussparen der \mathcal{H}_B -Komponente von $|\psi\rangle$).

Völlig analog gilt:

$$\text{tr}_A |\psi\rangle\langle\psi| = |k_B\rangle\langle k_B| \quad (II.65)$$

Interpretation von (II.64, II.65)

Verzicht auf die in den Basiszuständen des Faktorraums, über den gespurt wird, kodierte Information bringt **keinen** Informationsverlust bzgl. des in den Basiszuständen des verbleibenden Faktorraums eingeschriebene Struktur.

Die Situation verändert sich grundlegend, wenn wir mehr als einen nichtverschwindenden Schmidt-Koeffizienten λ_j in (II.61) zulassen:

Mit (II.62) erhält man für die Spur über \mathcal{H}_B :

$$\begin{aligned} \text{tr}_B |\psi\rangle\langle\psi| &\stackrel{(II.62)}{=} \sum_m \sum_{jj'} \lambda_j \lambda_{j'} |j_A\rangle\langle j'_A| \underbrace{{}_B\langle m|j_B\rangle}_{\delta_{mj}} \underbrace{\langle j'_B|m\rangle_B}_{\delta_{mj'}} \\ &= \sum_m \lambda_m^2 |m_a\rangle\langle m_a| =: \rho_A = \text{reduzierte Dichtematrix} \end{aligned} \quad (II.66)$$

mit $|\psi\rangle = \text{Zustand(-s-Vektor)}$ und $\rho = \text{Zustand}$.

Dies ist ein diagonal Operator auf \mathcal{H}_A , mit Eigenwerten $\lambda_m^2 < 1$. Da aber jeder Projektor

$|\varphi\rangle\langle\varphi|$ auf einen beliebigen Zustand $|\varphi\rangle \in \mathcal{H}_A$ Eigenwerte 0 und 1 hat, lässt sich $\text{tr}_B|\psi\rangle\langle\psi|$ im allgemeinen **nicht** mit einem Zustandsvektor in \mathcal{H}_A identifizieren!

$$\begin{aligned} \text{tr}_B|\psi\rangle\langle\psi| &= \rho_A \\ \text{tr}_A|\psi\rangle\langle\psi| &= \rho_B \end{aligned} \quad (\text{II.67})$$

Dabei ist ρ der **reduzierte/r Dichtematrix -operator** oder **statistischer Operator**.

Partielle Spurbildung über \mathcal{H}_A oder \mathcal{H}_B führt i.a. (d.h. für beliebige Verteilung der Schmidt-Koeffizienten von $|\psi\rangle$) auf operatorwertige Objekte der Form (II.66), die nur für separable $|\psi\rangle$ projektorwertig sind.

Dichtematrizen haben folgende Eigenschaften:

$$\begin{aligned} \rho_A^\dagger &= \rho_A \\ \text{tr}_A \rho_A &\stackrel{\text{(II.61)}}{=} \stackrel{\text{(II.66)}}{=} 1 = \text{tr}_A \text{tr}_B |\psi\rangle\langle\psi| \\ \text{tr} \rho_A^2 &\leq 1 \\ \rho_A &\geq 0 \end{aligned} \quad (\text{II.68})$$

Zur letzten Eigenschaft gilt: d.h. ρ_A hat nichtneg. EW ρ_A positiver Operator.

Wegen $\sum \lambda_m^2 = 1$ und $\lambda_m \in \mathbb{R}_0^+$ gilt, dass $\text{tr} \rho_A^2 = 1$ genau dann, wenn:

$$\rho_A = |\varphi\rangle\langle\varphi| \quad \text{mit} \quad |\varphi\rangle \in \mathcal{H}_A \quad (\text{II.69})$$

Gilt (II.69), so bezeichnet man ρ_A als „**reinen Zustand**“, der m.a.W. dadurch gekennzeichnet ist, dass er mit einem Zustands-Vektor identifizierbar ist. Andernfalls heißt ρ_A „**gemischter Zustand**“ ($\Leftrightarrow \text{tr} \rho_A^2 < 1$).

Motivation der Begrifflichkeit durch Wahl einer bestimmten Darstellung (d.h. in vorgegebener Basis)

$$\begin{aligned} \rho_A = |\varphi\rangle\langle\varphi| &= \left(\sum_j c_j |j\rangle \right) \left(\sum_l c_l^* \langle l| \right) = \sum_{jl} c_j \cdot c_l^* |j\rangle\langle l| \\ &= \begin{pmatrix} |c_1|^2 & c_1 c_2^* & c_1 c_3^* & \dots \\ c_1^* c_2 & |c_2|^2 & c_2 c_3^* & \dots \\ c_1^* c_3 & c_2^* c_3 & |c_3|^2 & \\ \vdots & \vdots & & \ddots \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{II.70})$$

Diagonalisierung führt (da ρ_A ein Projektor ist) auf:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \\ \vdots & \vdots & & \ddots \end{pmatrix}$$

Dagegen wissen wir wegen (II.66), dass ein gemischter Zustand die Diagonalform:

$$\begin{pmatrix} |c_1|^2 & 0 & \dots \\ 0 & |c_2|^2 & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (\text{II.71})$$

hat, also **nicht** in die Form von (II.70) überführt werden kann (bei (II.71) mindestens 2 Diagonaleinträge $\neq 0$).

Reminiszenz an Kapitel I.1 (Doppelspalt) und I.2 dort: Die Interferenzterme dort werden in (II.70) gerade durch die Nebendiagonalelemente bestimmt. Die relevante Information über die Interferenzfähigkeit des Systems ist den „**Kohärenzen**“

$$c_i c_j^* = |c_i| |c_j| e^{i(\varphi_i - \varphi_j)}$$

in der vorgegebenen Basis eingeschrieben.

★hier fehlt eine Grafik★

Die Diagonalelemente der Dichtematrix heißen auch „**Populationen**“ (Wkt. für sich klassisch ausschließende Alternativen). Das Abklingen (d. Ausdämpfen) der Nebendiagonalelemente/Kohärenzen in einem dynamischen Prozess heißt „**Dekohärenz**“.

Da man mit dem Verschwinden des Interferenzterms die Phänomenologie klassischer Teilchen am Doppelspalt gewinnt, vermittelt Dekohärenz der **quanten-klassischen Übergang**.

[Interessantes Paper zu Buckyballs auf ILIAS](#)

Kapitel III

Dynamik

Bisher: statische Struktur des Zustandsraums der Quantenmechanik.

Jetzt: Parametrisierung in der Zeit (zunächst aber **ohne** Begründung der „Richtung“ der Zeit (→ Ausblick: Dekohärenztheorie als ein aktueller Kandidat für den Ursprung des Zeitpfeils.)).

III.1 Die Schrödinger-Gleichung

Forderungen an die zeitliche Entwicklung eines Zustandes $|\psi\rangle$: Stetigkeit, d.h.

$$\lim_{t \rightarrow t_0} |\psi(t)\rangle = |\psi(t_0)\rangle = |\psi_0\rangle \equiv \text{Anfangszustand} \quad (\text{III.1})$$

wobei $t > t_0$.

Weiter werde der Zustand $|\psi(t)\rangle$ durch Operation des **Zeitentwicklungsoperators** $U(t, t_0)$ auf $|\psi_0\rangle$ erzeugt, d.h.

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\psi_0\rangle \quad (\text{III.2})$$

Im Sinne der Interpretation von $|\psi\rangle$ also Wahrscheinlichkeitsamplitude für Messergebnisse fordern wir die Normerhaltung im Laufe der Zeit, was die Unitarität von $U(t, t_0)$ impliziert (daher auch Sprechweise $U \equiv$ "the unitary").

$$U^\dagger(t, t_0)U(t, t_0) = \mathbb{1} \quad \text{bzw.} \quad U^\dagger(t, t_0) = U^{-1}(t, t_0) \quad (\text{III.3})$$

Dies garantiert:

$$\| |\psi(t)\rangle \| = 1 \quad \forall t \quad (\text{III.4})$$

Im Sinne einer kontinuierlichen und in einzelnen Zeitintervalle zerlegbaren Entwicklung fordern wir außerdem:

$$U(t, t_0) = U(t_1, t_2)U(t, t_0) \quad \forall t_2 > t_1 > t_0 \quad (\text{III.5})$$

Mit der Stetigkeitsbedingung (III.1) folgt für ein infinitesimales Zeitintervall dt :

$$\lim_{dt \rightarrow 0} U(t_0 + dt, t_0) = \mathbb{1} \quad (\text{III.6})$$

Der Ansatz

$$U(t_0 + dt, t_0) = \mathbb{1} - i\Omega dt \quad (\text{III.7})$$

mit $\Omega = \Omega^\dagger$, erfüllt die Forderungen aus (III.3), (III.5) und (III.6) - unter der Voraussetzung, dass Terme der Ordnung dt^2 vernachlässigbar sind.

$$\mathbb{1} - i\Omega dt + i\Omega dt + \cancel{cdt^2}$$

Ω in Gleichung (III.7) hat die Dimension $[S^{-1}]$, was, zusammen mit der Rolle der klassischen Hamiltonfunktion als Erzeuger der Phasenraumdynamik (siehe insbesondere Liouville-Satz bzw.

Liouville-Gleichung, die die Zeitentwicklung der Phasenraumvolumens beschreibt. $\sim i \frac{\partial f}{\partial t} = Lf$) und

$$E \sim \hbar \omega \quad (\text{III.8})$$

(nach Planck) zu der Identifikation:

$$\Omega := \frac{H}{\hbar} \quad (\text{III.9})$$

mit $H \equiv$ Hamiltonfunktion, führt. In der QM bezeichnen wir H als den **Hamilton-Operator**, der für autonome (d.h. Zeitunabhängige) H mit dem Energieoperator identifiziert wird.

Wir leiten nun die Bewegungsgleichungen für U her, um über beliebige Zeitintervalle propagieren zu können. Propagieren $\leftrightarrow U =$ Propagator (siehe HöMa, Cauchy Integrale und Zusammenhang Propagator und Greensfunktionen).

$$U(t + dt, t_0) \stackrel{(\text{III.5})}{=} U(t + dt, t)U(t, t_0) \stackrel{(\text{III.7})}{=} \stackrel{(\text{III.9})}{=} \left(\mathbb{1} - i \frac{H}{\hbar} dt \right) U(t, t_0)$$

$$U(t + dt, t_0) - U(t, t_0) = -i \frac{H}{\hbar} dt U(t, t_0)$$

woraus der Differenzquotient

$$\lim_{dt \rightarrow 0} \frac{U(t + dt, t_0) - U(t, t_0)}{dt} = \frac{\partial U}{\partial t} = -i \frac{H}{\hbar} U(t, t_0)$$

$$i\hbar \frac{\partial U(t, t_0)}{\partial t} = HU(t, t_0) \quad (\text{III.10})$$

Durch Multiplikation von rechts mit $|\psi_0\rangle$ erhalten wir die Schrödingergleichung:

Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle \quad (\text{III.11})$$

welche $\forall t$ gültig ist.

III.1.1 Heisenberg- vs. Schrödinger-Bild

Die Gleichung (III.2) liefert die zeitliche Entwicklung des Zustandsvektors

$$|\psi(t)\rangle \sim c_0(t)|0\rangle + c_1(t)|1\rangle$$

\downarrow
Kap.I

d.h. der Zustand $|\psi(t)\rangle$ bewegt sich bezüglich eines festen Koordinatensystems. Völlig gleichberechtigt ist die Perspektive, wonach der Zustandsvektor zeitlich unveränderlich ist, sich jedoch das Koordinatensystem bewegt oder dreht. Während nach (III.2) also die Zustände die Zeitabhängigkeit tragen, wird in der alternativen Sichtweise die Zeitabhängigkeit vollständig auf die Observablen abgewälzt (die Observablen helfen ja über ihre Eigenvektoren die Vektorraumbasis geliefert).

$$|\psi(t)\rangle_{\text{Schrödinger}} \stackrel{(\text{III.2})}{=} U(t, t_0)|\psi_0\rangle \quad \rightsquigarrow \quad |\psi_0\rangle =: |\psi\rangle_{\text{Heisenberg}} = U^\dagger(t, t_0)|\psi(t)\rangle_{\text{Schrödinger}} \quad (\text{III.12})$$

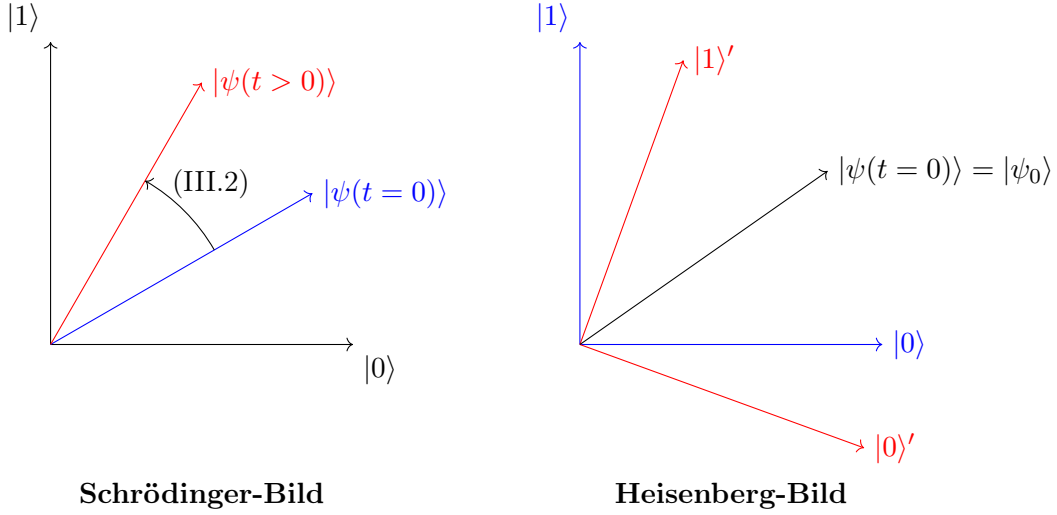


Abbildung III.1: Verschiedene Modelle zur Vorstellung einer Zeitabhängigen Wellenfunktion von Schrödinger und Heisenberg.

Erwartungswerte von Observablen sollten nicht von der Wahl des Bildes abhängen. Daher:

$$\begin{aligned}
 \text{Schrödinger } \langle \psi(t) | A_{\text{Schrödinger}} | \psi(t) \rangle_{\text{Schrödinger}} &\stackrel{(III.2)}{=} \underbrace{\langle \psi_0 |}_{\text{Heisenberg } \langle \psi |} U^\dagger(t, t_0) A_{\text{Schrödinger}} U(t, t_0) | \psi_0 \rangle \\
 &\stackrel{(III.12)}{=} \text{Heisenberg } \langle \psi | A_{\text{Heisenberg}}(t) | \psi \rangle_{\text{Heisenberg}}
 \end{aligned} \quad (III.13)$$

mit

$$A_{\text{Heisenberg}}(t) = U^\dagger(t, t_0) A_{\text{Schrödinger}} U(t, t_0) \quad (III.14)$$

Anstelle der Schrödingergleichung (III.11) benötigen wir Entwicklungsgleichung für $A_{\text{Heisenberg}}$ die sich aus (III.10) und (III.14) gewinnen lässt:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} A_{\text{Heisenberg}} \stackrel{(III.14)}{=} i\hbar \left[\frac{\partial U^\dagger}{\partial t} A_{\text{Schrödinger}} U + U^\dagger \frac{\partial A_{\text{Schrödinger}}}{\partial t} U + U^\dagger \frac{\partial U}{\partial t} \right]$$

Umformen mit $i\hbar \frac{\partial U}{\partial t} | \psi_0 \rangle = \underbrace{H U | \psi_0 \rangle}_{| \psi(t) \rangle}$

$$\begin{aligned}
 &= -U^\dagger H_{\text{Schrödinger}} A_{\text{Schrödinger}} U + U^\dagger A_{\text{Schrödinger}} H_{\text{Schrödinger}} U + i\hbar U^\dagger \frac{\partial A_{\text{Schrödinger}}}{\partial t} U \\
 \Rightarrow \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} A_{\text{Heisenberg}} &= U^\dagger [A_{\text{Schrödinger}}, H_{\text{Schrödinger}}] U + i\hbar U^\dagger \frac{\partial A_{\text{Schrödinger}}}{\partial t} U
 \end{aligned} \quad (III.15)$$

Mit $UU^\dagger \stackrel{(III.3)}{=} \mathbb{1}$ und $A_{\text{Heisenberg}} \stackrel{(III.14)}{=} U^\dagger A_{\text{Schrödinger}} U$ wird (III.15) zu:

Äquivalente dynamik im Heisenberg Bild zu SGL

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} A_{\text{Heisenberg}} = [A_{\text{Heisenberg}}, H_{\text{Heisenberg}}] + i\hbar \left(\frac{\partial A_{\text{Schrödinger}}}{\partial t} \right)_{\text{Heisenberg}} \quad (III.16)$$

äquivalente Dynamik zur Schrödinger-Gleichung (III.11) im Heisenberg Bild. Die direkte Analogie zur klassischen Hamilton'schen Dynamik in den Übungen.

III.1.2 Das Wechselwirkungsbild

→ Eine zwischen Schrödinger- und Heisenberg-Bild „interpolierende“ Perspektive, die eine Zerlegung des Hamiltonoperators voraussetzt, wobei H_0 die „triviale“ Dynamik (ungestört und bekannt!) erzeugt, V die Abweichung oder Störung davon induziert.

Ergänzung zum letzten Mal: Die Bewegungsgleichung für die durch (II.66) und (II.67) definierten Dichteoperatoren (analog zur Herleitung) von (III.16) → Übungen.

$$i\hbar\dot{\rho}_{\text{Schrödinger}} = [H_{\text{Schrödinger}}, \rho_{\text{Schrödinger}}] \quad (\text{III.17})$$

Beachte das andere Vorzeichen als in (III.16) und (III.24).

$$H = H_0 + V^1 \quad (\text{III.18})$$

Das **Wechselwirkungsbild** wälzt die H_0 -Dynamik auf die Observable ab, die V -Dynamik auf den Zustand (→ rotating wave approximation).

Zustandsdynamik:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle_{\text{Wechselwirkung}} &= U_{\text{Wechselwirkung}} |\psi\rangle_{\text{Heisenberg}} \\ &= U_{\text{Wechselwirkend}} |\psi_0\rangle \end{aligned} \quad (\text{III.19})$$

und im Schrödinger-Bild:

$$|\psi(t)\rangle_{\text{Schrödinger}} = U_0(t, t_0) U_{\text{Wechselwirkung}} |\psi_0\rangle \quad (\text{III.20})$$

beziehungsweise:

$$U(t, t_0) = U_0(t, t_0) U_{\text{Wechselwirkend}}(t, t_0) \quad (\text{III.21})$$

wobei $U_{\text{Wechselwirkung}}$ von V , U_0 von H_0 erzeugt wird

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) &\stackrel{(\text{III.21})}{=} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (U_0 U_{\text{WW}}) = i\hbar \left[\frac{\partial U_0}{\partial t} U_{\text{WW}} + U_0 \frac{\partial U_{\text{WW}}}{\partial t} \right] \\ &\stackrel{(\text{III.10})}{=} \boxed{H_0 U_0 U_{\text{WW}} + i\hbar U_0 \frac{\partial U_{\text{WW}}}{\partial t}} \\ &\stackrel{(\text{III.10})}{=} \stackrel{(\text{III.18})}{=} i\hbar (H_0 + V) U \stackrel{(\text{III.21})}{=} \boxed{H_0 U_0 U_{\text{WW}} + V U_0 U_{\text{WW}}} \end{aligned}$$

d.h.:

$$\begin{aligned} i\hbar U_0 \frac{\partial U_{\text{WW}}}{\partial t} &= V U_0 U_{\text{WW}} \\ U_0^\dagger \cdot \stackrel{(\text{III.22})}{\Rightarrow} i\hbar \frac{\partial U_{\text{WW}}}{\partial t} &= U_0^\dagger V U_0 U_{\text{WW}} \\ &:= V_{\text{WW}} U_{\text{WW}} \end{aligned} \quad (\text{III.22})$$

Wiederholung:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle_{\text{WW}} &\stackrel{(\text{III.19})}{=} U_{\text{WW}}(t, t_0) |\psi\rangle_H \\ &\stackrel{(\text{III.20})}{=} U_0^\dagger(t, t_0) |\psi(t)\rangle_S \\ |\psi(t)\rangle_{\text{WW}} &= |\psi\rangle_H = |\psi_0\rangle \stackrel{(\text{III.12})}{=} \stackrel{(\text{III.18})}{=} U_0^\dagger(t, t_0) |\psi(t)\rangle_S \end{aligned}$$

¹Kato: Perturbation theory of linear Operators.

$$U(t, t_0) \stackrel{\text{(III.21)}}{=} U_0(t, t_0) U_{\text{WW}}(t, t_0)$$

Es folgt dann (III.23):

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial U_{\text{WW}}}{\partial t} &= U_0^\dagger V U_0 U_{\text{WW}} \\ &:= V_{\text{WW}} U_{\text{WW}} \end{aligned}$$

Schrödingergleichung im Wechselwirkungs-Bild

$$\stackrel{\text{(III.19)}}{\rightarrow} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle_{\text{WW}} = V_{\text{WW}} |\psi(t)\rangle_{\text{WW}} \quad \text{(III.23)}$$

Wiederum aus der Unabhängigkeit der Erwartungswerte von Observablen von dem gewählten Bild folgt für die Bewegungsgleichung der Observablen im WW-Bild (siehe: (III.22)):

$$\begin{aligned} {}_S \langle \psi(t) | A_S | \psi(t) \rangle_S &\stackrel{\text{(III.20)}}{=} \langle \psi_0 | U_{\text{WW}}^\dagger U_0^\dagger A_S U_0 U_{\text{WW}} | \psi_0 \rangle \\ &\stackrel{\text{(III.22)}}{=} {}_{\text{WW}} \langle \psi(t) | U_0^\dagger A_S U_0 | \psi(t) \rangle_{\text{WW}} \stackrel{\text{(III.14)}}{=} {}_{\text{WW}} \langle \psi(t) | A_{\text{WW}} | \psi(t) \rangle_{\text{WW}} \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} A_{\text{WW}} &= \text{s.a. Umgebung von (III.14)} = -U_0^\dagger H_0 U_0^\dagger A_S U_0 + U_0^\dagger A_S U_0^\dagger H_0 U_0 + i\hbar U_0^\dagger \frac{\partial A_S}{\partial t} U_0 \\ &= -H_{0,\text{WW}} A_{\text{WW}} + A_{\text{WW}} H_{0,\text{WW}} + i\hbar \left(\frac{\partial A_S}{\partial t} \right)_{\text{WW}} \\ &= [A_{\text{WW}}, H_{0,\text{WW}}] + i\hbar \left(\frac{\partial A_S}{\partial t} \right)_{\text{WW}} \end{aligned} \quad \text{(III.24)}$$

mit:

$$A_{\text{WW}} = U_0^\dagger A_{\text{Schrödinger}} U_0 \quad \text{(III.25)}$$

III.2 Dynamik eines Zweiniveausystems unter dem Einfluss einer Störung

Häufig anzutreffendes Szenario in aktueller AMo (Atom-, Molecule and Quantumoptics) | Cond-Mat (Condensed Matter) - Experimentalphysik: „effektive“ Zwei-Niveau-Systeme ($\equiv H_0$) unter dem Einfluss (häufig oszillierender (think of lasers)) Felder

$$\text{spin up/down: } |\uparrow\rangle \quad |\downarrow\rangle \quad \text{NMR} \quad |0\rangle \quad |1\rangle \quad \text{Qbits}$$

★hier fehlt eine Grafik★ Cond Mat oder Zweiniveausystem und deren Bra-Ket Symbol Schreibweise

Der Hamiltonoperator der Zweiniveausystems ist definiert durch die Eigenwertgleichung

$$H_0 |j\rangle = E_j |j\rangle \quad j = 0, 1 \quad \text{(III.26)}$$

Die Störung V von H_0 sei gegeben als „Dipolnäherung“:

$$V = e \mathbf{r} \mathbf{F} \cos(\omega t) \quad \text{(III.27)}$$

mit $H \stackrel{\text{(III.18)}}{=} H_0 + V$.

e ist die Elementarladung des Elektrons, \mathbf{r} der Ortsvektor bzgl. des ortsfesten Kerns, \mathbf{F} ist die Feldamplitude und ω Feldfrequenz.

Diese Störung ist klassisch also nicht Quantisiert, der Anteil H_0 ist quantisiert. Das ganze nennt man die **semi-klassische** Beschreibung der Licht-Materie-Wechselwirkung.

★hier fehlt eine Grafik★ mit Effektivem Potential

Die Lösung der Schrödinger-Gleichung (III.11) (im Schrödinger-Bild, wobei wir die Indizes b sofort weglassen) im durch $|0\rangle$ und $|1\rangle$ aufgespannten Hilbertraum setzen wir an als

$$|\psi(t)\rangle = c_0(t)e^{-iE_0t/\hbar}|0\rangle + c_1(t)e^{-iE_1t/\hbar}|1\rangle \quad (\text{III.28})$$

Dies macht Sinn, da die Eigenvektoren von H_0 die (durch H_0 induzierte) Zeitentwicklung

$$U_0(t, t_0)|j\rangle = e^{-iE_j(t-t_0)/\hbar}|j\rangle \quad (\text{III.29})$$

tragen.

Dies stammt von:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle &= H_0|\psi\rangle = (E_0|0\rangle\langle 0| + E_1|1\rangle\langle 1|)|\psi\rangle = E_0|0\rangle\langle 0|\psi\rangle + E_1|1\rangle\langle 1|\psi\rangle \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t}(\langle 0|\psi\rangle|0\rangle + \langle 1|\psi\rangle|1\rangle) \end{aligned}$$

durch Linksmultiplikation von $\langle 0| \cdot ||$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\langle 0|\psi\rangle = E_0\langle 0|\psi\rangle$$

Wir setzen $t_0 := 0$ und $|\psi_0\rangle$ als beliebige Linearkombination von $|0\rangle$ und $|1\rangle$ mit $c_0(t=0)$ und $c_1(t=0)$ an. Eine nicht verschwindende Störung V in (III.18) wird dann gerade eine nichttriviale Dynamik von c_0 und c_1 induzieren.

Einsetzen von (III.28) in die Schrödingergleichung (III.11) (mit dem Ziel, Entwicklungsgleichungen für c_0 und c_1 zu gewinnen):

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} &= i\hbar \dot{c}_0 e^{-iE_0t/\hbar}|0\rangle + E_0 c_0 e^{-iE_0t/\hbar}|0\rangle + i\hbar \dot{c}_1 e^{-iE_1t/\hbar}|1\rangle + E_1 c_1 e^{-iE_1t/\hbar}|1\rangle \\ &\stackrel{\text{R.S.}}{=} H|\psi\rangle \stackrel{\substack{H=H_0+V \\ (\text{III.18}) \\ (\text{III.26}) \\ (\text{III.28})}}{=} E_0 c_0 e^{-iE_0t/\hbar}|0\rangle + E_1 c_1 e^{-iE_1t/\hbar}|1\rangle + c_0 e^{-iE_0t/\hbar}V|0\rangle + c_1 e^{-iE_1t/\hbar}V|1\rangle \end{aligned}$$

ergo:

$$i\hbar \dot{c}_0 e^{-iE_0t/\hbar}|0\rangle + i\hbar \dot{c}_1 e^{-iE_1t/\hbar}|1\rangle = c_0 e^{-iE_0t/\hbar}V|0\rangle + c_1 e^{-iE_1t/\hbar}V|1\rangle \quad (\text{III.30})$$

Um Entwicklungsgleichungen für c_0 und c_1 zu erhalten, filtern wir die entsprechenden Anteile durch (Skalare) Multiplikation von (III.30) von links mit $\langle 0|$ bzw. $\langle 1|$ heraus. Dabei setzen wir zusätzlich voraus, dass die Diagonalelemente von V aus Paritätsgründen (d.h. Symmetriegründen, s. weiter unten - Begründung wird nachgeliefert) verschwinden sollen (häufig wahr):

$$\langle j|V|j\rangle = 0 \quad (\text{III.31})$$

Somit:

$$i\hbar \dot{c}_0 = c_1 \langle \phi_0|V|\phi_0\rangle \quad i\hbar \dot{c}_1 = c_0 \langle \phi_1|V|\phi_1\rangle \quad (\text{III.32})$$

mit $|\phi_j\rangle = e^{-iE_jt/\hbar}|j\rangle$. Mit (III.27) wird das zu:

$$\begin{aligned} \langle \phi_0|V|\phi_0\rangle &\stackrel{(\text{III.32})}{=} e^{-i(E_1-E_0)t/\hbar}\langle 0|V|1\rangle = e^{-i\omega_0 t} eF\langle 0|x|1\rangle \cos(\omega t) \\ &= e^{-i\omega_0 t} \mathcal{V} \hbar \cos(\omega t) \end{aligned}$$

$$\omega_0 := \frac{E_1 - E_0}{\hbar} \quad \mathcal{V} = \frac{eF\langle 0|x|1\rangle}{\hbar} \quad (\text{III.33})$$

worin ω_0 die Übergangsfrequenz ist und \mathcal{V} die Kopplungsstärke, mit der Feldamplitude F .

Damit wird (III.32) zu:

$$i\dot{c}_0 = c_1 e^{-i\omega_0 t} \mathcal{V} \cos(\omega t) \quad i\dot{c}_1 = c_0 e^{+i\omega_0 t} \mathcal{V}^* \cos(\omega t) \quad (\text{III.34})$$

[Übungsaufgabe: Man zeige dass: $|||\psi\rangle||^2 = 1 \forall t$]

(III.34) kann für die Matrixelemente der $|\psi\rangle$ repräsentierenden Dichtematrix σ umformuliert werden: Mit (II.71)

$$\sigma_{00} = |c_0|^2 = c_0 c_0^* \quad \sigma_{11} = |c_1|^2 = c_1 c_1^* \quad \equiv \text{Besetzung bzw. Population} \quad (\text{III.35})$$

$$\sigma_{01} = c_0 c_1^* \quad \sigma_{10} = c_1 c_0^* = \sigma_{01}^* \quad \equiv \text{Kohärenzen „coherences“} \quad (\text{III.36})$$

Aus der Kohärenz \rightarrow Phaseninformation, kodiert Energieskalare ($E_0 - E_1$) (für $\mathcal{V} = 0$).

Mit (III.34) ergibt sich daher für die Zeitentwicklung der σ_{ij} :

$$\begin{aligned} \dot{\sigma}_{11} &= -\dot{\sigma}_{00} = -i \cos(\omega t) [\sigma_{01} \mathcal{V}^* e^{i\omega_0 t} - \sigma_{10} \mathcal{V} e^{-i\omega_0 t}] \\ \dot{\sigma}_{01} &= \dot{\sigma}_{10}^* = i \mathcal{V} \cos(\omega t) e^{-i\omega_0 t} [\sigma_{00} - \sigma_{11}] \end{aligned} \quad (\text{III.37})$$

Mit $\cos(\omega t) = \frac{1}{2} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})$ erhält man in (III.37) Terme der Form:

$$e^{\pm i(\omega + \omega_0)t} \quad \text{und} \quad e^{\pm i(\omega - \omega_0)t} \quad (\text{III.38})$$

Unter der Voraussetzung nah-resonanten Antriebs [! remember your classical mechanics class - chapter on driven harmonic oscillators !] d.h. $\omega \simeq \omega_0$ (III.38) [“near-resonant driving”], **separieren** die mit $\omega + \omega_0$ und $\omega - \omega_0$ assoziierten Zeitskalen, was die Vernachlässigung der schnell oszillierenden Terme ($\sim e^{\pm i(\omega + \omega_0)t}$) erlaubt. [Integration über t liefert Beiträge $\sim \frac{1}{\omega + \omega_0} e^{+i(\omega + \omega_0)t}$ bzw. $\sim \frac{1}{\omega - \omega_0} e^{i(\omega - \omega_0)t}$, dessen letzterer mit einem **Resonanznenner** behaftet ist.]

Bemerkung: Mindestens zwei Möglichkeiten: „Starke Kopplung“ zu induzieren: a) F sehr groß! oder b) resonante Kopplung.

In dieser **Drehwellnäherung** / “**rotating wave approximation**” (RWA) [in anderem Zusammengang auch: Säkularnäherung] nimmt (III.37) die folgende Form an:

optische Bloch-Gleichungen

$$\begin{aligned} \dot{\sigma}_{11} &= -\frac{i}{2} [\sigma_{01} \mathcal{V}^* e^{i(\omega_0 - \omega)t} - \sigma_{10} \mathcal{V} e^{-i(\omega_0 - \omega)t}] \\ \dot{\sigma}_{01} &= \frac{i}{2} \mathcal{V} e^{i(\omega - \omega_0)t} [\sigma_{00} - \sigma_{11}] \end{aligned} \quad (\text{III.39})$$

Die Voraussetzung dafür war die Gleichung (III.38)!

Lösungsansatz:

$$\begin{aligned} \sigma_{00} &= \sigma_{00}^{(0)} \exp(\lambda t) & \sigma_{01} &= \sigma_{01}^{(0)} \exp[-i(\omega_0 - \omega)t] \exp(\lambda t) \\ \sigma_{11} &= \sigma_{11}^{(0)} \exp(\lambda t) & \sigma_{10} &= \sigma_{10}^{(0)} \exp[+i(\omega_0 - \omega)t] \exp(\lambda t) \end{aligned} \quad (\text{III.40})$$

$$\sigma_{ij} \sim \dots \exp(\lambda t) [\exp[i(\omega - \omega_0)t]]$$

Einsetzen von (III.40) in (III.39) liefert:

$$\begin{pmatrix} -\lambda & 0 & \frac{1}{2}i\mathcal{V}^* & -\frac{1}{2}i\mathcal{V} \\ 0 & -\lambda & -\frac{1}{2}i\mathcal{V}^* & \frac{1}{2}i\mathcal{V} \\ \frac{1}{2}i\mathcal{V} & -\frac{1}{2}i\mathcal{V} & i(\omega_0 - \omega) - \lambda & 0 \\ -\frac{1}{2}i\mathcal{V}^* & \frac{1}{2}i\mathcal{V}^* & 0 & -i(\omega_0 - \omega) - \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_{00}^{(0)} \\ \sigma_{11}^{(0)} \\ \sigma_{01}^{(0)} \\ \sigma_{10}^{(0)} \end{pmatrix} = 0 \quad (\text{III.41})$$

Die möglichen Werte ergeben sich aus dem Verschwinden der Determinante der Koeffizientenmatrix in (III.41):

$$\lambda^2 [\lambda^2 + (\omega_0 - \omega)^2 + |\mathcal{V}|^2] = 0 \quad (\text{III.42})$$

mit den Wurzeln:

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= 0, \quad \lambda_2 = i\Omega, \quad \lambda_3 = -i\Omega \\ \text{mit } \Omega &= \sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 + |\mathcal{V}|^2} \end{aligned} \quad (\text{III.43})$$

Die allgemeinste Lösung von (III.40) ist demnach von der Form:

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^{(1)} + \sigma_{ij}^{(2)} \exp(i\Omega t) + \sigma_{ij}^{(3)} \exp(-i\Omega t) \quad (\text{III.44})$$

wobei (1) sich hierbei auf die Lösung λ_1 bezieht.

Wobei die $\sigma_{ij}^{(k)}$ durch die λ -unabhängigen Faktoren der rechten Seite der jeweiligen (durch i, j identifizierten) Gleichung in (III.40) gegeben sind.

RWA (at resonance), opt. Bloch Gleichungen.

Lösungen für spezielle Anfangsbedingungen

$$\begin{aligned} \sigma_{11}(t=0) &= 0 \\ \sigma_{01}(t=0) &= 0 \end{aligned} \quad (\text{III.45})$$

Mit (III.44) und (III.45) in (III.39) ergeben sich die Lösungen (\rightarrow ÜA 25)

$$\begin{aligned} \sigma_{11}(t) &= \frac{|\mathcal{V}|^2}{\Omega^2} \sin^2 \left[\frac{1}{2} \Omega t \right] \\ \sigma_{01}(t) &= e^{-i(\omega_0 - \omega)t} \frac{\mathcal{V}}{\Omega^2} \sin^2 \left[\frac{1}{2} \Omega t \right] \left[-(\omega_0 - \omega) \sin \left[\frac{1}{2} \Omega t \right] + i\Omega \cos \left[\frac{1}{2} \Omega t \right] \right] \end{aligned} \quad (\text{III.46})$$

Speziell für **resonanten Antrieb** $\omega = \omega_0$ (mit (III.43))

Rabi-Oszillationen

$$\sigma_{11}(t) = \sin^2 \left(\frac{1}{2} |\mathcal{V}| t \right) \quad \sigma_{01}(t) = i \frac{\mathcal{V}}{|\mathcal{V}|} \sin \left(\frac{1}{2} \Omega t \right) \cos \left(\frac{1}{2} \Omega t \right) \quad (\text{III.47})$$

Die Gleichungen (III.46), (III.47) beschreiben die **Rabi-Oszillationen** der atomaren Population zwischen Grund- und angeregtem Zustand (s. Gleichung (III.43), (III.46)). und **Rabi-Frequenzen** Ω von der **Verstimmung** (“detuning”) der treibenden Frequenz ω von der **Übergangsfrequenz** ω_0 (“**Iteration frequency**”) ².

$$\Delta = \omega - \omega_0 \quad (\text{III.48})$$

III.2.1 Geometrische Interpretation - die Bloch-Kugel

Diese erhalten wir durch Re-Formulierung der optischen Bloch-Gleichungen (III.39):

$$\tilde{\sigma}_{00} := \sigma_{00} \quad \tilde{\sigma}_{11} := \sigma_{11} \quad \tilde{\sigma}_{01} := \sigma_{01} e^{i(\omega_0 - \omega)t} \quad \tilde{\sigma}_{10} = \tilde{\sigma}_{01}^* \quad (\text{III.49})$$

(III.39) transformiert sich mit (III.49) zu:

$$\dot{\tilde{\sigma}}_{11} = -\frac{i}{2} [\tilde{\sigma}_{01} \mathcal{V}^* - \tilde{\sigma}_{10} \mathcal{V}] \quad \dot{\tilde{\sigma}}_{00} = -\dot{\tilde{\sigma}}_{11} \quad \dot{\tilde{\sigma}}_{01} = \frac{i}{2} \mathcal{V} [\tilde{\sigma}_{00} - \tilde{\sigma}_{11}] + i\Delta \tilde{\sigma}_{01} \quad \dot{\tilde{\sigma}}_{10} = \dot{\tilde{\sigma}}_{01}^* \quad (\text{III.50})$$

²Colloquium 3.6.19 “antibunching”

Wobei $\Delta = \omega - \omega_0$, also die Verstimmung, ist.

Neue Variablen:

$$\begin{aligned} u &:= \tilde{\sigma}_{10} + \tilde{\sigma}_{01} \equiv \text{Realteil der Kohärenz} \\ v &:= i(\tilde{\sigma}_{10} - \tilde{\sigma}_{01}) \equiv \text{Imaginärteil der Kohärenz} \\ w &:= \tilde{\sigma}_{11} - \tilde{\sigma}_{00} \equiv \text{Populationsdifferenz} \end{aligned} \quad (\text{III.51})$$

Unter der weiteren Anmerkung, dass \mathcal{V} reell sein soll (wenig einschränkend), nehmen die transformierten Bloch-Gleichungen (III.50) folgende Gestalt an:

$$\dot{u} = -\Delta v \quad \dot{v} = -\mathcal{V}w + \Delta u \quad \dot{w} = \mathcal{V}v \quad (\text{III.52})$$

Der **Bloch Vektor**

$$\mathbf{S} = \underbrace{u\hat{x} + v\hat{y}}_{\text{Kohärenzen}} + w\hat{z} \quad (\text{III.53})$$

(wobei w den Anteil des Grund- bzw. Angeregten Zustands ist) hat die Norm

$$|\mathbf{S}|^2 = |u|^2 + |v|^2 + |w|^2 \stackrel{!}{=} 1 \quad (\text{III.54})$$

mit

$$\frac{d}{dt}|\mathbf{S}|^2 = 0 \quad (\text{III.55})$$

und gehorcht der Bewegungsgleichung (komponentenweise)

$$\dot{\mathbf{S}} = \mathbf{Q} \times \mathbf{S} \quad , \text{ wobei } \quad \mathbf{Q} = \mathcal{V}\hat{x} + \Delta\hat{z} = (\mathcal{V}, 0, \Delta) \quad (\text{III.56})$$

(i8m wesentlich ist das (III.52) in disguise).

Wegen (III.55) kan eqref multiple equationsn daher die Dynamik des nah-resonant getriebenen Zwei-Niveau-Systems auf der Einheitskugel (**Bloch Kugel**) vollständig beschrieben werden.

Mittelpunkt der Bloch-Kugel ist gegeben durch $\mathbf{S} = 0$, was

$$\sigma = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (\text{III.57})$$

impliziert. $\sigma_{\mathbf{S}=0}$ heißt **maximal gemischter Zustand**.

Bemerkungen:

- 1.) Die Situation $w = 1$, d.h. wegen (III.51), $\sigma_{00} = 0$, $\sigma_{11} = 1$ heißt **vollständige Inversion** (“complete inversion”) der atomaren Population (oben in der Bloch Kugel) (\rightarrow insbesondere Laser-Theorie).
- 2.) $w = -1$, $\sigma_{11} = 0$, $\sigma_{00} = 1$, Atom im Grundzustand (unten in der Bloch Kugel).
- 3.) $\Delta = 0 \stackrel{(\text{III.56})}{\Rightarrow} \mathbf{Q} = \mathcal{V}\hat{x}$, d.h. \mathbf{S} rotiert in einer durch \hat{x} definierten Ebene.
- 4.) Ist die Feldamplitude $\mathbf{F} = \mathbf{F}(t)$ zeitabhängig, so vererbt sich diese Zeitabhängigkeit auf \mathcal{V} (wegen (III.33)). Es lässt sich dann zeigen (insbesondere für $\Delta = 0$, s.o. 3.)), dass der Blochvektor unter dem Einfluss von $\mathbf{F}(t)$ eine Rotation um den Winkel

$$\theta(T) = \int_0^T \mathcal{V}(t') dt' \quad (\text{III.58})$$

durchläuft. Man nennt diese Größe auch die **Fläche unter dem Puls** (oder “**area under the pulse**”).

Dies erlaubt die deterministische Initialisierung eines Zweiniveausystems (eines Qubits - für Quantencomputer bzw. eines Quantenregisters) beispielsweise in einer kohärenten Überlagerung à la $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \pm |1\rangle)$ per $\frac{\pi}{2}$ -**Puls** ($\theta = \frac{\pi}{2}$) bzw. des angeregten Zustands $|1\rangle$ durch einen π -**Puls** (**Kohärente Kontrolle**).

- 5.) (III.43), (III.46) zeigen, dass im Falle nichttrivialer Störung die ungestörte charakteristische Frequenzdifferenz $\omega - \omega_0$ (einzige relevante Skala) ersetzt wird durch die **Rabi-Frequenz** Ω . Dynamik wird vermittelt durch $U = e^{iHt/\hbar}$ vermittelt, mit durch die Eigenwerte von H per $E_j \sim \hbar\omega_j$ definierten Frequenzen. Dass heißt die Modifikation $(\omega - \omega_0) \xrightarrow{F=0 \rightarrow F \gtrsim 0} \Omega$ geht mit einer Modifikation der Eigenwerte von H einher.

Um die Verhältnisse zu veranschaulichen, trägt man Ω als Funktion von Δ auf.

★hier fehlt eine Grafik★

Vermiedene Kreuzung oder “**anti-crossing** vs. **Kreuzung**/“**crossing**” von Energieniveaus. \rightarrow entspricht allgemein dem Szenario der parametrischen **Entwicklung der Energieniveaus** eines Hamiltonoperators (“parametric-level-evolution” oder “level dynamics”).

In obigem Bild ist der relevante Parameter die Feldfrequenz ω , bei festem ω_0 und F (experimentell: frequency chirp).

Die Wirkung der Störung auf die spektrale Struktur ist am Stärksten bei $\Delta = 0$ [s.u. \rightarrow entartete Störungsrechnung (im Gegensatz zur nicht-entarteten) Störungstheorie].

Bei starker Verstimmung, d.h. $\Delta \gg |\mathcal{V}|$, wird die Verschiebung gegenüber den ungestörten Niveaus immer kleiner und ist von der Ordnung $\frac{|\mathcal{V}|^2}{\Delta^2}$, denn:

$$\Omega \stackrel{\text{(III.48)}}{=} \sqrt{\Delta^2 + |\mathcal{V}|^2} = \Delta \sqrt{1 + \frac{|\mathcal{V}|^2}{\Delta^2}} \stackrel{|\mathcal{V}| \ll \Delta}{\simeq} \Delta \left(1 + \frac{1}{2} \frac{|\mathcal{V}|^2}{\Delta^2} \right) \quad (\text{III.59})$$

[Wichtige Konsequenz z.B. in der Atomphysik: unterschiedliches Verhalten der Spektren von atomarem Wasserstoff und von Alkaliatomen in statischen elektrischen Feldern] heißt im Jargon **AC Stark shift**, **dynamical Stark effect**. Betrachtet man nun die räumliche Variation der Feldamplitude (natürlicher weise gegeben durch das Profil der Feldmode), so ergibt sich eine **ortsabhängige** Verschiebung der Energieniveaus, m.a.W. eine nicht-triviale Potentiallandschaft. Dies impliziert per Kraft = $-\text{grad Potential}$ eine Kraft auf das Zweiniveauatom, die lediglich in Gleichgewichtspunkten verschwindet.

★hier fehlt eine Grafik★

\rightarrow s.a. optical tweezers

- 6.) Ω^{-1} kleiner (d.h. schneller) als Zeitskala typischer Störeffekte (talk to Ranak o. Guiseppe Sansone. they know!)

Kapitel IV

Darstellungen

Bisher: Formulierung der QM in abstraktem Vektorraum, durch Zustände bzw. deren durch die Schrödingergleichung induzierte Dynamik, ohne jedoch die Frage zu stellen, wo das „Teilchen“ nun denn eigentlich sei (etwa im Orts- oder Impulsraum).

Komplikationen: Orts- und Impulsvariable jeweils kontinuierliche Größen, d.h. die assoziierten Observablen haben kontinuierliches Eigenspektrum.

IV.1 kontinuierliche Eigenwerte

Wir erinnern uns zunächst an die Vollständigkeitsrelation (II.8) $(\sum_j |j\rangle\langle j|)$, insbesondere also

$$|j\rangle = \sum_m |m\rangle\langle m|j\rangle = \sum_m |m\rangle\delta_{mj} \quad \forall |j\rangle \in \text{ONB} \quad (\text{IV.1})$$

Übergang zu kontinuierlichem Wertebereich von m legt folgende Verallgemeinerung nahe:

$$|q'\rangle = \int dq |q\rangle\langle q|q'\rangle \quad (\text{IV.2})$$

(IV.2) erfordert entsprechend die Normierung

$$\langle q|q'\rangle = \delta(q - q') \quad (\text{IV.3})$$

anstelle von (II.7), worin $\delta(q - q')$ die Punktmasse, Diracsche Deltafunktion, allgemeiner (\rightarrow Mathematik, O.Forster, Analysis III) **Testfunktion** oder **Distribution** mit bekannten Eigenschaften (s.o. Skript (IV.4 - 11) o.z.B. Theo ED). Vermöge (IV.3) liegen die mit unendlicher Norm ausgestattet $|q\rangle$ nicht mehr in unserem Hilbertraum [\rightarrow konkretes Beispiel: ebene Wellen zu Wellenvektor \mathbf{k} , s.u.]. Um demnach eine physikalisch konsistente Anschauung zu gewinnen, führt man mit $|q\rangle$ assoziierte **Eigendifferentiale** ein [Funktionalanalysis \rightarrow Reed, Simon Band I].

$$|q\rangle_{\Delta q} = \frac{1}{\sqrt{\Delta q}} \int_q^{q+\Delta q} |q'\rangle dq' \quad (\text{IV.12})$$

,die folgende beruhigende Eigenschaft haben:

$$\begin{aligned} \Delta q \langle q|q\rangle_{\Delta q} &= \frac{1}{\Delta q} \int_q^{q+\Delta q} dq' \int_q^{q+\Delta q} dq'' \langle q''|q'\rangle \\ &\stackrel{(\text{IV.3})}{=} \frac{1}{\Delta q} \int_q^{q+\Delta q} dq' \int_q^{q+\Delta q} dq'' \delta(q'' - q') \stackrel{(\text{IV.4})}{=} 1 \end{aligned} \quad (\text{IV.13})$$

d.h. $|q\rangle_{\Delta q}$ ist wieder ein normierbarer, näherungsweise Eigenvektor zum Eigenwert q [\rightarrow s.u. Konstruktion von Wellenpaketen als normierbare Darstellung freier Teilchen]. Mit der so definierten Schar $\{|q\rangle\}_q$ von Basiszuständen lässt sich ein beliebiger Zustand wie folgt darstellen:

$$|\psi\rangle = \int dq c(q) |q\rangle \quad (\text{IV.14})$$

Zunächst: Wahrscheinlichkeit für $q = y$, im Zustand $|\psi\rangle$:

$$\begin{aligned} |\langle y|\psi\rangle|^2 &\stackrel{(\text{IV.14})}{=} \left| \int dq c(q) \langle y|q\rangle \right|^2 = \int dq' c^*(q') \langle q'|y\rangle \int dq c(q) \langle y|q\rangle \\ &\stackrel{(\text{IV.3})}{=} \int \int dq' dq c^*(q') c(q) \delta(q' - y) \delta(y - q) \stackrel{\int dq}{=} \int dq' c^*(q') c(y) \delta(q' - y) \\ &\stackrel{\int dq'}{=} c^*(y) c(y) = |c(y)|^2 \\ |\langle y|\psi\rangle|^2 &= |c(y)|^2 \end{aligned} \quad (\text{IV.15})$$

[Beachte **strikte** Analogie zum diskreten Fall!]

Entsprechend erhält man für die Norm von $|\psi\rangle$ in der Basis $\{|q\rangle\}$

$$\langle \psi|\psi\rangle = \int \langle \psi|q\rangle \langle q|\psi\rangle dq = \int \underbrace{|\langle \psi|q\rangle|^2}_{\stackrel{(\text{IV.15})}{=} |c(q)|^2} dq = 1 \quad (\text{IV.16})$$

Somit gibt $|\langle \psi|q\rangle|^2 dq$ die Wahrscheinlichkeit an, den Ort q im Intervall $[q, q + dq]$ (Analog zum Δq oben) zu messen.

$$\delta(q - q') = \frac{1}{2\pi} \int e^{ik(q-q')} dk \quad (\text{IV.4})$$

$$l_2 \leftrightarrow \int d\mu(q) |c(q)|^2 < \infty$$

$$L_p \leftrightarrow \int \dots |c(q)|^2$$

$$\langle q|q'\rangle = \delta(q - q') \stackrel{(\text{IV.5})}{=} \frac{1}{2\pi} \int e^{ik(q-q')} dk = \frac{1}{2\pi} \int e^{ikq} e^{-ikq'} dk$$

Mit der de Broglie-Beziehung

$$p = \hbar k \quad (\text{IV.17})$$

wird $\langle q|q'\rangle$ zu

$$\langle q|q'\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{ipq/\hbar} e^{-upq'/\hbar} dp \quad (\text{IV.18})$$

Aufgrund der Interpretation von $e^{ipq/\hbar}$ als (Ortsdarstellung) einer ebenen Welle mit Impuls p - vgl. ebene Welle mit Wellenvektor k in E-Dyn. identifizieren wir diese Größe als Ortsprojektion des Impulseigenzustandes $|p\rangle$ zum Eigenwert p . D.h.

$$\langle q|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i/\hbar pq} \quad (\text{IV.19})$$

Die Darstellung quantenmechanischer Zustände $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ in der Ortsbasis, d.h. durch Projektion von $|\psi\rangle$ auf die kontinuierlich verteilte Ortszustände $|q\rangle$ heißt daher auch (historisch) **Wellenmechanik**.

IV.2 Ortsdarstellung quantenmechanischer Zustände und Operatoren

Analog zu obiger Verallgemeinerung der Zerlegung der $\mathbb{1}$ jetzt Verallgemeinerung des Spektralsatzes (II.30) für Systeme mit kontinuierlichem Spektrum (\rightarrow s.a. Reed & Simon Vol I for the mathematically more inclined).

$$Q \stackrel{(II.30)}{=} \int dq' q' |q'\rangle \langle q'| \quad (IV.20)$$

Entsprechend ergibt sich als Eigenwertgleichung

$$\begin{aligned} Q|q\rangle &\stackrel{(IV.20)}{=} \int dq' q' |q'\rangle \underbrace{\langle q'|q\rangle}_{\stackrel{(IV.3)}{=} \delta(q'-q)} \\ &= q|q\rangle \end{aligned} \quad (IV.21)$$

Für die Matrixelemente von Potenzen bzw. verallgemeinert Potenzreihen von Q folgt weiter:

$$\begin{aligned} \langle q|Q^\nu|q'\rangle &= q'^\nu \langle q|q'\rangle = q'^\nu \delta(q-q') \quad \nu \in \mathbb{Z} \\ \langle q|f(Q)|q'\rangle &= \sum_j c_j q'^j \langle q|q'\rangle = f(q') \delta(q-q') \end{aligned} \quad (IV.22)$$

für $f(Q) = \sum_{\nu=-\infty}^{+\infty} c_\nu Q^\nu$ (Konvergenz vorausgesetzt; $f(Q) \equiv$ verallgemeinerte Potenzreihe, setzt Existenz von Q^{-1} voraus).

Ähnlich für die Matrixelemente des Impulsoperators P :

$$\begin{aligned} \langle q|P|q'\rangle &\stackrel{(IV.2)}{=} \int dp \langle q|P|p\rangle \langle p|q'\rangle \stackrel{\substack{\uparrow \\ P|p\rangle = p|p\rangle}}{=} \int dp p \langle q|p\rangle \langle p|q'\rangle \\ &\stackrel{(IV.18)}{=} \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp p e^{\frac{i}{\hbar}p(q-q')} \\ \langle q|P|q'\rangle &\stackrel{(IV.10)}{=} -i\hbar \frac{d}{dq} \delta(q-q') \end{aligned} \quad (IV.23)$$

Matrixelemente ganzzahliger Potenzen ν von P :

$$\langle q|P^\nu|q'\rangle = \int dp p^\nu \langle q|p\rangle \langle p|q'\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp p^\nu e^{\frac{i}{\hbar}p(q-q')} \quad (IV.24)$$

Speziell für $\nu \geq 0$, mit (IV.5), als Verallgemeinerung von (IV.10), folgt:

$$\langle q|P^\nu|q'\rangle = \left(-i\hbar \frac{d}{dq}\right)^\nu \delta(q-q') \quad \nu \geq 0 \text{ ganzzahlig} \quad (IV.25)$$

Somit haben wir eine Darstellung von Q^ν und P^ν in der Ortsbasis gewonnen und können die Wirkung dieser Operatoren auf beliebige $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, dargestellt in der Ortsbasis, erschließen.

$$\langle q|Q^\nu|\psi\rangle \stackrel{(*)}{=} \int dq' \langle q|Q^\nu|q'\rangle \langle q'|\psi\rangle = \int dq' q'^\nu \langle q|q'\rangle \langle q'|\psi\rangle = q^\nu \langle q|\psi\rangle$$

(*): Einsetzen der Eins, mit $\langle q|\psi\rangle$ gegeben

D.h.

$$\langle q|Q^\nu|\psi\rangle = q^\nu \langle q|\psi\rangle = q^\nu \psi(q) \quad (IV.26)$$

$\psi(q)$ heißt „**Wellenfunktion**“ des Zustandes $|\psi\rangle$. M.a.W. ist die Wellenfunktion die Amplitude des Zustandes $|\psi\rangle$ am Ort q , repräsentiert durch $|q\rangle$.

Für P^ν folgt entsprechend

$$\begin{aligned}
\langle q|P^\nu|\psi\rangle &\stackrel{(*)}{=} \int dq' \langle q|P^\nu|q'\rangle \langle q'|\psi\rangle \\
&= \int dq' \int dp \langle q|P^\nu|p\rangle \langle p|q'\rangle \langle q'|\psi\rangle = \int \int dq' dp p^\nu \langle q|p\rangle \langle p|q'\rangle \langle q'|\psi\rangle \\
&\stackrel{(IV.19)}{=} \int dq' \langle q'|\psi\rangle \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp p^\nu e^{\frac{i}{\hbar}p(q-q')} = \langle q|P^\nu|\psi\rangle
\end{aligned} \tag{IV.27}$$

Dies vereinfacht sich für $\nu \geq 0$ (s. (IV.24), (IV.25))

$$\begin{aligned}
\langle q|P^\nu|\psi\rangle &\stackrel{(IV.25)}{=} \int dq' \left(-i\hbar \frac{d}{dq}\right)^\nu \delta(q-q') \langle q'|\psi\rangle = \left(-i\hbar \frac{d}{dq}\right)^\nu \langle q|\psi\rangle \\
\langle q|P^\nu|\psi\rangle &\stackrel{\nu \geq 0}{=} \left(-i\hbar \frac{d}{dq}\right)^\nu \psi(q)
\end{aligned} \tag{IV.28}$$

Die Gleichungen (IV.25) und (IV.28) besagen insbesondere, dass Orts- und Impulsoperator im (Vektor-) Raum der Wellenfunktionen $\langle q|\psi\rangle = \psi(q)$ als **Multiplikations-** bzw. **Differentialoperator** wirken; d.h.:

$$\begin{aligned}
\langle q|Q|\psi\rangle &=: Q_{\{q\}} \langle q|\psi\rangle = Q_{\{q\}} \psi(q) = q\psi(q) \\
\langle q|P|\psi\rangle &=: P_{\{q\}} \langle q|\psi\rangle = P_{\{q\}} \psi(q) = -i\hbar \frac{d}{dq} \psi(q)
\end{aligned} \tag{IV.29}$$

Wiederholte Anwendung, $\nu \geq 0$:

$$\begin{aligned}
Q_{\{q\}}^\nu \psi(q) &= q^\nu \psi(q) \\
P_{\{q\}}^\nu \psi(q) &= \left(-i\hbar \frac{d}{dq}\right)^\nu \psi(q)
\end{aligned} \tag{IV.30}$$

Entsprechend wird eine Hamiltonfunktion bzw. der assoziierte quantenmechanische Hamiltonoperator der Form:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(q) \tag{IV.31}$$

im Ortsraum die Darstellung

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dq^2} + V(q)$$

haben, mit der zugehörigen Schrödingergleichung

$$H\psi(q, t) = i\hbar \partial_t \psi(q, t) \tag{IV.32}$$

[$V(q)$ ist hier Multiplikationsoperator, mit V angewendet am Skalar q]

IV.3 Impulsdarstellung

→ wichtig für Festkörperphysik o.a. Skrenphysik

formal völlig analoges Vorgehen wie oben. Zwiedert ??, wegen (IV.18), (IV.19)

$$\langle p|q\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar}pq} = \overline{\langle p|q\rangle} \tag{IV.33}$$

Angenommen $\langle q|\psi\rangle$ sein bekannt, so ergibt sich $\langle p|\psi\rangle$ wie folgt, mittels Einsetzen der Eins (in $\{|q\rangle\}$)

$$\begin{aligned}\langle q|\psi\rangle &= \int dq \langle p|q\rangle \langle q|\psi\rangle \\ &\stackrel{\text{(IV.33)}}{=} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dq e^{-\frac{i}{\hbar}pq} \psi(q)\end{aligned}\tag{IV.35}$$

$\equiv \hat{\psi}(p) \equiv$ Fouriertransformierte der Wellenfunktion

[$\hat{\psi}$ oder alternativ $\tilde{\psi}$, lässt man oft einfach weg, da das Argument von $(\hat{\psi} =)\psi$ hinreichend klärt, in welcher Darstellung man arbeiten!]

Analog zu (IV.22) bis (IV.32) erklärt man (IV.37):

$$\langle p|P|\psi\rangle = p\langle p|\psi\rangle =: p\psi(p)\tag{IV.36}$$

$$\begin{aligned}\langle q|Q|\psi\rangle &= \int dq \langle p|q\rangle \langle q|Q|\psi\rangle \\ &= \int dq q \langle p|q\rangle \langle q|\psi\rangle \stackrel{\text{(IV.33)}}{=} \int dq i\hbar \frac{d}{dp} \langle p|q\rangle \langle q|\psi\rangle \\ &= i\hbar \frac{d}{dp} \int dq \langle p|q\rangle \langle q|\psi\rangle \stackrel{\text{(IV.34)}}{=} i\hbar \frac{d}{dp} \psi(p)\end{aligned}\tag{IV.37}$$

$$\begin{aligned}P_{\{p\}}\langle p|\psi\rangle &= P_{\{p\}}\psi(p) = p\psi(p) \\ Q_{\{p\}}\langle p|\psi\rangle &= Q_{\{p\}} = i\hbar \frac{d}{dp} \psi(p)\end{aligned}\tag{IV.38}$$

ganzzahlige Potenzen:

$$\langle p|Q^\nu|\psi\rangle = Q_{\{p\}}^\nu \langle p|\psi\rangle = Q_{\{p\}}^\nu \psi(p)$$

mit:

$$Q_{\{p\}}^\nu = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp' \odot \int dq q^\nu e^{-\frac{i}{\hbar}(p-p')q}$$

mit \odot dem Argument der Operators $Q_{\{p\}}^\nu$

$$\langle p|P^\nu|\psi\rangle = P_{\{p\}}^\nu \langle p|\psi\rangle = P_{\{p\}}^\nu \psi(p) \quad \text{mit} \quad P_{\{p\}}^\nu = p^\nu\tag{IV.39}$$

Für $\nu \geq 0$ wird der Ausdruck für $Q_{\{p\}}^\nu$ zu

$$Q_{\{p\}}^\nu = \left(-i\hbar \frac{d}{dp}\right)^\nu\tag{IV.40}$$

noch einmal Zusammengefasst also:

$$\begin{aligned}P_{\{p\}}^\nu \psi(p) &= p^\nu \psi(p) \\ Q_{\{p\}}^\nu \psi(p) &= \left(i\hbar \frac{d}{dp}\right)^\nu \psi(p)\end{aligned}$$

Und noch einmal die Herleitung die vorhin übersprungen wurde:

$$\begin{aligned}\langle p|Q^\nu|\psi\rangle &= \int \langle p|q\rangle \langle q|Q^\nu|\psi\rangle dq = \int dq \langle p|q\rangle q^\nu \langle q|\psi\rangle \\ &= \int dq \int dp' q^\nu \langle p|q\rangle \langle q|p'\rangle \langle p'|\psi\rangle \\ &= \int dp' \langle p'|\psi\rangle \int dq q^\nu \frac{1}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar}(p-p')q} \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp' \underbrace{\langle p'|\psi\rangle}_{\psi(p')} \int dq q^\nu e^{-\frac{i}{\hbar}(p-p')q}\end{aligned}$$

Für Hamiltonoperatoren, die ganzzahlige Potenzen, beispielsweise von q , enthalten (mit $\nu < 0$) wird die Impulsdarstellung der Schrödinger-Gleichung

$$H(Q_{\{p\}}, P_{\{p\}}) \psi(p, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(p, t) \quad (\text{IV.41})$$

i.d.R. **Integradifferentialform** annehmen [\rightarrow s. Übungsblatt 9]

IV.4 Vertauschungsrelation für Ort und Impuls, Unschärferelation

[bereits vorbereitet auf Übungsblatt 8]

Der Lagrange- und Hamilton-Formalismus der klassischen Mechanik baut auf verallgemeinerten Koordinaten q_i und den dazu jeweils kanonisch konjugierten Impulsen $p_i = \partial \mathcal{L} / \partial \dot{q}_i$ auf, die paarweise jeweils eine Fläche im Phasenraum aufspannen. H , gegeben in p_i und q_i , liefert die **kanonischen** Bewegungsgleichungen:

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

[Das Minus in der zweiten Gleichung ist notwendig, um zu Zeigen, dass die Liouville-Gleichung erfüllt und damit das Phasenraumvolumen Konstant ist.]

In der Quantenmechanik definiert man **kanonisch konjugierte Observablen** durch ihre Kommutatorbeziehung; hier für Q und P [siehe Übungsaufgabe 27].

$$\begin{aligned} \langle q | [Q, P] | \psi \rangle &\stackrel{(\text{IV.33})}{=} \langle q | QP - PQ | \psi \rangle = \langle q | QP | \psi \rangle - \langle q | PQ | \psi \rangle \\ &\stackrel{(\text{IV.29})}{=} q \left(-i\hbar \frac{d}{dq} \right) \langle q | \psi \rangle - \left(-i\hbar \frac{d}{dq} \right) q \langle q | \psi \rangle \\ &\stackrel{\langle q | \psi \rangle = \psi(q)}{=} -i\hbar \left[q \frac{d\psi}{dq} - \psi(q) - q \frac{d\psi}{dq} \right] = i\hbar \psi(q) \quad , \quad \forall | \psi \rangle \in \mathcal{H} \\ &\Rightarrow \boxed{[Q, P] = i\hbar \mathbb{1}} \end{aligned} \quad (\text{IV.42})$$

[siehe Übungsaufgabe 27!]

Erläuterung der Schritte oben mit $|\chi\rangle = Q|\psi\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle q | PQ | \psi \rangle &= \langle q | P | \chi \rangle \stackrel{(\text{IV.29})}{=} \left(-i\hbar \frac{d}{dq} \right) \langle q | \chi \rangle \\ &= \left(-i\hbar \frac{d}{dq} \right) \langle q | Q | \psi \rangle \\ &= \left(-i\hbar \frac{d}{dq} \right) q \langle q | \psi \rangle \end{aligned}$$

Allgemein: Observable A, B mit

$$[A, B] = i\hbar \mathbb{1} \quad (\text{IV.43})$$

heißen **kanonisch konjugiert** („tiling of phase space by areas \hbar “).

Mit Hilfe der Schwarzschen Ungleichung:

$$\langle f | f \rangle \langle g | g \rangle \geq |\langle f | g \rangle|^2 \quad \forall |f\rangle, |g\rangle \in \mathcal{H} \quad (\text{IV.44})$$

folgt aus (IV.43) die:

Heisenbergsche Unschärferelation

$$\Delta a \Delta b \geq \frac{\hbar}{2} \quad (\text{IV.45})$$

mit

$$\begin{aligned} (\Delta a)^2 &= \langle \psi | (A - \langle A \rangle)^2 | \psi \rangle \\ (\Delta b)^2 &= \langle \psi | (B - \langle B \rangle)^2 | \psi \rangle \end{aligned} \quad (\text{IV.46})$$

den Varianzen der Messwerte für A und B . Diese Streuung der Messwerte heißt auch „Messrauschen“ oder „Quantenfluktuation“. ★hier fehlt eine Grafik★ unschärfe Formen

Kapitel V

Zustände und Dynamik in einfachen Potentialproblemen

Die einfachste, aber bereits experimentell relevante physikalische Szenarien; Einzelteilchendynamik in Potentialtöpfen (quantumdots \equiv Quantenpunkt; Quantendrähte - experimentell unter guter Kontrolle seit ca. Mitte 80'er des letzten Jahrhunderts \rightarrow mesoskopische Physik, Nanophysik, Elektronenbillard).

★hier fehlt eine Grafik★ Stadion für Elektronenbillard

V.1 Gebundene Zustände im eindimensionalen Kastenpotential

Gegeben sei:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & -a \leq x \leq a \\ V_0 < \infty & x < -a \vee x > a \end{cases} \quad (\text{V.1})$$

Die zugehörige Eigenwertgleichung:

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (\text{V.2})$$

für den Energie- bzw. Hamiltonoperator lautet in der Ortsdarstellung wegen (IV.32):

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \right] \psi(x) = 0 \quad (\text{V.3})$$

★hier fehlt eine Grafik★ Potential außerhalb von $-a \leq x \leq a$
Zunächst Eigenwertgleichung in den Bereichen I, II, III .

$$\begin{aligned} (I) \quad & x < -a & \left(\frac{d^2}{dx^2} - \kappa^2 \right) \psi_I(x) &= 0 \\ (II) \quad & -a \leq x \leq a & \left(\frac{d^2}{dx^2} - k^2 \right) \psi_{II}(x) &= 0 \\ (III) \quad & x > a & \left(\frac{d^2}{dx^2} - \kappa^2 \right) \psi_{III}(x) &= 0 \end{aligned} \quad (\text{V.4})$$

wobei

$$\kappa^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (\text{V.5})$$

$$\text{Gebundene Zustände für } E < V_0 \quad (\text{V.6})$$

legen den Ansatz

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= A_1 e^{\kappa x} & x < -a \\ \psi_{II}(x) &= A_2 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx} & -a \leq x \leq a \\ \psi_{III}(x) &= B_3 e^{-\kappa x} & x > a \end{aligned} \quad (\text{V.7})$$

[Terme in $e^{-\kappa x}$ bzw. $e^{+\kappa x}$ unterdrückt, per $B_1 = A_3 := 0$, wegen Normierbarkeit von ψ]

Zur Bestimmung der Koeffizienten A_j, B_j in (V.7) fordern wir die Stetigkeit von $\psi(x)$ und ihrer Ableitung $\psi'(x)$ in $x = \pm a$. Die Forderung an $\psi'(x)$ ergibt sich aus der Kontinuitätsgleichung der **quantenmechanischen Wahrscheinlichkeitsstromdichte j** .

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(x)|^2 &= i\hbar \frac{d}{dt} (\psi^* \psi) = i\hbar (\partial_t \psi^*) \psi + i\hbar \psi^* \partial_t \psi \\ &= -\psi H \psi^* + \psi^* H \psi \stackrel{(V.32)}{=} -\psi \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right) \psi^* + \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right) \psi \\ &\stackrel{(*)}{=} -\frac{\hbar^2}{2m} (\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*) \stackrel{\Delta \equiv \nabla^2}{=} \nabla \frac{\hbar^2}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) \end{aligned}$$

(*): V Multiplikationsoperator

Ergo:

$$\partial_t |\psi|^2 + \nabla \left[\frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \right] = 0 \quad (V.8)$$

QM Stromdichte

$$\mathbf{j}(x) := \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \quad (V.9)$$

Aus der Stetigkeitsforderung an die Wellenfunktion und ihre erste Ableitung (wg. Kontinuitätsgleichung (V.8)) in $x = \pm a$ folgt mit (V.7):

$$\begin{pmatrix} -e^{-\kappa a} & e^{-ika} & e^{ika} & 0 \\ -\kappa e^{-\kappa a} & ike^{-ika} & -ike^{ika} & 0 \\ 0 & e^{ika} & e^{-ika} & -e^{-\kappa a} \\ 0 & ike^{ika} & -ike^{-ika} & \kappa e^{-\kappa a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ B_2 \\ B_3 \end{pmatrix} \quad (V.10)$$

Für nichttriviale Lösung muss Koeffizienten-Determinante verschwinden. Dies führt auf:

$$e^{-2\kappa a} [(\kappa^2 - k^2) \sin(2ka) + 2\kappa k \cos(2ka)] \stackrel{!}{=} 0 \quad (V.11)$$

$V_0 < \infty$ (wg. (V.1)) $\stackrel{(V.5)}{\Rightarrow} \kappa^2 < \infty \Rightarrow e^{-2\kappa a} \neq 0$, zusätzlich mit $\sin(2ka) \neq 0$ (o.E.d.A (!)), führt auf

$$\kappa^2 - k^2 + 2\kappa k \cot(2ka) = 0$$

Mit binomischer Formel für $\kappa^2 + \dots$ folgen die zwei Lösungen

$$\kappa_1 = k \tan(ka) \quad \kappa_2 = -l \cot(ka) \quad (V.14)$$

Einsetzen von (V.14) in (V.10), speziell $\kappa_1 = k \frac{\sin(ka)}{\cos(ka)}$; in (V.10) zunächst 2. Zeile:

$$\begin{aligned} A_1 \kappa e^{-\kappa a} &\stackrel{(V.14)}{=} A_1 k \frac{\sin(ka)}{\cos(ka)} e^{-\kappa a} = A_2 i k e^{-ika} - B_2 i k e^{ika} \\ A_1 e^{-\kappa a} \sin(ka) &= A_2 i \cos(ka) e^{-ika} - B_2 i \cos(ka) e^{ika} \end{aligned} \quad (A)$$

1. Zeile aus (V.10):

$$\begin{aligned} A_1 e^{-\kappa a} &= A_2 e^{ika} + B_2 e^{ika} \\ A_1 \sin(ka) e^{-\kappa a} &= A_2 \sin(ka) e^{-ika} + B_2 \sin(ka) e^{ika} \end{aligned} \quad (B)$$

Gleichungen (A) und (B) gleichsetzen liefert:

$$A_2 i \cos(ka) e^{-ika} - B_2 i \cos(ka) e^{ika} = A_2 \sin(ka) e^{ika} + B_2 \sin(ka) e^{ika}$$

$$\begin{aligned}
A_2 e^{-ika} (-\sin(ka) + i \cos(ka)) &= B_2 e^{ika} (\sin(ka) + i \cos(ka)) \\
A_2 e^{-ika} i \underbrace{(\cos(ka) + i \sin(ka))}_{e^{ika}} &= B_2 e^{ika} i \underbrace{(\cos(ka) - i \sin(ka))}_{e^{-ika}} \\
A_2 &= B_2
\end{aligned}$$

insgesamt folgt

$$\begin{aligned}
B_2^{(1)} &= A_2^{(1)} \\
A_2^{(1)} &= A_1^{(1)} \\
2A_2^{(1)} \cos(ka) &= A_1^{(1)} e^{-\kappa_1 a} \\
B_2^{(2)} &= -A_2^{(2)} \\
B_3^{(2)} &= -A_1^{(2)} \\
2iA_2^{(2)} \sin(ka) &= -A_1^{(2)} e^{-\kappa_2 a}
\end{aligned} \tag{V.15}$$

für κ_1 bzw. κ_2

(V.15) in (V.7) liefert die Lösungen für κ_1 :

$$\psi^{(1)}(x) = \begin{Bmatrix} A_1^{(1)} e^{\kappa_1 x} \\ A_1^{(1)} e^{-\kappa_1 a} \frac{\cos(kx)}{\cos(ka)} \\ A_1^{(1)} e^{-\kappa_1 x} \end{Bmatrix} = \psi^{(1)}(-x) \quad \text{„gerade“ Eigenfunktionen}$$

und für κ_2

$$\psi^{(2)}(x) = \begin{Bmatrix} A_1^{(2)} e^{\kappa_2 x} \\ -A_1^{(2)} e^{-\kappa_2 a} \frac{\sin(kx)}{\sin(ka)} \\ -A_1^{(2)} e^{-\kappa_2 x} \end{Bmatrix} = -\psi^{(2)}(-x) \quad \text{„ungerade“ Eigenfunktionen}$$

Da $\psi^{(1,2)}(x)$ wegen ihrer Asymptotik bzw. Beschränktheit auf $[-a, +a]$ integrierbar, lässt sich $A_1^{(1,2)}$ per Normierungsbedingung:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi^{(1,2)}(x)|^2 dx = 1 \tag{V.17}$$

gewinnen.

Eigenwerte zu (V.2), (V.3) und (V.16) sind noch codiert durch (V.5) und (V.14), lassen sich aber durch folgende Überlegung graphisch auffinden: wegen (V.5)

$$\kappa^2 a^2 + k^2 a^2 = \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} \tag{V.18}$$

gleichzeitig, wegen (V.14):

$$\kappa a = ka \tan(ka) \quad \text{bzw.} \quad \kappa a = -ka \cot(ka) \tag{V.19}$$

★hier fehlt eine Grafik★

Aus obiger Skizze ergibt sich, dass für V_0 klein genug derart, dass

$$\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} < \frac{\pi^2}{4} \quad \text{d.h.} \quad V_0 a^2 < \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m} \tag{V.20}$$

nur ein einzelner gebundener Zustand existiert.

Weitere Beobachtungen anhand von (V.16): Das gebundene Teilchen mit $E < V_0$ besitzt eine endliche Wahrscheinlichkeitsdichte (freilich exponentiell abfallend) im klassisch verbotenen

Gebiet $|x| > a$ (dort: $E < V_0$, $\frac{p^2}{2m} + V = E \Rightarrow p_{cl} = \sqrt{2m(E - V_0)}$) mit einer charakteristischen Eindringtiefe (penetration depth) $\sim \kappa_{1,2}^{-1}$ [s.a. Optik, Feldverlauf an Grenzflächen von Materialien mit unterschiedlichen Brechungsindizes, insbesondere jenseits des Grenzwinkels für Totalreflektion \rightarrow evaneszente Welle Spiegel für Atome].

Etwas einfacher: Grenzfall

$$V_0 \rightarrow \infty \quad (V.21)$$

in (V.1), d.h. wegen (V.5), $\kappa \rightarrow \infty$, somit, wegen (V.7), vereinfacht sich der Ansatz für die Lösungen zu:

$$\psi_I(x) \xrightarrow{\kappa \rightarrow \infty} 0 \quad \psi_{II}(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad \psi_{III}(x) \xrightarrow{\kappa \rightarrow \infty} 0 \quad (V.22)$$

D.h. ψ verschwindet **am Rand** $x = -a, +a$ des Potentials und in den Bereichen I und III , als Gleichung

$$\psi_{II}(-a) = \psi_{II}(+a) = 0 \quad (V.23)$$

Daraus mit (V.22):

$$Ae^{-ika} + Be^{ika} = 0 \quad Ae^{ika} + Be^{-ika} = 0 \quad (V.24)$$

und mit [Koeff. Matrix] $\stackrel{!}{=} 0$ erhalten wir:

$$\begin{aligned} e^{-2ika} - e^{2ika} &= -2i \sin(2ka) = -4i \sin(ka) \cos(ka) = 0 \\ \Rightarrow \sin(ka) &= 0 \quad \text{oder} \quad \cos(ka) = 0 \end{aligned} \quad (V.25)$$

Daher

$$\begin{aligned} ka &= n \frac{\pi}{2} \quad n = 1, 3, 5, \dots \quad (\cos(ka) = 0) \\ ka &= n \frac{\pi}{2} \quad n = 2, 4, 6, \dots \quad (\sin(ka) = 0) \end{aligned} \quad (V.26)$$

Eigenwerte (V.26) in Gleichungssystem (V.24) ergibt nach Addition/Subtraktion derselben:

$$A2 \cos(ka) + B2 \cos(ka) = 0 \quad -2iA \sin(ka) + 2iB \sin(ka) = 0$$

ergo, für $\cos(ka) = 0 : A = B$ und für $\sin(ka) = 0 : A = -B$, und daher insgesamt

$$\psi_{II}(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left(\frac{n\pi x}{2a}\right) & n = 1, 3, 5, \dots \\ \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{2a}\right) & n = 2, 4, 6, \dots \end{cases} \quad (V.27)$$

wobei der Vorfaktor wiederum aus der Normierungsbedingung folgt.

$$\Rightarrow (V.5) \quad \kappa^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \text{mit (V.26)}$$

$$k^2 a^2 = \frac{n^2 \pi^2}{4} \quad \Rightarrow \quad E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{8ma^2} \quad n \in \mathbb{N} \quad (V.28)$$

Wichtige Beobachtung/Eigenschaft: $E_n/E_1 = n^2$, d.h. Anregungsenergien sind ganzzahlige Vielfache von E_1 (später ähnliche Situationen beim harmonischen Oszillator, aber beispielsweise **nicht** beim Wasserstoffatom!).

$$\psi \propto e^{-i \overbrace{E_n t / \hbar}^{\varphi_n}} \quad |\phi(t)\rangle = \sum c_n e^{-i E_n t / \hbar} |E_n\rangle$$

Angenommen $E_1 t / \hbar = 2\pi \Rightarrow E_n t / \hbar = n^2 E_1 t / \hbar = n^2 2\pi$ d.h. Rephasierungsphänomen führt zu “revivals”.

$$\dot{\Theta} = \frac{\partial H}{\partial I} \quad \dot{I} = -\frac{\partial H}{\partial \Theta}$$

V.2 Paritätsoperator

Die Lösungen (V.16) und (V.27) zerfallen in gerade und ungerade Lösungen unter Inversion $x \rightarrow -x$ der Ortskoordinate, d.h. entweder $\psi(x) = \psi(-x)$ oder $\psi(x) = -\psi(-x)$. Diese **spezielle** Eigenschaft verdankt sich der **Invarianz** des Hamiltonoperators unter der Transformation $x \mapsto -x$ (s. (V.1)). Allgemeiner spricht man von **Symmetrieeigenschaften** (\rightarrow Gruppentheorie, QM II).

Wir definieren den **Paritätsoperator** Π , der diese Transformation vermittelt:

$$\begin{aligned}\Pi|\psi\rangle &= \int |q\rangle\langle -q|\psi\rangle dq \quad \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H} \\ \Pi_{\{q\}}\langle q|\psi\rangle &= \langle q|\Pi|\psi\rangle = \psi(-q)\end{aligned}\tag{V.29}$$

Invarianz von H unter Π ist äquivalent zu

$$[\Pi, H] = 0\tag{V.30}$$

womit insbesondere folgt: $H|\psi\rangle = i\partial_t|\psi\rangle$, dann auch

$$\begin{aligned}H\Pi|\psi\rangle &= i\partial_t|\psi\rangle \\ H\Pi|\psi\rangle &\stackrel{(V.30)}{=} \Pi H|\psi\rangle = \Pi i\partial_t|\psi\rangle = i\partial_t\Pi|\psi\rangle\end{aligned}\tag{V.31}$$

Wegen $\Pi^2 = \text{id}$, folgt

$$\Pi^{-1} = \Pi\tag{V.32}$$

, sowie

$$\Pi^2|\pi\rangle = \pi^2|\pi\rangle = |\pi\rangle\tag{V.33}$$

mit $|\pi\rangle$ EV von Π zum EW π

$$\Rightarrow \pi = \pm 1\tag{V.34}$$

Entsprechend heißen Zustände zum Eigenwert $\pi = +1$ **Zustände gerader Parität** und zu $\pi = -1$ **Zustände ungerader Parität**.

Das zweiwertige Spektrum von Π erlaubt die Zerlegung des Hilbertraums in zwei Unterräume gerader bzw. ungerader Parität. Sei P_+ der Projektor auf den geraden, P_- jener auf den ungeraden Unterraum, so gilt $\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}$

$$|\psi\rangle = P_+|\psi\rangle + P_-|\psi\rangle\tag{V.35}$$

Anwendung von Π auf (V.35) liefert

$$\Pi|\psi\rangle = P_+|\psi\rangle - P_-|\psi\rangle\tag{V.36}$$

Entsprechend Definition gerader und ungerader Operatoren A und B :

$$\Pi A \Pi^{-1} = A \quad A \text{ gerade} \quad \Pi B \Pi^{-1} = -B \quad B \text{ ungerade}\tag{V.37}$$

Speziell folgern wir für Matrixelemente ungerader Operatoren bzgl. Zuständen $|\pi, \dots\rangle$ wohldefinierte Parität:

$$\begin{aligned}\langle \pi \dots | B | \pi \dots \rangle &\stackrel{5.34}{=} \pi^2 \langle \pi \dots | B | \pi \dots \rangle \stackrel{(V.32)}{=} \langle \pi \dots | \Pi B \Pi^{-1} | \pi \dots \rangle \\ &\stackrel{(V.37)}{=} -\langle \pi \dots | B | \pi \dots \rangle \Rightarrow \langle \pi \dots | B | \pi \dots \rangle = 0\end{aligned}\tag{V.38}$$

Dies hatten wir in (III.31) bereits genutzt - unter der Annahme, dass atomare Eigenzustände wohldefinierte Parität haben (was für H -Eigenzustände **in der sphärischen Basis** auch zutrifft (s. späteres Kapitel!).

V.3 Ungebundene Zustände des Kastenpotentials

Im Gegensatz zu (V.6) betrachten wir um Energien mit

$$E > V_0 \quad (V.39)$$

im Kastenpotential, wählt aber auch den Energienullpunkt an anderer Stelle

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < -a \wedge x > a \\ -V_0 & -a \leq x \leq a \end{cases} \quad (V.40)$$

★hier fehlt eine Grafik★

Mit der durch die Skizze vermittelten Intuition (einlaufende Amplitude von $-\infty$) setzen wir als Lösung der Schrödingergleichung (V.3) an :

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} \\ \psi_{II}(x) &= A_2 e^{iKx} + B_2 e^{-iKx} \\ \psi_{III}(x) &= A_3 e^{ikx} \end{aligned} \quad (V.41)$$

mit

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad K = \sqrt{\frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}} \quad (V.42)$$

das negative V_0 sorgt für ein positives Vorzeichen und damit für ein reelles K .

Stetigkeitsforderung an $\psi(x)$ und $\psi'(x)$ in $x = \pm a$ führt auf folgende Gleichungen:

$$\begin{aligned} A_1 e^{-ika} + B_1 e^{ika} &= A_2 e^{-iKa} + B_2 e^{iKa} \\ k [A_1 e^{-ika} - B_1 e^{ika}] &= K [A_2 e^{-iKa} - B_2 e^{iKa}] \\ A_3 e^{ika} &= A_2 e^{iKa} + B_2 e^{-iKa} \\ k A_2 e^{ika} &= K [A_2 e^{iKa} - B_2 e^{-iKa}] \end{aligned} \quad (V.43)$$

Da dies vier Gleichungen für fünf Koeffizienten sind, ergeben sich Lösungen, parametrisiert durch A_1 , für beliebige k, K , d.h. Kontinuierliches Energiespektrum. Mit:

$$\begin{aligned} C &:= \left(1 - \frac{K}{k}\right)^2 e^{2ika} - \left(1 + \frac{K}{k}\right)^2 e^{-2iKa} \\ &= -\frac{4K}{k} \cos(2Ka) + 2i \left[1 + \left(\frac{K}{k}\right)^2\right] \sin(2Ka) \end{aligned} \quad (V.44)$$

findet man

$$\begin{aligned} B_1 &= A_1 \frac{2i}{C} \left[1 - \left(\frac{K}{k}\right)^2\right] \sin(2Ka) e^{-2ika} \\ A_2 &= -A_1 \frac{2}{C} \left(1 + \frac{K}{k}\right) e^{-i(K+k)a} \\ B_2 &= A_1 \frac{2}{C} \left(1 - \frac{K}{k}\right) e^{i(K-k)a} \\ A_3 &= -A_1 \frac{4K}{Ck} e^{-2ika} \end{aligned} \quad (V.45)$$

Aus (V.45) gewinnt man aus der Verhältnissen der einlaufenden und auslaufenden Wahrscheinlichkeitsdichten den Transmissions und Reflexionskoeffizienten T und R :

$$T := \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = \frac{j_3}{j_{1,\text{in}}} \quad R := \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} = \frac{j_{1,\text{out}}}{j_{1,\text{in}}} \quad (V.46)$$

[vgl. aber Potentialschwelle]

(V.45) in (V.46):

$$T = \left[1 + \frac{1}{4} \left(\frac{K}{k} - \frac{k}{K} \right)^2 \sin^2(2Ka) \right]^{-1} \quad R = \frac{1}{4} \left(\frac{K}{k} - \frac{k}{K} \right)^2 \sin^2(2Ka) \cdot T$$

mit $R + T = 1$.

Obwohl $E > V_0$ finden wir i.a. $R \geq 0$, was im klassischen Fall nicht passieren würde \rightarrow Quantenreflexion.

Ergebnis bleibt unverändert, wenn statt Potentialmulde Potentialbarriere sofern $E > V_0$ (d.h. (V.42) reell bleibt).