

# Theoretische Quantenmechanik

## Sommersemester 2017

Eine Zusammenfassung  
von Amanda Matthes

8. November 2017

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einführung und Wellenmechanik</b>	<b>5</b>
1.1	Plancksches Strahlungsgesetz . . . . .	5
1.2	Materiewellen . . . . .	5
1.3	Quantisierungsregel von Bohr und Sommerfeld . . . . .	5
1.4	Bohrsches Atommodell . . . . .	6
1.5	Wellenfunktion eines Teilchens . . . . .	6
<b>2</b>	<b>Formalismus der Quantenmechanik</b>	<b>6</b>
2.1	Wichtige Operatoren . . . . .	6
2.2	Schrödingergleichung . . . . .	6
2.3	Hilbertraum . . . . .	7
2.4	Direkte Summe . . . . .	7
2.5	Tensorprodukt . . . . .	7
2.6	Verschränktheit . . . . .	8
2.7	Operatoren . . . . .	8
2.8	Kommutator . . . . .	9
2.9	Dirac Notation . . . . .	9
2.10	Projektor . . . . .	10
2.11	Hermiteische Operatoren . . . . .	10
2.12	Spektralzerlegung . . . . .	11
2.13	Einsoperator . . . . .	13
2.14	Unitäre Operatoren . . . . .	13
<b>3</b>	<b>Observablen, Zustände und Unbestimmtheit</b>	<b>14</b>
3.1	Postulate der QM (Kopenhagener Deutung) . . . . .	14
3.2	Realität und Lokalität . . . . .	15
3.3	Bell'sche Ungleichung . . . . .	15
3.4	Gemischte Zustände . . . . .	15
<b>4</b>	<b>Zeitentwicklung</b>	<b>16</b>
4.1	Zeitentwicklungsoperator . . . . .	16
4.2	Rabi-Oszillationen . . . . .	16
4.3	Dyson Reihe . . . . .	16
4.4	Bilder der Quantenmechanik . . . . .	17
4.5	Zeitentwicklung von Gemischen . . . . .	17

<b>5</b>	<b>Einfache Quantensysteme</b>	<b>18</b>
5.1	Wellenfunktion . . . . .	18
5.2	Darstellungen des Orts- und Impulsoperators . . . . .	18
5.3	Zeitunabhängige Schrödingergleichung . . . . .	19
5.4	Dirichlet und Neumann Randbedingungen . . . . .	19
5.5	Allgemeine Aussagen über die Wellenfunktion . . . . .	19
5.6	Potentialstufe bei $x = y$ . . . . .	20
5.7	Reflexion und Transmission . . . . .	21
5.8	Potentialschwelle . . . . .	22
5.9	Potentialtopf . . . . .	22
5.10	Harmonischer Oszillator . . . . .	23
5.11	Auf und Absteigeoperatoren . . . . .	23
<b>6</b>	<b>Symmetrie</b>	<b>25</b>
6.1	Gruppenaxiome . . . . .	25
6.2	Wichtige Gruppen in der Physik . . . . .	25
6.3	Darstellungen . . . . .	26
6.4	Paulimatrizen . . . . .	26
6.5	Lie Gruppen . . . . .	26
6.6	Noether Theorem . . . . .	28
6.7	Parität . . . . .	29
6.8	Translation . . . . .	29
6.9	Drehungen . . . . .	30
6.10	Drehimpulsoperatoren . . . . .	30
6.11	Leiteroperatoren . . . . .	30
6.12	Bahndrehimpuls . . . . .	31
6.13	Zusammenhang Fouriermoden und Kugelflächenfunktionen . .	31
6.14	Addition von Drehimpulsen . . . . .	31
<b>7</b>	<b>Wasserstoffatom</b>	<b>31</b>
<b>8</b>	<b>Elektromagnetische Felder und Spin</b>	<b>32</b>
8.1	Aharonov Bohm Effekt . . . . .	33
8.2	Zeeman Effekt . . . . .	33
8.3	Spin . . . . .	33
8.4	Paschen-Back-Effekt . . . . .	34
8.5	Spin Bahn Kopplung . . . . .	34

<b>9</b>	<b>Störungstheorie</b>	<b>35</b>
9.1	Energieverschiebung in erster Ordnung . . . . .	35
9.2	Energieverschiebung zweiter Ordnung . . . . .	36
9.3	Linearer Stark Effekt . . . . .	36
9.4	Virialsatz . . . . .	36
9.5	Zeitabhängige Störungen . . . . .	36
9.6	Plötzliche Störungen . . . . .	37
9.7	Zeitentwicklung gestörter Zustände . . . . .	37
9.8	Fermis Goldene Regel . . . . .	37
9.9	Übergangsrate bei harmonischen Störungen . . . . .	38

# 1 Einführung und Wellenmechanik

## 1.1 Plancksches Strahlungsgesetz

Das Plancksche Strahlungsgesetz

$$u_\nu(T, \nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{\beta h\nu} - 1} \quad (1)$$

folgt direkt aus der Lichtquantenhypothese und der Annahme, dass Strahlungszustände im thermischen Gleichgewicht mit einer Wahrscheinlichkeit besetzt sind, die dem Boltzmann-Faktor entspricht.

## 1.2 Materiewellen

Einem Teilchen kann die de-Broglie-Wellenlänge zugeordnet werden:

$$\lambda_{dB} = \frac{h}{p} \quad (2)$$

Es gelten:

$$E = \hbar\omega \quad (3)$$

$$E = hf \quad (4)$$

$$p = \hbar k \quad (5)$$

$$p = h\lambda \quad (6)$$

## 1.3 Quantisierungsregel von Bohr und Sommerfeld

Die Quantisierungsregel von Bohr und Sommerfeld besagt, dass der konstante Teil der Wirkung nur ganzzahlige Vielfache des Planck'schen Wirkungsquantums sein kann:

$$S_0 = \oint pdq = nh \quad (7)$$

mit  $n = 1, 2, 3, \dots$

Für große  $n \gg 1$  wird  $h \ll S_0$  und die Quantisierung wird unerheblich.  $\rightarrow$  klassischer Grenzfall nach dem Bohrschen Korrespondenzprinzip.

## 1.4 Bohrsches Atommodell

Im Bohrschen Atommodell bewegt sich das Elektron im Wasserstoff nur auf diskreten Bahnen. In diesem Modell gilt für das Spektrum:

$$\nu = \frac{Ry}{h} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad (8)$$

## 1.5 Wellenfunktion eines Teilchens

In der Quantenmechanik werden Teilchen durch **Wellenfunktionen**  $\psi$  beschrieben, die sich durch Überlagerung von Fourier-Moden  $\hat{\psi}(\vec{k})$  schreiben lassen:

$$\psi(t, \vec{x}) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \hat{\psi}(\vec{k}) e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega t)} \quad (9)$$

Man interpretiert

$$|\psi(t, \vec{x})|^2 \quad (10)$$

als Wahrscheinlichkeitsdichte dafür, dass das Teilchen zur Zeit  $t$  am Ort  $\vec{x}$  gefunden wird. Sie ist zeitlich erhalten und normiert.

# 2 Formalismus der Quantenmechanik

## 2.1 Wichtige Operatoren

Man identifiziert den Hamiltonoperator als Operator der Energie:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V \quad (11)$$

Außerdem:

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar \vec{\nabla} \quad (12)$$

also

$$\hat{p}_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \quad (13)$$

## 2.2 Schrödingergleichung

Die Schrödingergleichung lautet:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V \right) \psi \quad (14)$$

$$= \hat{H} \psi \quad (15)$$

## 2.3 Hilbertraum

Ein **Hilbertraum** ist ein reeller oder komplexer Vektorraum  $\mathcal{H}$  mit einem Skalarprodukt  $\langle \cdot, \cdot \rangle$ , der vollständig ist.

Im Folgenden ist das Skalarprodukt linear im zweiten und semilinear im ersten Argument:

$$\langle u, \lambda v \rangle = \lambda \langle u, v \rangle \quad (16)$$

und

$$\langle \lambda u, v \rangle = \bar{\lambda} \langle u, v \rangle \quad (17)$$

Beispiele für Hilberträume sind:

- $\mathbb{R}^n$  mit dem Standardskalarprodukt:  
 $\langle u, v \rangle = \sum u_i v_i$
- $\mathbb{C}^n$  mit dem komplexen Standardskalarprodukt:  
 $\langle u, v \rangle = \sum \bar{u}_i v_i$
- Der Raum der quadratintegrierbaren Funktionen  $L^2$  mit dem Skalarprodukt:  
 $\langle f, g \rangle_{L^2} = \int \bar{f}(x) g(x) dx$

## 2.4 Direkte Summe

Das kartesische Produkt aus zwei Hilberträumen  $\mathcal{X}$  und  $\mathcal{Y}$  wird zusammen mit dem Skalarprodukt

$$\langle (x, y), (x', y') \rangle := \langle x, x' \rangle + \langle y, y' \rangle \quad (18)$$

bildet einen Hilbertraum, der als **direkte Summe**  $\mathcal{X} \oplus \mathcal{Y}$  bezeichnet wird. Aus den Basen  $a_i$  und  $b_i$  der ursprünglichen Hilberträumen ergibt sich die Basis der direkten Summe durch Vereinigung  $a_i \cup b_i$ . Die Dimensionen addieren sich.

## 2.5 Tensorprodukt

Tensoren n-ter Stufe sind allgemein n-fache lineare Abbildungen auf einen Vektorraum. Das bedeutet sie bilden n Vektoren in den zugrundeliegenden Körper ab.

## 2.6 Verschränktheit

Ein Zustand  $\psi = \sum_{m,n} \tilde{c}_{mn} \phi_m \otimes \psi_n$  ist genau dann verschränkt, wenn der Rang der Koeffizientenmatrix  $\tilde{c} = (\tilde{c}_{mn})$  größer ist als 1.

Beispiel:

Gegeben sei ein zusammengesetztes System mit Zustandsraum  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  mit  $\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_2 = \mathbb{C}^2$ . Die Basis von  $\mathbb{C}^2$  sei  $|1\rangle$  und  $|2\rangle$ . Produktzustände  $|a\rangle \otimes |b\rangle$  werden mit  $|ab\rangle$  bezeichnet.

Der Zustand

$$|\psi\rangle = \alpha |11\rangle + \beta |12\rangle + \gamma |21\rangle + \delta |22\rangle \quad (19)$$

ist genau dann separabel, wenn die Koeffizientenmatrix

$$c = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} \quad (20)$$

den Rang 1 hat. Dies ist der Fall, wenn die beiden Spaltenvektoren linear abhängig sind oder wenn die Determinante

$$\det(c) = \alpha\delta - \beta\gamma \quad (21)$$

verschwindet.

## 2.7 Operatoren

Ein **Linearer Operator**  $\hat{A}$ , ist eine Abbildung eines Vektorraums  $V$  auf sich,

$$\hat{A} : V \rightarrow V, v \mapsto \hat{A}(v) =: \hat{A}v \quad (22)$$

die in ihrem Argument linear ist:

$$\hat{A}(\lambda x + \mu y) = \lambda \hat{A}x + \mu \hat{A}y \quad (23)$$

Das Bild jedes Basisvektors muss selbst wieder als Linearkombination der Ba-



sisvektoren dargestellt werden können:

$$\hat{A}e_j =: a_{ij}e_i \quad (24)$$

Für lineare Operatoren gilt deshalb insbesondere

$$\hat{A}v = \hat{A}(v_j e_j) = v_j \hat{A}e_j = (a_{ij}v_j)e_i \quad (25)$$

mit Einsteinscher Summenkonvention. Das bedeutet, dass lineare Operatoren bezüglich einer Basis  $e_i$  durch quadratische Matrizen  $(a_{ij})$  *dargestellt* werden können.

Die linearen Operatoren bilden selbst einen Vektorraum. Lineare Operatoren können mit Skalen aus dem zugrundeliegenden Körper gestreckt werden und die Hintereinanderausführung von zwei linearen Operatoren ist selbst wieder ein linearer Operator:

$$(\hat{A}\hat{B})v = \hat{A}(\hat{B}v) \quad (26)$$

## 2.8 Kommutator

$$[\hat{A}, \hat{B}] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (27)$$

Es gelten u.A.:

Die Jacobi-Identität:

$$[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0 \quad (28)$$

Die Produktregel:

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} \quad (29)$$

und

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} \quad (30)$$

## 2.9 Dirac Notation

In der Dirac-Notation werden Vektoren aus dem Hilbertraum als Ket  $|\psi\rangle$  geschrieben und duale Zustandsvektoren als Bra  $\langle\psi|$ . Für das Skalarprodukt schreibt man:

$$\langle\phi|\psi\rangle \quad (31)$$

## 2.10 Projektor

Bei dem Ausdruck  $|\psi\rangle\langle\phi|$  handelt es sich um einen linearen Operator

$$|\psi\rangle\langle\phi| : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}, |\chi\rangle \mapsto |\psi\rangle\langle\phi|\chi\rangle \quad (32)$$

Das Ergebnis zeigt in Richtung des Ket  $|\psi\rangle$ . Man kann deshalb

$$P_\psi := |\psi\rangle\langle\psi| \quad (33)$$

als **Projektor** in Richtung des Ket  $|\psi\rangle$  interpretiert werden. Wird  $P_\psi$  auf einen Zustand  $|\chi\rangle$  angewandt, dann wird  $|\chi\rangle$  zunächst durch das Skalarprodukt auf das Ket  $|\psi\rangle$  projiziert und dann wird damit der Ket  $|\psi\rangle$  multipliziert.  $|\chi\rangle$  wird also auf den Unterraum des  $\mathcal{H}$  projiziert, der von  $|\psi\rangle$  aufgespannt wird.

## 2.11 Hermitesche Operatoren

Der zu einem Operator  $\hat{A}$  adjungierte Operator  $\hat{A}^\dagger$  ist definiert durch:

$$\langle\phi|\hat{A}\psi\rangle = \langle\hat{A}^\dagger\phi|\psi\rangle \quad (34)$$

Das bedeutet insbesondere:

$$\langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}^\dagger|\phi\rangle^* \quad (35)$$

Außerdem:

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger \quad (36)$$

Sei durch  $|\psi_i\rangle$  eine Orthonormalbasis von  $\mathcal{H}$  gegeben, dann wird  $\hat{A}$  bezüglich dieser Basis durch die Matrix  $(a_{ij})$  mit den Elementen

$$a_{ij} = \langle\psi_i|\hat{A}\psi_j\rangle \quad (37)$$

dargestellt. Daraus folgt

$$a_{ij} = \langle\hat{A}^\dagger\psi_i|\psi_j\rangle = \langle\psi_j|\hat{A}^\dagger\psi_i\rangle^* = a_{ij}^{\dagger*} \quad (38)$$

Das heißt, dass die Matrix des adjungierten Operators die komplex-konjugierte, transponierte Matrix des Operators ist.

In diesem Zusammenhang ist ein Operator  $\hat{A}$  **hermitesch** wenn  $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ . Hermitesche Operatoren haben folgende wichtige Eigenschaften:

- Sie haben reelle Eigenwerte<sup>2</sup>.
- Sie sind diagonalisierbar. D.h. es existiert eine Basis, in der sie durch eine Diagonalmatrix dargestellt werden können bzw. es existiert eine reguläre Matrix  $S$ , sodass  $D_A = S^{-1}AS$  für eine Diagonalmatrix  $D_A$  gilt. ( $A$  ist die Matrix zum Operator.)
- Die Eigenvektoren  $|a_n\rangle$  zu verschiedenen Eigenwerten  $a_n$  sind orthogonal zueinander und können zu einer orthonormalen ( $\langle a_n|a_m\rangle = \delta_{nm}$ ) Eigenbasis normiert werden, die einen Unterraum von  $\mathcal{H}$  aufspannt.

## 2.12 Spektralzerlegung

Insbesondere kann jeder beliebige Zustandsvektor  $|\psi\rangle$  bezüglich der Eigenbasis eines hermiteschen Operators dargestellt werden:

$$|\psi\rangle = \sum c_n |a_n\rangle \quad (39)$$

mit

$$c_n = \langle a_n|\psi\rangle \quad (40)$$

Für nichtentartete Eigenwerte definiert

$$\hat{P}_{a_n} := |a_n\rangle \langle a_n| \quad (41)$$

den Projektor auf den Unterraum von  $\mathcal{H}$ , der durch  $|a_n\rangle$  aufgespannt wird. Er heißt Spektralprojektor. Mithilfe der Spektralprojektoren kann der Hilbertraum in orthogonale Unterräume zerlegt werden:

$$\mathcal{H} = \oplus \hat{P}_{a_n} \mathcal{H} \quad (42)$$

Wendet man den Operator auf einen solchen Unterraum an, so muss er den Eigenwert  $a_n$  ergeben, also:

$$\hat{A}\hat{P}_{a_n} = a_n\hat{P}_{a_n} \quad (43)$$

<sup>1</sup>Strenggenommen muss zwischen hermitesch und selbstadjungiert unterschieden werden. Hier ist diese Unterscheidung aber nicht wesentlich.

<sup>2</sup>Es gilt  $\langle \hat{A}\psi|\psi\rangle = \langle \psi|\hat{A}\psi\rangle = \langle \hat{A}\psi|\psi\rangle^*$ . Sei jetzt  $|\psi\rangle$  Eigenvektor zu  $\hat{A}$  mit Eigenwert  $a$ , dann folgt daraus direkt  $a\langle \psi|\psi\rangle = a^*\langle \psi|\psi\rangle$ , also ist  $a$  reell.

Die Spektralprojektoren sind hermitesch und es gilt

$$\sum P_i = I \quad (44)$$

Funktionen von Operatoren können dann durch Spektralzerlegung

$$f(\hat{A})\hat{P}_{a_n} = f(a_n)\hat{P}_{a_n} \quad (45)$$

durch Funktionen von Eigenwerten dargestellt weqrden.

Beispiel:

$$A = \frac{1}{7} \begin{pmatrix} 27 & 12 & -24 \\ 12 & 59 & 8 \\ -24 & 8 & 47 \end{pmatrix} \quad (46)$$

Die Eigenwerte sind

$$\lambda_1 = \lambda_2 = 9, \lambda_3 = 1 \quad (47)$$

mit den Eigenvektoren

$$c_1 = \frac{1}{\sqrt{10}} \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 0 \end{pmatrix}, c_2 = \frac{1}{\sqrt{35}} \begin{pmatrix} -3 \\ 1 \\ 5 \end{pmatrix}, c_3 = \frac{1}{\sqrt{14}} \begin{pmatrix} 3 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix} \quad (48)$$

Der Spektralprojektor auf den Eigenraum von  $\lambda = 9$  ist

$$P_9 = c_1 c_1^T + c_2 c_2^T = \frac{1}{14} \begin{pmatrix} 5 & 3 & -6 \\ 3 & 13 & 2 \\ -6 & 2 & 10 \end{pmatrix} \quad (49)$$

und der Projektor auf den Eigenraum von  $\lambda = 1$  ist

$$P_1 = c_3 c_3^T = \frac{1}{14} \begin{pmatrix} 9 & -3 & 6 \\ -3 & 1 & -2 \\ 6 & -2 & 4 \end{pmatrix} \quad (50)$$

Mit den Eigenwerten und Spektralprojektoren können beliebige Funktionen der Matrix durch

$$f(A) = f(9)P_9 + f(1)P_1 \quad (51)$$

berechnet werden. Zum Beispiel ist

$$\sqrt{A} = 3P_9 + P_1 = \frac{1}{7} \begin{pmatrix} 12 & 3 & -6 \\ 3 & 20 & 2 \\ -6 & 2 & 17 \end{pmatrix} \quad (52)$$

### 2.13 Einsoperator

$$\hat{I} := \sum |a_n\rangle \langle a_n| \quad (53)$$

Angewandt auf einen beliebigen Vektor  $|\psi\rangle$  projiziert der Einsoperator zunächst  $|\psi\rangle$  auf alle Basisvektoren und spannt ihn dann mithilfe dieser Basis auf. Er erzeugt also eine Darstellung des Vektors  $|\psi\rangle$  bezüglich der Eigenbasis des Operators.

### 2.14 Unitäre Operatoren

Unitäre Operatoren sind solche, die invertierbar sind und das Skalarprodukt erhalten, also

$$\langle \hat{U}\phi | \hat{U}\psi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle \quad (54)$$

Daraus folgt, dass

$$\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1} \quad (55)$$

Zu jedem selbstadjungierten Operator  $\hat{A}$  gibt es einen unitären Operator

$$\hat{U} = e^{i\hat{A}} \quad (56)$$

und umgekehrt gibt es zu jedem unitären Operator einen selbstadjungierten, den man **Generator** oder **Erzeugender** von  $\hat{U}$  nennt. Hat  $\hat{A}$  die Eigenwerte  $a_n$ , dann besitzt  $\hat{U}$  die Eigenwerte  $e^{ia_n}$ .

Für einen antiunitären Operator gilt:

$$\langle \hat{U}\phi | \hat{U}\psi \rangle = \langle \phi | \bar{\psi} \rangle = \langle \psi | \phi \rangle \quad (57)$$

## 3 Observablen, Zustände und Unbestimmtheit

### 3.1 Postulate der QM (Kopenhagener Deutung)

- **Zustände:**

Quantenmechanische Zustände entsprechen eindimensionalen Teilräumen des Hilbertraums.

- **Observablen:**

Observablen werden durch lineare, selbstadjungierte Operatoren dargestellt.

- **Messwerte:**

Das Eigenwertspektrum eines selbstadjungierten Operators entspricht den möglichen Messwerten.

- **Wahrscheinlichkeiten:**

Die Betragsquadrate der Komponenten  $c_i$  eines beliebigen Zustandsvektors  $|\psi\rangle$  bezüglich einer (normierten) Eigenbasis  $|a_i\rangle$  eines Operators  $\hat{A}$  entsprechen den Wahrscheinlichkeiten  $p_i = p(a_i)$ , mit denen eine Messung der diesem Operator zugeordneten Observablen den Eigenwert  $a_i$  zum Eigenvektor  $|a_i\rangle$  ergibt:

$$p_i = p(a_i) = |c_i|^2 = |\langle a_i | \psi \rangle|^2 \quad (58)$$

- **Zeitentwicklung:**

Die Zeitentwicklung eines quantenmechanischen Zustands  $|\psi\rangle$  ist durch die Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = \hat{H} |\psi\rangle \quad (59)$$

bestimmt.

- **Messprozess:**

Eine Messung einer Observablen, die durch einen Operator  $\hat{A}$  dargestellt wird, überführt das System in einen Eigenzustand von  $\hat{A}$ . Nach der Messung ist der Zustandsvektor also gleich demjenigen Eigenvektor  $|a_n\rangle$  von  $\hat{A}$ , der zu dem Messwert  $a_n$  gehört, der bei der Messung gefunden wurde.

Die Quantenmechanik fragt nicht mehr, was physikalische Systeme sind und wie sie sich verhalten, sondern nur noch, was mit welcher Wahrscheinlichkeit gemessen werden kann.

### 3.2 Realität und Lokalität

Eine Größe ist real, wenn sie in einem ungestörten System mit Sicherheit vorhersagbar ist.

Lokalität besagt, dass die Messung an einem System den Zustand eines zweiten Systems nicht verändern kann, wenn die beiden Systeme nicht wechselwirken können.

### 3.3 Bell'sche Ungleichung

In einer Quantentheorie mit verborgenem Parameter  $\lambda$ , die die Prinzipien von Lokalität und Realität erfüllt, gilt die Bell'sche Ungleichung:

$$|E(\vec{m}, \vec{n}) - E(\vec{m}, \vec{n}')| \leq 1 + E(\vec{n}, \vec{n}') \quad (60)$$

Im Spinparadoxon steht  $E(\vec{m}, \vec{n})$  für die Korrelation zwischen zwei Messungen der Spinkomponenten in  $\vec{m}$  bzw.  $\vec{n}$  Richtung:

$$E(\vec{m}, \vec{n}) = \langle \psi | \sigma_A(\vec{m}) \sigma_B(\vec{n}) | \psi \rangle = -\vec{m} \cdot \vec{n} \quad (61)$$

mit

$$\sigma_A(\vec{m}) = \vec{m} \cdot \vec{\sigma}_A \quad (62)$$

$\sigma$  sind die Pauli-Matrizen.  $A$  und  $B$  stehen für die beiden Teilchen.

### 3.4 Gemischte Zustände

Quantenmechanische **reine Zustände** spannen komplex-eindimensionale Unterräume im Hilbertraum  $\mathcal{H}$  auf. **Gemischte Zustände** entsprechen mehrdimensionalen Unterräumen des Hilbertraums. Ein solcher mehrdimensionaler Unterraum kann durch eine Menge von orthonormalen Vektoren  $|n\rangle$  aufgespannt werden.

Ein Gemisch quantenmechanischer Zustände wird durch einen **Dichteoperator** dargestellt, der jedem Projektor  $\hat{P}_n = |n\rangle \langle n|$  eine Wahrscheinlichkeit  $p_n$  zuordnet:

$$\hat{\rho} := \sum_n p_n |n\rangle \langle n| \quad (63)$$

Dabei hat  $p_n$ , die Wahrscheinlichkeit, mit der ein Zustand  $|n\rangle$  in einem Gemisch besetzt ist. Sie hat nichts mit der quantenmechanischen Wahrscheinlichkeit  $|c_i|^2$  zu tun, mit der ein bestimmtes Messergebnis erwartet werden kann.

Der Erwartungswert einer Observablen  $\hat{A}$  in einem Gemisch ist durch

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | (\hat{A} \hat{\rho}) | \psi \rangle \quad (64)$$

gegeben. Der Dichteoperator zerlegt den Zustand  $|\psi\rangle$  in die orthonormalen Zustände  $|n\rangle$  und versieht sie mit einer Wahrscheinlichkeit  $p_n$  mit der die möglichen Messwerte von  $\hat{A}$  gemittelt werden. Man spricht auch von Spurbildung:

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | (\hat{A} \hat{\rho}) | \psi \rangle =: Sp(\hat{A} \hat{\rho}) \quad (65)$$

In der ÜG:

$$\begin{aligned} \hat{\rho} &= \sum_m p_m |m\rangle \langle m| \\ \langle \hat{A} \rangle &= \sum_n \langle n | \hat{\rho} \hat{A} | n \rangle \\ &= \sum_{m,n} \langle n | m \rangle \langle m | p_m \hat{A} | n \rangle \\ &= \sum_{m,n} p_m \langle m | \hat{A} | n \rangle \langle n | m \rangle \\ &= \sum_{m,n} p_m a_n |\langle m | n \rangle|^2 \\ &= \sum_n p_n a_n \end{aligned}$$

## 4 Zeitentwicklung

### 4.1 Zeitentwicklungsoperator

$$U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \quad (66)$$

Für die Matrixdarstellung des Zeitentwicklungsoperators gilt die Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t) = H U(t) \quad (67)$$

Der Zeitentwicklungsoperator muss folgende Eigenschaften haben

- Er muss unitär sein, damit der die Wahrscheinlichkeit erhält
- Transitivität:  $\hat{U}(t_1, t_3) = \hat{U}(t_1, t_2) \hat{U}(t_2, t_3)$
- $\hat{U}(t_0, t_0) = \hat{I}$

### 4.2 Rabi-Oszillationen

### 4.3 Dyson Reihe

$$\hat{U}(t, t_0) = T \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}(t') dt'\right) \quad (68)$$



## 4.4 Bilder der Quantenmechanik

Physikalisch bedeutend sind allein die *relativen* Orientierungen der Zustandsvektoren gegenüber den Eigenvektoren.

- Im **Schrödinger Bild** wirkt der Zeitentwicklungsoperator auf die quantenmechanischen Zustände. (Zustände zeitabhängig; Operatoren zeitunabhängig)
- Im **Heisenberg Bild** bleiben die Zustände zeitlich konstant, der Zeitentwicklungsoperator wirkt auf die Operatoren. (Zustände zeitunabhängig, Operatoren zeitabhängig)

Es gilt die Heisenberg-Gleichung:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}_H = [\hat{A}_H, \hat{H}_H] + i\hbar (\partial_i \hat{A})_H \quad (69)$$

Das H steht für Heisenberg.

- Im **Dirac Bild** oder auch **Wechselwirkungsbild** wird die Zeitentwicklung auf Operatoren und Zustände aufgeteilt. Die Zeitentwicklung der Zustände wird durch den Störoperator im Hamilton-Operator getrieben, während die Zeitentwicklung der Operatoren durch den zeitunabhängigen Teil des Hamilton-Operators getrieben wird. Man spaltet also  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ . Die Zustandsvektoren erfüllen:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle_I = \hat{V}_I |\psi(t)\rangle_I \quad (70)$$

I steht für Interaction.

Der Zeitentwicklungsoperator ist:

$$\hat{U}_I(t, t_0) = T \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{V}(t') dt'\right) \quad (71)$$

## 4.5 Zeitentwicklung von Gemischen

Ein Gemisch, das durch den Dichteoperator

$$\rho(t_0) = \sum_n p_n |n, t_0\rangle \langle n, t_0| \quad (72)$$

gegeben ist entwickelt sich im Schrödinger-Bild gemäß der **von Neumann Gleichung**:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho(t) = [\hat{H}, \hat{\rho}] \quad (73)$$

## 5 Einfache Quantensysteme

### 5.1 Wellenfunktion

Spannt man einen Zustandsvektor  $|\psi\rangle$  durch die Eigenvektoren  $|x\rangle$  des Ortsoperators  $\hat{x}$  auf

$$|\psi\rangle = \int |x\rangle \langle x|\psi\rangle d^d x \quad (74)$$

so nennt man die Projektion  $\langle x|\psi\rangle =: \psi(t, x)$  als **Wellenfunktion**. Das bedeutet insbesondere, dass sie normiert ist:

$$||\psi(t, x)||^2 = \int |\psi(t, x)|^2 d^d x = 1 \quad (75)$$

Wellenfunktionen müssen deshalb aus dem Raum der quadratintegrablen Funktionen  $\mathcal{L}_2(C) := \{\psi : C \mapsto \mathbb{C} \mid ||\psi(t, x)||^2 < \infty\}$  mit  $C \subset \mathbb{R}^d$ . Man führt die Äquivalenzklasse

$$[\psi] := \{\phi \in \mathcal{L}_2(C) \mid ||\phi - \psi|| = 0\} \quad (76)$$

ein. Damit definiert man den Raum

$$L_2(C) := \{[\psi] \mid \psi \in \mathcal{L}_2(C)\} \quad (77)$$

mit dem Skalarprodukt

$$\langle \phi, \psi \rangle := \int \phi^*(t, x) \psi(t, x) d^d x \quad (78)$$

So ist  $L_2(C)$  ein Hilbertraum.

Im Folgenden interessieren uns Wellenfunktionen aus diesem Raum, mit denen wir quantenmechanische Zustände in **Ortsdarstellung** beschreiben können.

### 5.2 Darstellungen des Orts- und Impulsoperators

In der Ortsdarstellung sind

$$\hat{x}_x = x \quad (79)$$

$$\hat{p}_x = i\hbar \nabla_p \quad (80)$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_x^2 + V(x) \quad (81)$$

In der Impulsdarstellung gilt:

$$\hat{x}_p = -i\hbar \nabla_x \quad (82)$$

$$\hat{p}_p = p \quad (83)$$

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + V(i\hbar\nabla_p) \quad (84)$$

Der Kommutator zwischen dem Orts- und Impulsoperator ist

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = -i\hbar[x_i, \partial_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad (85)$$

### 5.3 Zeitunabhängige Schrödingergleichung

Wenn der Hamiltonoperator nicht von der Zeit abhängt, kann die Schrödingergleichung durch den Produktansatz

$$\psi(t, x) = e^{-iEt\hbar}\phi(x) \quad (86)$$

in die Form

$$\hat{H}\phi(x) = E\phi(x) \quad (87)$$

einer Eigenwertgleichung gebracht werden.

### 5.4 Dirichlet und Neumann Randbedingungen

**Dirichlet** Randbedingungen sagen einem welche Werte die gesuchte Funktion auf dem Rand des Definitionsbereich annimmt. z.B.: (1D)

$$\psi(a) = 0 = \psi(b) \quad (88)$$

**Neumann** Randbedingungen machen Aussagen über die erste Ableitung dort. z.B.: (1D)

$$\psi(a)' = 0 = \psi'(b) \quad (89)$$

### 5.5 Allgemeine Aussagen über die Wellenfunktion

- Allgemein gilt, dass für ein stetiges Potential  $V(x)$  auch die zweite Ableitung von  $\psi(x)$  stetig sein muss, d.h.  $\psi$  muss dann zweimal stetig differenzierbar sein.
- Enthält  $V(x)$  einen endlichen Sprung an einer Stelle  $x_0$ , muss  $\psi'(x)$  an dieser Stelle einen Knick enthalten. Dann ist die Wellenfunktion nur noch einmal stetig differenzierbar.
- Der Grundzustand hat in dem Intervall, in dem die Schrödingergleichung gelöst wird keine Nullstelle. Der nte angeregte Zustand hat n Knoten

bzw. Nullstellen in diesem Intervall

## 5.6 Potentialstufe bei $x = y$

Die eindimensionale Schrödingergleichung mit konstantem Potential  $V_0$  kann in die Form

$$\psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)\psi(x) = 0 \quad (90)$$

gebracht werden. Sie hat die Form einer räumlichen harmonischen Oszillatorgleichung mit der Wellenzahl

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)} \quad (91)$$

Deren allgemeine Lösung

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (92)$$

lautet.

Für  $E > V_0$  ist  $k$  reell und die Lösung oszilliert. Für  $E < V_0$  wird  $k$  imaginär. Man setzt dann

$$k = i\kappa \quad (93)$$

$$\kappa := \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)} \in \mathbb{R} \quad (94)$$

Ansatz:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & x < y \\ Ce^{ik'x} + De^{-ik'x} & x > y \end{cases} \quad (95)$$

Mit

$$\alpha := e^{iky} \quad \alpha' := e^{ik'y} \quad (96)$$

und

$$\delta_{\pm} := 1 \pm \frac{k}{k'} \quad (97)$$

erhält man aus den oben genannten Stetigkeitsbedingungen das Gleichungssystem

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} \frac{\alpha}{\alpha'} \delta_+ & \frac{1}{\alpha \alpha'} \delta_- \\ \alpha \alpha' \delta_+ & \frac{\alpha'}{\alpha} \delta_- \end{pmatrix} \quad (98)$$

## 5.7 Reflexion und Transmission

Für eine Potentialstufe bei  $y = 0$  mit

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 > 0 & x > 0 \end{cases} \quad (99)$$

gilt zunächst  $\alpha = 1 = \alpha'$  und Die Matrix in der Gleichung oben vereinfacht sich zu:

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} \delta_+ & \delta_- \\ \delta_- & \delta_+ \end{pmatrix} \quad (100)$$

Betrachten wir ein Teilchen, dass mit der Energie  $E$  von links kommend auf die Potentialstufe trifft. Ansatz:

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + \mathcal{R}e^{-ikx} & x < 0 \\ \mathcal{T}e^{ik'x} & x > 0 \end{cases} \quad (101)$$

, wobei hier

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E} \text{ und } k' = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)} \quad (102)$$

Damit erhält man:

$$\mathcal{R} = \frac{k - k'}{k + k'} \quad (103)$$

und

$$\mathcal{T} = \frac{2k}{k + k'} \quad (104)$$

- Reflexion tritt auch dann auf, wenn  $E > V_0$
- auch für  $E < V_0$  liegt eine Transmissionswahrscheinlichkeit vor:

$$|\mathcal{T}|^2 = \frac{4k^2}{k^2 + \kappa^2} \quad (105)$$

Die Wellenfunktion in der Potentialstufe klingt exponentiell ab.

- Für eine beliebige aber feste Energie addieren sich Reflexions und Transmissionswahrscheinlichkeit zu 1:  $|\mathcal{R}|^2 + \frac{k'}{k}|\mathcal{T}|^2 = 1$
- Die Wahrscheinlichkeitsstromdichte für  $E > V_0$  ist  $j(x) = \frac{4\hbar}{m} \frac{k^2 k'}{(k+k')^2}$  und quellenfrei.
- Die Reflexionswahrscheinlichkeit beträgt, trotz endlicher Transmissionswahrscheinlichkeit

$$|\mathcal{R}|^2 = \left| \frac{k - i\kappa}{k + i\kappa} \right|^2 = 1 \quad (106)$$

Das Teilchen wird also vollständig reflektiert. Das Eindringen verzögert die Reflexion, sodass das Teilchen mit einer endlichen Phasenverschiebung wieder aus der Potentialstufe austritt. Diese Phasenverschiebung kann aus  $\mathcal{R}$  bestimmt werden. Man setzt an:

$$\mathcal{R} = e^{-2i\delta} \quad (107)$$

Für  $\delta$  ergibt sich:

$$\tan \delta = \frac{\kappa'}{k} \quad (108)$$

- Links der Potentialstufe ist  $\psi(x) = e^{ikx} + e^{-i(kx+2\delta)}$

## 5.8 Potentialschwelle

Eine Potentialschwelle hat die Form:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 > 0 & 0 < x < a \\ 0 & x > a \end{cases} \quad (109)$$

Ansatz:

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + \mathcal{R}e^{-ikx} & x < 0 \\ Ae^{ik'x} + Be^{-ik'x} & 0 < x < a \\ \mathcal{T}e^{ikx} & \end{cases} \quad (110)$$

Die Transmissionswahrscheinlichkeit für  $E < V_0$  beträgt

$$|\mathcal{T}|^2 = \left(1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sinh^2(\kappa'a)\right)^{-1} \quad (111)$$

## 5.9 Potentialtopf

Ein Potentialtopf hat die Form:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < -a \\ V_0 < 0 & -a < x < a \\ 0 & x > a \end{cases} \quad (112)$$

Ansatz:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{-ik'x} & x < -a \\ Be^{ikx} + Ce^{-ikx} & -a < x < a \\ De^{ik'x} & \end{cases} \quad (113)$$

Wegen der Symmetrie des Problems ist  $A = D$  und  $C = \pm B$ . Wir können  $B = 1$  setzen. Man erhält als Bedingung an Zustände eines Teilchens mit Energie  $E$  im Potentialtopf:

$$1 + \frac{k}{k'} = \pm e^{2ika} \left(1 - \frac{k}{k'}\right) \quad (114)$$

Für  $V_0 = -\infty$  gehen  $k' \rightarrow i\infty$  und  $\delta_{\pm} \rightarrow 1$ . Daraus folgt

$$k = \frac{n\pi}{2a} \quad (115)$$

In einem unendlich tiefen Potentialtopf muss ein Teilchen eine Wellenlänge  $\lambda = \frac{2\pi}{k}$  haben, die halb- oder ganzzahlig in die Breite  $L = 2a$  des Potentialtopfs passt:

$$n \frac{\lambda}{2} = L \quad (116)$$

## 5.10 Harmonischer Oszillator

Der Hamiltonoperator des harmonischen Oszillators:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}^2 \quad (117)$$

## 5.11 Auf und Absteigeoperatoren

Die zeitunabhängige Schrödingergleichung für den harmonischen Oszillator lautet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \psi = E\psi \quad (118)$$

Man führt die Längenskala

$$l := \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad (119)$$

ein. Sie entspricht dem klassischen Umkehrpunkt eines Oszillators mit der Grundzustandsenergie  $E_0 = \hbar\omega/2$ .

Damit kann man den Ort und die Ableitung nach dem Ort skalieren:

$$x = lu \text{ und } \partial_x = l^{-1} \partial_u \quad (120)$$

Damit vereinfacht sich die Schrödingergleichung zu

$$\frac{\hbar\omega}{2}(-\partial_u^2 + u^2)\psi(u) = E\psi(u) \quad (121)$$

Man definiert den **Aufsteigeoperator**

$$\hat{a} := \frac{1}{\sqrt{2}}(u + \partial_u) \quad (122)$$

und seinen adjungierten Operator den **Absteigeoperator**:

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(u - \partial_u) \quad (123)$$

Der Kommutator ist

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \quad (124)$$

Aus den beiden Operatoren kann man den **Besetzungszahloperator**

$$\hat{N} := \hat{a}^\dagger \hat{a} = \frac{1}{2}(u^2 - \partial_u^2 - [\partial_u, u]) \quad (125)$$

bauen. Es gelten

$$[\hat{N}, \hat{a}] = -\hat{a} \quad (126)$$

und

$$[\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger \quad (127)$$

Daraus folgt durch Vergleich:

$$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{N} + \frac{1}{2}) \quad (128)$$

Sei  $|n\rangle$  ein Eigenvektor von  $\hat{N}$  mit Eigenwert  $n$ . Dann:

$$\hat{N}(\hat{a}^\dagger |n\rangle) = (n+1)(\hat{a}^\dagger |n\rangle) \quad (129)$$

Also ist  $\hat{a}^\dagger |n\rangle$  auch Eigenzustand von  $\hat{N}$ , aber mit dem um eins erhöhten Eigenwert  $n+1$ . Ebenso:

$$\hat{N}(\hat{a} |n\rangle) = (n-1)(\hat{a} |n\rangle) \quad (130)$$

Der Grundzustand ist  $n=0$ . Mann kann  $|0\rangle$  dafür schreiben. Davon ausgehend, kann man durch wiederholte Anwendung von  $\hat{a}^\dagger$  Zustände mit jeweils um eins erhöhten Eigenwerten erreichen.



Die Eigenwerte des Hamiltonoperators sind damit

$$E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) \quad (131)$$

Wenn ein Zustand  $|n\rangle$  normiert ist, dann sind auch

$$|n-1\rangle := \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{a} |n\rangle \quad (132)$$

$$|n+1\rangle := \frac{1}{\sqrt{n+1}} \hat{a}^\dagger |n\rangle \quad (133)$$

normiert. Also sind die normierten Eigenzustände

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle \quad (134)$$

, wenn  $|0\rangle$  normiert ist.

Die Energieeigenzustände in der Ortsdarstellung lauten

$$\psi_n(u) = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}} \sqrt{2^n n!}} e^{-u^2/2} \quad (135)$$

wobei  $H_n(u)$  die Hermite-Polynome sind.

## 6 Symmetrie

### 6.1 Gruppenaxiome

siehe p.82 im pdf

### 6.2 Wichtige Gruppen in der Physik

Die **orthogonale Gruppe**  $O(n)$  ist die Gruppe der orthogonalen  $n \times n$  Matrizen mit reellen Koeffizienten. Sie ist eine Lie Gruppe. Die **spezielle orthogonale Gruppe**  $SO(n)$  umfasst die orthogonalen Matrizen mit Determinante +1. Ein Operator/ eine Matrix ist orthogonal, wenn

$$A^T = A^{-1} \quad (136)$$

d.h. alle Spalten/Zeilenvektoren sind orthogonal.

Die **unitäre Gruppe**  $U(\mathcal{H})$  über einen Hilbertraum  $\mathcal{H}$  ist die Gruppe aller unitären komplex linearen Abbildungen über  $\mathcal{H}$ . Ein Operator/eine Matrix ist unitär, wenn

$$A^\dagger = A^{-1} \quad (137)$$

Die unitäre Gruppe über einen endlichdimensionalen Hilbertraum  $\mathcal{H}$  der Dimension  $n$  ist eine Lie-Gruppe und wird mit  $U(n)$  bezeichnet. Sie ist eine Untergruppe der **allgemeinen linearen Gruppe**  $GL(n, \mathbb{C})$ ; das ist die Gruppe der regulären (= invertierbaren)  $n \times n$  Matrizen. Die **spezielle unitäre Gruppe**  $SU(n)$  beschränkt sich wieder nur auf solche, dessen Determinante +1 ist.

Die Lorentzgruppe ist die Gruppe aller Lorentz-Transformationen der Minkowski-Raumzeit.

### 6.3 Darstellungen

Man sollte streng unterscheiden zwischen einer Gruppe und ihrer Darstellung. Hier ist mit einer Darstellung einer Gruppe  $G$  ein Homomorphismus

$$D : G \rightarrow GL(N, K), \quad g \mapsto D(g) \quad (138)$$

gemeint, wobei  $K$  in der Regel  $\mathbb{R}$  oder  $\mathbb{C}$  ist. Eine lineare Darstellung  $D$  einer Gruppe  $G$  durch Matrizen  $M \in D(G) \subset GL(N)$  erlaubt es die Gruppenoperationen durch die Multiplikation von Matrizen mit Vektoren  $v \in V$  zu beschreiben:  $v \rightarrow v' = Mv$ .

Eine Darstellung heißt irreduzibel, wenn ein beliebiges  $v \in V$  durch Anwendung aller  $M \in D(G)$  in alle  $w \in V$  überführt werden kann.

### 6.4 Paulimatrizen

Jede Matrix  $U \in SU(2)$  kann durch Linearkombination der Einheitsmatrix und der drei **Pauli Matrizen**

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (139)$$

### 6.5 Lie Gruppen

Eine sehr wichtige Klasse kontinuierlicher Gruppen sind die **Lie Gruppen**. Wichtig hier ist u.A.

- Elemente einer Lie-Gruppe können nach ihren Parametern differenziert werden
- Es ist möglich Gruppenelemente zu betrachten, die infinitesimal benachbart sind.

$$g(\phi + d\phi) = g(\phi) + \frac{dg}{d\phi}d\phi \quad (140)$$

### Beispiel:

Die  $SO(2)$  kann durch reelle, orthogonale  $2 \times 2$ -Matrizen

$$R = \begin{pmatrix} \cos \phi & \sin \phi \\ -\sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix} \quad (141)$$

dargestellt werden, die von einem einzigen Parameter  $\phi$  abhängen. Mithilfe der Pauli-Matrix  $\sigma_2$  kann  $R$  in die Form

$$R = I_2 \cos \phi + i\sigma_2 \sin \phi = e^{i\sigma_2 \phi} \quad (142)$$

gebracht werden. Das Produkt zweier Matrizen  $R(\phi_1)$  und  $R(\phi_2)$  aus  $SO(2)$  lässt sich dann einfach als

$$R(\phi_1)R(\phi_2) = e^{i\sigma_2(\phi_1+\phi_2)} =: R(\phi) \quad (143)$$

schreiben, so dass  $\phi = \phi_1 + \phi_2$  eine analytische Funktion der Parameter  $\phi_1$  und  $\phi_2$  ist.

Man kann allgemein nach einer exponentiellen Darstellung

$$R = e^{i\epsilon S} \quad (144)$$

für Elemente  $R \in G$  ( $G$  Lie Gruppe) suchen, so dass  $R$  für  $\epsilon \rightarrow 0$  in das Einselement übergeht. Für kleine  $\epsilon$  ist  $R = 1 + i\epsilon S$ , d.h.  $S$  stellt eine infinitesimale Transformation dar. Sie heißt **Generator** oder **Erzeugende** der Gruppe. Zu jedem kontinuierlichen Gruppenparameter gehört ein Generator. Die Generatoren selbst bilden wieder einen Vektorraum, durch den die Gruppe dargestellt werden kann, weil jede Linearkombination der Generatoren zu

einer entsprechenden Multiplikation der Gruppenelemente gehört:

$$S = \lambda_i S_i \Rightarrow R = e^{i\epsilon \lambda_i S_i} = \prod_i R(\epsilon_i) \quad (145)$$

mit  $\epsilon_i := \epsilon \lambda_i$ . (Einsteinsche Summenkonvention)

Wir untersuchen nur zwei beliebige infinitesimale Transformationen  $R_i$  und  $R_j$  aus  $G$  und ihre Generatoren  $S_i$  und  $S_j$ , so findet man die Kommutatorrelation

$$[S_i, S_j] = \sum_k c_{ijk} S_k \quad (146)$$

Dieser Zusammenhang zwischen den Generatoren einer Lie-Gruppe  $G$  definiert deren **Strukturkonstanten**  $c_{ijk}$ .

Fasst man den Kommutator als (antisymmetrisches,  $c_{ijk} = -c_{jik}$ ) Produkt der Generatoren auf, wird durch 146 eine Verknüpfung aus dem Vektorraum der Generatoren in sich selbst definiert. Dieser Vektorraum zusammen mit diesem Produkt heißt **Lie-Algebra**.

Man erhält die Generatoren einer Gruppe zu einem Parameter  $\epsilon_i$  durch

$$S_i = -i \frac{\partial R}{\partial \epsilon_i} \Big|_{\epsilon_i} \quad (147)$$

### Beispiel:

In unserem Beispiel von oben bedeutet das, dass die  $SO(2)$  den einzigen Generator

$$-i \frac{d}{d\phi} \begin{pmatrix} -\sin \phi & \cos \phi \\ -\cos \phi & -\sin \phi \end{pmatrix} \Big|_{\phi=0} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \sigma_2 \quad (148)$$

Generatoren müssen spurfrei sein,  $\text{tr} S = 0$ .

## 6.6 Noether Theorem

Quantenmechanische Zustände  $|\psi\rangle$  sind Strahlen im Hilbertraum. In der Quantenmechanik sind **Symmetrien** Abbildungen dieser Strahlen, die die Übergangswahrscheinlichkeiten von einem Zustand in einen anderen unverändert lassen. Es handelt sich also um (anti)unitäre Transformationen, die mit dem

Hamiltonoperator vertauschen.

Zu jeder kontinuierlichen Symmetrieoperation  $\hat{U}$  gehören Erhaltungsgrößen  $\hat{G}$ , die durch die Generatoren von  $\hat{U}$  ausgedrückt werden.

## 6.7 Parität

Die Paritätsoperation  $P$  kehrt die Vorzeichen sämtlicher räumlicher Koordinaten um

$$P : \vec{x} \rightarrow -\vec{x} \quad (149)$$

Nach dem Wignerschen Satz wird es für ein symmetrisches System einen unitären Operator  $\hat{U}(P)$  geben, der diese Spiegelung implementiert und im Hilbertraum durch

$$\hat{U}(P) |\psi\rangle = |\psi_P\rangle, \quad \langle x | \psi_P \rangle = \psi(-\vec{x}_1, \dots, -\vec{x}_N) \quad (150)$$

dargestellt wird. Die Eigenwerte sind  $\pm 1$ .

Der kinetische Anteil des Hamiltonoperators bleibt unverändert unter Paritätstransformationen<sup>3</sup>, deshalb ist der Hamiltonoperator genau dann unter Paritätstransformationen invariant, wenn das Potential gerade ist  $\hat{V}(\vec{x}) = \hat{V}(-\vec{x})$ . Dann sind Eigenzustände von  $\hat{H}$  auch solche von  $\hat{U}(P)$  und haben deswegen entweder gerade oder ungerade Parität.

## 6.8 Translation

Translationen im Raum verschieben sämtliche räumliche Koordinaten um einen konstanten Betrag:

$$T : \vec{x} \rightarrow \vec{x} - \vec{a} \quad (151)$$

Wieder werden sie durch den unitären Operator  $\hat{U}(\vec{a})$  dargestellt:

$$\hat{U}(\vec{a}) |\psi\rangle = |\psi_{\vec{a}}\rangle \quad (152)$$

Der Operator  $\hat{U}(\vec{a})$  stellt die Gruppe räumlicher Translationen auf dem Hilbertraum dar. Der Generator der räumlichen Translationen ist gerade der Impulsoperator. Das bedeutet, dass auch in der Quantenmechanik in Systemen, die gegenüber räumlichen Translationen invariant sind der Impuls erhalten ist.

<sup>3</sup> $\hat{p}^2$  hat gerade Parität

## 6.9 Drehungen

Analog ist in quantenmechanischen Systemen, die gegenüber räumlichen Drehungen invariant ist der Drehimpuls erhalten.

## 6.10 Drehimpulsoperatoren

Für Drehimpulsoperatoren gilt:

$$[\hat{L}_i, \hat{x}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{x}_k \quad (153)$$

$$[\hat{L}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{p}_k \quad (154)$$

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{L}_k \quad (155)$$

Die Eigenfunktionen von  $\hat{J}_3$  sind zugleich Eigenfunktionen von  $\hat{J}^2$ . Wir bezeichnen sie mit  $|jj_3\rangle$ :

$$\hat{J}_3 |jj_3\rangle = \hbar j_3 |jj_3\rangle \quad (156)$$

$$\hat{J}^2 |jj_3\rangle = \hbar^2 j(j+1) |jj_3\rangle \quad (157)$$

Für die Eigenwerte gilt:

$$-j \leq j_3 \leq j \quad (158)$$

mit  $2j \in \mathbb{N}_0$ . Der Gesamtdrehimpuls kann also ganz- oder halbzahlige Eigenwerte annehmen.

Außerdem gilt

$$\langle (\Delta J_1)^2 \rangle \langle (\Delta J_2)^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2 j_3^2}{4} \quad (159)$$

## 6.11 Leiteroperatoren

Definiere  $\hat{J}_\pm$  als **Leiteroperatoren**:

$$\hat{J}_\pm := \hat{J}_1 \pm i\hat{J}_2 \quad (160)$$

Es gilt:

$$\hat{J}_3 \hat{J}_\pm |jj_3\rangle = \hbar(j_3 \pm 1) \hat{J}_\pm |jj_3\rangle \quad (161)$$

Der Zustand  $\hat{J}_\pm |jj_3\rangle$  ist also Eigenzustand von  $\hat{J}_3$  mit der um eins erhöhten oder erniedrigten magnetischen Quantenzahl  $j_3$ .

## 6.12 Bahndrehimpuls

Der Betrag des Bahndrehimpulses ist durch ganzzahlige Eigenwerte  $l \in \mathbb{N}_0$  gegeben. Die gemeinsamen Eigenfunktionen der Drehimpulskomponente  $\hat{L}_3$  und des Drehimpulsquadrats  $(\hat{L})^2$  in Ortsdarstellung sind die Kugelflächenfunktionen:

$$\langle \vec{x} | lm \rangle = Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (162)$$

## 6.13 Zusammenhang Fouriermoden und Kugelflächenfunktionen

Die Fouriermoden  $e^{i\vec{k}\vec{x}}$  sind Eigenfunktionen des Laplaceoperators mit Eigenwerten  $-\vec{k}^2$ , während die Kugelflächenfunktionen Eigenfunktionen des zweidimensionalen Laplaceoperators  $\Delta_{\theta,\phi}$  auf der Kugeloberfläche mit den Eigenwerten  $-l(l+1)$  sind:

$$\Delta_{\theta,\phi} Y_{lm}(\theta, \phi) = -l(l+1) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (163)$$

## 6.14 Addition von Drehimpulsen

Für die magnetische Quantenzahl  $m$  des Gesamtdrehimpulses gilt

$$m = m_1 + m_2 \quad (164)$$

und

$$-j \leq m \leq +j \quad (165)$$

Für die Quantenzahl des Gesamtdrehimpulses  $j$  gilt:

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2 \quad (166)$$

# 7 Wasserstoffatom

- Einführung von Schwerpunkts und Relativkoordinaten
- Hamilton-Operator zerlegen in Schwerpunkts- und Relativbewegung(, die kommutieren).
- Separation der Schrödingergleichung
- Schwerpunktsbewegung wird durch ebene Welle gelöst

- Die Schrödinger-Gleichung der Relativbewegung ist das **Wasserstoffproblem** und effektiv nur noch ein Einteilchenproblem
- Abspalten der Winkelabhängigkeit (möglich, da Potential kugelsymmetrisch also Drehimpulserhaltung, d.h. der Drehimpulsoperator vertauscht mit dem Hamilton Operator.)  $\rightarrow$  Produktansatz
- Diskrete Energieeigenwerte ergeben sich aus der Randbedingung, dass die Lösung der radialen Schrödinger-Gleichung schnell genug abfallen muss, damit die Wahrscheinlichkeitsdichte nicht divergiert.

Schrödinger-Gleichung für das Wasserstoffatom:

Mit dem dimensionslosen Radius  $\rho = r/a_B$  und der dimensionslosen Energie  $\epsilon := E/R_y$  geht die radiale Schrödinger-Gleichung in die dimensionslose Form

$$u_{El}'' - \frac{l(l+1)}{\rho^2} u_{El} + (\epsilon + \frac{2Z}{\rho}) u_{El} = 0 \quad (167)$$

mit  $u_{El}(r) := rR_{El}(r)$

Energiestufen:

$$E = -\frac{Z_y^R}{n^2} \quad (168)$$

Mit

$$0 \leq l \leq n-1 \quad (169)$$

Radiale Eigenfunktionen: siehe pdf 113

## 8 Elektromagnetische Felder und Spin

Hamiltonoperator eines geladenen Teilchens mit Masse  $\mu$  und Ladung  $q$  im elektromagnetischen Feld mit den Potentialen  $\Phi$  und  $\vec{A}$ : (nicht rel.)

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu} (\hat{p} - \frac{q}{c} \vec{A}(\hat{x}))^2 + q\Phi(\hat{x}) \quad (170)$$

$$\hat{\pi} := \hat{p} - \frac{q}{c} \vec{A}(\hat{x}) \quad (171)$$

heißt kinetischer Impuls.



## 8.1 Aharonov Bohm Effekt

## 8.2 Zeeman Effekt

Ein Magnetfeld ändert die Energieeigenwerte des Wasserstoffatoms um den Betrag

$$\Delta E = B\mu_B m \quad (172)$$

Dies hebt die m-Entartung auf.

## 8.3 Spin

Quantenmechanische Teilchen haben einen bisher unbekannten Freiheitsgrad, den **Spin**, der die Eigenschaften eines Drehimpulses mit halbzahligen Eigenwerten hat.

Der **Lande Faktor**  $g$  gibt an um wie viel das magnetische Moment  $\vec{m}$  eines Teilchens mit Drehimpuls  $\vec{J}$  gegenüber der theoretischen Erwartung erhöht ist:

$$|\vec{m}| = \frac{ge}{2\mu c} |\vec{J}| \quad (173)$$

Für das Elektron ist  $g \approx 2$ .

Konkret können die beiden Eigenzustände eines Spin- $\frac{1}{2}$  Teilchens durch Vektoren aus  $\mathbb{C}^2$  dargestellt werden,

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (174)$$

aus denen sich **Spinoren**

$$|s\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad (175)$$

bilden lassen. Der Spinoperator  $\hat{S}$  kann dann durch die Pauli-Matrizen dargestellt werden:

$$\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \quad (176)$$

Spinoren sind keine Vektoren im Ortsraum, weil sie sich bei Koordinatendrehungen anders transformieren.

Die Zeitentwicklung eines Spins im Magnetfeld ist gegeben durch

$$|s(t)\rangle = \exp(i\omega_L t \sigma_3) |s(0)\rangle \quad (177)$$

mit  $\omega_L := \frac{g}{2\hbar}\mu_B B$ . Dieses Phänomen nennt man **Spinpräzession**.

## 8.4 Paschen-Back-Effekt

Der Störoperator

$$\Delta\hat{H} := \mu_B \left( \frac{\hat{L}_3}{\hbar} \otimes \hat{I} + \hat{I} \otimes \sigma_3 \right) B \quad (178)$$

hat folgendes Verhalten auf die Spinor-Wellenfunktionen

$$\psi_{nlm\uparrow} = \begin{pmatrix} \psi_{nlm} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (179)$$

$$\psi_{nlm\downarrow} = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_{nlm} \end{pmatrix} \quad (180)$$

$$\Delta\hat{H}\psi_{nlm\uparrow} = \mu_B(m+1)B\psi_{nlm\uparrow} \quad (181)$$

$$\Delta\hat{H}\psi_{nlm\downarrow} = \mu_B(m-1)B\psi_{nlm\downarrow} \quad (182)$$

Diese von der magnetischen Quantenzahl und vom Spin unabhängige Aufspaltung der Energieniveaus im Wasserstoffatom wird als **Paschen-Back-Effekt** bezeichnet.

## 8.5 Spin Bahn Kopplung

Für eine vollständige Behandlung der Wechselwirkung des Spins mit einem äußeren Magnetfeld muss noch berücksichtigt werden, dass aus der Sicht des Elektrons das Proton nicht nur ein elektrisches Feld  $\vec{E}$  sondern auch ein Magnetfeld  $\vec{B} = \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{E}$  erzeugt, das sich durch Lorentztransformation in das Ruhesystem des Elektrons ergibt. Auch dieses Magnetfeld liefert einen Beitrag zum Hamiltonoperator, der durch

$$- \hat{m}\vec{B} = \frac{Ze^2}{\mu^2 c^2 r^3} \hat{S}\hat{L} \quad (183)$$

Dieser Beitrag wird als Spin Bahn Kopplung bezeichnet. Nur dann, wenn das äußere Magnetfeld so stark ist, dass es die Spin Bahn Kopplung dominiert, wird der Paschen-Back-Effekt messbar.

## 9 Störungstheorie

Häufig kann ein Hamiltonoperator so in einen ungestörten Anteil und eine Störung aufgespalten werden, dass die Energie-Eigenwerte und Eigenzustände des ungestörten Anteils bekannt sind und die Störung eine kleine Änderung sowohl der Eigenwerte als auch der Zustände bewirkt.

### 9.1 Energieverschiebung in erster Ordnung

Sei also  $\hat{H}^{(0)}$  ein ungestörter Hamiltonoperator und  $\hat{H}^{(1)}$  eine Störung die durch  $\epsilon$  quantifiziert wird:

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \epsilon \hat{H}^{(1)} \quad (184)$$

Die Störung des Hamiltonoperators bewirke kleine Veränderungen der Energie-Eigenzustände die wir durch eine Potenzreihe in  $\epsilon$  nähern:

$$|\psi\rangle_n = |\psi_n^{(0)}\rangle + \epsilon |\psi_n^{(1)}\rangle + \mathcal{O}(\epsilon^2) \quad (185)$$

$$E_n = E_n^{(0)} + \epsilon E_n^{(1)} + \mathcal{O}(\epsilon^2) \quad (186)$$

wobei  $|\psi_n^{(0)}\rangle$  die Eigenzustände des ungestörten Hamiltonoperators zum Eigenwert  $E_n$  seien.

Wir denken uns dabei die Eigenzustände so gewählt, dass sowohl die gestörten als auch die ungestörten Energieeigenzustände orhonormal zu den ungestörten Eigenzuständen sind. Diese Normierungsbedingung bedeuten, dass Störungen beliebiger Ordnung der Eigenzustände senkrecht auf den ungestörten Eigenzuständen stehen müssen.

So erhält man durch Anwenden der Schrödingergleichung die **Energieverschiebung erster Ordnung** als Erwartungswert des Störoperators, ausgewertet mit den ungestörten Energie-Eigenzuständen:

$$E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \psi_n^{(0)} \rangle \quad (187)$$

Für die **Energie Eigenzustände erster Ordnung** gilt

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{k \neq n} \frac{\langle \psi_k^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} |\psi_k^{(0)}\rangle \quad (188)$$

## 9.2 Energieverschiebung zweiter Ordnung

$$E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{|\langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \psi_k^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \quad (189)$$

In zweiter Ordnung der Störungstheorie wird die Grundzustandsenergie immer abgesenkt.

## 9.3 Linearer Stark Effekt

Die Energieverschiebung durch ein äußeres elektrisches Feld in erster Ordnung der Störungstheorie beträgt

$$E_2^{(1)} = \pm 3e|\vec{E}|a_B \quad (190)$$

## 9.4 Virialsatz

Wie in der klassischen Mechanik gilt in der Quantenmechanik der **Virialsatz**:

$$2 \langle T \rangle = \langle \hat{x} \vec{\nabla} V(\hat{x}) \rangle \quad (191)$$

Ist die potentielle Energie  $V$  homogen vom Grad  $k$  in  $\vec{x}$ ,

$$V(a\vec{x}) = a^k V(\vec{x}) \quad (192)$$

dann gilt wegen des Eulerschen Satzes für homogene Funktionen  $\vec{x} \vec{\nabla} V = kV$  und

$$2 \langle T \rangle = k \langle V \rangle \quad (193)$$

## 9.5 Zeitabhängige Störungen

Bei zeitabhängigen Störungen

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}^{(1)}(t) \quad (194)$$

kann die zeitunabhängige Schrödingergleichung nicht mehr verwendet werden, sodass nicht mehr von Energie-Eigenwerten und Eigenzuständen gesprochen werden kann.

## 9.6 Plötzliche Störungen

Wenn eine Störung plötzlich eingeschaltet wird, also so das die Zeitskala auf der die Störung auftritt wesentlich kürzer ist als die Zeit, die das System braucht um sich auf die Störung einzustellen kann das System vor dem Einschalten durch Eigenzustände  $|\psi_m^{(0)}\rangle$  des ungestörten Hamiltonoperators beschrieben werden und nach dem Einschalten durch Eigenzustände  $|\psi_n\rangle$  des gestörten Hamiltonoperators. Die Übergangswahrscheinlichkeit ist gegeben durch

$$P_{mn} = |\langle \psi_n | \psi_m^{(0)} \rangle|^2 \quad (195)$$

## 9.7 Zeitentwicklung gestörter Zustände

Kann diese Näherung nicht mehr gemacht werden, so stellt man die jetzt zeitabhängigen Zustände  $|\psi_n(t)\rangle$  durch eine Linearkombination aus ungestörten Energie-Eigenzuständen dar:

$$|\psi_n(t)\rangle = \sum_k c_{nk} |\psi_k^{(0)}(t)\rangle \quad (196)$$

Jetzt nähert man, dass bei  $t = 0$  das System sich in einem Eigenzustand befindet, also  $c_{nn} = 1$  und  $c_{nk} = 0 \forall k \neq n$ , und dass die Störung schwach genug ist, sodass für kleine  $t$   $c_{nk} \ll c_{nn} \forall k \neq n$ .

Für die  $c_{nk}$  erhält man dann

pdf 136

## 9.8 Fermis Goldene Regel

Nimmt man an, dass die Störung instantan eingeschaltet wird und auf konstantem Niveau bleibt:

$$\hat{H}^{(1)}(t) = \hat{H}^{(1)}\theta(t) \quad (197)$$

ergibt sich für die **Übergangsrate** für  $t \rightarrow \infty$

$$\Gamma_{nm} = \frac{P_{nm}(t)}{t} = \frac{|c_{nm}^{(1)}(t)|^2}{t} = \frac{2\pi}{\hbar^2} |\langle \psi_m^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \psi_n^{(0)} \rangle|^2 \delta(\omega_{mn}) \quad (198)$$

wobei

$$\omega_{mn} = \frac{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}}{\hbar} \quad (199)$$

die Übergangsfrequenz ist.

$$\Gamma_{nm} \rightarrow \Gamma = \int dE_m \Gamma_{nm} \rho(E_m) = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{2\pi}{\hbar^2} |\langle \psi_m^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \psi_n^{(0)} \rangle|^2 \rho(E_n) \quad (200)$$

## 9.9 Übergangsrate bei harmonischen Störungen

Die Spur eines Kommutators ist immer gleich 0 für beliebige Matrizen. (?)

Für Ort und Impuls gilt:

$$\Delta x \Delta p = 2h \quad (201)$$

$$\langle \hat{x}^2 \rangle \langle \hat{p}^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} \quad (202)$$

Relativistische Wirkung:

$$S = -mc \int_1^2 ds \quad (203)$$

$$H = \vec{v} \vec{p} - L = \gamma mc^2 + q\Phi \quad (204)$$

, wobei der Lorentz-Faktor durch den Impuls

$$\vec{p} = \gamma m \vec{v} + \frac{q}{c} \vec{A} \quad (205)$$

anstelle der Geschwindigkeit  $\vec{\beta}$  geschrieben werden muss.