

Quantenmechanik

Oliver Filla

05.52.2023

Contents

1	Disclaimer	4
2	1. Einleitung	4
3	2. Prinzipien	5
3.1	Operatoren	5
3.1.1	Hermiteische Operatoren	5
3.1.2	Adjunktion	5
3.1.3	Spektraldarstellung Hermitescher Operatoren	5
3.1.4	Erwartungswert Hermitescher Operatoren	5
3.1.5	Projektionsoperator	6
3.1.5.1	Darstellung mit Dualvektoren	6
3.1.6	Kommutator	6
3.2	Observable	6
3.3	Dirac-Notation	6
3.3.1	Rechenregeln	7
3.3.1.1	Ket	7
3.3.1.2	Bra	7
3.3.1.3	Operator / Matrix	7
3.4	Dualraum	7
3.5	Pauli-Matrizen	7
3.5.1	Euler-Identität	7
3.6	Exponentialfunktion	7
3.6.1	Reihendarstellung	8
3.6.2	Grenzwertdarstellung	8
3.7	Trigonometrie	8
3.7.1	Euler-Identität	8
4	3. Postulate	8
4.1	1. Postulat: Der Hilbertraum	8
4.1.1	Eigenschaften des hermiteschen Skalarprodukts	8
4.1.2	Winkel zwischen Zuständen	8
4.2	Superposition	9
4.2.0.1	Teilchen im Doppelmuldenpotential	9
4.2.0.2	Mathematische Darstellung	9
4.3	2. Postulat: Das Messpostulat	9

4.3.1	1. Messung von Zuständen	10
4.3.2	2. Bornsche Regel	10
4.3.3	3. ideale Messung	10
4.4	Indeterminismus	10
4.5	3. Postulat: Dynamik	10
5	4. Zweizustandssysteme	10
5.1	Bohr-Sommerfeldsches Atommodell	10
5.1.1	Zeemann-Effekt	11
5.2	Das Stern-Gerlach-Experiment	11
5.2.1	Rotation im Stern-Gerlach-Experiment	11
5.2.2	Observable	12
5.3	Schrödingergleichung	12
5.3.1	Hamiltonfunktion	12
5.3.2	Poisson-Klammer	13
5.3.3	Herleitung der Schrödingergleichung	13
5.4	Hamiltonoperator	13
5.4.1	Hamiltonoperator eines freien Punktteilchens	13
5.4.1.1	Energie-Impuls-Relation	13
5.5	Zeitentwicklungsoperator	14
5.5.1	Spektraldarstellung / Energiedarstellung	14
5.5.2	Operatoren	14
5.6	Erhaltungsgrößen	14
5.6.1	Stabilität von Eigenzuständen	14
5.6.2	Quantenschwebung	15
5.7	Lamorpräzession	15
5.7.1	Klassische Präzession	15
5.7.2	Lamorpräzession: Präzession des magnetischen Moments	15
6	5. Quantenmechanik eines Punktteilchens	15
6.1	Ortsoperator	15
6.2	Impulsoperator	16
6.3	Ortsdarstellung und Impulsdarstellung	16
6.4	Translationsoperator	17
6.5	Kontinuitätsübergang	17
6.5.1	Komponentendarstellung	17
6.5.1.1	Skalarprodukt in Komponentendarstellung	18
6.6	Translationssymmetrie und Impulserhaltung	18
6.7	Hamiltonoperator eines Punktteilchens	18
6.7.1	Hamiltonoperator eines freien Punktteilchens	18
6.7.2	Hamiltonoperator eines Punktteilchens	18
6.8	Schrödingergleichung eines Punktteilchens	18
6.8.1	Schrödingergleichung eines freien Punktteilchens	18
6.8.2	allgemeine Schrödingergleichung eines Punktteilchens	18
6.8.3	Stationäre Schrödingergleichung	19
6.9	Quanten-Zeno-Effekt	19
7	6. Modellsysteme	19
7.1	Gebundene Eigenenergiezustände	19
7.2	Potentialkasten	19

7.2.1	Unendlicher Potentialkasten	20
7.3	Doppelkastenpotential	21
7.3.1	symmetrische Zustände	21
7.3.2	antisymmetrische Zustände	22
7.3.3	Niveaufenspaltung	22
7.3.4	Superposition	22
7.3.5	Dipolmoment	23
7.4	Reflektion und Transmission an einer Potentialbarriere	23
7.4.1	Tunneleffekt	23
7.4.2	Potentialbarriere	23
7.4.3	Streuansatz	23
7.4.4	Anschlussbedingungen	24
7.4.5	Reflektions- und Transmissionswahrscheinlichkeit	24
7.4.6	Wahrscheinlichkeitsstromdichte	24
7.4.7	Kontinuitätsgleichung	24
7.4.8	Kastenförmige Potentialbarriere	25
7.4.8.1	Lösung der Anschlussbedingungen	25
7.4.9	Gamow-Näherung	26
7.4.10	Streuung an einem Potentialtopf	26
7.5	Harmonischer Oszillator	27
7.5.1	Plank'sche Strahlungsformel	27
7.5.2	Eigenenergien	27
7.5.2.1	Beweisidee: Analytische Methode	28
7.5.2.2	Beweis: Algebraische Methode	28
7.5.3	Die Leiteroperatoren	28
7.5.3.1	Darstellung des Ortsoperators und des Impulsoperators	28
7.5.3.2	Darstellung des Hamiltonoperators	29
7.5.3.3	Eigenschaften von $N = a^\dagger a$	29
8	7. Kohärente Zustände	29
8.1	Verschiebungsoperator	30
8.2	Baker-Campbell-Hausdorff-Identität	30
8.3	Kohärente Zustände	30
9	8. Störungstheorie	31
9.1	Zeitunabhängige Störungstheorie	31
9.1.1	Nicht-entartete Zustände	31
9.1.2	Niveaubstöße	33
9.1.3	Grundzustand	33
9.1.4	Beispiel: Harmonischer Oszillator mit Anharmonizität	33
9.1.5	Entartete Zustände	33
9.2	Zeitabhängige Störungstheorie	34
9.2.1	Zeitabhängige Störungen	34
9.2.2	Übergangswahrscheinlichkeit	34
9.2.3	Wechselwirkungsbild	35
9.2.4	Operatoren im Wechselwirkungsbild	35
9.2.5	Schrödingergleichung im Wechselwirkungsbild	35
9.2.6	Störungstheorie in n -ter Ordnung	35
9.2.7	Fermis goldene Regel	36

9.2.7.1	Physikalische Interpretation	36
10	9. Unbestimmtheitsrelationen	37
10.1	Heisenberg'sche Unbestimmtheit	37
10.2	Unbestimmtheit von Messungen	37
10.2.1	Beweis	37
10.2.2	Orts- und Impulsungenauigkeit	38
10.3	Das Variationsprinzip	38
10.3.1	Freies Teilchen in einer Dimension	38
10.3.2	Abschätzung der Grundzustandsenergie	39
10.3.3	Bohr-Radius des Wasserstoffatoms	39
10.3.4	Ideale Messung eines freien Teilchens	39
10.3.5	Unschärfe Messung eines freien Teilchens	39
10.3.6	Kommutierende Observablen	40
10.3.6.1	Beweis	40
11	10. Drehimpuls	40
11.1	Quantenmechanischer Drehimpuls	40
11.2	Teilchen im dreidimensionalen Raum	41
11.3	Eigenzustände & Drehimpulsquantenzahlen	41
11.4	Eigendrehimpuls / Spin	42
11.4.1	Rotation im Stern-Gerlach-Experiment	43
11.4.2	Beispiel: Spin des Elektrons	43
11.5	Bahndrehimpuls	43
12	Literatur	43

1 Disclaimer

2 1. Einleitung

Die klassische Physik ist schon lange bekannt, zu Teilen schon sehr lange. Hierzu zählen die *klassische Mechanik*, die *Elektrodynamik* sowie die *spezielle* und *allgemeine Relativitätstheorie*. Diese Bereiche gelten zwar im makroskopischen Bereich, allerdings nicht im mikroskopischen Bereich! Hierfür benötigt man die Quantenphysik.

Beispielsweise besagt die klassische Vorstellung eines Atoms, ein Elektron kreise auf einer Keplerbahn um den Atomkern. Auf diese Weise wäre es jedoch dauerhaft beschleunigt, daher müsste es elektromagnetische Strahlung abstrahlen. Dies würde die Energie des Elektrons reduzieren, was die Kreisbahn instabil machen müsste - das Elektron fiel auf einer spiralförmigen Bahn in den Atomkern. Daher reicht die klassische Theorie nicht aus, um Atome zu erklären.

Andere Phänomene, die die klassische Physik nicht erklären kann, sind Spektrallinien, manche Eigenschaften von Festkörpern¹ oder die Schwarzkörperstrahlung.

¹z.B: elektrische Leitfähigkeit und Wärmekapazität

Aus diesen Gründen entstand um 1925 die Quantenphysik. Heutzutage ist sie extrem gut erforscht und scheint allgemeingültig zu sein.

Der in dieser Vorlesung gewählte Zugang ist ahistorisch über Postulate. Wesentliche Merkmale der Quantenmechanik sind das *Superpositionsprinzip* und der *Indeterminismus*.

3 2. Prinzipien

3.1 Operatoren

Ein Operator \hat{A} auf dem Hilbertraum \mathcal{H} ist eine lineare Abbildung, die einen Zustand φ auf einen Zustand $\hat{A}\varphi$ abbildet.

Ein Operator ist vollständig beschrieben durch die Bilder der Basisvektoren, die er erzeugt. Daher kann er als Matrix dargestellt werden. Er kann einer Observablen zugeordnet werden. Es gilt $\langle O \rangle_\Psi = \langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle$.

Die meisten quantenmechanischen Operatoren sind *selbstadjungiert* bzw. *hermitesch*.

3.1.1 Hermitesche Operatoren

Ein Operator \hat{A} ist hermitesch bzw. selbstadjungiert, wenn $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$. Daraus folgt, dass die Adjungierte $\hat{A}^\dagger = \hat{A}^{-1}$ auch die Inverse ist.

- Quantenmechanisch wird die Adjunktion eines Operators durch $\langle \varphi | A \psi \rangle = \langle A^\dagger \varphi | \psi \rangle$ definiert.
- Ein hermitescher Operator besitzt eine orthonormale Basis $\{\varphi_i\}$.
- Die Eigenwerte a_i eines hermiteschen Operators sind *reell*: $\hat{A}|\varphi_i\rangle = a_i|\varphi_i\rangle$
 - Dadurch kann die Matrix A in der Spektraldarstellung diagonalisiert werden.
 - Der Erwartungswert $\langle \hat{A} \rangle_\Psi$ ist das Skalarprodukt $\langle \Psi | A | \Psi \rangle$.

3.1.2 Adjunktion

Die Adjunktion A^\dagger ist die Verkettung von komplexer Konjugation A^* und Transposition A^T . Es gilt $A^\dagger = (A^*)^T$.

3.1.3 Spektraldarstellung Hermitescher Operatoren

Die Spektraldarstellung nutzt den Projektionsoperator P_χ . $\sum_i |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i|$ ist dabei die Einheitsmatrix, $a_i \in \mathbb{R}$ sind reelle Eigenwerte. Daher sind $\{\varphi_i\}$ eine orthonormale Eigenbasis.

$$\hat{A} = \sum_i a_i P_{\varphi_i} = \sum_i a_i |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i|$$

3.1.4 Erwartungswert Hermitescher Operatoren

Der Erwartungswert $\langle \hat{A} \rangle_\Psi$ eines Hermiteschen Operators \hat{A} ist für ein System im Zustand Ψ durch das Skalarprodukt $\langle \Psi | A | \Psi \rangle$ definiert. Durch die Spektraldarstellung kann die Matrix A als reellwertige Diagonalmatrix dargestellt wer-

den, daher spielt es keine Rolle, ob A auf den Ket-Vektor oder den Bra-Vektor angewendet wird.

3.1.5 Projektionsoperator

Der Operator P_χ projiziert einen Vektor Ψ auf den Vektor χ . Dies ergibt einen Vektor mit Richtung und Orientierung des Vektors χ . Die Länge des Vektors $P_\chi \Psi$ entspricht dem "Schatten," den der Vektor Ψ werfen würde. Dieser wird durch das Skalarprodukt $\langle \chi, \Psi \rangle$ beschrieben.

$$P_\chi \Psi = \langle \chi, \Psi \rangle \chi$$

3.1.5.1 Darstellung mit Dualvektoren Die Matrixdarstellung des Projektionsoperators kann mittels des Dualraums \mathcal{H}^* berechnet werden:

$$P_\chi |\Psi\rangle = (\langle \chi | \Psi \rangle) |\chi\rangle = |\chi\rangle (\langle \chi | \Psi \rangle) = (|\chi\rangle \langle \chi|) |\Psi\rangle \Rightarrow P_\chi = |\chi\rangle \langle \chi|$$

Da $\langle \chi | \Psi \rangle \in \mathbb{C}$ kann das Kommutativgesetz angewendet werden. $|\chi\rangle \langle \chi|$ ist eine $n \times n$ -dimensionale Matrix.

3.1.6 Kommutator

Der Kommutator ist definiert als $[A, B] = AB - BA$, man sagt auch A und B kommutieren. Falls zwei Observablen *nicht* kommutieren, gibt es eine Unbestimmtheitsrelation zwischen ihnen (siehe Unbestimmtheitsrelationen).

Wenn A eine Erhaltungsgröße und H der Hamiltonoperator ist, gilt $[H, A] = 0$.

Die klassische Entsprechung des Kommutators ist die Poisson-Klammer.

3.2 Observable

Eine beobachtbare Größe wird in der Quantenmechanik *Observable* genannt.

Sie hat konkrete Werte, die gemessen werden. Für Messungen einem Systemen im Zustand Ψ wird der Erwartungswert der Observable O als $\langle O \rangle_\Psi$ geschrieben. Einer Observable O kann ein zugehöriger Operator \hat{O} zugeordnet werden. Es gilt $\langle O \rangle_\Psi = \langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle$.

Im Fall des Stern-Gerlach-Experimentes ist die Observable die z -Komponente μ_z des magnetischen Moments.

3.3 Dirac-Notation

Zustände im Hilbertraum $\varphi \in \mathcal{H}$ werden als "Ket" $|\varphi\rangle$ dargestellt, Dualvektoren $\varphi^\dagger \in \mathcal{H}^*$ als "Bra" $\langle \varphi|$. Auf diese Weise wird das Skalarprodukt als "Bra-Ket" $\langle \varphi | \varphi \rangle$ dargestellt.

Zudem werden oft nur Indizes in Ket/Bra eingetragen. So wird aus $|\varphi_{z+}\rangle = |z+\rangle$.

3.3.1 Rechenregeln

3.3.1.1 Ket

- $|\varphi + \psi\rangle = |\varphi\rangle + |\psi\rangle$
- $|\lambda\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$

3.3.1.2 Bra

- $\langle\varphi + \psi| = \langle\varphi| + \langle\psi|$
- $\langle\lambda\psi| = \lambda^* \langle\psi|$

3.3.1.3 Operator / Matrix

$$\begin{aligned} |\varphi\rangle \langle\chi| &= \varphi \chi^\dagger \\ &= \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \vdots \\ \varphi_n \end{pmatrix} \cdot (\Psi_1^*, \dots, \Psi_n^*) \\ &= \begin{pmatrix} \varphi_1 \Psi_1^* & \dots & \varphi_1 \Psi_n^* \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_n \Psi_1^* & \dots & \varphi_n \Psi_n^* \end{pmatrix} \end{aligned}$$

3.4 Dualraum

Der Dualraum \mathcal{H}^* zu dem Hilbertraum \mathcal{H} ist der Vektorraum der linearen Abbildungen (*Linearformen*) von $\mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$.

Es gibt einen Isomorphismus, der einem Zustand $\psi \in \mathcal{H}$ den *Dualvektor* $\psi^\dagger \in \mathcal{H}^*$ zuordnet. Es gilt $\varphi^\dagger \psi = \langle\varphi|\psi\rangle$. Hierbei sind ψ als n -dimensionaler Vektor und φ^\dagger als $1 \times n$ -dimensionale Matrix darstellbar.

3.5 Pauli-Matrizen

$$\begin{aligned} \sigma_1 = \sigma_x &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \sigma_2 = \sigma_y &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ \sigma_3 = \sigma_z &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ \vec{\sigma} &= \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

3.5.1 Euler-Identität

$$e^{i\varphi\sigma_i} = \cos(\varphi)\mathbb{1} + i\sigma_i \sin(\varphi)$$

3.6 Exponentialfunktion

3.6.1 Reihendarstellung

$$e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!}$$

3.6.2 Grenzwertdarstellung

$$e^x = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{x}{n}\right)^n$$

3.7 Trigonometrie

$$\sinh[i\alpha] = i \sin[\alpha]$$

$$\cosh[i\alpha] = \cos[\alpha]$$

3.7.1 Euler-Identität

$$e^{i\varphi} = \cos(\varphi) + i \sin(\varphi) \Rightarrow e^{i\pi} = 1$$

4 3. Postulate

4.1 1. Postulat: Der Hilbertraum

Der Zustandsraum der Quantenmechanik ist der **Hilbertraum** \mathcal{H}_S des Systems, ein unitärer Vektorraum. Dies bedeutet, es gibt ein hermitesches Skalarprodukt.

Ein quantenmechanischer Zustand ist ein Vektor $\varphi \in \mathcal{H}_S$. Dieser Vektor hat die Norm 1: $\|\varphi\| = 1$

4.1.1 Eigenschaften des hermiteschen Skalarprodukts

$$\langle \Psi | \varphi \rangle = \Psi^\dagger \varphi = (\Psi_1^*, \dots, \Psi_n^*) \cdot \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \vdots \\ \varphi_n \end{pmatrix}$$

- Vertauschung der Parameter erzeugt das komplex Konjugierte des Skalarprodukts: $\langle \varphi | \psi \rangle = \langle \psi | \varphi \rangle^*$
- positiv semi-definit: $\forall \varphi \in V \setminus \{0\} : \langle \varphi | \varphi \rangle > 0$
 - $\forall \varphi \neq 0 : \langle \varphi | \varphi \rangle > 0$
 - $\varphi = 0 \Leftrightarrow \langle \varphi | \varphi \rangle = 0$
- Linearität:
 - $\forall \lambda \in \mathbb{C} : \langle \varphi | \lambda \psi \rangle = \lambda \langle \varphi | \psi \rangle = \langle \lambda^* \varphi | \psi \rangle$
 - $\langle \varphi | \psi_1 + \psi_2 \rangle = \langle \varphi | \psi_1 \rangle + \langle \varphi | \psi_2 \rangle$

4.1.2 Winkel zwischen Zuständen

Das Skalarprodukt zweier Vektoren $\langle \varphi, \psi \rangle$ beschreibt den Winkel $\alpha = \angle(\varphi, \psi)$. Es gilt $\langle \varphi, \psi \rangle = \cos(\alpha)$. Daraus folgt, dass die Wahrscheinlichkeit p dem quadrierten Kosinus des Winkels zwischen den Zuständen entspricht:

$$p = |\langle \varphi, \psi \rangle|^2 = [\cos(\alpha)]^2 \in [0, 1] \Rightarrow p = \begin{cases} 0 \Leftrightarrow \varphi \perp \psi \\ 1 \Leftrightarrow \varphi \parallel \psi \end{cases}$$

Nur wenn $p \neq 0 \vee p \neq 1$ gelten, kann man das Ergebnis einer Messung M_φ vorhersagen. Das bedeutet, wenn $\varphi \perp \psi \vee \varphi \parallel \psi$ ist die Messung M_φ deterministisch, ansonsten ist sie indeterministisch.

4.2 Superposition

Superposition ist ein universell gültiges Prinzip, das besagt, dass sich ein Quantenteilchen zugleich in mehreren Zuständen befinden kann.

Ein berühmtes Beispiel ist das Gedankenexperiment von Schrödingers Katze. Heute verstehen wir, dass Superposition auch hier gilt, aber trotzdem in diesem Fall praktisch nicht beobachtbar ist. Dies ist ein Problem der Dekohärenz.

4.2.0.1 Teilchen im Doppelmuldenpotential Sei ein Teilchen in einem *Doppelmuldenpotential* im Grundzustand. Das Potential habe zwei Minima bei x_1 und x_2 , beide auf exakt gleicher Höhe $E(x_1) = E(x_2)$. Somit ist die Wahrscheinlichkeit, dass das Teilchen sich an der Stelle x_1 befindet, ebenso groß wie die Wahrscheinlichkeit für die Position x_2 .

Klassisch würden wir erwarten, dass das Teilchen sich im Grundzustand *entweder* an x_1 *oder* an x_2 befindet.

Quantenmechanisch sagen wir dagegen, das Teilchen befindet sich in *Superposition*, es befindet sich *zugleich* an beiden Orten!

Ein anderes Beispiel ist der Spin: Beispielsweise kann ein Silberatom gleichzeitig in Zuständen *up* und *down* (relativ zu einer z-Achse) sein.

4.2.0.2 Mathematische Darstellung Bezeichne \mathcal{H}_{DMP} den Hilbertraum des Doppelmuldenpotentials. Dann gibt es zwei Zustände $\varphi_1 \in \mathcal{H}_{DMP}$ und $\varphi_2 \in \mathcal{H}_{DMP}$. Die Superposition wird dann als $\mathcal{H}_{DMP} \ni \Psi = \varphi_1 + \varphi_2$ geschrieben.

4.3 2. Postulat: Das Messpostulat

Ein fundamentales Problem der Quantenphysik ist, dass direkte Beobachtungen nicht möglich sind.

Dieses Problem wird *operationalistisch* gelöst. Das Messpostulat besagt, dass die Theorie mit *makroskopischen Messungen* kompatibel sein muss.

Die Messung M_φ misst, ob der Zustand φ vorliegt (genannt *positiv*) oder nicht (genannt *negativ*).

$$M_\varphi = \begin{cases} 0 \Leftrightarrow \varphi \text{ negativ} \\ 1 \Leftrightarrow \varphi \text{ positiv} \end{cases}$$

1. Die gemessenen Werte sind reell, daher kann ein hermitescher Operator durch die Eigenwerte $\{a_i\}$ und Eigenzustände $\{|\varphi_i\rangle\}$ dargestellt werden.
2. Bornsche Regel: $p = |\langle \varphi | \Psi \rangle|^2$, der Eigenwert a_i wird mit der Wahrscheinlichkeit $p = |\langle \varphi_1 | \Psi \rangle|^2$ gemessen. Erwartungswert $\langle A \rangle_\Psi = \langle \Psi | A | \Psi \rangle$.
3. Eine *ideale* Messung M_{φ_i} präpariert das System in Zustand φ_i durch einen Kollaps der Wellenfunktion Ψ .

4.3.1 1. Messung von Zuständen

Die Messwerte a_i , die die Zustände $\varphi_i \in \mathcal{H}$ im Hilbertraum messen, sind reellwertig $a_i \in \mathbb{R}^n$.

Die Zustände werden durch hermitesche Operatoren beschrieben, die in der Spektraldarstellung durch die Eigenwerte $\{a_i\}$ und Eigenzustände $\{|\varphi_i\rangle\}$ dargestellt werden können.

4.3.2 2. Bornsche Regel

Sei das System in einem Zustand $\Psi \in \mathcal{H}$. Dann ist Messung M_φ mit der Wahrscheinlichkeit $p = |\langle\varphi|\Psi\rangle|^2$ positiv. In der kontinuierlichen Darstellung kann man auch $p = |\Psi(x)|^2$ schreiben.

4.3.3 3. ideale Messung

Eine Messung nennt man ideal, wenn sich das System nach der Messung M_Ψ im Zustand Ψ befindet. Dann spricht man von einem *Kollaps der Wellenfunktion*. Dies ermöglicht eine Präparation des Systems mit dem Zustand Ψ .

4.4 Indeterminismus

Es gibt nur zwei Fälle in denen man das Ergebnis vorhersagen kann. Dazu muss ein Zustand ψ gemessen worden sein, nun wird der der Zustand φ gemessen. Diese zweite Messung kann man genau dann vorhersagen, wenn $\varphi \perp \psi$ oder $\varphi \parallel \psi$ gelten, ansonsten kann man das Ergebnis nicht vorhersagen.

4.5 3. Postulat: Dynamik

Die zeitliche Entwicklung eines Zustands $\Psi(t)$ eines abgeschlossenen, un beobachteten Systems genügt der Schrödingergleichung mit dem Hermiteschen Operator H , dem sogenannten Hamiltonoperator des Systems.

$$\dot{\Psi}(t) = -\frac{i}{\hbar} H \Psi(t) ,$$

5 4. Zweizustandssysteme

5.1 Bohr-Sommerfeldsches Atommodell

Das Bohr-Sommerfeldsche Atommodell ist eine Erweiterung des Bohrschen Atommodells, das klassische Mechanik annimmt, um die Bewegung der Elektronen um den Atomkern zu beschreiben. Es wird um Quantisierungsbedingungen ergänzt.

Durch seine Rotation um den Atomkern hat ein Elektron einen Drehimpuls \vec{L} . Dieser Drehimpuls ist durch die Quantenzahl $l = 1, 2, 3, \dots$ quantisiert, es gilt $|\vec{L}| = l\hbar$.

Die Drehimpulskomponente in Richtung der z -Achse $L_z = m\hbar$ ist nun durch eine magnetische Quantenzahl $m = -l, -l+1, \dots, l$ zu beschreiben.

Da eine bewegte Ladung ein elektromagnetisches Feld beschreibt, kann man die Quantenzahlen auch nutzen, um ein sogenanntes Magneton $\vec{\mu}$ zu beschreiben. Es gilt $|\vec{\mu}| = \mu_0 l$ sowie $\mu_z = \mu_0 m$. μ_0 ist das Bohrsche Magneton.

5.1.1 Zeemann-Effekt

Durch L_z werden die Energieniveaus der Elektronen verschoben. Diese Verschiebung führt zu einer Verschiebung der Spektrallinien.

Der Zeemann-Effekt wird auch Feinaufspaltung genannt.

5.2 Das Stern-Gerlach-Experiment

Die Quantenphysik erwartet diskrete magnetische Momente, die klassische Physik hätte nach dem Bohr-Modell kontinuierliche magnetische Momente erwartet. Im Stern-Gerlach-Experiment wurde gemessen, was davon zutrifft.

Hierzu wird ein Strahl von Silberatomen durch ein inhomogenes Magnetfeld geschickt. Durch ihr magnetisches Moment werden diese Atome abgelenkt, diese Ablenkung ist proportional zum magnetischen Moment in z -Richtung. Klassischerweise würde man eine kontinuierliche Verteilung der abgelenkten Strahlen erwarten, quantenmechanisch eine diskrete Verteilung.

Das Experiment ergab, dass es genau zwei Punkte gab, an denen Silberatome gemessen werden konnten. Dies zeigte, dass das magnetische Moment gequantelt ist.

In weiteren Messungen wurde festgestellt, dass die Zustände $|z \uparrow\rangle$ und $|z \downarrow\rangle$ senkrecht zueinander sind, selbiges gilt jeweils in x - und y -Richtung. Die Zustände der Achsen x , y und z sind untereinander jedoch nicht rechtwinklig, sondern in einem Winkel von jeweils 45° .

Deswegen wählt man oft folgende Ortonormalbasis. Diese gilt allgemein für Spinzustände.

$$\begin{aligned} \varphi_{z+} &\wedge \varphi_{z-} \\ \varphi_{x+} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_{z+} + \varphi_{z-}) \quad \wedge \quad \varphi_{x-} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_{z+} - \varphi_{z-}) \\ \varphi_{y+} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_{z+} + i\varphi_{z-}) \quad \wedge \quad \varphi_{y-} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_{z+} - i\varphi_{z-}) \end{aligned}$$

5.2.1 Rotation im Stern-Gerlach-Experiment

Sei ein Strahl Silberatome im Stern-Gerlach-Experiment auf den Zustand $|z+\rangle$ präpariert. Sei nun ein zweiter Magnet im Winkel φ zum ersten Magneten aufgebaut. Dann ist der finale Up-Zustand $|z+\rangle' = U(R_{2,\varphi})|z+\rangle$. Dann folgt die Wahrscheinlichkeit den Zustand $|z+\rangle$ zu messen $P_+ = |\langle z+\rangle' | z+\rangle|^2 = |\cos(\frac{\varphi}{2})|^2$. Bei einer Drehung um 30° ist $P_+(30^\circ) \approx 93\%$.

5.2.2 Observable

Die Observable ist in diesem Fall μ_z , die z -Komponente des magnetischen Moments. Die gemessenen Werte sind $\pm\mu_0$.

Nach dem Messpostulat hat sie die Wahrscheinlichkeiten $p_+ = |\langle \varphi_{z+}, \Psi \rangle|^2$ und $p_- = |\langle \varphi_{z-}, \Psi \rangle|^2$, wenn vorher der Zustand Ψ vorherrschte. Damit hat μ_z den Erwartungswert $\langle \mu_z \rangle_\Psi$ für Messungen an Atomen mit dem Zustand Ψ . Es gilt daher $\langle \mu_z \rangle_\Psi = p_+ \cdot \mu_0 + p_- \cdot (-\mu_0)$.

Die Operatoren $\{\mu_i\}$ sind proportional zu den Paulimatrizen σ_i :

$$\begin{aligned}\mu_x &= \mu_0 \sigma_1 = \mu_0 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \mu_y &= \mu_0 \sigma_2 = \mu_0 \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ \mu_z &= \mu_0 \sigma_3 = \mu_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

5.3 Schrödingergleichung

Die zeitliche Entwicklung eines Zustands $\Psi(t)$ eines abgeschlossenen, unbeobachteten Systems genügt der Schrödingergleichung mit dem Hermiteschen Operator H , dem sogenannten Hamiltonoperator des Systems. Der Faktor \hbar^{-1} sorgt dafür, dass die Einheit der Eigenwerte eine Energie ist.

$$\dot{\Psi}(t) = -\frac{i}{\hbar} H \Psi(t) ,$$

Die Schrödingergleichung beschreibt eine *lineare* Dynamik. Nicht-lineare Dynamik verstößt gegen die Spezielle Relativitätstheorie.

Mit dem Kommutator lässt folgt für eine Observable A :

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle_{\Psi(t)} = \left\langle \frac{i}{\hbar} [H, A] \right\rangle_{\Psi(t)}$$

Schrödingergleichung eines Punktteilchens siehe unten: *Quantenmechanik eines Punktteilchens -> Schrödingergleichung eines Punktteilchens.*

5.3.1 Hamiltonfunktion

In der Klassischen Mechanik werden Zustände durch den Hamiltonian $H(\vec{x}, t)$ beschrieben, wobei $\vec{x}(t) = \begin{pmatrix} \vec{q}(t) \\ \vec{p}(t) \end{pmatrix} \in \Gamma(\mathbb{R}^{2n})$ einen Punkt im Phasenraum Γ beschreibt. Die Bewegungsgleichung lautet:

$$\dot{\vec{x}}(t) = \begin{pmatrix} \dot{\vec{q}}(t) \\ \dot{\vec{p}}(t) \end{pmatrix} \stackrel{!}{=} \begin{pmatrix} \frac{\partial H(\vec{x}, t)}{\partial \vec{p}} \\ -\frac{\partial H(\vec{x}, t)}{\partial \vec{q}} \end{pmatrix} \frac{d}{dt} A(\vec{x}, t) = \{H, A\}_{\vec{x}(t)}$$

Dies führt zu einer Differentialgleichung 1. Ordnung. Es gilt mit den Poisson-Klammern:

Die Entsprechung in der Quantenmechanik ist der Hamiltonoperator.

5.3.2 Poisson-Klammer

$$\{A, B\} = \sum_i \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial B}{\partial q_i} - \frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i}$$

Die quantenmechanische Entsprechung der Poisson-Klammer ist der Kommutator.

5.3.3 Herleitung der Schrödingergleichung

In der Quantenmechanik gilt eine ähnliche Zustandsgleichung: $\dot{\Psi}(t) \stackrel{!}{=} F\Psi(t)$, wobei F ein linearer Operator sein muss. Aus der Normierung der Zustände $|\Psi|^2 = 1$ folgt, dass $\frac{d}{dt}|\Psi|^2 = 0$. Rechnung führt zu der Identität $\frac{d}{dt}|\Psi|^2 = \langle \Psi | (F^\dagger + F) | \Psi \rangle$, woraus folgt dass $F^\dagger + F = 0$ gelten muss.

Die übliche Wahl fällt auf $F = -\frac{i}{\hbar}H$, wobei H der Hamiltonoperator ist. Daraus folgt

$$\dot{\Psi}(t) = -\frac{i}{\hbar}H\Psi(t) ,$$

sowie $H^\dagger = H$. H ist also ein Hermitescher Operator.

5.4 Hamiltonoperator

- Der Hamiltonoperator H ist ein Hermitescher Operator. Er wird in der Schrödingergleichung verwendet.
- Er entspricht der Hamiltonfunktion in der Klassischen Mechanik.
- Die zugehörige Observable ist die Energie des Systems
- Spektraldarstellung: $H = \sum_{i=0}^N E_i |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i|$
 - E_i sind die Eigenenergien bzw. Energieniveaus
 - φ_i sind die Eigenenergiezustände bzw. Eigenzustände

Der Kommutator $[H, H]$ ist immer 0, daher ist die Energie immer eine Erhaltungsgröße.

Mithilfe des Zeitentwicklungsoperators $U(t)$ kann H folgendermassen dargestellt werden:

$$H = i\hbar \left. \frac{d}{dt} U(t) \right|_{t=0}$$

Dies ist analog zu der Darstellung des Impulsoperators mithilfe des Translationoperators.

5.4.1 Hamiltonoperator eines freien Punktteilchens

siehe unten: *Quantenmechanik eines Punktteilchens -> Hamiltonoperator eines Punktteilchens.*

5.4.1.1 Energie-Impuls-Relation

$$\langle H \rangle_\Psi = \frac{1}{2m} \langle p \rangle_\Psi$$

5.5 Zeitentwicklungsoperator

Da die Schrödingergleichung $\dot{\Psi}(t) = -\frac{i}{\hbar}H\Psi(t)$ durch die allgemeine Lösung $\Psi(t) = \exp[-\frac{i}{\hbar}Ht]\Psi(0)$ gelöst wird, ist es sinnvoll, dies durch einen Operator auszudrücken. Der Zeitentwicklungsoperator $U(t)$ ist wie folgt definiert:

$$U(t) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}Ht\right]$$

$U(t)$ ist die Lösung der Schrödingergleichung zu dem Anfangswert $U(0)$. Da $U(t_1) \cdot U(t_2) = U(t_1 + t_2)$ gilt, folgt $U(t)U(-t) = 0$, wodurch folgt dass U unitär ist: $U^\dagger = U^{-1}$.

- $\Psi(t) = U(t)\Psi(0)$
- $U(0) = \mathbb{1}$
- $\dot{U}(t) = -\frac{i}{\hbar}H \cdot U(t)$
- Der Kommutator verschwindet: $[U(t), H] = 0$
- $\langle A \rangle_{|\Psi(t)\rangle} = \langle \Psi(0) | U^\dagger(t) A U(t) | \Psi(0) \rangle$
- $\dot{A}(t) = \frac{d}{dt}A(t) = \frac{i}{\hbar}[H, A(t)]$

Der Zeitentwicklungsoperator ist analog zum Translationsoperator.

5.5.1 Spektraldarstellung / Energiedarstellung

Aus $H = \sum_{i=0}^N E_i |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i|$ folgt $U(t) = \sum_{i=0}^N \exp[-\frac{i}{\hbar}E_i t] |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i|$, wodurch $U(t)$ dieselben Eigenzustände wie H hat.

5.5.2 Operatoren

Für zeitabhängige Operatoren $\hat{A}(t)$ mit $\hat{A}(0) = A$ gilt:

$$\hat{A}(t) = U^\dagger(t) A U(t) \langle A \rangle_{\Psi(t)} = \langle \hat{A}(t) \rangle_{\Psi(0)}$$

5.6 Erhaltungsgrößen

Die Observable A ist genau dann eine Erhaltungsgröße, wenn $\langle A \rangle_{\Psi(t)}$ für alle Lösungen der Schrödingergleichung $\dot{\Psi}(t) = -\frac{i}{\hbar}H\Psi(t)$ konstant ist.

Daraus folgt, dass A genau dann eine Erhaltungsgröße ist, wenn für die Operatoren $HA = AH$ gilt, bzw. der Kommutator $[H, A] = 0$ ist. Insbesondere gilt:

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle_{\Psi(t)} = \left\langle \frac{i}{\hbar} [H, A] \right\rangle_{\Psi(t)}$$

Die Energie immer eine Erhaltungsgröße, da $[H, H] = 0$.

5.6.1 Stabilität von Eigenzuständen

Eigenzustände sind immer stabil, der Erwartungswert aller Observablen bezüglich eines Eigenzustandes ist immer erhalten. Daraus folgt, dass dynamische Zustände durch die Superposition von Energieeigenzuständen entstehen.

Beweis: Die zeitliche Veränderung eines Eigenzustands wird durch den Zeitentwicklungsoperator $U(t)$ beschrieben. Für Eigenzustände $|\varphi_i\rangle$ gilt demnach $U(t)|\varphi_i\rangle = \exp[-i\omega_i t]|\varphi_i\rangle$. Der Erwartungswert einer Observable A im Eigenzustand ist $\langle A \rangle_{|\varphi_i\rangle}$ wird unter Zeitentwicklung $\langle A \rangle_{U(t)|\varphi_i\rangle} = \langle U(t)\varphi_i | A | U(t)\varphi_i \rangle = \langle \varphi_i | A | \varphi_i \rangle$. Die Phasenverschiebung eines einzelnen Eigenzustands ist daher nicht beobachtbar.

5.6.2 Quantenschwebung

Der Erwartungswert einer beliebigen Observablen in der Superposition $|\varphi_m + \varphi_n\rangle$ der Energieeigenzustände $|m\rangle$ und $|n\rangle$ oszilliert mit der Frequenz ω .

$$\omega = \left| \frac{E_n - E_m}{\hbar} \right|$$

5.7 Lamorpräzession

5.7.1 Klassische Präzession

Ein symmetrischer Kreisel mit einer Winkelgeschwindigkeit $\vec{\omega} = \omega \hat{n}$ und der Länge l hat ein Drehmoment von $\vec{M} = -ml\vec{g} \times \vec{n}$, wobei das Drehmoment die Änderung des Drehimpulses \vec{L} darstellt. Es gelten $\vec{M} = \dot{\vec{L}}$ und \$.

Ein Spin im Magnetfeld \vec{B} hat mit einem magnetischen Moment $\vec{\mu}$ ein Drehmoment von $\vec{M} = \vec{B} \times \vec{\mu}$, da $\vec{\mu} \parallel \vec{L}$.

5.7.2 Lamorpräzession: Präzession des magnetischen Moments

Betrachtet wird die Präzession des magnetischen Moments $\vec{\mu}$ in einem Magnetfeld \vec{B} , wenn das magnetische Moment entlang der z -Achse ausgerichtet ist. Die Energie ist $E = -\vec{B}\vec{\mu} = -B\mu_z$. Daher ist der Hamiltonoperator $H = -B\hat{\mu}_z = -B\mu_0\sigma_3$.

Aus der Schrödingergleichung folgt dann die Bewegungsgleichung $\dot{\Psi}(t) = i\omega\sigma_3\Psi(t)$. Diese wird durch $\Psi(t) = \exp[i\omega t\sigma_3]\Psi(0)$ gelöst. Nach der Euler-Identität für Pauli-Matrizen wird dies durch $\Psi(t) = e^{i\omega t\sigma_3}\Psi_0$ gelöst.

Wird $\Psi_0 = \varphi_{x+}$ gewählt, so folgt $\Psi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\omega t} \\ e^{-i\omega t} \end{pmatrix}$. Es folgt für die Erwartungswerte der Komponenten von $\vec{\mu}$:

$$\langle \mu \rangle_{\Psi(t)} = \begin{pmatrix} \langle \mu_x \rangle_{\Psi(t)} \\ \langle \mu_y \rangle_{\Psi(t)} \\ \langle \mu_z \rangle_{\Psi(t)} \end{pmatrix} = \mu_0 \begin{pmatrix} \cos[2\omega t] \\ -\sin[2\omega t] \\ 0 \end{pmatrix}$$

Dies ist eine **Lamorpräzession** mit der Frequenz $\omega_L = 2\omega = \frac{2B\mu_0}{\hbar}$.

6 5. Quantenmechanik eines Punktteilchens

6.1 Ortsoperator

Im Folgenden betrachten wir ein Teilchen im Eindimensionalen Raum.

Die Observable $x \in \mathbb{R}$ beschreibt den Ort, der dazugehörige hermitesche Operator \hat{X} hat daher reelle Eigenwerte. Daher wird das Eigensystem durch die Menge der Zustände $\{|\varphi_x\rangle\}_{x \in \mathbb{R}}$ beschrieben, es gilt $\hat{x}|\varphi_x\rangle = x|\varphi_x\rangle$.

6.2 Impulsoperator

Der Impulsoperator \hat{p} ist der Erzeuger von Translationen und kann durch den Translationsoperator \hat{T} dargestellt werden. Dies ist analog zu der Darstellung des Hamiltonoperators mithilfe des Zeitentwicklungsoperators.

$$\hat{p} = i\hbar \frac{d}{ds} \hat{T}(s) \Big|_{s=0}$$

Es folgt daraus:

$$\begin{aligned} \hat{p}|\varphi_p\rangle &= p|\varphi_p\rangle \\ \hat{p}\Psi(x) &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x) \stackrel{!}{=} p\Psi(x) \end{aligned}$$

- $p = p^\dagger$
- $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \mathbb{1}$
 - hieraus folgt die Unschärferelation $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$.
 - dies gilt für alle Observablen mit nicht-verschwindendem Kommutator.
- $p = \hbar k$

6.3 Ortsdarstellung und Impulsdarstellung

Wenn ein Ort gemessen wird, muss die Ortsdarstellung verwendet werden; wird ein Impuls gemessen, muss die Impulsdarstellung verwendet werden. Durch eine Fouriertransformation kann zwischen Ortsdarstellung und Impulsdarstellung gewechselt werden.

Im Impulsraum hat der Impulsoperator die Eigenzustände $|\tilde{\varphi}_p\rangle$ mit $\tilde{\varphi}_p(x) = \exp[i\frac{p}{\hbar}x]$. $\tilde{\varphi}_p$ ist eine ebene Welle mit der Wellenzahl $k = \frac{p}{\hbar}$.

Daraus folgt für die Orthonormalität $\langle \tilde{\varphi}_p | \tilde{\varphi}_{p'} \rangle = 2\pi\hbar\delta(p - p')$ bzw. mit den Wellenzahlen $\langle \tilde{\varphi}_{\hbar k} | \tilde{\varphi}_{\hbar k'} \rangle = 2\pi\delta(k - k')$.

Die Impulswellenfunktion $\tilde{\Psi}(k)$ wird als Fouriertransformierte der Ortswellenfunktion $\Psi(x)$ bestimmt.

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= \int \frac{dk}{2\pi} \tilde{\Psi}(k) |\tilde{\varphi}_{\hbar k}\rangle \\ |\Psi\rangle &= \int dx \Psi(x) |\varphi_x\rangle \\ \Rightarrow \tilde{\Psi}(k) &= \mathcal{F}(\Psi(x)) \\ \mathcal{F}(\Psi(x)) &= \int \frac{dx}{2\pi} \Psi(x) \exp[-ikx] \end{aligned}$$

6.4 Translationsoperator

Der Translationsoperator $\hat{T}(s)$ verschiebt den Ort eines Objektes um s . Es gelten $\hat{T}(0) = \mathbb{1}$ und $\hat{T}(s)|\varphi_x\rangle = |\varphi_{x+s}\rangle$. Er ist analog zum Zeitentwicklungsoperator.

$$\hat{T}(s) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{p}s\right]$$

Daraus folgt $\hat{T}^\dagger(s) = \hat{T}(-s)$.

6.5 Kontinuitätsübergang

Üblicherweise wird der Ort als diskret betrachten, daher wird meist Lineare Algebra verwendet, um Orte zu beschreiben. Die Menge $\{|\varphi_x\rangle\}_{x \in \mathbb{R}}$ hat jedoch unendlich viele Basisvektoren, daher ist die Dimension des Hilbertraumes $\dim \mathcal{H} = \infty$. Deswegen muss statt der Linearen Algebra die Funktionsanalysis verwendet werden, um Quantenzustände zu beschreiben.

	diskret	kontinuierlich
Kronecker-Delta	δ_{ij}	Deltafunktion $\delta(x)$
	$\delta_{ij} = 0 \Leftrightarrow i \neq j$	$\delta(x - y) = 0 \Leftrightarrow x \neq y$
Normierung	$\sum_i \delta_{ij} = 1$	$\int_{\mathbb{R}} \delta(x - x') dx = 1$
Orthonormale Eigenbasis	$\{ \varphi_i\rangle\}$	$\{ \varphi_x\rangle\}$ Eigensystem
Orthonormalität	$\langle \varphi_i \varphi_j \rangle = \delta_{ij}$	$\langle \varphi_x \varphi_{x'} \rangle = \delta(x - x')$
Vollständigkeit	$\mathbb{1}_{\mathcal{H}} = \sum_i \varphi_i\rangle \langle \varphi_i $	$\mathbb{1}_{\mathcal{H}} = \int_{\mathbb{R}} \varphi_x\rangle \langle \varphi_x dx$
Spektraldarstellung	$A = \sum_i a_i \varphi_i\rangle \langle \varphi_i $	$A = \int_{\mathbb{R}} x \varphi_x\rangle \langle \varphi_x dx$
Komponentendarstellung	$\sum_i \Psi_i \varphi_i\rangle$	$\int_{\mathbb{R}} \Psi(x) \varphi_x\rangle dx$
Skalarprodukt	$\langle \Psi \chi \rangle = \sum_i \Psi_i^* \chi_i$	$\langle \Psi \chi \rangle = \int_{\mathbb{R}} \Psi^*(x) \chi(x) dx$

6.5.1 Komponentendarstellung

$$\mathcal{H} \ni |\Psi\rangle = \mathbb{1} |\Psi\rangle \quad \Rightarrow \quad |\Psi\rangle = \sum_i |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i | \Psi \rangle$$

$$\Psi_i = \langle \varphi_i | \Psi \rangle \quad \Rightarrow \quad |\Psi\rangle = \sum_i \Psi_i |\varphi_i\rangle$$

$$\Psi(x) = \langle \varphi_x | \Psi \rangle \quad \Rightarrow \quad |\Psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} \Psi(x) |\varphi_x\rangle dx$$

$\Psi(x)$ ist die Wellenfunktion des Zustands $|\Psi\rangle$, Ψ_i eine Komponente von $|\Psi\rangle$.

6.5.1.1 Skalarprodukt in Komponentendarstellung Dadurch sieht das Skalarprodukt in Komponentendarstellung folgendermaßen aus:

$$\langle \Psi | \chi \rangle = \langle \Psi | \mathbb{1} | \chi \rangle = \langle \Psi | \left(\sum_i |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i| \right) | \chi \rangle = \sum_i \Psi_i^* \chi_i \langle \Psi | \chi \rangle = \int_{\mathbb{R}} \Psi^*(x) \chi(x) dx$$

6.6 Translationssymmetrie und Impulserhaltung

Ein System ist genau dann symmetrisch bezüglich Translation, wenn der Impuls p eine Erhaltungsgröße ist. Dies ist genau dann der Fall, wenn der Kommutator $[T(s), U(t)]$ verschwindet. Dies wiederum ist äquivalent dazu, dass der Kommutator $[H, p]$ verschwindet.

6.7 Hamiltonoperator eines Punktteilchens

6.7.1 Hamiltonoperator eines freien Punktteilchens

Aus der Energie-Impuls-Reaktion folgt der Hamiltonoperator eines freien Punktteilchens:

$$H = \frac{p^2}{2m}$$

6.7.2 Hamiltonoperator eines Punktteilchens

Sei das Teilchen in einem Potential $U(x)$.

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

6.8 Schrödingergleichung eines Punktteilchens

6.8.1 Schrödingergleichung eines freien Punktteilchens

Ein freies Teilchen ist symmetrisch bezüglich Translation, daher gilt $[H, p] = 0$. Der Hamiltonoperator eines freien Punktteilchens wird in die Schrödingergleichung eingesetzt.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t)$$

Dies ist eine partielle Differentialgleichung 2. Ordnung, die eine nicht-triviale Dynamik erzeugt.

6.8.2 allgemeine Schrödingergleichung eines Punktteilchens

Der Hamiltonoperator eines Punktteilchens $H = \frac{p^2}{2m}$ wird in die Schrödingergleichung eingesetzt.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \right) \Psi(x, t)$$

6.8.3 Stationäre Schrödingergleichung

Oft ist es hilfreich, ein dynamisches Problem zunächst als stationär zu betrachten. Dies ist meist einfacher und daraufhin kann man die Zeitentwicklung anwenden.

Die stationäre Schrödingergleichung gilt, wenn die Wellenfunktion $\Psi(x)$ nur vom Ort, aber nicht von der Zeit abhängt. Hierbei sind die normierten Eigenenergiezustände $|\Psi_n\rangle$ und die Eigenenergien E_n wichtig. Es gilt $H|\Psi_n\rangle = E_n|\Psi_n\rangle$, daraus folgt die stationäre Schrödingergleichung.

$$E_n \Psi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \right) \Psi_n(x)$$

Daraus folgt die Dynamik des Teilchens. Hierbei sind c_n Koeffizienten, die bestimmt werden müssen.

$$\begin{aligned} |\Psi(0)\rangle &= \sum_n c_n |\Psi_n\rangle \\ \Rightarrow |\Psi(t)\rangle &= \sum_n c_n \exp\left[-\frac{i}{\hbar} E_n t\right] |\Psi_n\rangle \end{aligned}$$

6.9 Quanten-Zeno-Effekt

Der Übergang eines quantenmechanischen Systems von einem Zustand in einen anderen kann durch wiederholte Messungen aufgehalten werden.² Durch die Messung eines Zustand ϕ wird das System diesem Zustand ϕ präpariert. Wird dies häufig gemacht, so kann das System in ϕ fixiert werden.

Die Wahrscheinlichkeit, dass N Messungen M_ϕ im zeitlichen Abstand τ das selbe Ergebnis liefern, ist nach der Bornschen Regel $P_N = |\langle \phi | \Psi \rangle|^2$, wenn vorher der Zustand Ψ vorherrschte. Wird häufig genug gemessen, geht die Wahrscheinlichkeit für den Wechsel in einen anderen Zustand gegen Null.

7 6. Modellsysteme

7.1 Gebundene Eigenenergiezustände

Eigenzustände sind gebunden, wenn die Eigenenergiezustände normierbar sind.

7.2 Potentialkasten

Sei das Potential U überall V außer in dem Bereich von 0 bis a .

$$U(x) = \begin{cases} V & x \notin [0, a] \\ 0 & x \in [0, a] \end{cases}$$

²Benannt nach *Zenon von Elea*, von dem das Pfeil-Paradoxon stammt.

Dann gilt die stationäre Schrödingergleichung:

$$E\Psi_E(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)\right)\Psi_E(x)$$

$$\Leftrightarrow \Psi_E''(x) = \frac{2m}{\hbar^2}(U(x) - E)\Psi_E(x)$$

In Bereichen, in denen $U(x) > E$, folgt $\Psi_E''(x) = c \cdot \Psi_E(x)$, wobei c eine positive Konstante ist. In Bereichen, in denen $U(x) < E$, folgt $\Psi_E''(x) = -c \cdot \Psi_E(x)$. Daher ist $\Psi_E(x)$ in Bereichen mit $U(x) > E$ konvex und in Bereichen mit $U(x) < E$ konkav.

Falls $x \notin [0, a]$, dann gilt $\Psi_E''(x) = \chi^2 \Psi_E(x)$, wobei $\chi^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V - E)$ eine verkürzte Schreibweise darstellt. Falls $x \in [0, a]$, dann gilt $\Psi_E''(x) = k^2 \Psi_E(x)$, da $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Dann folgt $\Psi_{\pm}(x) = |\tilde{\varphi}_{\pm \hbar k}\rangle$

$$\Rightarrow \Psi_E(x) = \begin{cases} x < 0 : & \alpha \exp[\chi x] + \beta_2 \exp[-\chi x] \\ x > a : & \alpha_2 \exp[\chi x] + \beta \exp[-\chi x] \\ x \in [0, a] : & r \sin(kx) + s \cos(kx) \end{cases}$$

Hierbei muss $\alpha_2 = \beta_2 = 0$ gelten, da die entsprechenden Exponentialterme divergieren.

Zudem muss die Funktion auch an den Stellen 0 und a stetig sein. Daraus folgen 5 Bedingungen. Daraus erhalten wir die 5 freien Parameter α, β, r, s und E .

$$\Psi(0_-) = \Psi(0_+)$$

$$\Psi'(0_-) = \Psi'(0_+)$$

$$\Psi(a_-) = \Psi(a_+)$$

$$\Psi'(a_-) = \Psi'(a_+)$$

$$\text{Normierung: } 1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx$$

7.2.1 Unendlicher Potentialkasten

Eine Vereinfachung ist, $V \rightarrow \infty$ zu schicken. Dann gilt auch $\chi^2 \rightarrow \infty$ und damit gilt $\forall x \notin [0, a] : \Psi(x) = 0$. Dadurch gibt es die Randbedingungen $\Psi(0) = \Psi(a) = 0$, woraus $\Psi(x) = r \sin(kx)$ für $x \in [0, a]$ folgt. Daher muss $ka = n\pi$ (mit $n \in \mathbb{N}$) sein.

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(k_n x)$$

$$k_n = \frac{\pi}{a} \cdot n \text{ mit } n \in \mathbb{N}$$

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

Die Schwingung Ψ_n besitzt $n - 1$ Nullstellen bzw. Knoten.

7.3 Doppelkastenpotential

Sei das Potential $U(x)$ ein Potentialkasten im Bereich $[-a, a]$, der bei $x = 0$ eine Potentialbarriere in der Höhe von u hat. Zur Vereinfachung nehmen wir an, dass das Potential außerhalb des Kastens unendlich hoch ist und u groß ist. Dieses Potential ist ein einfaches Modell für Teilchen im Doppelmuldenpotential.

$$U(x) = \begin{cases} u\delta(x) & |x| < a \\ \infty & |x| > a \end{cases}$$

Nun sei Ψ ein Eigenenergiezustand zur Energie E . Dann wird die stationäre Schrödingergleichung durch folgende Differentialgleichung für $x \in (-a, a)$ gelöst. Hierbei gelten die Randbedingungen $\Psi_E(\pm a) = 0$.

$$\Psi_E''(x) = \frac{2m}{\hbar^2}(u\delta(x) - E)\Psi_E(x)$$

7.3.1 symmetrische Zustände

Für $x \neq 0$ erhält man wie beim Potentialkasten $\Psi_E = r \sin(kx) + s \cos(kx)$ mit $k = \frac{2mE}{\hbar^2}$. Das Verhalten bei $x = 0$ ist dagegen anders zu bestimmen.

Da die δ -Funktion keinen exakten Wert angibt, sondern nur über eine Integration sinnvoll interpretiert werden kann, muss die Differentialgleichung integriert werden. Sei $\varepsilon \rightarrow 0$ klein. Zudem sei $\Psi_E(x)$ innerhalb des Potentialkastens symmetrisch.

$$\begin{aligned} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \Psi_E''(x) dx &= \frac{2mu}{\hbar^2} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \delta(x) \Psi_E(x) dx - k^2 \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \Psi_E(x) dx \\ \Leftrightarrow \Psi_E'(\varepsilon) - \Psi_E'(-\varepsilon) &= \frac{2mu}{\hbar^2} \Psi_E(0) - 0 \\ \Rightarrow \Delta \Psi_E'(x) &= \frac{2mu}{\hbar^2} \Psi_E(0) \end{aligned}$$

Als Ansatz kann man $\Psi_E(x) = c \sin(k|x| + b)$ wählen. Dann erhält man aus der obigen Gleichung $\tan(kb) = \frac{k\hbar^2}{mu}$. Da u groß ist, ist der Tangens klein und es gilt $\tan(kb) \approx kb$. Damit erhält man die Relation $b = \frac{\hbar^2}{mu}$.

Die Randbedingungen $\Psi_E(\pm a) = 0$ liefern uns die Gleichung $\sin(k(a+b)) = 0$, woraus $k(a+b) = \pi n$ (mit $n \in \mathbb{N}$) gefordert wird. Daraus erhalten wir die Energieeigenfunktionen.

$$\begin{aligned} \Psi_n(x) &= c_n \sin(k_n(|x| + b)) \\ k_n &= \frac{\pi}{a+b} \cdot n \\ E_n &= \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \frac{k_n^2}{(a+b)^2} \end{aligned}$$

7.3.2 antisymmetrische Zustände

Mit einer ähnlichen Rechnung wie bei den symmetrischen Zuständen erhält man für ungerade Wellenzahlen k folgendes.

$$\begin{aligned}\tilde{\Psi}_n(x) &= \frac{1}{\sqrt{a}} \sin(\tilde{k}x) \\ \tilde{k}_n &= \frac{\pi}{a} \cdot n \\ \tilde{E}_n &= \frac{\hbar^2 \tilde{k}^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \frac{n^2}{a^2}\end{aligned}$$

Hier gibt es neben den Randbedingungen $\tilde{\Psi}_n(\pm a) = 0$ und der Lösung der Schrödingergleichung bei $x = 0$ noch eine weitere Bedingung, die eingehalten werden muss, nämlich die *Anschlussbedingung*. Diese fordert die Stetigkeit der Wellenfunktion, also dass für $\varepsilon \rightarrow 0$ der gleiche Wert $\tilde{\Psi}_n(-\varepsilon) = \tilde{\Psi}_n(\varepsilon)$ gilt. Dies ist erfüllt, da $\tilde{\Psi}_n(0) = 0$.

7.3.3 Niveaufspaltung

Die symmetrischen Eigenenergien E_n sind kleiner als die antisymmetrischen Eigenenergien \tilde{E}_n , da $\Delta E_n = \tilde{E}_n - E_n > 0$ positiv ist. Daher ist Ψ_n jeweils der n -te Grundzustand, $\tilde{\Psi}_n$ ist der n -te angeregte Zustand. Allerdings ist $\Delta E_n = \tilde{E}_n - E_n \ll \tilde{E}_n$ bzw. $\frac{\Delta E_n - E_n}{\tilde{E}_n} = \frac{2b}{a} \ll 1$ sehr klein.

Die Oszillation zwischen den Kästen wird durch die Frequenz $\omega_n = \frac{\Delta E_n}{\hbar}$ beschrieben, die von der Niveaufspaltung abhängt. Die Oszillation in den jeweiligen Kästen wird durch die Frequenz $\Omega_n = \frac{\tilde{E}_n}{\hbar}$ dargestellt, die von der Eigenenergie im angeregten Zustand abhängt und $\omega_n \ll \Omega_n$.

Dies kommt daher, dass der Hamiltonoperator in Spektraldarstellung durch $H = 1 \frac{E_n + \tilde{E}_n}{2} + \sigma_z \frac{E_n - \tilde{E}_n}{2}$ darstellen kann. Der erste Term ist konstant, der zweite erzeugt die Dynamik. Durch diese Separation kann der Zeitentwicklungoperator $U(t)$ in eine global wirkende Phase und einen Schwingungsterm mit σ_z separiert werden, also $U(t) = \exp[i \frac{i}{\hbar} \Omega t] \cdot \exp[-i \frac{i}{\hbar} \sigma_z \omega t]$. Nur der Term $\exp[-i \frac{i}{\hbar} \sigma_z \omega t]$ erzeugt die Dynamik.

7.3.4 Superposition

Als Basis wählt man den n -ten Grundzustand und den n -ten angeregten Zustand. Ψ_+ beschreibt hier ein Teilchen im rechten Kasten, Ψ_- ein Teilchen im linken Kasten. So kann man aus beiden Zuständen ein Teilchen beschreiben, dass sich nur auf einer Seite im Kasten befindet.

$$|\Psi_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\Psi_n\rangle \pm |\tilde{\Psi}_n\rangle)$$

7.3.5 Dipolmoment

Beispielsweise bei Ammoniak befinden sich Bindungselektronen in einem Doppelmuldenpotential. Durch den Wechsel von der einen in die andere Mulde induzieren sie ein magnetisches Dipolmoment $\vec{\mu}$.

$$\mu_x = \mu_0 (|\Psi_+\rangle \langle \Psi_+| - |\Psi_-\rangle \langle \Psi_-|)$$

7.4 Reflektion und Transmission an einer Potentialbarriere

7.4.1 Tunneleffekt

Wenn eine Potentialbarriere höher ist als die Energie, die ein Teilchen hat, würde man klassisch 100% Reflektion erwarten. In der Quantenmechanik gibt es allerdings Fälle von Transmission. Man spricht davon, dass das Teilchen durch die Potentialbarriere tunnelt.

Dies ist beispielsweise für den α -Zerfall relevant. Nur durch den Tunneleffekt ist es möglich, dass die α -Teilchen die Bindungsenergie überwinden können.

7.4.2 Potentialbarriere

Sei eine Potentialbarriere $U(x) > 0$ der Dicke a im Intervall $(0, a)$ gegeben. Sei $|\Psi\rangle_{t_0}$ die einlaufende Welle zum Zeitpunkt t_0 Position $\langle x \rangle_{t_0} = -l$. Der initiale Abstand zur Barriere soll sehr viel größer sein als die Dicke, also $l \gg a$, die initiale Breite b der Welle mit $a \ll b \ll l$ sei sehr viel kleiner als der Abstand zur Barriere, aber deutlich größer als die Dicke der Barriere. Es gilt also $\langle \Delta x \rangle_{t_0} = b$. Die Welle habe einen Impuls $p = \hbar k = \langle p \rangle_{t_0}$ und damit eine Energie $E = \langle H \rangle_{t_0} = \frac{p^2}{2m}$.

Die Wellenfunktion der einlaufenden Welle lautet zu Beginn folgendermaßen:

$$\Psi(x, t_0) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi b^2}} \exp\left[-\frac{(x+l)^2}{4b^2}\right] \exp[ikx]$$

7.4.3 Streuansatz

Zunächst soll das stationäre Problem betrachtet werden. Um die Wellenfunktion zu beschreiben, wird ein Streuansatz benutzt. Hierbei sind der Reflektionskoeffizient r und der Transmissionskoeffizient t wichtig. Im Bereich vor der Barriere gibt es eine einlaufende und eine reflektierte Welle, hinter der Barriere eine transmittierte Welle. $\Psi_0(x)$ ist die Lösung der stationären Schrödingergleichung für das gegebene Potential.

$$\Psi(x) = \begin{cases} 1 \exp[ikx] + r \exp[-ikx] & : x < 0 \\ \Psi_0(x) & : x \in [0, a] \\ t \exp[ikx] & : x > a \end{cases}$$

$\Psi_0(x)$ kann wie beim Potentialkasten als $\Psi_0(x) = s \sin(kx) + u \cos(kx)$ dargestellt werden.

7.4.4 Anschlussbedingungen

Es ist gefordert, dass $\Psi(x)$ und $\Psi'(x)$ stetig sind. Dies muss an den Stellen $x = 0$ und $x = a$ sichergestellt werden, dadurch ergeben sich 4 Bedingungen, die erfüllt werden müssen. Dadurch werden die freien Parameter r, t, s, u bestimmt.

7.4.5 Reflektions- und Transmissionswahrscheinlichkeit

Insbesondere ergibt sich, dass die Reflektionswahrscheinlichkeit R und die Transmissionswahrscheinlichkeit T von den Parametern r, t abhängen:

$$R = |r|^2$$

$$T = |t|^2$$

7.4.6 Wahrscheinlichkeitsstromdichte

Initial ist die gesamte Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Welle im Bereich um $-l$, später ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit deutlich verteilt. Man es daher von "fließenden" Wahrscheinlichkeiten sprechen, ähnlich wie von fließenden Ladungen.

Die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\Psi(x, t)|^2$ ist normiert ($\int_{\mathbb{R}} |\Psi(x, t)|^2 = 1$).

Die zeitliche Änderung der Wahrscheinlichkeitsdichte ist $\frac{d}{dt} |\Psi(x, t)|^2 = \frac{d}{dt} (\Psi^* \Psi)^2$. Die Wahrscheinlichkeitsstromdichte $j(x, t)$ wird aus diesem Ausdruck hergeleitet, sodass folgende Gleichung erfüllt ist:

$$\frac{d}{dt} |\Psi(x, t)|^2 + \frac{\partial}{\partial x} j(x, t) \stackrel{!}{=} 0$$

Daraus folgt die Definition der Wahrscheinlichkeitsstromdichte als Imaginärteil von $\Psi^* \partial_x \Psi$.

$$j(x, t) = \frac{\hbar}{m} \Im(\Psi^*(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t))$$

7.4.7 Kontinuitätsgleichung

Die Kontinuitätsgleichung für die Erhaltungsgröße der Aufenthaltswahrscheinlichkeit sieht folgendermaßen aus. Hierbei ist $\rho(x, t) = |\Psi(x, t)|^2$ die Wahrscheinlichkeitsdichte. Kontinuitätsgleichungen kann ganz allgemein für Erhaltungsgrößen definieren, wenn diese sich im Raum verteilen können.

$$\frac{d}{dt} \rho(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} j(x, t) \stackrel{!}{=} 0$$

7.4.8 Kastenförmige Potentialbarriere

Für eine Kastenförmige Potentialbarriere erhält man folgende Tunnelwahrscheinlichkeit:

$$T^{-1} = 1 + \left(1 + \frac{1}{4} \left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q} \right)^2 \right) \sinh^2[qa]$$

Im Grenzfall $qd \gg 1$ folgt $\sinh[qa] \approx \frac{1}{2} \exp[qa]$. Damit folgt $T \approx \frac{1}{4(\dots)} \exp[-2qd] \approx \exp[-2qd]$. Mit $\lambda = \frac{2}{q} = \hbar(\sqrt{8m(V-E)})^{-1}$ folgt $T \approx \exp\left[-\frac{d}{\lambda}\right]$.

7.4.8.1 Lösung der Anschlussbedingungen

$$\Psi(x) = \begin{cases} 1 \exp[ikx] + r \exp[-ikx] & : x < 0 \\ s \exp[qx] + u \exp[-qx] & : x \in [0, d] \\ t \exp[ikx] & : x > a \end{cases}$$

Die Anschlussbedingungen liefern das folgende lineare Gleichungssystem:

$$\begin{aligned} 1 + r &= s + u \\ ik - ikr &= -qs + qu \\ s \exp[-qd] + u \exp[qd] &= t \\ -qs \exp[-qd] + qu \exp[-qd] &= ikt \end{aligned}$$

Dies kann auch in Matrixform dargestellt werden.

$$\begin{aligned} A &= \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{pmatrix} \\ B &= \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -q & q \end{pmatrix} \\ C &= \begin{pmatrix} \exp[-qd] & \exp[qd] \\ -q \exp[-qd] & \exp[qd] \end{pmatrix} \\ v &= \begin{pmatrix} 1 \\ ik \end{pmatrix} \\ \Rightarrow \frac{1}{t} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix} &= A^{-1} B C^{-1} v \end{aligned}$$

Computerprogramme können folgende Lösung liefern.

$$\frac{1}{t} = \cosh[qd] + \frac{i}{2} \left(\frac{q}{\hbar} - \frac{k}{q} \right) \sinh[qd]$$

Aus $T = |t|^2$ folgt der oben genannte Zusammenhang.

7.4.9 Gamow-Näherung

Nähere eine beliebige Potentialbarriere durch eine Kombination von mehreren rechteckigen Potentialbarrieren an. Barrieren, die geringer als die Energie der einlaufenden Welle sind, können vernachlässigt werden. Die WKB-Methode ist genauer, wird aber hier nicht besprochen.

Sei eine Potentialbarriere im Bereich $[a, b]$ durch n kastenförmige Potentialbarrieren der Breite d darstellbar. Die Höhe der i -ten Potentialbarriere sei V_j im Bereich $q_j = \sqrt{2m(U(x_j) - E)\hbar^{-1}}$. Dann ist $T_j = \exp[-2q_j d]$.

Die Wahrscheinlichkeit, dass alle Barrieren durchtunnelt werden, ist $T = \prod_j T_j = \exp\left[\sum_{j=1} d 2q_j\right]$.

Wähle nun d klein, ohne dass $qd \gg 1$ verletzt wird. Dies geht, wenn U hinreichend glatt ist. Damit kann man T im Kontinuumsübergang durch ein Integral bestimmen.

$$T \approx \exp\left[\frac{1}{\hbar} \int_a^b \sqrt{8m(U(x) - E)} dx\right]$$

7.4.10 Streuung an einem Potentialtopf

Sei $U(x) = -V$ im Intervall $[0, d]$ und $U(x) = 0$ außerhalb dieses Intervalls.

$$\Psi(x) = \begin{cases} \exp[ikx] + r \exp[-ikx] & : x < 0 \\ s \exp[ikx] + u \exp[-ikx] & : x \in [0, d] \\ t \exp[ikx] & : x > d \end{cases}$$

Das Ergebnis der Streuung an einer kastenförmigen Potentialbarriere kann man verwenden, wenn man q durch $i\kappa$ ersetzt. Daraus folgt:

$$\frac{1}{t} = \cosh[i\kappa d] + \frac{i}{2} \left(\frac{i\kappa}{\hbar} + \frac{ik}{\kappa} \right) \sinh[i\kappa d]$$

Es gilt $\cosh[i\alpha] = \cos[\alpha]$ und $\sinh[i\alpha] = i \sin[\alpha]$. Daraus folgt die Tunnelwahrscheinlichkeit.

$$\begin{aligned} T^{-1} &= 1 + \left(1 + \frac{1}{4} \left(\frac{\kappa}{k} + \frac{k}{\kappa} \right)^2 \right) \sinh^2[qa] \\ &= 1 + \left(\frac{\kappa^2 - k^2}{2k\kappa} \right)^2 \sin^2[\kappa d] \end{aligned}$$

Für $\kappa d = n\pi$ folgt $T = 1$. Für $\kappa d = \frac{\pi}{2}(2n+1)$ ist T minimal.

7.5 Harmonischer Oszillator

Sei ein Teilchen in einem Potential $U(x) = \frac{1}{2}kx^2$, wobei $k = m\omega^2$ eine Art Federkonstante mit der Masse m und der Frequenz ω beschreibt. Auch viele reelle Potentiale kann man als harmonisch annähern, wenn die Auslenkung bzw die Energie gering sind. Deswegen ist der harmonische Oszillator in vielen Anwendungsgebieten sehr wichtig.

7.5.1 Plank'sche Strahlungsformel

Die Energie E_k ist gequantelt in Vielfachen von $\hbar\omega_k$, wobei $\omega_k = c|\vec{k}|$ die Frequenz zum Wellenvektor \vec{k} mit der Lichtgeschwindigkeit c . Mit $n \in \mathbb{N}_0$ gilt $E_k = n \cdot \hbar\omega_k$. Dadurch kann der Erwartungswert der Energie bei der Temperatur T bestimmt werden. Hierbei ist $\langle n \rangle$ der Erwartungswert der Phononenzahl im thermischen Gleichgewicht.

$$\langle E_k \rangle_T = \hbar\omega_k \langle n \rangle_T = \frac{\hbar\omega_k}{\exp\left[\frac{\hbar\omega_k}{k_b T}\right] - 1}$$

Damit können die Schwingungsmoden abgezählt werden. Damit kann die Intensität I der Strahlung beschrieben werden, wobei γ eine beliebige Konstante ist. Dies ist die Plank'sche Strahlungsformel.

$$I(\omega) = \gamma \frac{\hbar\omega^3}{\exp\left[\frac{\hbar\omega_k}{k_b T}\right] - 1}$$

7.5.2 Eigenenergien

Seien E_n Eigenenergien zu den Eigenzuständen $|\varphi_n\rangle = |n\rangle$, die mit den Wellenfunktionen $\varphi_n(x)$ beschrieben wird. Hierzu wird l als charakteristische Länge bezeichnet.

$$\begin{aligned} E_n &= \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) \\ l &= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \\ \varphi_0(x) &= \frac{1}{\sqrt[4]{\pi l^2}} \exp\left[-\frac{x^2}{2l^2}\right] \\ \Rightarrow \varphi_{n+1} &= \frac{1}{\sqrt{n+1}} \left(\frac{x}{l} - l \frac{\partial}{\partial x}\right) \varphi_n(x) \\ \Rightarrow |n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |0\rangle \end{aligned}$$

$|0\rangle$ hat eine gaußverteilte Wahrscheinlichkeitsdichte mit der Standardabweichung l .

7.5.2.1 Beweisidee: Analytische Methode Gesucht werden normierbare Lösungen zu der stationären Schrödingergleichung. Hieraus folgt die Gleichung für die Eigenenergien E_n , $\varphi_n(x)$ sind Hermite-Polynome.

7.5.2.2 Beweis: Algebraische Methode Die Leiteroperatoren erzeugen Eigenzustände, die um 1 verschoben sind. Eigenwerte des Hamiltonoperators bzw. des Operators $N = a^\dagger a$ müssen nicht-negativ sein. Damit dies keinen Widerspruch erzeugt, müssen alle Eigenwerte natürliche Zahlen $\nu \in \mathbb{N}_0$ sein. Daraus folgt, dass $E_\nu = \hbar\omega(\nu + \frac{1}{2}) = E_n$ die Eigenwerte des Hamiltonoperators sein müssen.

Da $|\nu\rangle$ normierte Eigenzustände sind, muss auch $a^\dagger |\nu\rangle$ ein normierter Eigenzustand sein. Da $\|a^\dagger |\nu\rangle\|^2 = \nu + 1$, muss $|\nu + 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{\nu+1}} a^\dagger |\nu\rangle$ ein normierter Eigenzustand zum Eigenwert $\nu + 1$ sein. Analog folgt, dass $|\nu - 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{\nu}} a |\nu\rangle$ der Eigenzustand zum Eigenwert $\nu - 1$ sein muss.

7.5.3 Die Leiteroperatoren

Der Erzeugeroperator a^\dagger und der Vernichteroperator a können einen Eigenzustand eines harmonischen Oszillators um ein Energieniveau anheben bzw. senken. Der Kommutator ergibt den Einheitsoperator.

$$\begin{aligned} a &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} + \frac{i\hat{p}}{m\omega} \right) \\ a^\dagger |n\rangle &= \sqrt{n+1} |n+1\rangle \\ a |n\rangle &= \sqrt{n} |n-1\rangle \\ \Rightarrow [a, a^\dagger] &= \mathbb{1} \end{aligned}$$

Sei $|\nu\rangle$ ein Eigenzustand des harmonischen Oszillators. Dann sind $a^\dagger |\nu\rangle$ ein Eigenzustand zum Eigenwert $\nu + 1$ und $a |\nu\rangle$ ein Eigenzustand zum Eigenwert $\nu - 1$. Deswegen nennt man diese beiden Operatoren auch Leiteroperatoren.

Die Eigenzustände der beiden Leiteroperatoren sind kohärente Zustände.

7.5.3.1 Darstellung des Ortsoperators und des Impulsoperators

Damit lassen sich auch Ortsoperator und Impulsoperator durch Erzeugeroperator und Vernichteroperator darstellen.

$$\begin{aligned} \hat{x} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a^\dagger + a) \\ \hat{p} &= i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} (a^\dagger - a) \end{aligned}$$

7.5.3.1.1 Erwartungswerte Die Erwartungswerte von x und p sind 0. Dies bedeutet, dass das Teilchen in der Ruhelage am Wahrscheinlichsten ist, ebenso wie es am Wahrscheinlichsten ist, dass das Teilchen sich in Ruhe befindet. Dies bedeutet jedoch nicht, dass es sich in Ruhe *und* in der Ruhelage gleichzeitig befindet.

$$\langle x \rangle_{|n\rangle} = 0$$

$$\langle p \rangle_{|n\rangle} = 0$$

Die zweiten statistischen Momente x^2 und p^2 sind dagegen abhängig von der charakteristischen Länge l . Dies bedeutet, dass die Standardabweichung von x proportional zu l ist, weshalb der Begriff der charakteristischen Länge sinnvoll ist. Die Standardabweichung von p ist dagegen umgekehrt proportional zu l , daher ist eine kurze charakteristische Länge für hohe Impulsfluktuationen. Dies ist der Heisenberg'schen Unschärferelation ähnlich.

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle_{|n\rangle} &= l^2 \left(n + \frac{1}{2} \right) & \Rightarrow & \quad \langle x^2 \rangle_{|0\rangle} = \frac{l^2}{2} \\ \langle p^2 \rangle_{|n\rangle} &= \frac{\hbar^2}{l^2} \left(n + \frac{1}{2} \right) & \Rightarrow & \quad \langle p^2 \rangle_{|n\rangle} = \frac{\hbar^2}{2l^2} \end{aligned}$$

7.5.3.2 Darstellung des Hamiltonoperators Setzt man diese Darstellungen in den Hamiltonoperator H harmonischen Oszillators ein, erhält man eine Darstellung durch Erzeugeroperator und Vernichteroperator. Dadurch hat der Operator $a^\dagger a$ dasselbe Spektrum wie der Hamiltonoperator.

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

Wenn ν ein Eigenwert von $a^\dagger a$ ist, dann ist $E_\nu = \hbar\omega \left(\nu + \frac{1}{2} \right)$ ein Eigenwert zum Hamiltonoperator.

Daher gilt $a^\dagger a |n\rangle = n |n\rangle$, $a^\dagger a$ hat also dieselben Eigenzustände wie der Hamiltonoperator mit den Eigenwerten n . auch aa^\dagger hat dieselben Eigenzustände. Da aus dem Kommutator $aa^\dagger = \mathbb{1} + a^\dagger a$ folgt, gilt $aa^\dagger |n\rangle = (1 + n) |n\rangle$, der Eigenwert ist also um 1 erhöht.

7.5.3.3 Eigenschaften von $N = a^\dagger a$ N ist hermitesch, also selbstadjungiert, daher hat N reelle Eigenwerte.

Weiterhin ist N positiv-semidefinit. Ähnlich wie beim Skalarprodukt bedeutet dies, dass der Eigenwert von N nicht-negativ ist. Ist der betreffende Eigenzustand $|\nu\rangle = 0$, so ist der Eigenwert $\nu > 0$. Falls der Eigenwert $\nu = 0$ verschwindet, ist der Eigenzustand $|\nu\rangle = 0$ ebenfalls verschwunden.

Zudem gelten die Kommutatoren $[N, a] = -a$ und $[N, a^\dagger] = a^\dagger$.

8 7. Kohärente Zustände

Kohärente Zustände sind quasi-klassische Zustände. Sie sind in der Quantenoptik besonders interessant, da optische Wellen in einem begrenzten Raum durch stehende Wellen eines harmonischen Oszillators beschrieben werden.

Für große $n \gg 1$ sind die Eigenenergiezustände $|n\rangle$ delokalisiert, aber stationäre Lösungen $\varphi_n(x)$. Klassische Zustände sind stattdessen lokal und nicht-stationär, beispielsweise als $\rho_t(x) = \delta(x - x_0)$.

8.1 Verschiebungsoperator

Es werden Zustände $|\Psi(x)\rangle$ gesucht, die möglichst lokale Zustände beschrieben. Dies kann dadurch ermöglicht werden, dass der Erwartungswert der Varianz $\langle \Delta x \rangle$ klein im Vergleich zum zweiten statistischen Moment $\langle x^2 \rangle$ sein soll, also $\langle (\Delta x)^2 \rangle_t \ll \langle x^2 \rangle_t$.

Dies kann auf zwei Arten erfolgen: Man kann das Teilchen auslenken, was durch eine Translation $|\Psi_0\rangle = T(x_0)|0\rangle$ dargestellt wird, oder es anstoßen, was durch eine Impulstranslation $|\Psi_0\rangle = \tilde{T}(p_0)|0\rangle$ beschrieben wird. Man kann auch beide Methoden kombinieren, dies wird durch den unitären Verschiebungsoperator $D(\alpha) := \tilde{T}(\alpha)T(\alpha)$ dargestellt, wobei $\alpha \in \mathbb{C}$ komplexwertig ist.

$$D(\alpha) \equiv \tilde{T}(\alpha)T(\alpha) = \exp[\alpha a^\dagger - \alpha^* a]$$

$$D(\alpha) = e^{i\varphi} \tilde{T}\left(\frac{\sqrt{2}\hbar}{l}\mathfrak{I}(\alpha)\right) T(\sqrt{2}l\mathfrak{R}(\alpha))$$

Sei $\alpha = u + iv$ mit $u, v \in \mathbb{R}$. Falls α reell ist ($\mathfrak{I}(\alpha) = v = 0$), beschreibt $D(\alpha) = T(\sqrt{2}lu)$ eine reine Translation. Falls α imaginär ist ($\mathfrak{R}(\alpha) = u = 0$), beschreibt $D(\alpha) = \tilde{T}(\frac{\sqrt{2}\hbar}{l}\alpha)$ eine reine Impulstranslation.

Im allgemeinen Fall kann man $D(\alpha)$ folgendermaßen darstellen. Hierzu sind A und B die Operatoren, die in den Exponenten der (Impuls-)Translationsoperatoren auftauchen.

$$A := i\sqrt{2}v\frac{\hat{x}}{l}$$

$$B := -i\sqrt{2}lu\frac{\hat{p}}{\hbar}$$

$$D(\alpha) = e^A e^B$$

8.2 Baker-Campbell-Hausdorff-Identität

Für Operatoren A, B , die mit $[A, B]$ vertauschen, gilt folgende Identität.

$$e^A e^B = e^{[A, B]} e^{A+B}$$

8.3 Kohärente Zustände

Wird die Baker-Campbell-Hausdorff-Identität auf den Verschiebungsoperator $D(\alpha)$ angewendet, ergibt sich folgende Relation.

$$D(\alpha) = \exp[\alpha a^\dagger - \alpha^* a]$$

$$D(\alpha) = e^{iuv\tilde{T}} \left(\frac{\sqrt{2}\hbar}{l} \mathfrak{I}(\alpha) \right) T(\sqrt{2}l\Re(\alpha))$$

Damit können kohärente Zustände $|c(\alpha)\rangle$ definiert werden. Diese ergeben sich aus einer Impuls- und Ortstranslation des Grundzustandes $|0\rangle$, die durch den Verschiebungsoperator mit komplexwertigem $\alpha \in \mathbb{C}$ dargestellt wird. Der zeitentwickelte Zustand $U(t)|c(\alpha)\rangle$ bewegt sich ähnlich zum klassischen Fall auf einer Ellipse im Phasenraum.

$$|c(\alpha)\rangle = D(\alpha)|0\rangle$$

$$U(t)|c(\alpha)\rangle = \exp\left[-i\omega\frac{t}{2}\right]|c(\exp[-i\omega t]\alpha)\rangle$$

Zum konkreten Rechnen kann man die Definitionen von \tilde{T} und T einsetzen und erhält eine strukturell einfache Gleichung für $D(\alpha)$.

9 8. Störungstheorie

9.1 Zeitunabhängige Störungstheorie

Im Allgemeinen wird ein reales System durch einen Hamiltonoperator H beschrieben. Dieses soll kein ideales System sein, sondern geringfügig von einem idealen System abweichen. Dies kann ein näherungsweise harmonischer Oszillator sein, oft wird auch das Wasserstoffatom als ideales System verwendet.

Der Hamiltonoperator des idealen Systems sei H_0 , H_1 sei eine Korrektur. Sei $|\lambda| \ll 1$ ein dimensionsloser Faktor, der die Störung klein hält. Wird diese Störung zu groß, kann man die Störungstheorie nicht mehr anwenden.

Dann gilt $H = H_0 + \lambda H_1$. Damit kann die Energie $E_n(\lambda) = E_n + \Delta E(\lambda)$ als Abweichung der idealen Eigenenergie E_n bestimmt werden, ebenso ist $|n(\lambda)\rangle = |n\rangle + |\Delta n(\lambda)\rangle$ abweichend vom idealen Eigenzustand $|n\rangle$.

9.1.1 Nicht-entartete Zustände

Im Folgenden wird angenommen, dass keine Entartungen von Zuständen vorliegen. Dies bedeutet, dass die Energieniveaus für $\forall m \neq n$ ungleich sind ($E_n \neq E_m$).

Die Lösungsidee ist eine Potenzreihenentwicklung um λ . $E_n^{(0)}$ und $|n^{(0)}\rangle$ sind die Korrekturterme 0-ter Ordnung. Diese Lösungen erfüllen die statische Schrödingergleichung.

$$\begin{aligned}
E_n(\lambda) &= E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \mathcal{O}(\lambda^3) \\
|n(\lambda)\rangle &= |n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |n^{(2)}\rangle + \mathcal{O}(\lambda^3) \\
(H_0 + \lambda H_1) |n(\lambda)\rangle &\stackrel{!}{=} E_n(\lambda) |n(\lambda)\rangle \\
\Rightarrow (H_0 + \lambda H_1) (|n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |n^{(2)}\rangle) &\stackrel{!}{\approx} (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)}) (|n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |n^{(2)}\rangle)
\end{aligned}$$

Um diese Gleichung zu lösen kann man nach Potenzen von λ separieren. Dann kann man die Koeffizienten vergleichen. Dadurch erhält man je eine Gleichung für die Terme mit λ^0 , λ^1 und λ^2 .

$$\begin{aligned}
H_0 |n^{(0)}\rangle &= E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle & (0) \\
H_0 |n^{(1)}\rangle + H_1 |n^{(0)}\rangle &= E_n^{(0)} |n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)} |n^{(0)}\rangle & (1) \\
H_0 |n^{(2)}\rangle + H_1 |n^{(1)}\rangle &= E_n^{(0)} |n^{(2)}\rangle + E_n^{(1)} |n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)} |n^{(0)}\rangle & (2)
\end{aligned}$$

Die λ^0 -Terme ergeben die ursprünglichen Eigenenergien und Eigenzustände. Eine Normierung von $\langle n^{(0)} | n(\lambda) \rangle \stackrel{!}{=} 1$ ist sinnvoll. Da diese für alle λ gelten soll, folgt dass die ursprünglichen Eigenzustände $|n^{(0)}\rangle$ und die Korrekturen $|n^{(l)}\rangle$ für $l \geq 1$ orthogonal ($\langle n^{(0)} | n^{(l)} \rangle = 0$) sein müssen.

In der 0-ten Ordnung erhält man aus dem Multiplizieren von $\langle n^{(0)} |$ an die der Gleichung (0) die Eigenenergie E_n . In der 1-ten Ordnung erhält man mit Gleichung (1) auf analoge Weise $E_n^{(1)} = \langle n | H_1 | n \rangle$, was der Erwartungswert der Störung ist.

Um mit Gleichung (2) ebenso verfahren zu können, muss zunächst $|n^{(1)}\rangle$ ermittelt werden, um die Gleichung aufzulösen. Daraus erhält man $E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m | H_1 | n \rangle|^2}{E_n - E_m}$. Dies ist die Summe der Betragsquadrate der Matrixelemente der Störung, die durch die Energiedifferenz dividiert werden.

$$\begin{aligned}
E_n(\lambda) &= E_n + \lambda \langle n | H_1 | n \rangle + \mathcal{O}(\lambda^2) \\
E_n(\lambda) &= E_n + \lambda \langle n | H_1 | n \rangle + \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m | H_1 | n \rangle|^2}{E_n - E_m} + \mathcal{O}(\lambda^3)
\end{aligned}$$

Sei die Störung H_1 eine Matrix mit den Matrixelementen $H_{1,mn} = \langle m | H_1 | n \rangle$. Sei $|m\rangle = |m^{(0)}\rangle$ ein von $|n\rangle$ unterschiedlicher ungestörter Zustand.

$$\begin{aligned}
|n^{(1)}\rangle &= \sum_{m \neq n} c_m |m\rangle \\
\Rightarrow |n^{(1)}\rangle &= \sum_{m \neq n} \frac{\langle m | H_1 | n \rangle}{E_n - E_m} |m\rangle
\end{aligned}$$

9.1.2 Niveauabstoßung

Existierende Differenzen von Energieniveaus werden immer vergrößert, jedoch nie verringert. Dies geschieht durch die Terme zweiter Ordnung aus der Störungstheorie.

Dieser Effekt sorgt bei Festkörpern dafür, dass es verschiedene getrennte Energieniveaus gibt. Diese getrennten Energieniveaus nennt man in der Festkörperphysik *Bänder*.

9.1.3 Grundzustand

Da die Korrekturterme zweiter Ordnung negativ sind, wird der Grundzustand durch die Störungen abgesenkt.

9.1.4 Beispiel: Harmonischer Oszillator mit Anharmonizität

Sei $H_1 = \hbar\omega \left(\frac{x}{l}\right)^3$ eine kleine Anharmonizität eines ansonsten harmonischen Oszillators. In der Rechnung wird die Relation $\frac{x}{l} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger + a)$ verwendet. Aus $(a^\dagger + a)^3$ sind die Terme mit mehr Erzeugern a^\dagger als Vernichtern a irrelevant, da $a|0\rangle = |0\rangle$.

$$\begin{aligned} H &= \underbrace{\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2}_{H_0} + \underbrace{\lambda \hbar\omega \left(\frac{x}{l}\right)^3}_{H_1} \\ \Rightarrow E_n(\lambda) &= \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) + \lambda \frac{\hbar\omega}{l^3} \langle n|x^3|n\rangle - \lambda^2 \hbar^2 \omega^2 \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m|\frac{x^3}{l^3}|n\rangle|^2}{\hbar\omega} \\ \Rightarrow E_0(\lambda) &= \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) + \underbrace{\lambda \frac{\hbar\omega}{l^3} \langle 0|x^3|0\rangle}_{=0} - \lambda^2 \hbar^2 \omega^2 \sum_{m \neq 0} \frac{|\langle m|\frac{x^3}{l^3}|0\rangle|^2}{\hbar\omega} \end{aligned}$$

9.1.5 Entartete Zustände

Sei der Zustand mit Energie E_l g -fach entartet, d.h. es gibt g Teilchen im Zustand $|l\rangle$. Dann gibt es einen g -dimensionalen Eigenraum $\mathcal{H}_l \subset \mathcal{H}$, sodass für alle enthaltenden Zustände $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}_l$ die Eigenwertgleichung $H_0|\Psi\rangle = E_l|\Psi\rangle$ gilt.

Eine Orthonormalbasis, bei der für verschiedene Basisvektoren $h \neq l$ das Skalarprodukt mit der Störung $\langle \varphi_h|H_1|\varphi_l\rangle = 0$ verschwindet und $\langle \varphi_h|\varphi_l\rangle = \delta_{hl}$, ist für die Störungstheorie ist eine besonders gut geeignet. Diese kann durch eine Projektion auf \mathcal{H}_l beschrieben werden, indem $\tilde{H}_1 = P_l H_1 P_l$ den in die entsprechende Basis transformierten Hamiltonoperator beschreibt.

Nichtentartete Zustände $|n\rangle \neq |l\rangle$ sind senkrecht zu den Basisvektoren $|\varphi_k\rangle$ ($\langle \varphi_k|n\rangle = 0$). Analog zu den nicht-entarteten Zuständen liefert die Potenzreihenentwicklung mit anschließendem Koeffizientenvergleich folgende Relationen mit $j \in \{1, \dots, g\}$.

$$E_{l,j}(\lambda) = E_l + \lambda \langle \varphi_j | H_1 | \varphi_j \rangle + \sum_{m \neq l} \frac{|\langle m | H_1 | \varphi_j \rangle|^2}{E_l - E_m} + \mathcal{O}(\lambda^3)$$

$$E_{n \neq j}(\lambda) = E_n + \lambda \langle n | H_1 | n \rangle + \sum_{m \neq n \neq l} \frac{|\langle m | H_1 | n \rangle|^2}{E_n - E_m} + \sum_{j=1}^g \frac{|\langle \varphi_j | H_1 | n \rangle|^2}{E_n - E_l} + \mathcal{O}(\lambda^3)$$

Der Zeemann-Effekt ist ein Beispiel für Störungen mit entarteten Zuständen.

9.2 Zeitabhängige Störungstheorie

9.2.1 Zeitabhängige Störungen

Im Unterschied zur zeitunabhängigen Störungstheorie wird nun angenommen, dass die Störung in der Zeit variabel ist. Dies wird durch ein zeitabhängiges Potential $V(t)$ beschrieben. Die Dynamik des gestörten Systems soll nun in Bezug auf die ungestörte Dynamik von H_0 mit den Energieeigenwerten E_n und Zuständen $|n\rangle$ bestimmt werden.

$$H(t) = H_0 + V(t)$$

Zeitentwicklungsoperator $U_0(t)$ Der Zeitentwicklungsoperator $U_0(t)$ für das ungestörte System mit dem Hamiltonoperator H_0 lautet folgendermaßen.

$$U_0(t) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} H_0 t \right]$$

9.2.2 Übergangswahrscheinlichkeit

Beispielsweise sei ein System zum Zeitpunkt $t = 0$ im H_0 -Eigenzustand $|n\rangle$. Dann gibt die Übergangswahrscheinlichkeit $P_{nm}(t) = |\langle m | n \rangle|^2$ die Wahrscheinlichkeit an, dass sich das System zum Zeitpunkt t im ungestörten Zustand $|m\rangle$ befindet.

Falls $V(t) = 0$ verschwindet, ist die Übergangswahrscheinlichkeit $P_{nm}(t) = 0$ ebenfalls nichtexistent. Ansonsten muss die folgende Schrödingergleichung gelöst werden, um den Zustand zu bestimmen. Hierbei ist $U_0(t)$ der Zeitentwicklungsoperator des ungestörten Systems.

$$i\hbar |\dot{\Psi}(t)\rangle = (H_0 + V(t)) |\Psi(t)\rangle$$

$$\Rightarrow |\Psi(t)\rangle = U_0(t) |\Psi(0)\rangle$$

Den ersten Korrekturterm für die Übergangswahrscheinlichkeit $P_{nm}^{(1)}$ kann man über die Definition $P_{nm}^{(1)}(t) = |\langle m | \Psi(t) \rangle|^2$ berechnen, wobei $|m\rangle$ ein ungestörter Zustand ist und $|\Psi(t)\rangle_I^{(1)}$ der Störungszustand im Wechselwirkungsbild in erster Ordnung. $U_0(t)$ ist der Zeitentwicklungsoperator des ungestörten Systems. Da $|\Psi(t)\rangle = U_0(t) |\Psi(t)\rangle_I = |\Psi(t)\rangle_I^{(1)}$ folgt die Relation für die Übergangswahrscheinlichkeit in erster Ordnung.

$$P_{nm}^{(1)} = |\langle m | \Psi(t) \rangle_I^{(1)}|^2$$

$$P_{nm}^{(1)} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t dt' \exp \left[\frac{i}{\hbar} (E_m - E_n) t' \right] \langle m | V(t') | n \rangle \right|^2$$

9.2.3 Wechselwirkungsbild

Mittels des Wechselwirkungsbildes wird die ungestörte H_0 -Dynamik von der störenden $V(t)$ -Dynamik getrennt.

Hierzu sei $|\Psi(t)\rangle$ ein Zustand im ungestörten Schrödingerbild, das die Schrödingergleichung $i\hbar |\dot{\Psi}(t)\rangle = (H_0 + V(t)) |\Psi(t)\rangle$ löst. Dann sei $|\Psi(t)\rangle_I$ ein Zustand im Wechselwirkungsbild, $U_0^\dagger(t)$ ist der adjungierte Zeitentwicklungsoperator des ungestörten Systems.

$$|\Psi(t)\rangle_I = U_0^\dagger(t) |\Psi(t)\rangle = \exp \left[+i \frac{H_0}{\hbar} t \right] |\Psi(t)\rangle$$

Ohne Störung ($V(t) = 0$) gilt mit dem Zeitentwicklungsoperator $U_0(t)$ die Relation $|\Psi(t)\rangle_I = U_0(t) |\Psi(0)\rangle$.

Die Störungstheorie kann durch iteratives Lösen der Schrödingergleichung im Wechselwirkungsbild gelöst werden.

9.2.4 Operatoren im Wechselwirkungsbild

Ein Operator $V(t)$ kann in das Wechselwirkungsbild transformiert werden. Diese Transformation erzeugt $V_I(t)$ und ist folgendermaßen definiert.

$$V_I(t) = U_0^\dagger(t) V_0(t) U_0(t)$$

$$V_I(t) = \exp \left[+i \frac{H_0}{\hbar} t \right] V_0(t) \exp \left[-i \frac{H_0}{\hbar} t \right]$$

9.2.5 Schrödingergleichung im Wechselwirkungsbild

Damit muss $|\Psi(t)\rangle_I$ der Schrödingergleichung im Wechselwirkungsbild genügen. Hieran sieht man, dass die Dynamik von $|\Psi(t)\rangle_I$ durch das Bild der Störung $V_I(t)$ beschrieben.

$$i\hbar |\dot{\Psi}(t)\rangle_I = V_I(t) |\Psi(t)\rangle_I$$

9.2.6 Störungstheorie in n -ter Ordnung

Der Störungszustand in n -ter Ordnung wird durch die Wirkung der Störung auf den Störungszustand $n-1$ -ter Ordnung beschrieben. In 0-ter Ordnung gilt $i\hbar |\dot{\Psi}(t)\rangle_I^{(0)} = 0$, in 1-ter Ordnung gilt $i\hbar |\dot{\Psi}(t)\rangle_I^{(1)} = V_I(t) |\Psi(t)\rangle_I^{(0)}$ et cetera.

$$\begin{aligned}
|\Psi(t)\rangle_I^{(0)} &= |\Psi(0)\rangle \\
\Rightarrow |\Psi(t)\rangle_I^{(1)} &= |\Psi(t)\rangle^{(0)} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_I(t') |\Psi(0)\rangle \\
\Rightarrow |\Psi(t)\rangle_I^{(2)} &= |\Psi(t)\rangle^{(0)} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_I(t') |\Psi(0)\rangle + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' V_I(t') V_I(t'') |\Psi(0)\rangle
\end{aligned}$$

9.2.7 Fermis goldene Regel

Sei $V(t)$ eine Störung, die mit der Frequenz ω oszilliert.

$$V(t) = u \exp[i\omega t] + u^\dagger \exp[-i\omega t]$$

Falls $u = u^\dagger = \frac{V_0}{2}$, dann ist $V(t) = V_0 \cos(\omega t)$. Damit ist die Eigenenergie $E_x(t) = E_0 \cos(\omega t)$, wodurch der Operator V als $V(t) = -qE_0 \hat{x} \cos(\omega t)$ dargestellt wird.

Mit der Störungstheorie erster Ordnung wird die Übergangswahrscheinlichkeit $P_{nm}(t)$ gesucht.

Genau dann, wenn die Frequenz ω der Störung der Frequenz der Energiedifferenz $\frac{E_m - E_n}{\hbar}$ entspricht, gibt es eine Resonanz mit der Übergangsrate $\Gamma_{nm} = \frac{2\pi}{\hbar} |u_{nm}|^2 \delta(E_m - E_n - \omega\hbar)$.

$$\Gamma_{nm} = \frac{2\pi}{\hbar} [|u_{nm}|^2 \delta(E_m - E_n - \omega\hbar) + |u_{mn}|^2 \delta(E_m - E_n + \omega\hbar)]$$

Dies wird auch als *Fermis goldene Regel* bezeichnet, auch wenn Pauli diese Regel früher erkannte.

9.2.7.1 Physikalische Interpretation Seien Energieniveaus bei $E_m > E_n$ mit der Differenz $E_m - E_n = \hbar\omega$. Bei der spontanen Absorption eines Photons der Energie $\hbar\omega$ wechselt ein Elektron vom Zustand $|n\rangle$ in den Zustand $|m\rangle$. Bei der induzierten Emission eines Photons wechselt ein Elektron vom Zustand $|n\rangle$ in den energieärmeren Zustand $|n\rangle$.

Erst durch die Existenz eines äußeren Feldes wird der Wechsel von Elektronen zwischen Energieniveaus angeregt. In Isolation sind alle erreichbaren Niveaus Eigenzustände.

9.2.7.1.1 Laser Bei einem Laser werden Zustände erzeugt, bei denen möglichst viele Elektronen in Zuständen $|n\rangle$ sitzen. Dann kann eine passende Elektromagnetische Welle die Elektronen auf Zustände $|m\rangle$ anregen. Dann kann man die Emission von Photonen induzieren.

Man kann auch beweisen, dass auch die Phase der emittierten Photonen gleich ist. Dies kann man mit kohärenten Zuständen erklären.

10 9. Unbestimmtheitsrelationen

10.1 Heisenberg'sche Unbestimmtheit

Heisenberg hat deutlich kompliziertere Überlegungen als das, was heutzutage normalerweise als Heisenberg'sche Unbestimmtheitsrelationen bezeichnet wird. Es ging darum, Elektronen zu messen. Dazu würden Gamma-Quanten benötigt, aber eine Messung beeinflusst das gemessene Elektron durch den Compton-Effekt. Je genauer der Ort x bestimmt werden soll, desto größer ist die Impulsungenauigkeit Δp des Elektrons *nach* der Messung. Hierbei werden x und p nacheinander im selben System gemessen, die Systeme sind demnach nicht unabhängig.

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

10.2 Unbestimmtheit von Messungen

Wird eine Observable A im Zustand $|\Psi\rangle$ gemessen, so kann man den Erwartungswert $\langle A \rangle_\Psi = \langle \Psi | A | \Psi \rangle$ berechnen. Die Standardabweichung $\Delta A_\Psi = (A - \langle A \rangle_\Psi)$ ist ebenfalls eine Observable, die die Wurzel der Varianz $(\Delta A_\Psi)^2 = \langle (A - \langle A \rangle_\Psi)^2 \rangle_\Psi$ ist.

Nach dem Messpostulat kann man einzelne Zustände mit einer bestimmaren Wahrscheinlichkeit messen. Durch wiederholte Messungen kann man den Erwartungswert genauer bestimmen. Allerdings zeigt sich, dass die Varianz nicht beliebig genau gemessen werden kann.

Das Produkt zweier Varianzen ΔA_Ψ und ΔB_Ψ von zwei Observablen A und B kann nicht kleiner werden, als der halbe Betrag des Erwartungswertes des Kommutators $[A, B]$ der Operatoren A und B . Dazu müssen die Messungen von A und B an unabhängigen Systemen im gleichen Zustand Ψ gemessen werden.

$$\Delta A_\Psi \Delta B_\Psi \geq \frac{1}{2} |\langle i[A, B] \rangle_\Psi|$$

10.2.1 Beweis

Seien A und B Observablen, die durch hermitesche Operatoren dargestellt werden und sei $x \in \mathbb{R}$. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit seien die Erwartungswerte von A und B $\langle A \rangle_\Psi = \langle B \rangle_\Psi = 0$.³

$$\begin{aligned} 0 &\leq \| (A + iBx) |\Psi\rangle \|^2 \\ &= \langle \Psi | (A - iBx)(A + iBx) | \Psi \rangle \\ &= \langle A^2 \rangle_\Psi + x^2 \langle B^2 \rangle_\Psi + ix \langle AB - BA \rangle_\Psi \\ &= \Delta A_\Psi^2 + \Delta B_\Psi^2 + x \langle i[A, B] \rangle \\ &=: a^2 + b^2 + x \cdot c \end{aligned}$$

³Falls dies nicht der Fall ist, kann man Wertebereich um den entsprechenden Erwartungswert verschieben, um diesen Zustand zu erreichen.

Da $\langle A \rangle_\Psi = 0$ gilt $\langle A^2 \rangle_\Psi = \Delta A_\Psi^2$. $c \in \mathbb{R}$ ist genau dann reell, wenn $i[A, B]$ hermitesch ist.

$$\begin{aligned} i[A, B] &= (i[A, B])^\dagger \\ &= (iAB - iBA)^\dagger \\ &= -i(AB)^\dagger + i(BA)^\dagger \\ &= -iBA + iAB \\ &= i[A, B] \end{aligned}$$

Durch quadratische Ergänzung kann die Gleichung $0 \leq a^2 + b^2 + xc$ zu $a^2 b^2 \geq \frac{c^2}{4}$ umgeformt werden, wenn $x = \frac{c}{2b^2}$ gewählt wird. Durch diese Wahl von x kann es aus der Gleichung eliminiert werden. Daraus folgt die Unschärferelation.

10.2.2 Orts- und Impulsungenauigkeit

In diesem Fall ist $A = \hat{x}$ und $B = \hat{p}$, der Kommutator ist $[x, p] = i\hbar$. A und B werden in unabhängigen Systemen im Zustand Ψ gemessen.

$$\Delta x_\Psi \Delta p_\Psi \geq \frac{1}{2} \hbar$$

Das Ergebnis sieht aus wie Heisenbergs Formulierung, in seiner Betrachtung werden jedoch x und p im selben System nacheinander gemessen, die Messungen sind also nicht unabhängig.

10.3 Das Variationsprinzip

Mithilfe der Unabhängigkeitsrelationen kann man beispielsweise die Energie eines Zustands abschätzen.

10.3.1 Freies Teilchen in einer Dimension

Sei ein Teilchen im Zustand $|\Psi\rangle$ in einer Dimension. Im Ortsraum gilt $\Psi(x) = \langle \varphi_x | \Psi \rangle$.

$$\begin{aligned} \Psi(x) &= \frac{1}{\sqrt[4]{\pi\sigma^2}} \exp\left[-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right] \\ \Rightarrow \langle x \rangle_\Psi &= 0 \\ \Rightarrow \Delta x_\Psi &= \frac{\sigma}{\sqrt{2}} \end{aligned}$$

Die Unbestimmtheitsrelation fordert, dass $\Delta p_\Psi \geq \frac{\hbar}{2\Delta x_\Psi} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}\sigma}$. Im Impulsraum gilt $\tilde{\Psi}(p) = \langle \tilde{\varphi}_k | \Psi \rangle$.

$$\begin{aligned} \tilde{\Psi}(k) &\propto \frac{1}{\sqrt[4]{\pi\sigma^{-2}}} \exp\left[-\frac{k^2\sigma^2}{2}\right] \\ \Rightarrow \Delta p_\Psi &= \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\hbar}{\sigma} \end{aligned}$$

Durch die konkrete Rechnung wurde die untere Grenze von Δp_Ψ bestimmt, die von der Unbestimmtheitsrelation gefordert ist.

10.3.2 Abschätzung der Grundzustandsenergie

Sei ein Teilchen in einem Potentialkasten der Länge L . Nun soll die Grundzustandsenergie E_0 durch die Unbestimmtheitsrelation ermittelt werden.

Die Unbestimmtheit des Ortes ist näherungsweise die Länge des Kastens ($\Delta x_{\Psi_0} \stackrel{!}{\approx} L$). Die Unbestimmtheitsrelation fordert $\Delta p_\Psi \geq \frac{\hbar}{2\Delta x_\Psi} = \frac{\hbar}{2L}$. Damit folgt $E_0 = \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle_{\Psi_0}$, was $E_0 = \frac{1}{2m}(\Delta p_{\Psi_0})^2 \geq \frac{\hbar^2}{8mL^2}$ ergibt. Die genaue Rechnung ergibt $E_0 = \frac{\pi^2}{2} \frac{\hbar^2}{mL^2}$, was einen Faktor $4\pi^2$ größer als die untere Grenze der Abschätzung ist.

Dies ist in der Festkörperphysik relevant. Beispielsweise erklärt dies, warum die Metallbindung energetisch sinnvoll ist.

10.3.3 Bohr-Radius des Wasserstoffatoms

Der Bohr-Radius a_0 eines Wasserstoffatoms im Grundzustand kann ebenfalls mithilfe der Unbestimmtheit abgeschätzt werden.

Hierzu wird das Potential $V(x) = -\frac{e^2}{|x|}$ angenommen, was eine Darstellung des Coulomb-Potentials in Einheiten von $4\pi\epsilon_0 = 1$ ist. Die Unbestimmtheit des Ortes wird als $\Delta x = a$ definiert. Dadurch ist der Erwartungswert der potentiellen Energie $-\frac{e^2}{a}$. Der Erwartungswert der kinetischen Energie kann durch $\frac{\Delta p^2}{2m}$ angenähert werden. Aus der Ungenauigkeitsrelation folgt $\Delta p \leq \frac{\hbar^2}{a^2}$, was zu einem Gesamtpotential von $E(a) = \frac{\hbar^2}{2ma} - \frac{e^2}{a}$ führt. Wird dieses nach a hin minimiert, erhält man den Bohr-Radius $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$.

10.3.4 Ideale Messung eines freien Teilchens

Sei der Ort eines freien Teilchens im Zustand $|\Psi\rangle$ in einer idealen Messung festgestellt worden. Nun soll die Impulsunschärfe abgeschätzt werden. Bei einer idealen Ortsmessung gilt $\Delta x = 0$, da das Teilchen danach im Zustand präpariert ist. Durch die Unschärfe folgt, dass $\Delta p = \infty$ divergiert.

Nach der Ortsmessung ist das Teilchen im Eigenzustand $|\Psi'\rangle = |\varphi_{x_0}\rangle$ mit $\varphi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0)$. Um die Unschärfe des Impulses zu bestimmen, muss $\tilde{\Psi}'(k)$ als Fouriertransformierte von $\varphi_{x_0}(x)$ ermittelt werden. Die Fouriertransformierte einer Delta-Funktion ist eine konstante Funktion, demnach ist $\Delta p = \infty$.

10.3.5 Unschärfe Messung eines freien Teilchens

Der Ort eines freien Teilchens im Zustand $|\Psi\rangle$ in einer idealen Messung festgestellt werden, die durch die Unschärfe $\Delta x = L$ beschränkt ist. Dies kann man realisieren, indem man im Abstand L Potentialbarrieren errichtet, zwischen denen das Teilchen gefangen wird. Damit kann gemessen werden, in welchem Intervall das Teilchen ist.

Nach der Messung ist der Erwartungswert $\langle x \rangle_\Psi = x_n + \frac{L}{2}$ mit der Unschärfe $\Delta x_\Psi = L$. Der Erwartungswert des Impulses verschwindet ($\langle p \rangle_\Psi = 0$), dessen Unschärfe ist $\Delta p_\Psi = \frac{\hbar^2 \pi^2}{L^2}$. Daraus folgt $\Delta x_\Psi \Delta p_\Psi = \hbar \pi$, was die Unbestimmtheitsrelation erfüllt.

10.3.6 Kommutierende Observablen

Seien A und B Observablen, deren Operatoren kommutieren ($[A, B] = 0$). Daraus folgt aus der Unschärferelation $\Delta A_\Psi \Delta B_\Psi \geq 0$. Dies ist keine sinnvolle Aussage, da die Standardabweichung immer nicht-negativ ist.

Für beliebige Zustände $|\Psi\rangle$ sind die Unschärfen nicht-null. Dennoch gibt es Zustände, die exakt gemessen werden. Sei $|a_n\rangle$ ein Eigenzustand von A , dann ist $\langle A \rangle_{|a_n\rangle} = a_n$ mit $\Delta A_{|a_n\rangle} = 0$.

Es gibt auch Zustände $|\Psi\rangle$, die zeitgleich Eigenzustände von A und B sind.

Seien A und B hermitesche Operatoren. Genau dann, wenn sie kommutieren ($[A, B] = 0$), dann gibt es eine gemeinsame Eigenbasis $|\varphi_n\rangle$ für beide Operatoren.

10.3.6.1 Beweis

10.3.6.1.1 \Leftarrow Stelle A und B in der Spektraldarstellung mit denselben Eigenzuständen dar. Dann ist es offensichtlich, dass A und B kommutieren.

10.3.6.1.2 \Rightarrow Seien $|a_n\rangle$ und $|b_n\rangle$ eine Eigenbasis von A respektive B . Seien weiterhin die Zustände von B nicht entartet ($\forall n \neq m : b_n \neq b_m$).

Da $[A, B] = 0$ gilt $BA|b_n\rangle = AB|b_n\rangle = b_n A|b_n\rangle$. Daher ist $A|b_n\rangle$ ein Eigenvektor von B zum Eigenwert b_n von B . Da die Zustände nicht entartet sind, gibt es $\lambda \in \mathbb{C}$ mit $A|b_n\rangle = \lambda|b_n\rangle$. Damit ist $|b_n\rangle$ auch ein Eigenvektor von A . Da dies für alle $|b_n\rangle$ gilt und alle $|b_n\rangle$ eine Orthonormalbasis von B bilden, bilden sie auch eine Orthonormalbasis von A .

Falls B entartete Zustände besitzt ($\exists n \neq m : b_n = b_m$), kann $|a_n\rangle$ als Linearkombinationen von Vektoren aus dem Spektrum von B dargestellt werden. Auf diese Weise lässt sich der Satz beweisen.

11 10. Drehimpuls

11.1 Quantenmechanischer Drehimpuls

Ein Drehimpuls \vec{J} ist ein Erzeuger einer Rotation $R_{\vec{n}, \varphi}$ um eine Achse \vec{n} und einen Winkel φ . Sie erfüllen daher die Vertauschungsrelation $[J_i, J_k] = i\hbar \varepsilon_{ikl} J_l$. Dies kann als Transformationsoperator $U(R_{\vec{n}, \varphi})$ repräsentiert werden.

$$J_i = i\hbar \left. \frac{\partial}{\partial \varphi} U(R_{i, \varphi}) \right|_{\varphi=0}$$

$$U(R_{\vec{n}, \varphi}) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (\hat{\vec{J}} \cdot \vec{n}) \varphi \right]$$

Daraus folgt, dass der Kommutator von zwei Drehimpulskomponenten die dritte Drehimpulskomponente ergibt, also $[J_i, J_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}J_k$. Da das Betragsquadrat J^2 eine Erhaltungsgröße ist, ist es insbesondere invariant unter Rotation um eine Achse i . Daher verschwindet der Kommutator $[J^2, J_i] = 0$. Dies gilt sowohl für den Bahndrehimpulsoperator \hat{L} , als auch für den Spinoperator \hat{S} und den Gesamtdrehimpulsoperator $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$.

Der Spin ist der Eigendrehimpuls und kann nur einen von zwei Werten annehmen. Der Spinhilbertraum $\mathcal{H}_{\text{Spin}}$ ist zweidimensional, jeder Spin lässt sich daher durch eine Linearkombination von up $|\uparrow\rangle$ und down $|\downarrow\rangle$ dargestellt werden.

Im Unterschied dazu wird die Basis des Ortshilbertraumes \mathcal{H}_{Ort} durch den gesamten dreidimensionalen Raum aufgespannt. Dadurch wird der Gesamtdrehimpulsoperator auf Zuständen im Hilbertraum $\mathcal{H}_{\text{Ort}} \otimes \mathcal{H}_{\text{Spin}}$ wirken. Daher gilt auch $U(R_{\vec{n},\varphi}) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(\hat{L} \cdot \vec{n})\varphi\right] \otimes \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(\hat{S} \cdot \vec{n})\varphi\right]$.

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{\text{Spin}} &= \text{Span}\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\} \subseteq \mathbb{C}^2 \\ \mathcal{H}_{\text{Ort}} &= \text{Span}\{|\vec{r}\rangle\}_{\vec{r} \in \mathbb{R}^3} \\ \mathcal{H}_{\text{Ort}} \otimes \mathcal{H}_{\text{Spin}} &= \text{Span}\{|\vec{r}, \uparrow\rangle, |\vec{r}, \downarrow\rangle\}_{\vec{r} \in \mathbb{R}^3}\end{aligned}$$

Die Eigenschaften der drei Impulsoperatoren ergeben sich durch die Eigenschaften der räumlichen Rotation. Dies wird mathematisch durch die spezielle orthogonale Gruppe $\text{SO}(3)$ dargestellt und berechnet.

11.2 Teilchen im dreidimensionalen Raum

Betrachtet werde ein Teilchen im dreidimensionalen Raum. Damit ist Ortsoperator $\hat{\vec{r}}$ ein dreidimensionaler Vektor mit den Komponenten \hat{x}_i , wobei die Achsen miteinander kommutieren ($[x_i, x_j] = 0$). Die gemeinsamen Eigenzustände $|\varphi_{\vec{r}}\rangle = |\vec{r}\rangle \in \mathbb{R}^3$ sind durch die Eigenwertgleichungen $\hat{x}_i |\vec{r}\rangle = x_i |\vec{r}\rangle$ definiert.

Wie auch im eindimensionalen Fall sind verschiedene Eigenzustände orthogonal zueinander ($\langle \vec{r}' | \vec{r} \rangle = \delta(\vec{r}' - \vec{r})$). Ebenso ist die Vollständigkeit analog definiert ($\int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{r} |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}| = \mathbb{1}$), wie auch die Wellenfunktion $\Psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \Psi \rangle$ für einen Zustand $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$.

Der Drehimpulsoperator wird analog durch $\hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla$ dargestellt.

11.3 Eigenzustände & Drehimpulsquantenzahlen

Da durch die Vertauschungsrelationen insbesondere J^2 und J_3 kommutieren ($[J^2, J_3] = 0$), haben beide Operatoren eine gemeinsame Eigenbasis $|a, b\rangle$ mit $J^2 |a, b\rangle = a |a, b\rangle$ und $J_3 |a, b\rangle = b |a, b\rangle$.

$$\begin{aligned}J_+ &= J_1 + iJ_2 \\ J_- &= J_1 - iJ_2\end{aligned}$$

Durch die zueinander adjunkten Operatoren J_{\pm} , die den Aufsteiger- und Absteigeroperatoren des harmonischen Oszillators ähneln. Auch die Vertauschungsrelationen $[J_3, J_{\pm}] = \hbar J_{\pm}$ und $[J^2, J_{\pm}] = 0$ sind ähnlich. Dadurch kann man die Eigenwerte algebraisch ausrechnen. Daher gilt für einen beliebigen Eigenzustand von J_3 b_0 , dass man mit J_{\pm} benachbarte Eigenzustände $J_{\pm} |a, b_0\rangle = |a, b_0 \pm 1\rangle$ ermittelt.

Der Operator $J^2 - J_3^2 \geq 0$ muss positive Eigenwerte haben. Dadurch werden die Eigenwerte von J_3 durch die von J^2 beschränkt. Daher gibt es einen maximalen Eigenwert b_{\max} , sodass $J_+ |a, b_{\max}\rangle = 0$ unverändert bleibt. Analog gibt es auch einen minimalen Eigenwert b_{\min} . Dadurch ist auch $J_- J_+ |a, b_{\max}\rangle = 0$. Es gilt $J_- J_+ = J^2 - J_3^2 - \hbar J_3$, daraus folgt $(J^2 - J_3^2 - \hbar J_3) |a, b_{\max}\rangle = 0$, was äquivalent zu der Forderung $a = b_{\max}(b_{\max} + \hbar)$ führt. Gleichzeitig gilt auch $a = b_{\min}(b_{\min} - \hbar)$, was durch eine analoge Rechnung bewiesen ist. Daher muss $b \equiv b_{\max} = -b_{\min}$ gelten. Der Abstand zwischen den Grenzen muss ein Vielfaches von \hbar sein, daher gilt $2b = n\hbar$ (mit $n \in \mathbb{N}$).

Daraus ergeben sich Eigenwerte zu J^2 als $a = \hbar^2 \frac{n}{2}(\frac{n}{2} + 1)$ und zu J_3 als $b_{\max} = \hbar \cdot \frac{n}{2}$. Nun wird $j \equiv \frac{n}{2}$ als **Drehimpulsquantenzahl** bezeichnet. Da $b \in [-\frac{n\hbar}{2}, +\frac{n\hbar}{2}]$ ebenfalls in ganzzahligen Vielfachen von \hbar quantisiert ist, kann es durch eine Quantenzahl $m = -j, \dots, j$ beschrieben werden. m heißt **magnetische Quantenzahl**, weil sie für magnetische Effekte wie den Zeemann-Effekt relevant ist.

Damit sind die Eigenzustände und Eigenwerte durch folgende Relationen definiert.

$$\begin{aligned} J^2 |j, m\rangle &= \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle \\ J_3 |j, m\rangle &= \hbar m |j, m\rangle \end{aligned}$$

11.4 Eigendrehimpuls / Spin

Der Spinoperator erfüllt die Relation $[S_i, S_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} S_k$, ebenso die anderen Relationen des Gesamtdrehimpulses \vec{J} . Daraus folgt, dass die Komponenten S_i des Spinvektors durch die Paulimatrizen σ_i darzustellen sind. Die Eigenwerte der Spinkomponenten S_i sind allesamt $\pm \frac{\hbar}{2}$. Wie beim Stern-Gerlach-Experiment werden die Eigenzustände in der Eigenbasis einer Spinkomponente - hier $|z\pm\rangle$ - dargestellt.

$$\begin{aligned} \vec{S} &= \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \\ |x\pm\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix} \\ |y\pm\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix} \\ |z+\rangle &= |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ |z-\rangle &= |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Dadurch können die Eigenzustände und Eigenwerte allgemein bestimmt ebenso wie es der Gesamtdrehimpuls erfordern und der Transformationsoperator U_{spin} kann dadurch explizit angegeben werden.

$$\begin{aligned} U_{\text{Spin}}(R_{\vec{n},\varphi}) &= \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (\hat{\vec{S}} \cdot \vec{n}) \varphi \right] \\ &= \exp \left[-i \vec{n} \vec{\sigma} \frac{\varphi}{2} \right] \\ U_{\text{Spin}}(R_{\vec{n},\varphi}) &= \mathbb{1} \cos \left[\frac{\varphi}{2} \right] - i \vec{n} \vec{\sigma} \sin \left[\frac{\varphi}{2} \right] \end{aligned}$$

Durch den Term $\frac{\varphi}{2}$ wird eine Drehung um 2π die Rotation $U(R_{\vec{n},2\pi}) = -1$. Dies unterscheidet sich von der klassischen Rechnung, da der Spin dabei gespiegelt wird. Eine Drehung von 4π ergibt dagegen eine wirklich komplette Drehung. Tatsächlich ist eine Drehung um 2π auch im klassischen Fall unterschiedlich zu einer Drehung von 4π .

Um diesen Faktor -1 zu kompensieren, muss die Wellenfunktion von Fermionen (mit halbzahligem Spin) antisymmetrisch sein. Daraus folgt das Pauliprinzip für Fermionen.

11.4.1 Rotation im Stern-Gerlach-Experiment

Sei ein Strahl Silberatome im Stern-Gerlach-Experiment auf den Zustand $|z+\rangle$ präpariert. Sei nun ein zweiter Magnet im Winkel φ zum ersten Magneten aufgebaut. Dann ist der finale Up-Zustand $|z+\rangle = U(R_{\vec{n},\varphi}) |z+\rangle$. Dann folgt die Wahrscheinlichkeit den Zustand $|z+\rangle$ zu messen $P_+ = |\langle z+ | z+\rangle|^2 = |\cos(\frac{\varphi}{2})|^2$. Bei einer Drehung um 30° ist $P_+(30^\circ) \approx 93\%$.

11.4.2 Beispiel: Spin des Elektrons

Der Eigenwert des Elektronenspins beträgt immer $\pm \frac{\hbar}{2}$, insbesondere gilt $S_3 |z\pm\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} |z\pm\rangle$. Dadurch ist die magnetische Quantenzahl $m = \pm \frac{1}{2}$. Da j die Grenzen der gültigen m definiert, muss $j = s = \frac{1}{2}$ gelten. Dies wird als Spin bezeichnet.

Da $s = \frac{1}{2}$ nennt man Elektronen “Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen” oder Fermionen.

11.5 Bahndrehimpuls

Für den Bahndrehimpuls gilt die klassische Relation $\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}$, zudem gelten die Relationen des Gesamtdrehimpulses \vec{J} .

12 Literatur

1. (Sakurai 2020)
Sakurai, Jun John. 2020. *Modern Quantum Mechanics*. 3rd ed. Cambridge University Press.