

Quantenmechanik

Oliver Filla

22.06.2023

Contents

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

4.3.1	1. Messung von Zuständen	8
4.3.2	2. Bornsche Regel	8
4.3.3	3. ideale Messung	9
4.4	Indeterminismus	9
4.5	3. Postulat: Dynamik	9
5	Zweizustandssysteme	9
5.1	Bohr-Sommerfeldsches Atommodell	9
5.1.1	Zeemann-Effekt	9
5.2	Das Stern-Gerlach-Experiment	9
5.2.1	Observable	10
5.3	Schrödingergleichung	10
5.3.1	Hamiltonfunktion	11
5.3.2	Poisson-Klammer	11
5.3.3	Herleitung der Schrödingergleichung	11
5.4	Hamiltonoperator	11
5.4.1	Hamiltonoperator eines freien Punktteilchens	12
5.4.1.1	Energie-Impuls-Relation	12
5.5	Zeitentwicklungsoperator	12
5.5.1	Spektraldarstellung / Energiedarstellung	12
5.5.2	Operatoren	13
5.6	Erhaltungsgrößen	13
5.6.1	Stabilität von Eigenzuständen	13
5.6.2	Quantenschwebung	13
5.7	Lamorpräzession	13
5.7.1	Klassische Präzession	13
5.7.2	Lamorpräzession: Präzession des magnetischem Moments	14
6	Quantenmechanik eines Punktteilchens	14
6.1	Ortsoperator	14
6.2	Impulsoperator	14
6.3	Ortsdarstellung und Impulsdarstellung	15
6.4	Translationsoperator	15
6.5	Kontinuitätsübergang	15
6.5.1	Komponentendarstellung	16
6.5.1.1	Skalarprodukt in Komponentendarstellung	16
6.6	Translationssymmetrie und Impulserhaltung	16
6.7	Hamiltonoperator eines Punktteilchens	16
6.7.1	Hamiltonoperator eines freien Punktteilchens	16
6.7.2	Hamiltonoperator eines Punktteilchens	17
6.8	Schrödingergleichung eines Punktteilchens	17
6.8.1	Schrödingergleichung eines freien Punktteilchens	17
6.8.2	allgemeine Schrödingergleichung eines Punktteilchens	17
6.8.3	Stationäre Schrödingergleichung	17
6.9	Quanten-Zeno-Effekt	18
7	Modellsysteme	18
7.1	Gebundene Eigenenergiezustände	18
7.2	Potentialkasten	18
7.2.1	Unendlicher Potentialkasten	19

7.3	Doppelkastenpotential	19
7.3.1	symmetrische Zustände	19
7.3.2	antisymmetrische Zustände	20
7.3.3	Niveaufenspaltung	20
7.3.4	Superposition	21
7.3.5	Dipolmoment	21
7.4	Reflektion und Transmission an einer Potentialbarriere	21
7.4.1	Tunneleffekt	21
7.4.2	Potentialbarriere	21
7.4.3	Streuansatz	22
7.4.4	Anschlussbedingungen	22
7.4.5	Reflektions- und Transmissionswahrscheinlichkeit	22
7.4.6	Wahrscheinlichkeitsstromdichte	22
7.4.7	Kastenförmige Potentialbarriere	23
7.4.7.1	Lösung der Anschlussbedingungen	23
7.4.8	Gamow-Näherung	24
7.4.9	Streuung an einem Potentialtopf	24
8	Literatur	25

1 Disclaimer

2 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.

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*.

¹z.B: elektrische Leitfähigkeit und Wärmekapazität

3 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 werden, 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 $[A, B] = AB - BA$.

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

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

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

3.7.1 Euler-Identität

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

$\cosh[i\alpha] = \cos[\alpha]$ und $\sinh[i\alpha] = i \sin[\alpha]$

4 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 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:

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

5.2.1 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 sich 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 $H(\vec{x}, \vec{p}, t)$ 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 $\Psi(t) = \exp[-\frac{i}{\hbar} H t] \Psi(0)$ gelöst wird, ist es sinnvoll, dies durch einen Operator auszudrücken. Der Zeitentwicklungsoperator $U(t)$ ist wie folgt definiert:

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

$U(t)$ 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 Larmorpräzession

5.7.1 Klassische Präzession

Ein symmetrischer Kreisel mit einer Winkelgeschwindigkeit $\vec{\omega} = \omega \hat{n}$ und der Länge l hat ein Drehmoment von $\vec{M} = -ml\vec{g} \times \hat{n}$, 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 Quantenmechanik eines Partikels

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.

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.

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

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 betrachtet, 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

$$\mathcal{H} \ni |\Psi\rangle = \mathbb{1} |\Psi\rangle = \sum_i |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i | \Psi \rangle \Psi_i = \langle \varphi_i | \Psi \rangle \Rightarrow |\Psi\rangle = \sum_i \Psi_i |\varphi_i\rangle \Psi(x) = \langle \varphi_x | \Psi \rangle \Rightarrow |\Psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} \Psi(x) |\varphi_x\rangle dx$$

$\Psi(x)$ 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 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 .

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

Dann gilt die stationäre Schrödingergleichung:

$$\begin{aligned} E\Psi_E(x) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \right) \Psi_E(x) \\ \Leftrightarrow \Psi_E''(x) &= \frac{2m}{\hbar^2} (U(x) - E) \Psi_E(x) \end{aligned}$$

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.

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

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 .

$$\begin{aligned}\Psi(0_-) &= \Psi(0_+) \\ \Psi'(0_-) &= \Psi'(0_+) \\ \Psi(a_-) &= \Psi(a_+) \\ \Psi'(a_-) &= \Psi'(a_+) \\ \text{Normierung: } 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx\end{aligned}$$

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.

$$\begin{aligned}\Psi_n(x) &= \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(k_n x) \\ k_n &= \frac{\pi}{a} \cdot n \text{ mit } n \in \mathbb{N} \\ E_n &= \frac{(\hbar k_n)^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \cdot n^2\end{aligned}$$

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 $\Psi_E(\pm a) = 0$.

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

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 $\tan(kb) = \frac{\hbar^2 k^2}{mu}$. 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.

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

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 Niveaueaufspaltung

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 $\Delta E_n = \tilde{E}_n \frac{2b}{a} \ll \tilde{E}_n$ bzw. $\frac{\Delta E_n - E_n}{E_n} = \frac{2b}{a} \ll 1$ sehr klein.

Die Oszillation zwischen den Kästen wird durch die Frequenz $\omega_n = \frac{\Delta E_n}{\hbar}$ beschrieben, die von der Niveaufaltung 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 Zeitentwicklungsoperator $U(t)$ in eine global wirkende Phase und einen Schwingungsterm mit σ_z separiert werden, also $U(t) = \exp[i \frac{i}{\hbar} \Omega t] \cdot \exp[-\frac{i}{\hbar} \sigma_z \omega t]$. Nur der Term $\exp[-\frac{i}{\hbar} \sigma_z \omega t]$ 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 Reflexion 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% Reflexion 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:

$$\begin{aligned} R &= |r|^2 \\ T &= |t|^2 \end{aligned}$$

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 $\frac{d}{dt}|\Psi(x, t)|^2 = \frac{d}{dt}(\Psi^*\Psi)$. 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 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 $T \approx \exp[-\frac{d}{\lambda}]$.

7.4.7.1 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.

7.4.8 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 sein 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.

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

7.4.9 Streuung an einem Potentialtopf

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

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

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.

8 Literatur

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