

# **Theorie II - Quantenmechanik**

## **Skript zur Vorlesung**

**von Prof. Dr. Muschik**

**erweitert um zahlreiche Kapitel zur  
fortgeschrittenen Quantenmechanik**

**Franz- Josef Schmitt**

### **0. Einleitung**

#### **0.1 Überblick**

1. Materiewellen
2. Observable
3. Unitärer Raum
4. Anwendung
5. Dynamik
6. Drehimpuls und Spin
7. Störungsrechnung
8. Identische Teilchen
9. Statistischer Operator
10. Streuprozesse

## 1. Materiewellen

### 1.1 Beziehungen von de Broglie

- Lichtelektrischer Effekt
- Hallwachs 1888
- Lenard 1900
- --> Lichtquantenhypothese von Einstein

Comptoneffekt 1923 -> relativistischer, inelastischer Stoß zwischen Elektronen und Photonen  
Für Licht gilt:

$$E = \hbar \omega$$

$$\vec{p} = \hbar \vec{k}$$

### **De Broglie, 1924**

Auch für Elektronen gilt:

$$E = \hbar \omega$$

$$\vec{p} = \hbar \vec{k}$$

mit

$$E = mc^2 - eV$$

$$\vec{p} = m\vec{v} - e\vec{A}$$

Mit

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$$

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}}$$

### 1.2 Partikel und Welle

Nichtrelativistischer Grenzfall:

$$E + eV = \frac{m}{2} \vec{v}^2 = \hbar \omega + eV$$

$$(\vec{p} + e\vec{A})^2 = m^2 \vec{v}^2 = (\hbar \vec{k} + e\vec{A})^2$$

### **Dispersionsrelation**

$$\omega = \omega(\vec{k}) = \frac{\hbar}{2m} \left( \vec{k} + \frac{e}{\hbar} \vec{A} \right)^2 - \frac{e}{\hbar} V$$

➔ Wellentheorie für Elektronen

Ansatz für ein nichtrelativistisches Wellenfeld

$$\Psi(\vec{r}, t) = \bar{A}(\vec{r}) e^{i[S(\vec{r}) - \omega t]}$$

$$\omega = \omega(\vec{k})$$

$$\vec{k} := \nabla S(\vec{r})$$

Bei ebenen Wellen:

$$S(\vec{r}) = \vec{k} \cdot \vec{r}$$

Gruppengeschwindigkeit

$$\bar{v}_g := \text{grad}_{\bar{k}} \mathbf{w}(\bar{k}) = \frac{\partial}{\partial \bar{k}} \mathbf{w}(\bar{k})$$

**Satz**

Aus der De-Broglie beziehung für das Wellenfeld:

$$\Psi(\bar{r}, t) = \bar{A}(\bar{r}) e^{i[S(\bar{r}) - \mathbf{w}t]}$$

$$\mathbf{w} = \mathbf{w}(\bar{k})$$

$$E = \hbar \mathbf{w}$$

$$\bar{p} = \hbar \bar{k}$$

folgt durch Identifizierung der Gruppengeschwindigkeit des Wellenfeldes mit der Teilchengeschwindigkeit:

$$\bar{v}_g \equiv \bar{v} := \frac{d\bar{r}}{dt}$$

Damit folgt eine Bewegungsgleichung für das Teilchen:

$$m \frac{d\bar{v}}{dt} = -e[\bar{E} + \bar{v} \times \bar{B}]$$

### **1.3 Schrödinger - Gleichung**

**Satz:**

Ein Wellenpaket

$$\Psi(\bar{r}, t) = \int \bar{B}(\bar{k}) e^{i[\bar{k}\bar{r} - \mathbf{w}t]} d^3\bar{k}$$

$$\mathbf{w} = \mathbf{w}(\bar{k})$$

Das der Differentialgleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle_t = \hat{H} |\Psi\rangle_t = \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla + e\bar{A} \right)^2 |\Psi\rangle_t - eV |\Psi\rangle_t$$

genügt, erfüllt die Dispersionsrelation

$$\mathbf{w}(\bar{k}) = \frac{\hbar}{2m} \left( \bar{k} + \frac{e}{\hbar} \bar{A} \right)^2 - \frac{e}{\hbar} V$$

Somit ergibt sich die Dispersionsrelation aus der Schrödingergleichung kombiniert mit der De Broglie-Beziehung.

Läßt man in der Schrödingergleichung  $\hbar$  gegen Null laufen, so folgen die HAMILTON- JACOBISCHEN Gleichungen

**Satz: Genügt ein** Wellenfeld der Schrödingergleichung, so gilt eine globale BILANZGLEICHUNG:

$$\frac{d}{dt} \int_G |\Psi|^2 dV = - \oint_{\partial G} \bar{j} \cdot d\bar{f}$$

Mit

$$\bar{j} := \frac{1}{2m} \left[ \Psi^* \left( \frac{\hbar}{i} \nabla + e\bar{A} \right) \Psi - \Psi \left( \frac{\hbar}{i} \nabla + e\bar{A} \right) \Psi^* \right]$$

Für  $G \rightarrow R^3$  abgeschlossenes System:

$\vec{j} = 0$  weit draußen

$$\rightarrow \oint_{\partial G} \vec{j} \cdot d\vec{f} = 0$$

$$\rightarrow \int_G |\Psi|^2 dV = \text{const}$$

Annahme:  $\Psi\Psi^* \propto$  Massendichte

- Widerspruch zur Dissipation des Wellenpaketes, während die Massendichte nicht dissipiert.
- Das Wellenpaket kann zu  $t_0$  um  $x_0$  lokalisiert sein (Delta- Artig).
- Durch Dispersionsrelation kommt es dann zur Dissipation und die Wellenfunktion, beispielsweise eine Gaußglocke im Betragsquadrat verbreitert sich um  $x_0$  zu  $t_1 > t_0$
- keine Massendichte

### Spaltversuch

#### Interpretation:

$|\Psi|^2$  ist Wahrscheinlichkeitsdichte -> Bornsche Deutung:

$$g(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r}, t)\Psi^*(\vec{r}, t)$$

$$\rightarrow P_t(G) = \int_G g(\vec{r}, t) dV$$

mit der Normierung

$$\int_{R^3} g(\vec{r}, t) dV = 1$$

#### 1.4 Grenzbedingungen

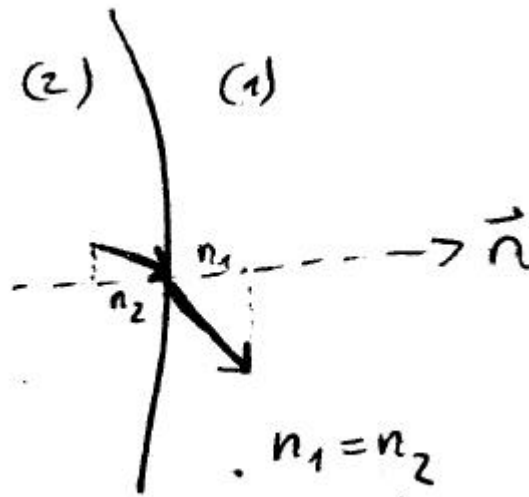
$$\int_{R^3} \Psi(\vec{r}, t)\Psi^*(\vec{r}, t) dV = 1$$

Also: Quadratintegrabel. Aber: Sie sollen im Unendlichen verschwinden

#### Satz:

Die Normalkomponente der Wahrscheinlichkeitsstromdichte  $\vec{j}$  geht stetig durch Unstetigkeitsflächen des Potentials

$$(\vec{j}^{(1)} - \vec{j}^{(2)}) \cdot \vec{n} = 0$$

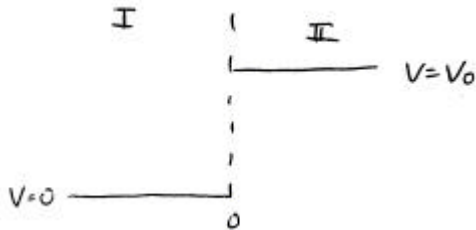


### Satz

Ist  $\bar{A}$  an der Unstetigkeitsstelle von  $V$  stetig:  $\bar{A}^{(1)} = \bar{A}^{(2)}$

so sind  $\Psi^{(1)} = \Psi^{(2)}$  und  $\vec{n} \cdot \nabla^{(1)} \Psi = \vec{n} \cdot \nabla^{(2)} \Psi$  hinreichende Bedingungen für die Stetigkeit der Normalkomponente der Wahrscheinlichkeitsstromdichte.

### Beispiel:



$$-\frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{j}'' + U\mathbf{j} = E\mathbf{j}$$

Mit

$$U = V_0 \quad x \geq 0$$

$$U = 0 \quad x \leq 0$$

I)

$$\frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{j}'' = E\mathbf{j} \quad \mathbf{j}_I = A_1 \sin k_1 x + B_1 \cos k_1 x$$

$$k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

II)

$$\frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{j}'' = (E - V_0)\mathbf{j} \quad \mathbf{j}_{II} = A_2 \sin k_2 x + B_2 \cos k_2 x$$

$$k_2^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}$$

Stetigkeitsbedingungen:

$$\mathbf{j}_I(0) = \mathbf{j}_{II}(0) \rightarrow B_1 = B_2$$

$$\mathbf{j}_I'(0) = \mathbf{j}_{II}'(0) \rightarrow k_1 A_1 = k_2 A_2 \rightarrow \text{Somit: kein Eigenwertproblem !}$$

Vorlesung vom 18.10.

Wiederholung:

De Broglie -> Dispersionsrelation <- Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \left[ \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla + e\bar{A} \right)^2 - eV \right] \Psi =: H\Psi$$

$$V(\vec{x}, t)$$

$$\bar{A}(\vec{x}, t)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{g(t)} \Psi^* \Psi dV = - \oint_{\partial g(t)} j \cdot d\vec{f}$$

$$j = \frac{1}{2m} \left[ \Psi^* \left( \frac{\hbar}{i} \nabla + e\bar{A} \right) \Psi - \Psi \left( \frac{\hbar}{i} \nabla + e\bar{A} \right) \Psi^* \right]$$

**Bornsche Deutung:**

$$\mathbf{r}(\vec{x}, t) = \Psi^*(\vec{x}, t) \Psi(\vec{x}, t)$$

**Hinreichende Grenzbedingungen:**

$$\bar{A}^1 = \bar{A}^2$$

$$\Psi^1 = \Psi^2$$

$$\vec{n} \cdot \nabla^1 \Psi = \vec{n} \cdot \nabla^2 \Psi$$

## 2. Observablen

### Physikalische Grundgrößen

$$E \rightarrow H$$

Man sucht nun Übersetzungsvorschriften

In der **Klassischen mechanik**

$$\mathbf{r}(\vec{x}, t)$$

$$\int \mathbf{r}(\vec{x}, t) dV = M$$

$$\frac{1}{M} \int \mathbf{r}(\vec{x}, t) dV = 1$$

**Born:**

$$\Psi^*(\vec{x}, t) \Psi(\vec{x}, t)$$

$$\int \Psi^*(\vec{x}, t) \Psi(\vec{x}, t) dV = 1$$

Also

$$\frac{\mathbf{r}}{M} = \Psi^* \Psi$$

### 2.1.1 Ortsoperator

Schwerpunkt:

$$\bar{R}(t) = \frac{1}{M} \int \bar{r}(t) \mathbf{r}(\bar{x}, t) dV$$

$$\leftrightarrow \bar{R}(t) = \int \Psi^*(\bar{x}, t) \hat{r}(t) \Psi(\bar{x}, t) dV$$

( der Einteilchengesamtheit)

mit dem Ortsoperator

$$\hat{r}(t) \leftrightarrow \bar{r}(t)$$

Allgemein:

$$F(t) = \int f(\bar{r}, t) \frac{\mathbf{r}(\bar{x}, t)}{M} dV$$

$$\leftrightarrow F(t) = \int \Psi^*(\bar{x}, t) \tilde{F} \Psi(\bar{x}, t) dV$$

Reine Herleitung, ein Programm, um Operatoren zu finden mit

$$\tilde{F} = \tilde{F}(\bar{r}, t, \nabla, \partial_t, \Delta)$$

## 2.12 Geschwindigkeitsoperator

### Schwerpunktsgeschwindigkeit:

$$\dot{\bar{R}}(t) = \frac{1}{M} \frac{d}{dt} \int \bar{r}(t) \mathbf{r}(\bar{r}, t) dV = \frac{1}{M} \int [\dot{\bar{r}}(t) \mathbf{r}(\bar{r}, t) + \bar{r}(t) [\dot{\mathbf{r}}(\bar{r}, t) + \mathbf{r}(\bar{r}, t) \nabla \cdot \bar{\mathbf{v}}(\bar{r}, t)]] dV$$

Mit der Kontinuitätsgleichung folgt:

$$[\dot{\mathbf{r}}(\bar{r}, t) + \mathbf{r}(\bar{r}, t) \nabla \cdot \bar{\mathbf{v}}(\bar{r}, t)] = 0$$

Also:

$$\dot{\bar{R}}(t) = \frac{1}{M} \int [\dot{\bar{r}}(t) \mathbf{r}(\bar{r}, t)] dV$$

für die Schwerpunktsgeschwindigkeit

Welche Bedeutung sollte jedoch  $\ddot{\bar{r}}(t)$  in der Quantenmechanik haben ? Schließlich gibt es keine Bahn in der QM !

Als Quantisierungsvorschrift / Quantisierungsaxiom betrachten wir deshalb die Forderungen

$$\dot{\bar{r}}(t) = 0$$

$$\nabla \cdot \bar{\mathbf{v}} = 0$$

$$\frac{d}{dt} := \partial_t + \bar{\mathbf{v}} \cdot \nabla = \partial_t$$

Somit gibt es nur noch eine Zeitableitung

$$\dot{\bar{R}}(t) = \frac{1}{M} \int [\bar{r}(t) \dot{\mathbf{r}}(\bar{r}, t)] dV$$

In der QM damit als Quantisierungsvorschrift:

$$\dot{\bar{R}}(t) = \int [\dot{\Psi}^* \bar{r}(t) \Psi + \Psi^* \bar{r}(t) \dot{\Psi}] dV$$

Mit Hilfe der Schrödingergleichung:

$$\dot{\Psi} = \frac{1}{i\hbar} H\Psi$$

$$\dot{\Psi}^* = -\frac{1}{i\hbar} H^* \Psi^*$$

$$\Rightarrow \dot{\bar{R}}(t) = \int \left[ -\frac{1}{i\hbar} \bar{r}(t) H^* \Psi^* \bar{r}(t) \Psi + \Psi^* \bar{r}(t) \frac{1}{i\hbar} H\Psi \right] dV$$

**Behauptung: Es gilt:**

$$\begin{aligned} & \Psi^*(\bar{x}, t) H \mathbf{j}(\bar{x}, t) - \mathbf{j}(\bar{x}, t) H \Psi^*(\bar{x}, t) \\ &= \frac{\hbar}{2mi} \nabla \cdot \left\{ \Psi^*(\bar{x}, t) \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - q\bar{A} \right) \mathbf{j}(\bar{x}, t) - \mathbf{j}(\bar{x}, t) \left( \frac{\hbar}{i} \nabla + q\bar{A} \right) \Psi^*(\bar{x}, t) \right\} =: \frac{\hbar}{i} \nabla \cdot \bar{\mathbf{j}} \end{aligned}$$

Speziell:

$$\mathbf{j}(\bar{x}, t) = \Psi(\bar{x}, t)$$

$$\Psi^*(\bar{x}, t) H \Psi(\bar{x}, t) - \Psi(\bar{x}, t) H \Psi^*(\bar{x}, t) = \frac{\hbar}{i} \nabla \cdot \bar{\mathbf{j}}$$

$$\bar{\mathbf{j}} := \frac{1}{2m} \left\{ \Psi^*(\bar{x}, t) \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - q\bar{A} \right) \Psi(\bar{x}, t) - \Psi(\bar{x}, t) \left( \frac{\hbar}{i} \nabla + q\bar{A} \right) \Psi^*(\bar{x}, t) \right\}$$

$$\dot{\bar{R}}(t) = \int [-\bar{r}(t) \nabla \cdot \bar{\mathbf{j}}] dV$$

$$\bar{r}(t) \nabla \cdot \bar{\mathbf{j}} = \nabla \cdot (\bar{r}(t) \bar{\mathbf{j}}) - \bar{\mathbf{j}} \cdot \nabla \bar{r}(t)$$

$$\nabla \bar{r}(t) = 1$$

$$\Rightarrow \dot{\bar{R}}(t) = \int -\nabla \cdot [\bar{r}(t) \bar{\mathbf{j}}] dV + \int \bar{\mathbf{j}} dV$$

$$\int -\nabla \cdot [\bar{r}(t) \bar{\mathbf{j}}] dV = -\oint [\bar{r}(t) \cdot \bar{\mathbf{j}}] d\vec{f} = 0$$

für abgeschlossene Systeme !

Also:

$$\begin{aligned} \dot{\bar{R}}(t) &= \int \bar{\mathbf{j}} dV = \int \frac{1}{2m} \left\{ \Psi^*(\bar{x}, t) \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - q\bar{A} \right) \Psi(\bar{x}, t) - \Psi(\bar{x}, t) \left( \frac{\hbar}{i} \nabla + q\bar{A} \right) \Psi^*(\bar{x}, t) \right\} dV \\ &= \int \frac{1}{2m} \left\{ \Psi^*(\bar{x}, t) \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi(\bar{x}, t) - \Psi(\bar{x}, t) \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi^*(\bar{x}, t) - 2\Psi^*(\bar{x}, t) q\hat{\bar{A}} \Psi(\bar{x}, t) \right\} dV \end{aligned}$$

Dabei wurde bereits der Feldoperator

$$\hat{\bar{A}} = \bar{A} \text{ eingeführt}$$

Mit Hilfe von

$$\int \left\{ \Psi^*(\bar{x}, t) \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi(\bar{x}, t) + \Psi(\bar{x}, t) \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi^*(\bar{x}, t) \right\} dV = \int \frac{\hbar}{i} \nabla \cdot \{\Psi^*(\bar{x}, t) \Psi(\bar{x}, t)\} dV = 0$$

(Das Integral ist vom Gaußschen Typ, kann als Oberflächenintegral geschrieben werden und verschwindet dann für abgeschlossene Systeme)

kann man zu  $\dot{\bar{R}}(t)$  eine Null addieren und schreiben:



$$\dot{\hat{R}}(t) = \int \frac{1}{m} \left\{ \Psi^* (\bar{x}, t) \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - q \hat{A} \right) \Psi (\bar{x}, t) \right\} dV$$

Ein Vergleich mit dem Forschungsauftrag von Born

$$F(t) = \int f(\bar{r}, t) \frac{\mathbf{r}(\bar{x}, t)}{M} dV$$

$$\leftrightarrow F(t) = \int \Psi^* (\bar{x}, t) \tilde{F} \Psi (\bar{x}, t) dV$$

zeigt uns, dass wir den Geschwindigkeitsoperator gefunden haben.

Er lautet:

$$\hat{v}(t) := \frac{1}{m} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - q \hat{A} \right)$$

Die Veränderung des Schwerpunktes ist nun gerade als Erwartungswert des Geschwindigkeitsoperators zu verstehen:

$$\dot{\hat{R}}(t) = \int \left\{ \Psi^* (\bar{x}, t) \hat{v}(t) \Psi (\bar{x}, t) \right\} dV$$

### 2.13 Der zeitableitungsoperator (Kringeloperator)

$$F(t) = \int \Psi^* (\bar{x}, t) \hat{F} \Psi (\bar{x}, t) dV$$

Existiert nun ein Kringeloperator der Form

$$\dot{\hat{F}}(t) = \int \Psi^* (\bar{x}, t) \hat{F}^\circ \Psi (\bar{x}, t) dV ?$$

Wichtig:

$\hat{F}^\circ$  ist nicht die Zeitableitung des Operators  $\hat{F}$  sondern, er ist der Operator, dessen Erwartungswert die Zeitableitung des Erwartungswertes von  $\hat{F}$  liefert.

Das heißt:  $\hat{F}^\circ$  erzeugt die Zeitableitung  $\dot{\hat{F}}(t)$  auf der linken Seite

$$\dot{F}(t) = \frac{d}{dt} \int \Psi^* (\bar{x}, t) \hat{F} \Psi (\bar{x}, t) dV = \int \left( \partial_t \left[ \Psi^* (\bar{x}, t) \hat{F} \Psi (\bar{x}, t) \right] + \Psi^* (\bar{x}, t) \hat{F} \Psi (\bar{x}, t) \nabla \cdot \bar{v} \right) dV$$

$$\bar{v} = 0$$

$$\Rightarrow \dot{F}(t) = \int \left( \partial_t \left[ \Psi^* (\bar{x}, t) \hat{F} \Psi (\bar{x}, t) \right] \right) dV$$

$$= \int \left( \left[ (\partial_t \Psi^* (\bar{x}, t)) \hat{F} \Psi (\bar{x}, t) \right] + \left[ \Psi^* (\bar{x}, t) (\partial_t \hat{F}) \Psi (\bar{x}, t) \right] + \left[ \Psi^* (\bar{x}, t) \hat{F} \partial_t \Psi (\bar{x}, t) \right] \right) dV$$

$$\dot{\Psi} = \frac{1}{i\hbar} H \Psi$$

$$\dot{\Psi}^* = -\frac{1}{i\hbar} H^* \Psi^*$$

**Betrachtung des ersten Gliedes:**

$$- \int \left[ (H^* \Psi^* (\bar{x}, t)) \hat{F} \Psi (\bar{x}, t) \right] dV$$

**addiere:**

$$\int \left[ (\Psi^* (\bar{x}, t)) H \hat{F} \Psi (\bar{x}, t) \right] dV$$

Also:

$$\int \left[ (\Psi^*(\bar{x}, t)) H \hat{F} \Psi(\bar{x}, t) \right] - \left[ (\hat{F} \Psi(\bar{x}, t)) H \Psi^*(\bar{x}, t) \right] dV$$

Mit

$$\begin{aligned} & \Psi^*(\bar{x}, t) H \mathbf{j}(\bar{x}, t) - \mathbf{j}(\bar{x}, t) H \Psi^*(\bar{x}, t) \\ &= \frac{\hbar}{2mi} \nabla \cdot \left\{ \Psi^*(\bar{x}, t) \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - q\bar{A} \right) \mathbf{j}(\bar{x}, t) - \mathbf{j}(\bar{x}, t) \left( \frac{\hbar}{i} \nabla + q\bar{A} \right) \Psi^*(\bar{x}, t) \right\} =: \frac{\hbar}{i} \nabla \cdot \bar{\mathbf{j}} \end{aligned}$$

Folgt dann:

$$\int \left[ (\Psi^*(\bar{x}, t)) H \hat{F} \Psi(\bar{x}, t) \right] - \left[ (\hat{F} \Psi(\bar{x}, t)) H \Psi^*(\bar{x}, t) \right] dV = \oint \bar{\mathbf{j}} d\vec{f} \rightarrow 0$$

für abgeschlossene Systeme

Dies bei Addition von

$$\int \left[ (\Psi^*(\bar{x}, t)) H \hat{F} \Psi(\bar{x}, t) \right] dV$$

Also gilt:

$$-\int \left[ (H \Psi^*(\bar{x}, t)) \hat{F} \Psi(\bar{x}, t) \right] dV = -\int \left[ (\Psi^*(\bar{x}, t)) H \hat{F} \Psi(\bar{x}, t) \right] dV$$

Also:

$$\begin{aligned} \dot{F}(t) &= \int \left( \left[ \left( -\frac{1}{i\hbar} H \Psi^*(\bar{x}, t) \right) \hat{F} \Psi(\bar{x}, t) \right] + \left[ \Psi^*(\bar{x}, t) (\partial_t \hat{F}) \Psi(\bar{x}, t) \right] + \left[ \Psi^*(\bar{x}, t) \hat{F} \frac{1}{i\hbar} H \Psi(\bar{x}, t) \right] \right) dV \\ &= \int \Psi^*(\bar{x}, t) \left( \partial_t \hat{F} + \hat{F} \frac{1}{i\hbar} H - \frac{1}{i\hbar} H \hat{F} \right) \Psi(\bar{x}, t) dV \\ \dot{F}(t) &= \int \Psi^*(\bar{x}, t) \left( \partial_t \hat{F} + \frac{1}{i\hbar} [H, \hat{F}] \right) \Psi(\bar{x}, t) dV \end{aligned}$$

Also haben wir den Kringeloperator:

$$\hat{F}^\circ = \partial_t \hat{F} + \frac{1}{i\hbar} [H, \hat{F}]$$

Der Ableitungsoperator

Vorlesung 23.10.02

## Wiederholung

Von der klassischen Mechanik zur Quantenmechanik:

Übersetzungsvorschrift:

$$\frac{\mathbf{r}(\bar{x}, t)}{M} = \Psi^*(\bar{x}, t) \Psi(\bar{x}, t)$$

$$F(t) = \int f(\vec{r}, t) \frac{\mathbf{r}(\vec{x}, t)}{M} dV$$

$$\Leftrightarrow F(t) = \int \Psi^*(\vec{x}, t) \hat{F} \Psi(\vec{x}, t) dV$$

Der Übergang erfolgt mit Hilfe des

REYNOLDSCHEN Transporttheorems und mit der Annahme:

$$\dot{\vec{r}}(t) = 0$$

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0$$

$$\frac{d}{dt} := \partial_t + \vec{v} \cdot \nabla = \partial_t$$

Sowie der Schrödingergleichung

$$\dot{\Psi} = \frac{1}{i\hbar} H \Psi$$

$$\dot{\Psi}^* = -\frac{1}{i\hbar} H^* \Psi^*$$

**Das Reynoldscche Transporttheorem / Expliziter Übergang:**

Mit

$$\frac{d}{dt} \Psi = \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \dot{\Psi}$$

$$\frac{d}{dt} F(t) = \int \frac{d}{dt} \left( \frac{f \mathbf{r}}{M} \right) dV + \int \left( \frac{f \mathbf{r}}{M} \right) \nabla \cdot \vec{v} dV$$

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} F(t) = \frac{1}{M} \int \left( \mathbf{r} \frac{d}{dt} f + f \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{r} \right) dV = \int \left( \Psi^* \left( \frac{d}{dt} f \right) \Psi + f (\dot{\Psi} \Psi^* + \Psi \dot{\Psi}^*) \right) dV$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} F(t) = \int \left( \Psi^* \left( \frac{d}{dt} f \right) \Psi + f \left( -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Psi^* + \Psi \frac{i}{\hbar} \hat{H}^* \Psi^* \right) \right) dV$$

Zeitableitung für eine beliebige Funktion f !

**Beispiele:**

$$f(\vec{r}, t) = \vec{r}$$

➔ Der Geschwindigkeitsoperator ist ableitbar, falls

$$\rightarrow \hat{H} = \frac{1}{2}mv^2 + qV$$

**Teilchen im E- Magnet. Feld:**

$$\hat{v} = \frac{1}{m} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - q\vec{A} \right)$$

Masse: m

Ladung: q

Beweis:

Lagrangefunktion aufstellen -> Übergang zur Hamiltonfunktion

oder ( historisch): Lorentzkraft finden -> Erstellen der Hamiltonfunktion als Verallgemeinerte Form der Gesamtenergie:

$$\vec{F} = m\vec{a} \Leftrightarrow \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}$$

**Wichtig:**

in der QM gilt:

$$\hat{v} = \frac{1}{m} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - q\vec{A} \right) \neq \frac{1}{m} \hat{p}$$

Nicht wie in der klassischen Mechanik !

Wichtig : Die Operatoren der QM hängen nicht zusammen wie ihre Erwartungswerte, also wie die Observablen der klassischen Mechanik

Ebenso ist der Zeitableitungsoperator nicht einfach die Zeitableitung des entsprechenden Operators ( bei uns: °)

$$\dot{F}(t) = \frac{d}{dt} \int \Psi^*(\vec{x}, t) \hat{F} \Psi(\vec{x}, t) dV := \int \Psi^*(\vec{x}, t) \hat{F}^\circ \Psi(\vec{x}, t) dV$$

$$\hat{F}^\circ = \partial_t \hat{F} + \frac{1}{i\hbar} [H, \hat{F}]$$

**Nebenbemerkung**

Hamiltongleichungen der Mechanik:

$$\dot{\vec{x}} = H_{\vec{p}} := \nabla_{\vec{p}} H = \frac{\partial}{\partial \vec{p}} H$$

$$\dot{\vec{p}} = -H_{\vec{x}}$$

$$\dot{F}(\vec{x}, \vec{p}, t) = \frac{\partial}{\partial t} F + F_{\vec{x}} \dot{\vec{x}} + F_{\vec{p}} \dot{\vec{p}} = \frac{\partial}{\partial t} F + F_{\vec{x}} H_{\vec{p}} - H_{\vec{x}} F_{\vec{p}} = \frac{\partial}{\partial t} F + \{F, H\}$$

Dies ist die bekannte zeitliche Änderung von Observablen aus dem Hamiltonformalismus der Mechanik:

$$\dot{F}(\vec{x}, \vec{p}, t) = \frac{\partial}{\partial t} F + \{F, H\}$$

**Anwendungen:**

$$\dot{H}(\vec{x}, \vec{p}, t) = \frac{\partial}{\partial t} H + \{H, H\} = \frac{\partial}{\partial t} H$$

**Für die Elektrodynamik:**

$$\hat{H}(\vec{x}, \vec{p}, t) = \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - q \hat{A} \right)^2 + q \hat{V}$$

Für

$$\hat{A} = \hat{A}(\vec{x})$$

$$V = V(\vec{x})$$

$$\Rightarrow \hat{H}^\circ(\vec{x}, \vec{p}, t) = 0$$

**Behauptung:**

$$\hat{x}^\circ = \frac{\partial}{\partial t} \hat{x} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{x}] = \vec{v}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{x} = 0$$

$$\Rightarrow \hat{x}^\circ = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{x}]$$

**Beweis: Anwenden auf Testfunktion:**

$$\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{x}] \Psi = \frac{i}{\hbar} (\hat{H} \hat{x} \Psi - \hat{x} \hat{H} \Psi)$$

$$\begin{aligned} \hat{H} \hat{x} \Psi &= \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - q \hat{A} \right) \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - q \hat{A} \right) \hat{x} \Psi + q \hat{V} \hat{x} \Psi \\ &= \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - q \hat{A} \right) \left( \frac{\hbar}{i} \Psi \nabla \hat{x} + \frac{\hbar}{i} \hat{x} \nabla \Psi - q \hat{A} \hat{x} \Psi \right) + q \hat{V} \hat{x} \Psi \end{aligned}$$

Dabei ( wie schon einmal oben) muss vorsichtig vorgegangen werden, da

$\nabla \hat{x}$  hier als ein tensor zweiter Stufe und nicht als  $\nabla \cdot \hat{x}$  zu verstehen ist !

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - q \hat{A} \right) \left( \frac{\hbar}{i} \Psi \nabla \hat{x} + \frac{\hbar}{i} \hat{x} \nabla \Psi - q \hat{A} \hat{x} \Psi \right) + q \hat{V} \hat{x} \Psi \\ &= \frac{1}{2m} \left( -\hbar^2 \Psi \Delta \hat{x} - \hbar^2 \nabla \Psi \nabla \hat{x} - \hbar^2 \hat{x} \Delta \Psi - \hbar^2 \nabla \hat{x} \nabla \Psi - q \frac{\hbar}{i} \nabla \hat{A} \hat{x} \Psi - q \frac{\hbar}{i} \hat{A} \nabla \hat{x} \Psi - q \frac{\hbar}{i} \hat{A} \hat{x} \nabla \Psi \right) \\ &\quad + \frac{1}{2m} \left( -q \frac{\hbar}{i} \hat{A} \Psi \nabla \hat{x} - q \frac{\hbar}{i} \hat{A} \hat{x} \nabla \Psi + q^2 \hat{A}^2 \hat{x} \Psi \right) + q \hat{V} \hat{x} \Psi \end{aligned}$$

Weiter:

$$\hat{x} \hat{H} \Psi = \frac{1}{2m} \left( -\hbar^2 \hat{x} \Delta \Psi - q \frac{\hbar}{i} \hat{A} \hat{x} \nabla \Psi - q \frac{\hbar}{i} \hat{x} \nabla (\hat{A} \Psi) + q^2 \hat{A}^2 \hat{x} \Psi \right) + q \hat{V} \hat{x} \Psi$$

**Weiter:**

$$q \hat{V} \hat{x} \Psi = q \hat{x} \hat{V} \Psi$$

Wegen

$$[\hat{x}, \hat{x}] = 0 \Rightarrow [\hat{x}, \hat{x}^n] = 0 \Rightarrow [\hat{V}, \hat{x}] = 0$$

Denn:

Alle Potenziale sind in einer Potenzreihe des Ortes entwickelbar !

Somit folgt nach länglicher Rechnung:

$$\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{x}] \Psi = \frac{1}{2m} \left( 2 \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi \nabla \hat{x} + \frac{\hbar}{i} \Delta \hat{x} - 2q\hat{A} \Psi \nabla \hat{x} \right)$$

$$\nabla \hat{x} = 1$$

$$\Delta \hat{x} = 0$$

$$\Rightarrow \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{x}] \Psi = \frac{1}{m} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - q\hat{A} \right) \Psi = \hat{V} \Psi$$

In diesem Formalismus werden grundsätzlich  $\hat{x}$  und  $t$  als verschiedene Größen behandelt.

Somit:  $\frac{\partial}{\partial t} \hat{x} = 0$

**Impulsoperator:**

Klassisch:  $p(t) = \int \mathbf{r} \left( \bar{v} + \frac{q}{M} \bar{A} \right) dV$

Somit Übergang zur QM durch Übersetzungsvorschrift für die Dichte/ Masse und durch Ersetzen des Restes durch Operatoren:

$$p(t) = \int M \Psi^* \left( \hat{v} + \frac{q}{M} \hat{A} \right) \Psi dV$$

$$M = m$$

$$p(t) = \int M \Psi^* \left( \frac{1}{M} \frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{q}{M} \hat{A} + \frac{q}{M} \hat{A} \right) \Psi dV$$

$$p(t) = \int \Psi^* \left( \frac{\hbar}{i} \nabla \right) \Psi dV$$

Somit:

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla$$

Der Impulsoperator

**Alternative / andere Vorgehensweise:**

Annahme einer typischen ebenen Welle:

$$\Psi = e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$$

De Broglie- Beziehung:

$$\vec{p} = \hbar \vec{k}$$

### Schrödingergleichung

$$i\hbar \dot{\Psi} = H\Psi = \hbar \omega \Psi$$

$$\Rightarrow E = \hbar \omega$$

So gewinnt man die Dispersionsrelation und die Energie

$$\Psi = e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} = e^{i(\frac{\vec{p}}{\hbar} \cdot \vec{r} - \omega t)}$$

Mit

$$\hat{p}\Psi = \vec{p}\Psi \Rightarrow \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla$$

### Der Beschleunigungsoperator

$$\hat{b} = \hat{v}^\circ = \frac{\partial \hat{v}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{v}]$$

mit

$$\hat{v} = \frac{1}{m} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - q\vec{A} \right) \neq \frac{1}{m} \hat{p}$$

$$\Rightarrow \hat{b}_j = -\frac{q}{m} \frac{\partial A_j}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \left[ \frac{1}{2} m \hat{v}^2 + q\hat{V}, \hat{v}_j \right] = -\frac{q}{m} \frac{\partial A_j}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \left[ \frac{1}{2} m \hat{v}^2, \hat{v}_j \right] + \frac{i}{\hbar} [q\hat{V}, \hat{v}_j]$$

$$j = 1, 2, 3$$

### **Kommutatoren**

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

$$[\hat{x}, \hat{x}] = 0$$

$$[\hat{p}, \hat{p}] = 0$$

$$[\hat{v}_i, \hat{v}_j] = \frac{1}{m^2} q \frac{\hbar}{i} (\nabla_j \hat{A}_i - \nabla_i \hat{A}_j) = -\frac{1}{m^2} q \frac{\hbar}{i} (\nabla \times \hat{A})_k$$

$i, j, k$  zyklisch

$$[\hat{v}_i, \hat{v}_j] = -\frac{1}{m^2} q \frac{\hbar}{i} \epsilon_{ijk} \nabla_i \hat{A}_j$$

$$[\hat{V}(\hat{x}), \hat{v}_j] = -\frac{1}{m} \frac{\hbar}{i} \nabla_j \hat{V}(\hat{x})$$

$$[\hat{v}^2, \hat{v}_j] = \hat{v}_i [\hat{v}_i, \hat{v}_j] + [\hat{v}_i, \hat{v}_j] \hat{v}_i$$

$$[\hat{v}_i, \hat{v}_j] = -\hat{v}_i \left( \frac{1}{m^2} q \frac{\hbar}{i} \mathbf{e}_{ijk} \nabla_i \hat{A}_j \right) - \left( \frac{1}{m^2} q \frac{\hbar}{i} \mathbf{e}_{ijk} \nabla_i \hat{A}_j \right) \hat{v}_i = \frac{1}{m^2} q \frac{\hbar}{i} \left[ (\hat{\mathbf{v}} \times \hat{\mathbf{B}})_j - (\hat{\mathbf{B}} \times \hat{\mathbf{v}})_j \right]$$

$$\hat{\mathbf{B}} = \nabla \times \hat{\mathbf{A}}$$

$$\hat{E} = -\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} - \nabla \hat{V}$$

SUMMENKONVENTION !

Fazit: Die Beschleunigung im elektromagnetischen Feld ist die Lorentzkraft

mit

$$\Rightarrow \hat{b}_j = -\frac{q}{m} \frac{\partial A_j}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \left[ \frac{1}{2} m \hat{v}^2, \hat{v}_j \right] + \frac{i}{\hbar} [q \hat{V}, \hat{v}_j] \quad j=1,2,3$$

$$\Rightarrow m \hat{\mathbf{b}} = q \hat{\mathbf{E}} + \frac{q}{2} \left[ (\hat{\mathbf{v}} \times \hat{\mathbf{B}}) - (\hat{\mathbf{B}} \times \hat{\mathbf{v}}) \right]$$

Vertauschbarkeit im Kreuzprodukt:

$$(\hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}})_i = \mathbf{e}_{lmi} \hat{x}_l \hat{p}_m = \mathbf{e}_{lmi} \hat{p}_m \hat{x}_l + \mathbf{e}_{lmi} [\hat{x}_l, \hat{p}_m] = \mathbf{e}_{lmi} \hat{p}_m \hat{x}_l + \mathbf{e}_{lmi} \frac{\hbar}{i} \mathbf{d}_{lm} = \mathbf{e}_{lmi} \hat{p}_m \hat{x}_l$$



$$F(t) = \int \Psi^* (\vec{x}, t) \tilde{F} \Psi (\vec{x}, t) dV$$

$$\dot{F}(t) = \int \Psi^* (\vec{x}, t) \hat{F}^\circ \Psi (\vec{x}, t) dV$$

$$\hat{F}^\circ = \partial_t \hat{F} + \frac{1}{i\hbar} [H, \hat{F}]$$

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla$$

$$\hat{v} = \frac{1}{m} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - q\vec{A} \right)$$

$$\hat{H} = \frac{1}{2} m v^2 + qV$$

$$\frac{\hat{b}}{b} = \hat{v}^\circ = \frac{\partial \hat{v}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{v}]$$

$$\frac{\hat{b}}{b} = \frac{q}{m} \hat{E} + \frac{q}{2m} \left[ (\hat{v} \times \hat{B}) - (\hat{B} \times \hat{v}) \right]$$

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

$$[\hat{x}, \hat{x}] = 0$$

$$[\hat{p}, \hat{p}] = 0$$

$$[\hat{F}, \hat{p}] = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \hat{F}$$

$$[\hat{F}, \hat{x}] = i\hbar \frac{\partial}{\partial \hat{x}} \hat{F}$$

### Drehimpuls

$$\hat{\vec{L}} := \hat{\vec{x}} \times \hat{\vec{p}}$$

$$\hat{L}_i := \hat{x}_k \hat{p}_l - \hat{x}_l \hat{p}_k, \quad ijk \quad \text{zyklisch}$$

$$\left[ \hat{L}_i, \hat{x}_i \right] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p_i} (\hat{x}_k \hat{p}_l - \hat{x}_l \hat{p}_k) = 0$$

$$\left[ \hat{L}_i, \hat{p}_i \right] = 0$$

$$\left[ \hat{L}_i, \hat{x}_k \right] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p_k} (\hat{x}_k \hat{p}_l - \hat{x}_l \hat{p}_k) = -\frac{\hbar}{i} \hat{x}_l$$

$$\left[ \hat{L}_i, \hat{p}_k \right] = -\frac{\hbar}{i} \hat{p}_l$$

$$\left[ \hat{L}_i, \hat{L}_k \right] = \hat{x}_k \frac{\hbar}{i} \hat{p}_i - \hat{x}_i \frac{\hbar}{i} \hat{p}_k = -\frac{\hbar}{i} \hat{L}_l$$

$$\left[ \hat{L}^2, \hat{L}_i \right] = 0$$

### Satz

Es gilt die Energiebilanzgleichung

$$\dot{W} = -\nabla \cdot \vec{s} + \mathbf{e}$$

Mit der Energiedichte

$$w = \left( qV + \frac{q^2}{2m} \bar{A}^2 \right) \Psi^* \Psi - \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi^* \right) \left( \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi \right) - \frac{1}{2m} q \bar{A} \left( \Psi^* \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi - \Psi \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi^* \right)$$

und der Energiestromdichte

$$\vec{s} = \frac{\hbar}{2mi} \left[ \left( \dot{\Psi}^* \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - q \bar{A} \right) \Psi + \dot{\Psi} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - q \bar{A} \right) \Psi^* \right) \right]$$

und dem Energie- Supply:

$$\mathbf{e} = \left[ \frac{d}{dt} \left( qV + \frac{q^2}{2m} \bar{A}^2 \right) \right] \Psi^* \Psi - \frac{q}{2m} \dot{\bar{A}} \left( \Psi^* \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi - \Psi \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi^* \right)$$

**Satz:** Der HAMILTONoperator ist der Energieoperator

$$W' := \int w dV = \int \Psi^* \hat{H} \Psi dV$$

## 2.2 Diracsche Schreibweise

### 2.2.1 Skalarprodukt

$\langle u | v \rangle$  - Bilinearform

$$\langle u | v \rangle = \langle v | u \rangle^*$$

$$\langle u | u \rangle \geq 0$$

$$\langle u | u \rangle = 0 \Leftrightarrow u = 0$$

$$F(t) = \int \Psi^*(\bar{x}, t) \tilde{F} \Psi(\bar{x}, t) dV$$

$$\tilde{F} \Psi(\bar{x}, t) = \Phi(\bar{x}, t)$$

$$\Rightarrow F(t) = \langle \Psi(\bar{x}, t) | \Phi(\bar{x}, t) \rangle = \langle \Psi | \Phi \rangle$$

### 2.2.2 Entwicklungssatz

Komplexe Schreibweise der Fourier- Reihe:

$$x \in [-l, l]$$

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2l}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{in \frac{p}{l} x}$$

$$c_n = \frac{1}{\sqrt{2l}} \int_{-l}^l f(x) e^{-in \frac{p}{l} x} dx$$

$$\mathbf{j}_n(x) := \frac{1}{\sqrt{2l}} e^{in \frac{p}{l} x}$$

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \mathbf{j}_n(x)$$

$$c_n = \int_{-l}^l \mathbf{j}_n^*(x) f(x) dx$$

Orthogonalität:

$$c_n = \int_{-l}^l \mathbf{j}_{n'}^*(x) \mathbf{j}_n(x) dx = \mathbf{d}_{n'n}$$

Dirac:

$$|f\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n |\mathbf{j}_n\rangle$$

$$c_n = \langle \mathbf{j}_n | f \rangle$$

$$|f\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} |\mathbf{j}_n\rangle \langle \mathbf{j}_n | f \rangle$$

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} |\mathbf{j}_n\rangle \langle \mathbf{j}_n| = 1$$

( Vollständigkeitsrelation)

Vorteile der Schreibweise werden besonders an folgendem einfachen Beispiel deutlich:

$$|f\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n |\mathbf{j}_n\rangle$$

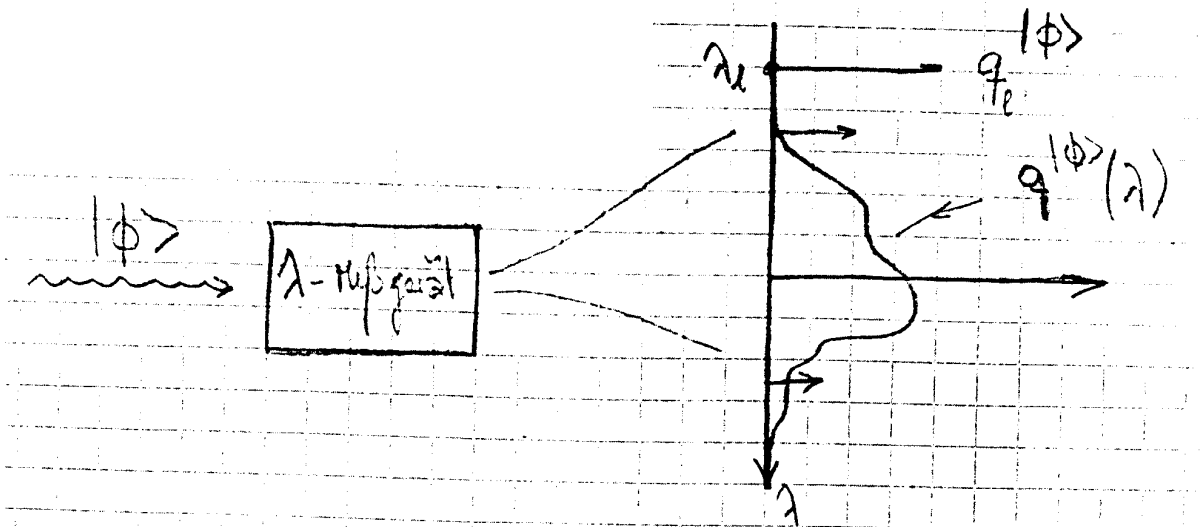
$$\langle \mathbf{j}_m | f \rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \langle \mathbf{j}_m | \mathbf{j}_n \rangle = c_m$$

$$\langle \mathbf{j}_m | \mathbf{j}_n \rangle = \mathbf{d}_{mn}$$

## 2.3 Axiome

### 2.3.1 L- Messgerät

Sei ein System in verschiedenen Zuständen, so möge ein L- Messgerät die möglichen Eigenwerte  $I_l$  der Zustände messen:



**Gesamtspektrum:**

$$Q^{|\Phi\rangle} = \sum_k q_k^{|\Phi\rangle} d(I - I_k) + q^{|\Phi\rangle}(I)$$

$$q_k^{|\Phi\rangle} \geq 0$$

$$q^{|\Phi\rangle}(I) \geq 0$$

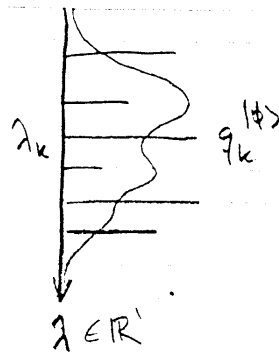
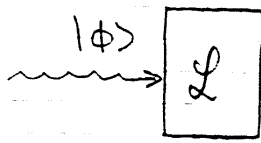
- 1) Die Messgröße ist messgerätspezifisch  
→  $I$  - Achse, wie Energie, Drehimpuls, Ort,...
- 2) Auftretende  $I$  - Werte sind systemspezifisch, jedoch immer reell
- 3) Intensitätsverhältnisse sind zustandsspezifisch

$$q_1^{|\Phi\rangle} \dots q_n^{|\Phi\rangle} \dots q^{|\Phi\rangle}(I)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} Q^{|\Phi\rangle}(I) dI = 1 = \sum_k q_k^{|\Phi\rangle} + \int_{-\infty}^{\infty} q^{|\Phi\rangle}(I) dI$$

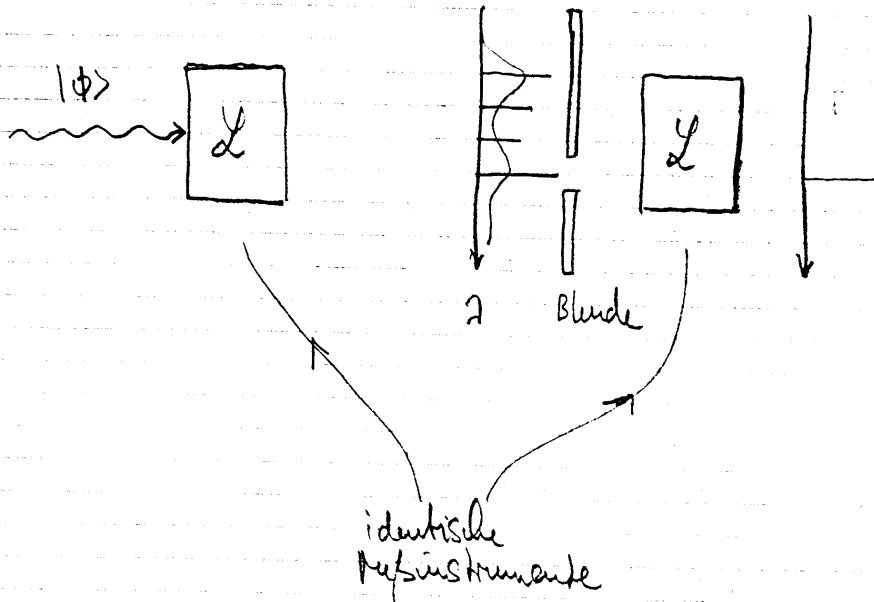
VORLESUNG 30.10.2002

$\mathcal{L}$ -Meßgerät



$q_k^{|\Phi\rangle}, q^{|\Phi\rangle}(I)$  sind die gemessenen Intensitäten (im diskreten bzw. kontinuierlichen Teil des Spektrums)

$$\int_{-\infty}^{\infty} Q^{|\Phi\rangle}(I) dI = 1 = \sum_k q_k^{|\Phi\rangle} + \int_{-\infty}^{\infty} q^{|\Phi\rangle}(I) dI \quad (\text{Diskreter Teil} + \text{kontinuierlicher Teil})$$



### Axiom I

Jedem System werden durch Messgeräte  $(I, \mathbf{m}, \dots)$  Operatoren  $(\hat{L}, \hat{M}, \dots)$  genannt Observablen zugeordnet, so dass die Eigenwerte dieser Operatoren  $(I_1, I_2, \dots, \mathbf{m}_1, \mathbf{m}_2, \dots)$  mit den von diesem System erzeugten Messwerten übereinstimmen.

Diese erzeugten Messwerte heißen SPEKTRUM

$$\hat{L} |j(I)\rangle = I |j(I)\rangle \quad \text{für den kontinuierlichen Teil des Spektrums}$$

$$\hat{M} |\Psi(\mathbf{m})\rangle = \mathbf{m} |\Psi(\mathbf{m})\rangle$$

$$\hat{L}|\mathbf{j}_k\rangle = L_k|\mathbf{j}_k\rangle$$

$$\hat{M}|\Psi_l\rangle = m_l|\Psi_l\rangle$$

Für den diskreten teil des Spektrums

Dabei sind alle Eigenwerte, ob aus dem diskreten oder aus dem kontinuierlichen teil, grundsätzlich reell

### Axiom II

Das von einem L- Messgerät ausgeblendete ( der teil, der gemessen wurde und dann durch eine Blende hindurchgelassen wurde) Teilspektrum wird in einem 2. L- Messgerät unverändert entworfen, falls beide Messgeräte hintereinander geschaltet sind !

Idealmessung: Immer der gleiche Eigenwert wird gemessen !

$$|\Phi\rangle = |\mathbf{j}_l\rangle$$

in

$$1 = \sum_k q_k |\Phi\rangle + \int_{-\infty}^{\infty} q^{|\Phi\rangle}(I) dI$$

bei Idealmessung:

$$\int_{-\infty}^{\infty} q^{|\Phi\rangle}(I) dI = 0$$

$$1 = q_l |\mathbf{j}_l\rangle$$

### **Reiner Zustand**

Es wird immer die Intensität  $q_l |\mathbf{j}_l\rangle$  gemessen. Die Intensität des ausgeblendeten ( durchgelassenen) Teils ist zeitlich konstant. Das heißt: Die Intensität des Eigenwertes ist immer die gleiche.

$$q_k |\mathbf{j}_l\rangle = d_{kl}$$

ist reell und nicht negativ und alleine durch die  $\{\mathbf{j}_m\}$  darstellbar

Wie kann die Intensität  $q_k |\mathbf{j}_l\rangle = d_{kl}$  dargestellt werden ?

### **Vorschlag der Intensitätsdarstellung ( = Wahrscheinlichkeit des Auffindens eines Teilchens)**

$$q_k |\mathbf{j}_l\rangle = \langle \mathbf{j}_l | \mathbf{j}_k \rangle = d_{kl}$$

Dies ist jedoch nicht gut, da es sich nicht verallgemeinern läßt !

Beispiel:

$$q_k |\Phi\rangle = \langle \Phi | \mathbf{j}_k \rangle$$

für den Einfall von  $|\Phi\rangle$

$q_k |\Phi\rangle = \langle \Phi | \mathbf{j}_k \rangle$  ist jedoch ein komplexes Skalarprodukt und deshalb nicht notwendigerweise reell oder nicht negativ.

### **Lösung**

$$q_k^{|\mathbf{j}_l\rangle} = \langle \mathbf{j}_l | \mathbf{j}_k \rangle \langle \mathbf{j}_k | \mathbf{j}_l \rangle = \mathbf{d}_{kl} = |\langle \mathbf{j}_l | \mathbf{j}_k \rangle|^2$$

Mit

$$q_k^{|\Phi\rangle} = \langle \Phi | \mathbf{j}_k \rangle \langle \mathbf{j}_k | \Phi \rangle$$

$$\sum_k q_k^{|\Phi\rangle} = \langle \Phi | \mathbf{j}_k \rangle \langle \mathbf{j}_k | \Phi \rangle = \langle \Phi | \Phi \rangle = 1$$

**Notwendige Forderungen für diese Interpretation als Intensitäten / Wahrscheinlichkeiten**

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} |\mathbf{j}_n\rangle \langle \mathbf{j}_n| = 1 \quad (\text{Vollständigkeit})$$

$$\langle \Phi | \Phi \rangle = 1 \quad (\text{Normierung})$$

Diese beiden Forderungen können als Definition von  $\sum_{n=-\infty}^{\infty} |\mathbf{j}_n\rangle \langle \mathbf{j}_n|$  und  $\langle \Phi | \Phi \rangle$  verstanden werden und ergeben sich als Bedingung aus dem Messgerät.

Interpretation:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} |\mathbf{j}_n\rangle \langle \mathbf{j}_n| = 1 \quad - \text{Was am kontinuierlichen Spektrum ausgeblendet wird muss vollständig sein}$$

$$\langle \Phi | \Phi \rangle = 1 \quad - \text{die Zustände im Messgerät ( die } |\Phi\rangle \text{ sitzen im Messgerät) müssen normiert sein}$$

$$1 = \sum_k q_k^{|\mathbf{j}_l\rangle} = \left\langle \mathbf{j}_l \left| \sum_k \mathbf{j}_k \right\rangle \langle \mathbf{j}_k | \mathbf{j}_l \right\rangle = \mathbf{d}_{kl} = \langle \mathbf{j}_l | \mathbf{j}_l \rangle = 1$$

( Nur diskrete Werte ( keine Operatoren mit diskretem Spektrum))

Beispiel für diskreten teil des Spektrums:

$$q_k^{|\sum_l c_l \mathbf{j}_l\rangle} = \sum_l \sum_{l'} \langle c_l \mathbf{j}_l | \mathbf{j}_k \rangle \langle \mathbf{j}_k | c_{l'} \mathbf{j}_{l'} \rangle$$

$$= \sum_{l,l'} c_l^* c_{l'} \langle \mathbf{j}_l | \mathbf{j}_k \rangle \langle \mathbf{j}_k | \mathbf{j}_{l'} \rangle = \sum_{l,l'} c_l^* c_{l'} \mathbf{d}_{kl} \mathbf{d}_{kl'} = c_k^* c_k = |c_k|^2$$

also reell und stets positiv !

Beispiel für kontinuierlichen teil des Spektrums:

$$q_k^{\int d\mathbf{l}' c(\mathbf{l}') |\mathbf{j}(\mathbf{l}')\rangle}(\mathbf{m}) = \int d\mathbf{l} \int d\mathbf{l}' c^*(\mathbf{l}') c(\mathbf{l}) \langle \mathbf{j}(\mathbf{l}) | \mathbf{j}(\mathbf{m}) \rangle \langle \mathbf{j}(\mathbf{m}) | \mathbf{j}(\mathbf{l}') \rangle$$

$$\langle \mathbf{j}(\mathbf{l}) | \mathbf{j}(\mathbf{m}) \rangle \langle \mathbf{j}(\mathbf{m}) | \mathbf{j}(\mathbf{l}') \rangle = \mathbf{d}(\mathbf{l}' - \mathbf{m}) \mathbf{d}(\mathbf{m} - \mathbf{l})$$

$$q_k^{\int d\mathbf{l}' c(\mathbf{l}') |\mathbf{j}(\mathbf{l}')\rangle}(\mathbf{m}) = c^*(\mathbf{m}) c(\mathbf{m})$$

**Betrachte**

$$\hat{A} = \sum_k |\Psi_k\rangle a_k \langle \mathbf{j}_k|$$

mit

$$\langle \Psi_l | \mathbf{j}_k \rangle = d_{kl}$$

$$\Rightarrow \hat{A} |\mathbf{j}_l\rangle = a_l |\mathbf{j}_l\rangle$$

$$\hat{A} |\Psi_l\rangle = a_l |\Psi_l\rangle$$

$$\sum_k |\Psi_k\rangle a_k \langle \mathbf{j}_k|$$

mit

$$\langle \Psi_l | \mathbf{j}_k \rangle = d_{kl}$$

Dies ist das Eigenwertproblem des Operators  $\hat{A} = \sum_k |\Psi_k\rangle a_k \langle \mathbf{j}_k|$

Das Eigenwertproblem kann auch auf Bra- Vektoren angewandt werden.

Oftmals ist es günstiger, die Eigenwerte nach rechts auszuwerten (z.B. bei Produkten aus Operatoren).

$$\langle \mathbf{j}_l | \hat{A} = a_l \langle \mathbf{j}_l |$$

### Adjungierter Operator

$$\hat{A}^+ = \sum_k |\mathbf{j}_k\rangle a_k^* \langle \Psi_k|$$

$$\Rightarrow \hat{A}^+ |\mathbf{j}_l\rangle = a_l^* |\mathbf{j}_l\rangle$$

$$\langle \Psi_l | \hat{A}^+ = a_l^* \langle \Psi_l |$$

Aus dem Eigenwertproblem können dann grundsätzlich die  $|\mathbf{j}_l\rangle$  gewonnen werden:

$$\hat{L} |\mathbf{j}_k\rangle = a_k |\mathbf{j}_k\rangle$$

ergibt:

$a_k$  und  $|\mathbf{j}_k\rangle$  als Ergebnisse

### **Linearität**

$\hat{L} |\mathbf{j}_k\rangle \langle \mathbf{j}_k| = a_k |\mathbf{j}_k\rangle \langle \mathbf{j}_k|$ , falls  $\hat{L}$  linear ist. Dies muss bei Observablen so sein !

$\hat{A} = \sum_k |\Psi_k\rangle a_k \langle \mathbf{j}_k|$  ist linear angeschrieben !

➔ Diese Schreibweise ist nicht unbedingt ganz allgemein !

Sei L nun linear:



$$\Rightarrow \hat{L} \sum_k |j_k\rangle \langle j_k| = \sum_k a_k |j_k\rangle \langle j_k| = \hat{L}$$

$$\Rightarrow \hat{L} = \sum_k |j_k\rangle a_k \langle j_k|$$

$$\hat{L}^+ = \sum_k |j_k\rangle a_k^* \langle j_k|$$

Falls  $\hat{L}$  observable sind die Eigenwerte reell. Das heißt:  $a_k^* = a_k$ .

In diesem Fall gilt:  $\hat{L} = \hat{L}^+$  (Hermitizität)

Observablen sind grundsätzlich selbstadjungierte Operatoren.

Selbstadjungierte Operatoren haben reelle Eigenwerte und es gilt:

$$\hat{L} = \sum_k |j_k\rangle a_k \langle j_k|$$

$$\Rightarrow \Psi_k = j_k$$

**Behauptung**

$$\langle \Psi | \hat{L} | j \rangle = \langle \hat{L}^+ \Psi | j \rangle$$

für jede Observable  $\hat{L}$  folgt damit:

$$\langle \Psi | \hat{L} | j \rangle = \langle \hat{L} \Psi | j \rangle$$

**Hermitizität:**

Falls:

$$\langle \Psi | \hat{B} | j \rangle = \langle \hat{B} \Psi | j \rangle$$

$$\Rightarrow \hat{B} \text{ hermitesch}$$

Jedoch könnten die Eigenwerte noch imaginär sein !

Also: selbstadjungierte Operatoren sind immer hermitesch !

hermitesche Operatoren sind nur mit reellen Eigenwerten selbstadjungiert !

## Vorlesung 01.11.02

Aus der Idealmessung wissen wir:

$$q_k |j_l\rangle = d_{kl}$$

$$q_k |\Phi\rangle = \langle \Phi | j_k \rangle |j_k\rangle$$

$$q_k \left| \sum_l c_l j_l \right\rangle = c_k^* c_k = |c_k|^2$$

$$q_k \int dI c(I) |j(I)\rangle (\mathbf{m}) = c^*(\mathbf{m}) c(\mathbf{m})$$

$$\langle j(I') | j(\mathbf{m}) \rangle = d(I' - \mathbf{m})$$

$$\langle j_k | j_l \rangle = d_{kl}$$

$$\hat{A} = \sum_k |\Psi_k\rangle a_k \langle j_k|$$

$$\hat{A}^+ = \sum_k |j_k\rangle a_k^* \langle \Psi_k|$$

Observablen sind selbstadjungiert:  $\hat{L} = \hat{L}^+$

Für den Fall dass  $\hat{L}$  hermitesch:

$$\langle \Psi | \hat{L} | j \rangle = \langle \hat{L} \Psi | j \rangle = \langle \Psi | \hat{L} | j \rangle$$

hermitesche Operatoren repräsentieren Observablen, falls sie auch linear sind.

Die Spektraldarstellung von Observablen lautet

$$\hat{L} = \sum_k |j_k\rangle L_k \langle j_k| + \int dI |j(I)\rangle I \langle j(I)|$$

### 2.3.3 Vollständigkeit

Entwicklungssatz:

$$|\Phi\rangle = \sum_l c_l |j_l\rangle + \int_{-\infty}^{\infty} dI c(I) |j(I)\rangle$$

$$\langle j_k | \Phi \rangle = \sum_l c_l \langle j_k | j_l \rangle + \int_{-\infty}^{\infty} dI c(I) \langle j_k | j(I) \rangle$$

$$\langle j_k | j(I) \rangle = 0$$

$$\Rightarrow \langle j_k | \Phi \rangle = c_k$$

Skalarprodukte aus dem diskreten und dem kontinuierlichen teil des Spektrums verschwinden stets !

$$\langle j(\mathbf{m}) | \Phi \rangle = \sum_l c_l \langle j(\mathbf{m}) | j_l \rangle + \int_{-\infty}^{\infty} dI c(I) \langle j(\mathbf{m}) | j(I) \rangle$$

$$\langle j(\mathbf{m}) | j(I) \rangle = d(I - \mathbf{m})$$

$$\Rightarrow \langle j(\mathbf{m}) | \Phi \rangle = c(\mathbf{m})$$

$$|\Phi\rangle = \sum_k |j_k\rangle \langle j_k | \Phi \rangle + \int_{-\infty}^{\infty} dI |j(I)\rangle \langle j(I) | \Phi \rangle$$

$$1 = \langle \Phi | \Phi \rangle = \sum_k \langle j_k | \langle j_k | + \int_{-\infty}^{\infty} dI |j(I)\rangle \langle j(I)|$$

VOLLSTÄNDIGKEITSRELATION

### Axiom III

Die Eigenfunktionen einer Observablen bilden ein vollständiges Orthonormalsystem.

Die Intensitäten im Spektrum sind

$$q_k^{|\Phi\rangle} = \langle \Phi | j_k \rangle \langle j_k | \Phi \rangle = c_k^* c_k = |c_k|^2$$

$$q^{|\Phi\rangle}(I) = \langle \Phi | j(I) \rangle \langle j(I) | \Phi \rangle = |c(I)|^2$$

$$\sum_k q_k^{|\Phi\rangle} + \int_{-\infty}^{\infty} dI q^{|\Phi\rangle}(I) = 1$$

### 2.3.4 Linearität

Bisher wurde  $\hat{L}$  nur auf seinen Eigenfunktionen definiert:

$$\hat{L} |j_k\rangle = I_k |j_k\rangle$$

$$\hat{L} |j(I)\rangle = I |j(I)\rangle$$

Betrachte

$$\Lambda := \sum_k \hat{L} |j_k\rangle \langle j_k| + \int_{-\infty}^{\infty} dI \hat{L} |j(I)\rangle \langle j(I)|$$

$$= \sum_k I_k |j_k\rangle \langle j_k| + \int_{-\infty}^{\infty} dI I |j(I)\rangle \langle j(I)|$$

$\Lambda$  ist ein linearer Operator. Auf den Eigenfunktionen unterscheiden sich  $\hat{L}$  und  $\Lambda$  nicht !

$$\Lambda |j_j\rangle = \hat{L} |j_j\rangle = I_j |j_j\rangle$$

$$\Lambda |j(m)\rangle = \hat{L} |j(m)\rangle = m |j(m)\rangle$$

Man nennt  $\Lambda$  auch die lineare Erweiterung von  $\hat{L}$ .

Ist das eindeutig ?

Annahme:

$$\exists \Lambda, \Lambda' \quad \Lambda \neq \Lambda' \quad \text{mit}$$

$$\Lambda |j_j\rangle = I_j |j_j\rangle = \Lambda' |j_j\rangle$$

$$\Lambda |j(m)\rangle = m |j(m)\rangle = \Lambda' |j(m)\rangle$$

### Entwicklungssatz:

$$|\Phi\rangle = \sum_k |j_k\rangle \langle j_k | \Phi \rangle + \int_{-\infty}^{\infty} dI |j(I)\rangle \langle j(I) | \Phi \rangle$$

$$\Lambda |\Phi\rangle = \sum_k I_k |j_k\rangle \langle j_k | + \int_{-\infty}^{\infty} dI I |j(I)\rangle \langle j(I) |$$

$$I_k |j_k\rangle = \Lambda |j_k\rangle$$

$$I |j(I)\rangle = \Lambda |j(I)\rangle$$

$$\Lambda |\Phi\rangle = \sum_k \Lambda |j_k\rangle \langle j_k | + \int_{-\infty}^{\infty} dI \Lambda |j(I)\rangle \langle j(I) | = \Lambda' |\Phi\rangle$$

$$\Rightarrow \Lambda = \Lambda'$$

Der Operator  $\hat{L}$  wird nun durch seine eindeutige lineare Erweiterung ersetzt !

$$\Lambda = \hat{L}$$

- a) Alle physikalischen Grundgrößen sind lineare Operatoren
- b) Die Schrödingergleichung ist linear in  $\hat{H}$

### Axiom IV:

Observable ist linearer Operator, der auf allen Zuständen des physikalischen Systems definiert ist, reelle Eigenwerte und ein vollständiges orthonormiertes System von Eigenfunktionen hat:

- Spektraldarstellung
- Orthonormierung
- Vollständigkeitsrelation

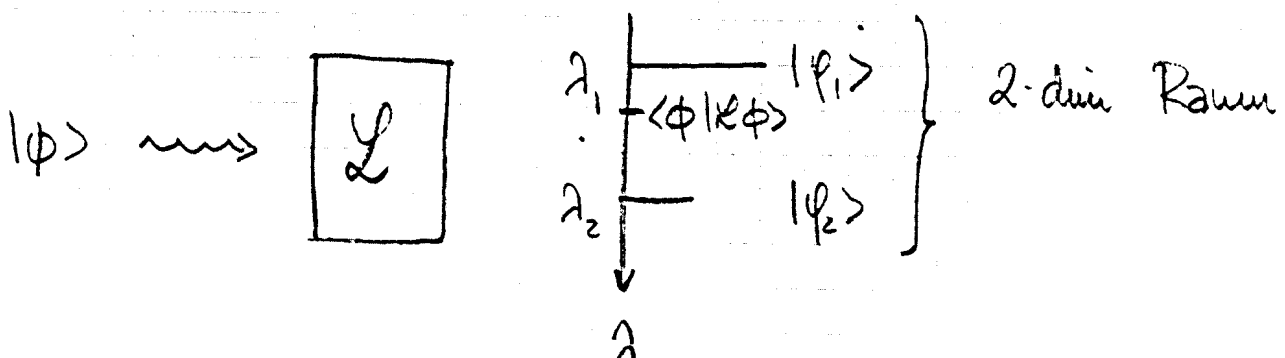
Observablen sind selbstadjungiert.

$$\hat{L} = \sum_k I_k P_k + \int dI I P(I) = \sum_I \int I P(I)$$

$$P_k := |j_k\rangle \langle j_k |$$

$$P(I) = |j(I)\rangle \langle j(I) |$$

### Beispiel: Stern - Gerlach- versuch



$$\hat{L}|\mathbf{j}_k\rangle = I_k |\mathbf{j}_k\rangle \quad k=1,2$$

$$\langle \mathbf{j}_j | \mathbf{j}_k \rangle = d_{kj}$$

$$q_k^{|\Phi\rangle} = \langle \Phi | \mathbf{j}_k \rangle \langle \mathbf{j}_k | \Phi \rangle$$

$$\sum_k q_k^{|\Phi\rangle} = 1$$

$$|\Phi\rangle := |\mathbf{j}_1\rangle$$

$$q_1^{|\mathbf{j}_1\rangle} = \langle \mathbf{j}_1 | \mathbf{j}_1 \rangle \langle \mathbf{j}_1 | \mathbf{j}_1 \rangle$$

$$q_2^{|\mathbf{j}_1\rangle} = \langle \mathbf{j}_1 | \mathbf{j}_2 \rangle \langle \mathbf{j}_2 | \mathbf{j}_1 \rangle = 0$$

Nun: Auftretende Zustände in der Basis des verwendeten Hilbertraums entwickeln:

$$|\Phi\rangle := |\mathbf{j}_1\rangle \langle \mathbf{j}_1 | \Phi \rangle + |\mathbf{j}_2\rangle \langle \mathbf{j}_2 | \Phi \rangle$$

$$\hat{L}|\Phi\rangle = I_1 |\mathbf{j}_1\rangle \langle \mathbf{j}_1 | \Phi \rangle + I_2 |\mathbf{j}_2\rangle \langle \mathbf{j}_2 | \Phi \rangle$$

$$\langle \Phi | \hat{L} | \Phi \rangle = I_1 \langle \Phi | \mathbf{j}_1 \rangle \langle \mathbf{j}_1 | \Phi \rangle + I_2 \langle \Phi | \mathbf{j}_2 \rangle \langle \mathbf{j}_2 | \Phi \rangle$$

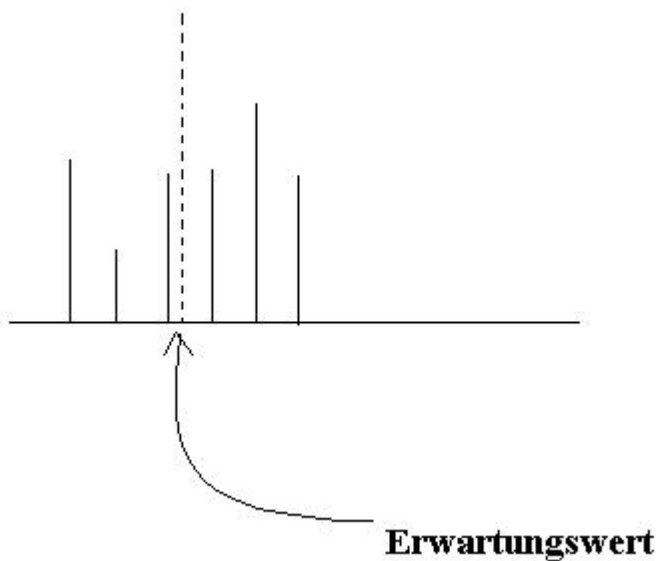
$$\langle \Phi | \mathbf{j}_1 \rangle \langle \mathbf{j}_1 | \Phi \rangle = q_1^{|\Phi\rangle}$$

$$\langle \Phi | \mathbf{j}_2 \rangle \langle \mathbf{j}_2 | \Phi \rangle = q_2^{|\Phi\rangle}$$

$$\Rightarrow \langle \Phi | \hat{L} | \Phi \rangle = I_1 \langle \Phi | \mathbf{j}_1 \rangle \langle \mathbf{j}_1 | \Phi \rangle + I_2 \langle \Phi | \mathbf{j}_2 \rangle \langle \mathbf{j}_2 | \Phi \rangle = \sum_k I_k q_k^{|\Phi\rangle}$$

Also: der Erwartungswert des L-Operators, im Allgemeinen selbst gar keine Messgröße ist als Summe von mit den Eigenwerten gewichteten Intensitäten zu verstehen !

Der Erwartungswert muss keine Messgröße sein, so liegt er bei diskreten Eigenwerten im Allgemeinen zwischen zwei diskreten Werten:



### **Definition:**

Der Erwartungswert  $\langle \hat{F} | \Phi \rangle$  der Observablen  $\hat{F}$  im Systemzustand  $|\Phi\rangle$  ist der mit den Intensitäten gewichtete Mittelwert aus den Messwerten ( Eigenwerten) von  $\hat{F}$  :

$$\langle \hat{F} | \Phi \rangle = \sum_k q_k |\Phi\rangle \mathbf{I}_k$$

$$0 \leq q_k^{|\Phi\rangle} \leq 1$$

$$\sum_k q_k^{|\Phi\rangle} = 1$$

$$\langle \hat{F} | \Phi \rangle = \sum_k \langle \Phi | \mathbf{j}_k \rangle \langle \mathbf{j}_k | \Phi \rangle \mathbf{I}_k = \langle \Phi | \sum_k |\mathbf{j}_k\rangle \mathbf{I}_k \langle \mathbf{j}_k | \Phi \rangle = \langle \Phi | \hat{F} | \Phi \rangle$$

$$\sum_k |\mathbf{j}_k\rangle \mathbf{I}_k \langle \mathbf{j}_k| = \hat{F}$$

### Vorlesung 05.11.2002

Beispiel:

$$\Psi(x, t) = \int A(k) e^{i(\bar{k}\bar{x} - \mathbf{w}t)} d\bar{k}$$

$$\mathbf{w} = \mathbf{w}(\bar{k})$$

$$\mathbf{d}(u) = \frac{1}{2p} \int e^{iku} dk$$

Nun:

$$\int \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) dV = \int \int \int A^*(\bar{k}) e^{-i(\bar{k}\bar{x} - \mathbf{w}t)} A(\bar{k}') e^{i(\bar{k}'\bar{x} - \mathbf{w}'t)} d\bar{k}' d\bar{k} dV$$

$$= \int \int \int A^*(\bar{k}) A(\bar{k}') e^{i(\bar{k}' - \bar{k})\bar{x}} e^{-i(\mathbf{w}' - \mathbf{w})t} d\bar{k}' d\bar{k} dV$$

$$= (2p)^3 \int \int A^*(\bar{k}) A(\bar{k}') \mathbf{d}(\bar{k} - \bar{k}') e^{-i(\mathbf{w}' - \mathbf{w})t} d\bar{k}' d\bar{k}$$

$$= (2p)^3 \int A^*(\bar{k}) A(\bar{k}) e^{-i(\mathbf{w} - \mathbf{w})t} d\bar{k}$$

$$\bar{k} = \bar{k}' \Rightarrow \mathbf{w} = \mathbf{w}'$$

$$= (2p)^3 \int A^*(\bar{k}) A(\bar{k}) d\bar{k} \stackrel{!}{=} 1$$

$$\Rightarrow \int A^*(\bar{k}) A(\bar{k}) d\bar{k} = \frac{1}{(2p)^3}$$

$$H\Psi = i\hbar\dot{\Psi}$$

$$\dot{\Psi} = -\int i\mathbf{w}A(\bar{k}) e^{i(\bar{k}\bar{x} - \mathbf{w}t)} d\bar{k}$$

$$E = \langle \Psi | H\Psi \rangle = -i\hbar \int \int \int A^*(\bar{k}) e^{-i(\bar{k}\bar{x} - \mathbf{w}t)} i\mathbf{w}(\bar{k}') A(\bar{k}') e^{i(\bar{k}'\bar{x} - \mathbf{w}'t)} d\bar{k}' d\bar{k} dV$$

$$= \hbar \int \int \int A^*(\bar{k}) A(\bar{k}') e^{i(\bar{k}' - \bar{k})\bar{x}} e^{-i(\mathbf{w}' - \mathbf{w})t} \mathbf{w}(\bar{k}') d\bar{k}' d\bar{k} dV$$

$$= \hbar (2p)^3 \int A^*(\bar{k}) A(\bar{k}) \mathbf{w}(\bar{k}) d\bar{k}$$

Weiter:

$\mathbf{W}$  muss eine glatte Funktion sein.

Damit : (Mittelwertsatz der Integralrechnung)

$$\exists \bar{k}'$$

$$\Rightarrow E = \langle \Psi | H \Psi \rangle = \hbar (2\mathbf{p})^3 \mathbf{w}(\bar{k}') \int A^*(\bar{k}) A(\bar{k}) d\bar{k}$$

$$\int A^*(\bar{k}) A(\bar{k}) d\bar{k} = \frac{1}{(2\mathbf{p})^3}$$

$$\Rightarrow E = \langle \Psi | H \Psi \rangle = \hbar \mathbf{w}(\bar{k}')$$

**Impuls**

$$\langle \bar{P} \rangle = \langle \Psi | \hat{P} \Psi \rangle = \langle \Psi | \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi \rangle$$

$$\nabla \Psi = \int i \bar{k} A(\bar{k}) e^{i(\bar{k}\bar{x} - \mathbf{w}t)} d\bar{k}$$

$$\Rightarrow \langle \bar{P} \rangle = \hbar (2\mathbf{p})^3 \int A^*(\bar{k}) \bar{k} A(\bar{k}) d\bar{k} = \hbar \langle \bar{k} \rangle$$

## 2.5 Symmetrie

$$\langle \Phi | \hat{F} | \Psi \rangle = \sum_k \langle \Phi | \mathbf{j}_k \rangle I_k \langle \mathbf{j}_k | \Psi \rangle$$

$$\langle \hat{F} \Phi | \Psi \rangle = \sum_k \langle \Phi | \mathbf{j}_k \rangle I_k^* \langle \mathbf{j}_k | \Psi \rangle$$

$$\langle \hat{F} \Phi | = \langle \hat{F} \Phi \rangle^*$$

Somit:

$$\langle \hat{F} \Phi | \Psi \rangle = \langle \Phi | \hat{F} | \Psi \rangle$$

$$\Rightarrow \hat{F} \text{ ist Observable}$$

**Beispiel: Symmetrie des Impulsoperators**

$$\hat{P} = \frac{\hbar}{i} \nabla$$

$$\langle \Phi | \hat{P} \Psi \rangle = \langle \Phi | \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi \rangle = \int \Phi^* \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi d^3r = \int \frac{\hbar}{i} \nabla (\Phi^* \Psi) d^3r - \int \Psi \frac{\hbar}{i} \nabla \Phi^* d^3r$$

$$\int \frac{\hbar}{i} \nabla (\Phi^* \Psi) d^3r = \oint \frac{\hbar}{i} (\Phi^* \Psi) d\vec{f} = 0$$

$$\Rightarrow \langle \Phi | \hat{P} \Psi \rangle = - \int \Psi \frac{\hbar}{i} \nabla \Phi^* d^3r = \left\langle \frac{\hbar}{i} \nabla \Phi \right| \Psi \rangle = \langle \hat{P} \Phi | \Psi \rangle$$

Somit ist der Impuls eine Observable und wird durch einen hermiteschen Operator beschrieben !

Interpretation:

$$\int \Phi^* \Psi d^3r$$

entspricht dem Anteil von  $\Psi$ , der parallel zu  $\Phi$  liegt.

Im Unendlichen verschwindet jedoch die Wahrscheinlichkeit bei abgeschlossenen Systemen :

$$\oint_{\partial} (\Phi^* \Psi) d\vec{f} = 0$$

### **3. Unitärer Raum**

#### **3.1 Motivation**

Gesucht: Lösung der Schrödingergleichung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - q\vec{A} \right)^2 |\Psi\rangle + q\hat{V} |\Psi\rangle$$

Dies ist eine lineare DGL ( 1. Ordnung in der zeit) und 2. ordnung im Ort !

Bekannt sei

$$\Psi(x, t_0) := |\Psi\rangle_0$$

$$\int |\Psi(x, t)|^2 dV = 1 < \infty$$

Die Lösungen müssen superpositionierbar sein ! Sie müssen bestimmten Differenzierbarkeits- und Integrierbarkeitskriterien entsprechend

- Normierbarkeit
- zweifach diffbar in ort und Zeit

Weiter:

$\langle \Phi | \Psi \rangle$  muss existieren -> das Skalarprodukt muss definiert sein

→ es existieren bestimmte Funktionen, die diesen Forderungen genügen. bestimmte Funktionsklassen. Mit diesen lassen sich dann Räume definieren.

Alleine Schon die Existenz des Skalarproduktes sticht ein paar Eigenschaften heraus, die den Räumen und Funktionenklassen mitgegeben werden. Dadurch wird so etwas selektiert wie ein Hilbertraum etc...

### **3.2 Vektoren**

#### **3.2.1 Linearität**

Def.: Eine Menge L von Elementen  $\langle \Phi |, | \Psi \rangle, | c \rangle, | \Phi \rangle$  heißt linearer Raum, wenn gilt:



$$\forall |\Psi\rangle, |\Phi\rangle \in L \Rightarrow |\Psi\rangle + |\Phi\rangle = |\Psi + \Phi\rangle \in L$$

$$|\Psi\rangle + |\Phi\rangle = |\Phi\rangle + |\Psi\rangle$$

$$|\Psi + \Phi\rangle + |c\rangle = |\Psi\rangle + |\Phi + c\rangle$$

$$\exists 0 \in L, \forall |\Phi\rangle \in L : |\Phi\rangle + 0 = |\Phi\rangle$$

$$\forall |\Phi\rangle \in L \exists |\Psi\rangle \in L : |\Phi\rangle + |\Psi\rangle = 0$$

2)

$$\forall |\Psi\rangle, |\Phi\rangle \in L, a, b \in C$$

$$|a\Psi\rangle \in L$$

$$\langle a\Phi| = a^* \langle \Phi|$$

$$a|\Psi + \Phi\rangle = a|\Psi\rangle + a|\Phi\rangle$$

$$|a\Phi\rangle = a|\Phi\rangle$$

$$(a + b)|\Phi\rangle = a|\Phi\rangle + b|\Phi\rangle$$

$$1|\Phi\rangle = |\Phi\rangle$$

Elemente eines linearen Raumes werden Vektoren genannt !

### **3.22 Skalarprodukt ( linear im 1. Eingang), antilinear im 2. Eingang**

**Definition:** Ein linearer Raum U mit Skalarprodukt heißt UNITÄRER RAUM

**Definition:** Ein linearer Raum H heißt normiert, wenn gilt:

$$\|\cdot\| : H \rightarrow R$$

$$1) \|\Psi\| \geq 0; \|\Phi\| = 0 \Leftrightarrow |\Phi\rangle = 0$$

$$2) \|\Phi\rangle + |\Psi\rangle \leq \|\Phi\| + \|\Psi\|$$

$$3) \|a|\Phi\rangle\| = |a| \|\Phi\| \quad \forall a \in C$$

**Satz:**

Ein unitärer Raum ist mit  $\|\Phi\| = \sqrt{\langle \Phi | \Phi \rangle}$  stets normiert

Dabei bilden die  $\{|\Phi_j\rangle\}$  ein Orthonormalbasis, also:

$$\langle \Phi_i | \Phi_j \rangle = \delta_{ij}$$

$$\forall |\Phi_j\rangle \Rightarrow \langle \Phi | \Phi_j \rangle = 0 \Rightarrow |\Phi\rangle = 0$$

Damit folgt Vollständigkeit. Es handelt sich derart also um eine andere Form der Vollständigkeitsrelation

$$|\Phi\rangle = \sum_k |\Phi_k\rangle \langle \Phi_k | \Phi \rangle$$

$$\langle \Phi | \Phi \rangle = \sum_k \langle \Phi | \Phi_k \rangle \langle \Phi_k | \Phi \rangle$$

$$\|\Phi\|^2 = \sum_k |\langle \Phi_k | \Phi \rangle|^2$$

**Parsevalsche Ungleichung:**

$$\|\Phi\|^2 \geq \sum_k |\langle \Phi_k | \Phi \rangle|^2$$

mit

$$\|\Phi\|^2 > \sum_k |\langle \Phi_k | \Phi \rangle|^2$$

Falls

$|\Phi_k\rangle$  nicht vollständig !

**Schwarzsche Ungleichung**

$$|\langle \Phi | \Psi \rangle|^2 \leq \|\Phi\| \|\Psi\|$$

### Definition

ein vollständig normierter Raum heißt Banach- Raum

ein vollständig unitärer Raum heißt Hilbert- Raum

Vollständigkeit ist äquivalent zu:

- jede Cauchy- Folge konvergiert gegen ein Element des Raumes

### 3.2.3 Konvergenz

Def.: ein linearer Raum heißt metrisch, wenn gilt:

$$d : M \times M \rightarrow R$$

$$\forall f, g, h :$$

$$1) d(f, g) = 0 \Leftrightarrow f = g$$

$$2) d(f, g) \leq d(f, h) + d(g, h)$$

$$3) d(f, g) = d(g, f)$$

### **Definition**

Eine Folge  $\{f_n\} \subset M$  ist konvergent gegen ein  $f$  aus  $M$ , also

$$\lim_{n \rightarrow \infty} f_n = f, \text{ falls}$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} d(f_n, f) = 0$$

Cauchyfolgen konvergieren dabei gegen Elemente des Raumes.

Eine Folge  $\{f_n\} \subset M$  heißt Cauchy-Folge, wenn gilt:

$$\forall \epsilon > 0 \exists n(\epsilon) \in \mathbb{N} \forall k, m \geq n(\epsilon) \text{ mit } d(f_k, f_m) < \epsilon$$

Vervollständigung eines nicht vollständigen Raumes

→ definiere Äquivalenzklassen der Cauchyfolgen !

→ -> Der Raum wird vervollständigt !

Lineare Räume -> haben keinen Rand !

→ definiere Folgen, die immer näher an den Rand herankommen, jedoch selbst gar nicht konvergieren.

<-> Lineare Hülle !

Dies ist dann äquivalent zur sogenannten "linearen Hülle "

Also:

unitär -> normiert -> metrisch

unitär:

$$\langle \mathbf{j} | \Psi \rangle$$

normiert:

$$\|\mathbf{j}\| := \sqrt{\langle \mathbf{j} | \mathbf{j} \rangle}$$

metrisch:

$$d(u, v) := \|u - v\|$$

**Beispiel: der Ortsoperator  $\hat{x}$**

$$\hat{x}|\mathbf{j}(x)\rangle = x|\mathbf{j}(x)\rangle$$

$$\hat{T} := e^{-\frac{i}{\hbar} \bar{\mathbf{x}} \bar{\mathbf{p}}}$$

$$\Rightarrow [\hat{T}, \hat{x}] = -\bar{\mathbf{x}} \hat{T}$$

wegen

$$[F(\hat{x}, \bar{p}), \hat{x}] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \bar{p}} F(\hat{x}, \bar{p})$$

vergl.: 2.1.9

$$\Rightarrow \langle \Phi | \hat{T}(\bar{\mathbf{x}}) \hat{x} \mathbf{j}(\hat{x}) \rangle - \langle \Phi | \hat{x} \hat{T}(\bar{\mathbf{x}}) \mathbf{j}(\hat{x}) \rangle = -\bar{\mathbf{x}} \langle \Phi | \hat{T}(\bar{\mathbf{x}}) \mathbf{j}(\hat{x}) \rangle$$

$$\langle \Phi | \hat{T}(\bar{\mathbf{x}}) \hat{x} \mathbf{j}(\hat{x}) \rangle = \langle \hat{T}(\bar{\mathbf{x}})^+ \Phi | \hat{x} \mathbf{j}(\hat{x}) \rangle = \bar{x} \langle \Phi | \mathbf{j}(\hat{x}) \rangle$$

$$\Rightarrow (\bar{x} + \bar{\mathbf{x}}) \langle \Phi | \hat{T}(\bar{\mathbf{x}}) \mathbf{j}(\hat{x}) \rangle = \langle \Phi | \hat{x} \hat{T}(\bar{\mathbf{x}}) \mathbf{j}(\hat{x}) \rangle$$

$$(\bar{x} + \bar{\mathbf{x}}) \hat{T}(\bar{\mathbf{x}}) \mathbf{j}(\hat{x}) = \hat{x} \hat{T}(\bar{\mathbf{x}}) \mathbf{j}(\hat{x})$$

Somit: Eigenwerte von  $\hat{x}$  beliebig, da  $\bar{\mathbf{x}}$  beliebig

$$\langle \mathbf{j}(\bar{x}') | \hat{x} \mathbf{j}(\bar{x}) \rangle = \bar{x} \langle \mathbf{j}(\bar{x}') | \mathbf{j}(\bar{x}) \rangle = \bar{x} d(\bar{x} - \bar{x}')$$

$$\langle \mathbf{j}(\bar{x}') | \hat{x} \mathbf{j}(\bar{x}) \rangle = \langle \hat{x} \mathbf{j}(\bar{x}') | \mathbf{j}(\bar{x}) \rangle = \bar{x}' \langle \mathbf{j}(\bar{x}') | \mathbf{j}(\bar{x}) \rangle = \bar{x}' d(\bar{x} - \bar{x}')$$

$$\Rightarrow \bar{x}' d(\bar{x} - \bar{x}') = \bar{x} d(\bar{x} - \bar{x}')$$

### 3.3 Lineare Operatoren

Axiom 4: Observablen sind lineare Operatoren

**Definition:**  $H$  sei Hilbertraum;  $\hat{A}$  sei Operator

$$M \subseteq H$$

$$\hat{A}: M \rightarrow H$$

$$|\mathbf{j}\rangle \rightarrow \hat{A}|\mathbf{j}\rangle$$

$\hat{A}$  heißt linearer Operator:

$\langle - \rangle$

$$\forall |\Psi\rangle, |\Phi\rangle \in M, a, b \in \mathbb{C}$$

$$\hat{A}|a\Phi + b\Psi\rangle = a\hat{A}|\Phi\rangle + b\hat{A}|\Psi\rangle$$

**Def.:**  $\hat{A}, \hat{B}$  lineare Operatoren  $\langle - \rangle$

$$M, L \subseteq H$$

$$\hat{A}: M \rightarrow H$$

$$\hat{B}: L \rightarrow H$$

$\hat{A}, \hat{B}$  heißen gleich, falls:

$$i) M = L$$

$$ii) \hat{A}|\mathbf{j}\rangle = \hat{B}|\mathbf{j}\rangle$$

$$\forall |\mathbf{j}\rangle \in M = L \subseteq H$$

**Def.:**  $\hat{A} + \hat{B}$  heißt Summe von  $\hat{A}, \hat{B}$ , falls:

$$M, L, N \subseteq H$$

$$\hat{A}: M \rightarrow H$$

$$\hat{B}: L \rightarrow H$$

$$\hat{C}: N \rightarrow H$$

$$\hat{A} + \hat{B} = \hat{C}$$

$$N = M \cap L$$

$$(\hat{A} + \hat{B})|\mathbf{j}\rangle = \hat{A}|\mathbf{j}\rangle + \hat{B}|\mathbf{j}\rangle$$

$$\forall |\mathbf{j}\rangle \in N$$

**Def.:**  $\hat{A}\hat{B}$  heißt Summe von  $\hat{A}, \hat{B}$ , falls:

$$M, L, N \subseteq H$$

$$\hat{A}: M \rightarrow H$$

$$\hat{B}: L \rightarrow H$$

$$\hat{C}: N \rightarrow H$$

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{C}$$

$$N \subseteq L$$

$$(\hat{A}\hat{B})|\mathbf{j}\rangle = \hat{A}(\hat{B}|\mathbf{j}\rangle)$$

$$\forall |\mathbf{j}\rangle \in N$$

### **3.3.3 Operatorfunktionen**

$$e^{\hat{A}} := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \hat{A}^n$$

$$\hat{A} \text{ selbstadjungiert: } \hat{A} = \sum_k |\mathbf{j}_k\rangle I_k \langle \mathbf{j}_k|$$

Also:

$$\hat{A}^n = \sum_{k,l,\dots,m} |\mathbf{j}_k\rangle I_k \langle \mathbf{j}_k| |\mathbf{j}_l\rangle I_l \langle \mathbf{j}_l| \dots |\mathbf{j}_m\rangle I_m \langle \mathbf{j}_m|$$

→  $n$  - mal

→  $n$  Delta - Funktionen

$$\rightarrow \hat{A}^n = \sum_k |\mathbf{j}_k\rangle I_k^n \langle \mathbf{j}_k|$$

$$e^{\hat{A}} := \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{l!} \sum_k |\mathbf{j}_k\rangle I_k^l \langle \mathbf{j}_k| = \sum_k |\mathbf{j}_k\rangle e^{I_k} \langle \mathbf{j}_k|$$

### **3.3.4 Unitäre Operatoren**

**Def.: U auf H heißt unitär:**  $\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{U} \hat{U}^\dagger = 1$

unitäre Operatoren sind isometrisch:

$$\langle \Phi | \hat{U}^\dagger \hat{U} | \mathbf{j} \rangle = \langle \Phi | \mathbf{j} \rangle = \langle \hat{U} \Phi | \hat{U} \mathbf{j} \rangle = \langle \Phi | \mathbf{j} \rangle$$

**Beispiel:**

$$\hat{A} = \hat{A}^\dagger, \hat{B} := e^{i\hat{A}}$$

$$\langle e^{i\hat{A}} \Phi | e^{i\hat{A}} \mathbf{j} \rangle = \sum_{k,l} \langle \Phi | \mathbf{j}_k \rangle e^{-iI_k} \langle \mathbf{j}_k | \mathbf{j}_l \rangle e^{iI_l} \langle \mathbf{j}_l | \mathbf{j} \rangle = \langle \Phi | \mathbf{j} \rangle$$

Also :

$$e^{i\hat{A}}$$

isometrisch

$$\left( e^{i\hat{A}} \right)^\dagger = e^{-i\hat{A}} \Rightarrow \left( e^{i\hat{A}} \right)^\dagger e^{i\hat{A}} = 1$$

Also:

$e^{i\hat{A}}$  unitärer Operator

### 3.4 Eigenwertprobleme

**Def.:** Eine nichttriviale Lösung  $\mathbf{j}(I) \in M$  von  $\hat{A}|\mathbf{j}(I)\rangle = I|\mathbf{j}(I)\rangle \quad \|\mathbf{j}(I)\| = 1$

heißt EIGENVEKTOR zum EIGENWERT  $I$  :

**Erwartungswert:**

$$\overline{\hat{A}}_{|\mathbf{j}(I)\rangle} = \langle \mathbf{j}(I) | \hat{A} | \mathbf{j}(I) \rangle = I$$

**Def.:**

Ein Eigenwert heißt ENTARTET, falls es mehr als einen Eigenvektor zu diesem Eigenwert gibt:

$$\hat{A}|\mathbf{j}^k(I)\rangle = I|\mathbf{j}^k(I)\rangle \quad \|\mathbf{j}(I)\| = 1$$

$$k = 1, \dots, k_I$$

Dann spannen die  $|\mathbf{j}^k(I)\rangle$  den Eigenraum zu  $I$  auf.

Die Dimension des Eigenraums ist durch die Maximalzahl der linear unabhängigen Eigenfunktionen zu diesem Eigenwert gegeben ( := Entartungsgrad)

$$\hat{A}|\mathbf{j}^k(I)\rangle = I|\mathbf{j}^k(I)\rangle \quad \|\mathbf{j}(I)\| = 1$$

$$|\mathbf{j}^k(I)\rangle = \mathbf{b}_k(I)|\mathbf{j}^k(I)\rangle \quad \|\mathbf{b}_k(I)\| = 1$$

Dann:

$$\mathbf{b}_k(I) = e^{ig_k(I)}$$

ist Phasenfaktor !!

Die Eigenwerte selbstadjungierter Operatoren sind reell. Eigenfunktionen ( Eigenvektoren) zu verschiedenen Eigenwerten sind zueinander orthogonal.

Zum gleichen Eigenwert kann immer ein vollständiges ONS gewählt werden.

#### 3.4.3 Vertauschbare Operatoren

$$\hat{A} = \hat{A}^+, \hat{B} = \hat{B}^+, \hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} \text{ ohne Entartung}$$

dann gilt:

$$\hat{A} = \hat{A}^+, \hat{B} = \hat{B}^+, \hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$$

$$\hat{B}\hat{A}|\mathbf{j}(I)\rangle = I\hat{B}|\mathbf{j}(I)\rangle = \hat{B}I|\mathbf{j}(I)\rangle = \hat{A}\hat{B}|\mathbf{j}(I)\rangle$$

Also:

$$\hat{B}|\mathbf{j}(I)\rangle \text{ ist wie } |\mathbf{j}(I)\rangle \text{ Eigenvektor von } \hat{A} \text{ zum Eigenwert } I$$

$$\text{Also: } \hat{B}|\mathbf{j}(I)\rangle = \mathbf{a}|\mathbf{j}(I)\rangle$$

## 2.5 Dynamik im Schrödinger- Heisenberg- und Wechselwirkungsbild

Betrachte die zeitabhängigen Zustände  $|\Psi\rangle_t$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle_t = \hat{H} |\Psi\rangle_t$$

Die zeitabhängige Schrödingergleichung kann formal gelöst werden:

$$|\Psi\rangle_t = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} |\Psi\rangle_0 = U(t,0) |\Psi\rangle_0$$

Definition des Operators U geschieht über eine Potenzreihe:

$$U(t,0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( -\frac{i}{\hbar} \hat{H} t \right)^n \text{ Zeitentwicklungsoperator}$$

Setzt man dies in die Schrödingergleichung ein, so folgt:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( -\frac{i}{\hbar} t \right)^n \hat{H}^n |\Psi\rangle_0 = \hat{H} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( -\frac{i}{\hbar} t \right)^n \hat{H}^n |\Psi\rangle_0 = \hat{H} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n-1!} \left( -\frac{i}{\hbar} t \right)^{n-1} \hat{H}^{n-1} |\Psi\rangle_0$$

Da H hermitesch ist, muss U(t,0) ein unitärer Operator sein !

$$H^+ = H$$

Klar: 
$$\Rightarrow U^+ = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( \frac{i}{\hbar} t \right)^n \hat{H}^n \Rightarrow U^+ U = 1$$

Die adjungierte Schrödingergleichung lautet:

$$\langle \Psi |_t \hat{H} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \Psi |_t$$

Mit der formalen Lösung:

$$\langle \Psi |_t = \langle \Psi |_0 e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} = \langle \Psi |_0 U^+(t,0)$$

Der Erwartungswert eines Operators, der auch explizit zeitabhängig sein kann, z.B. über  $\bar{A}(t)$  ergibt sich für

$$\hat{F} = \hat{F}(\hat{r}, \hat{p}, t):$$

$$\langle \hat{F} \rangle = \langle \Psi |_t \hat{F} |\Psi\rangle_t$$

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{F} \rangle = \frac{d}{dt} \langle \Psi |_t \hat{F} |\Psi\rangle_t = \langle \Psi |_t \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} |\Psi\rangle_t + \left( \frac{\partial}{\partial t} \langle \Psi |_t \right) \frac{d}{dt} \hat{F} |\Psi\rangle_t + \langle \Psi |_t \hat{F} \left( \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle_t \right)$$

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} \langle \Psi |_t \right) = -\frac{1}{i\hbar} \langle \Psi |_t \hat{H}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle_t = \frac{1}{i\hbar} \hat{H} |\Psi\rangle_t$$

Also:

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{F} \rangle = \frac{d}{dt} \langle \Psi | \hat{F} | \Psi \rangle_t = \langle \Psi | \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}] | \Psi \rangle_t$$

Ein nicht explizit zeitabhängiger Operator ist grundsätzlich zeitlich konstant, wenn er mit dem Hamiltonoperator vertauscht.

Für einen nicht explizit zeitabhängigen Operator gilt folglich:

$$[\hat{H}, \hat{F}] = 0 \Rightarrow \frac{d}{dt} \langle \hat{F} \rangle = 0$$

### Klassisches Analogon: Poisson- Klammern

- in der klassischen Mechanik finden wir analog die Poissonklammern:

Sei  $F(\bar{q}, \bar{p}, t)$  eine klassische Observable und  $H(\bar{q}, \bar{p})$  die klassische Hamiltonfunktion, so gilt:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} F(\bar{q}, \bar{p}, t) &= \frac{\partial}{\partial t} F(\bar{q}, \bar{p}, t) + \sum_{i=1}^3 \left( \frac{\partial F(\bar{q}, \bar{p}, t)}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial F(\bar{q}, \bar{p}, t)}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) \\ \frac{d}{dt} F(\bar{q}, \bar{p}, t) &= \frac{\partial}{\partial t} F(\bar{q}, \bar{p}, t) + \sum_{i=1}^3 \left( \frac{\partial F(\bar{q}, \bar{p}, t)}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial F(\bar{q}, \bar{p}, t)}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) = \frac{\partial}{\partial t} F(\bar{q}, \bar{p}, t) + \{H, F\} \end{aligned}$$

Also gilt in der Quantenmechanik die anschauliche Relation:

$$\{H, F\} \rightarrow \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}]$$

Definiere:

Observable " zeitliche Veränderung von  $F(\bar{q}, \bar{p}, t)$  " als Operator:

$$\hat{F}^\circ = \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}]$$

**Fundamentalbeziehung** der Dynamik der Quantentheorie, aber keine Differenzialgleichung für  $\hat{F}$ , da im Allgemeinen:

$$\hat{F}^\circ \neq \frac{d\hat{F}}{dt}$$

Der Operator der zeitlichen Veränderung ist lediglich über seinen Erwartungswert definiert:

$$\langle \hat{F}^\circ \rangle = \frac{d}{dt} \langle \hat{F} \rangle$$

**Speziell gilt**, analog zu den klassischen Hamiltonschen Gleichungen:

$$\hat{r}^\circ = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{r}]$$

$$\hat{p}^\circ = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{p}]$$

Merke dazu ( Ehrenfest- Theorem):

$$\partial_t \hat{r} = 0$$

$$\partial_t \hat{p} = 0$$

-> die partiellen Zeitableitungen verschwinden. Die Operatoren für Ort und Impuls sind nicht explizit zeitabhängig !

Mit der Allgemeinen Hamiltonfunktion für ein Potenzial, nämlich



$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r})$$

folgt:

$$[\hat{H}, \hat{x}_k] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}_k}$$

$$[\hat{H}, \hat{p}_k] = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{x}_k}$$

Also:

$$\hat{r}^\circ = \frac{\hat{p}}{m}$$

$$\hat{p}^\circ = -\nabla V(\hat{r})$$

Denn:

$$[\hat{H}, \hat{x}_k] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}_k} = \frac{\hbar}{i} \hat{x}_k^\circ \Rightarrow \hat{x}^\circ = \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}} = \frac{\hat{p}}{m}$$

$$[\hat{H}, \hat{p}_k] = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{x}_k} \Rightarrow \hat{p}^\circ = -\frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{x}} = -\nabla V(\hat{x})$$

Merke:

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{r} \rangle = \langle \hat{r}^\circ \rangle$$

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle = \langle \hat{p}^\circ \rangle$$

Woraus das Ehrenfestsche Theorem folgt:

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{r} \rangle = \frac{1}{m} \langle \hat{p} \rangle$$

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle = -\langle \nabla V(\hat{r}) \rangle$$

$$\text{da ja: } \partial_t \hat{r} = 0$$

$$\partial_t \hat{p} = 0$$

das heißt, die Erwartungswerte quantenmechanischer Observablen gehorchen den klassischen Bewegungsgleichungen

### **Bilder:**

Da die Erwartungswerte invariant bei unitären Transformationen U sind, sind Operatoren und Zustände nur bis auf UNITÄR-ÄQUIVALENZ festgelegt:

$$|\Psi\rangle \rightarrow |\Psi'\rangle = U|\Psi\rangle$$

$$\hat{F} \rightarrow \hat{F}' = U\hat{F}U^\dagger$$

Für verschiedene, zeitabhängige U erhält man sogenannte verschiedene "Bilder":

Im Folgenden gelte  $\frac{\partial \hat{F}}{\partial t} = 0$ , also keine explizite Zeitabhängigkeit !

Merke: Hat man ein Bild gefunden, so kann man die Zustände und Operatoren durch eine beliebige unitäre Trafo "verdrehen" und man hat ein neues Bild !

### Schrödingerbild:

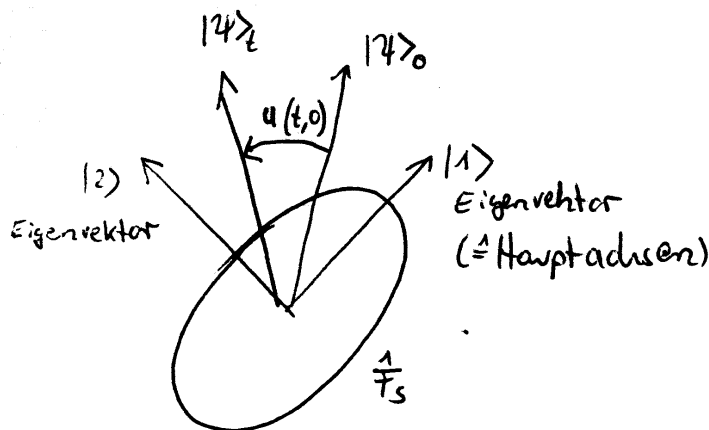
Operatoren  $\hat{F}_S(\hat{r}, \hat{p})$  zeitunabhängig

Eigenvektoren  $|n\rangle$  zeitunabhängig

Aber: Allgemeine Zustände, Zustandsvektoren:  $|\Psi\rangle$  zeitabhängig (Die Zeitabhängigkeit wird dabei durch die Schrödingergleichung beschrieben):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle_t = \hat{H} |\Psi\rangle_t$$

Veranschaulichung im  $R^2$ :



Unitäre Transformationen, wie die Zeitentwicklung, sind IMMER Drehungen im Hilbertraum!

Im Schrödingerbild werden somit die Zustände im Hilbertraum durch unitäre Transformationen gedreht !

Im  $R^2$  entspricht  $\hat{F}_S$  einer 2x2- Matrix, definiert eine symmetrische, quadratische Form. ( Übungsaufgabe !)

Die Eigenvektoren des Systems sind Hauptachsen und die Zeitentwicklung des Zustandes folgt:

$$|\Psi\rangle_t = U(t,0) |\Psi\rangle_0$$

### Das Heisenbergbild

$$\langle \hat{F}_S \rangle = \langle \Psi | \hat{F}_S | \Psi \rangle_t = \langle \Psi |_0 U^\dagger(t,0) \hat{F}_S U(t,0) | \Psi \rangle_0$$

$$U^\dagger(t,0) \hat{F}_S U(t,0) = \hat{F}_H(t)$$

In diesem Bild sind die

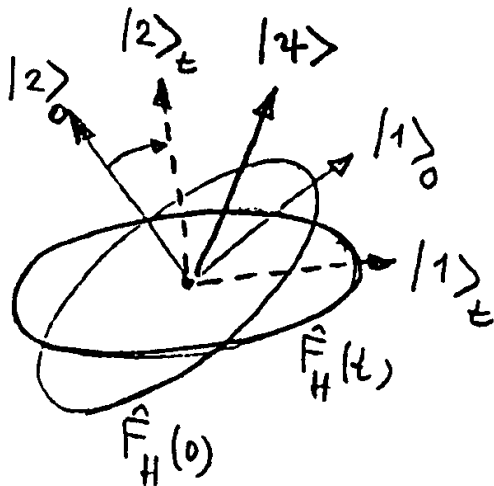
Operatoren  $\hat{F}_H(t)$  zeitabhängig

und damit Eigenvektoren  $|n\rangle$  zeitabhängig

Aber: Allgemeine Zustände, Zustandsvektoren:  $|\Psi\rangle = |\Psi\rangle_0$  zeitunabhängig:

Veranschaulichung im  $R^2$ :

Im Heisenbergbild werden folglich die Operatoren und ihre Eigenvektoren ( zwangsläufig) unter unitären Transformationen im Hilbertraum verdreht ( als Zeitentwicklung).



Aus

$$\hat{F}_H(t) = e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \hat{F}_S e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}$$

folgt:

$$\frac{d}{dt} \hat{F}_H(t) = \frac{i}{\hbar} \hat{H} e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \hat{F}_S e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} + e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \hat{F}_S \left( -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \right) e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}$$

Also:

$$\frac{d}{dt} \hat{F}_H(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}_H] \quad (\text{Operatoren im Heisenbergbild gehorchen der Von-Neumann-}$$

Bewegungsgleichung)

Somit folgt für das Heisenbergbild:

$$\hat{F}^{\circ}_H = \frac{d}{dt} \hat{F}_H(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}_H]$$

Insbesondere gilt:

$$\frac{d}{dt} \hat{H}_H = 0$$

also die bildunabhängige Darstellung

$$\hat{H}_H = \hat{H}_S = \hat{H}$$

Merke: Der Hamiltonian ist grundsätzlich bildunabhängig.

### Wechselwirkungsbild

$$\text{Sei } \hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}^1$$

mit dem ungestörten Hamiltonoperator  $\hat{H}^0$  und der Störung  $\hat{H}^1$ .

Es gilt die Zeitentwicklung des Operators F für das Wechselwirkungsbild:

$$\hat{F}_W(t) = e^{\frac{i\hat{H}^0 t}{\hbar}} \hat{F}_S e^{-\frac{i\hat{H}^0 t}{\hbar}}$$

Somit gilt wieder die Relation

$$\frac{d}{dt} \hat{F}_W(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}^0, \hat{F}_W]$$

Also:

$$\frac{d}{dt} \hat{H}^0 = 0$$

Somit ist auch hier der ungestörte Hamiltonian  $\hat{H}^0 = \hat{H}_S = \hat{H}_H$  bildunabhängig.

Aber:

$$\frac{d}{dt} \hat{H}_W(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}^0, \hat{H}_W] = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}^0, \hat{H}^1] \neq 0 \text{ im Allgemeinen}$$

$$\langle \hat{F}_S \rangle = \langle \Psi |_t \hat{F}_S | \Psi \rangle_t = \langle \Psi |_t e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} e^{+\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} \hat{F}_S e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} e^{+\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} | \Psi \rangle_t$$

$$\langle \Psi |_t e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} = \langle \Psi |_W$$

$$e^{+\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} \hat{F}_S e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} = \hat{F}_W(t)$$

$$e^{+\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} | \Psi \rangle_0 = | \Psi \rangle_W$$

$$\langle \hat{F}_S \rangle = \langle \Psi |_W \hat{F}_W(t) | \Psi \rangle_W$$

Bemerkung: Die Erwartungswertbildung formal gilt natürlich für alle Bilder.

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} | \Psi \rangle_W = \frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 e^{+\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} | \Psi \rangle_t + e^{+\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} \frac{\partial}{\partial t} | \Psi \rangle_t$$

$$\frac{\partial}{\partial t} | \Psi \rangle_t = \frac{1}{i\hbar} \hat{H}_S | \Psi \rangle_t = \frac{1}{i\hbar} \hat{H}_S e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} | \Psi \rangle_W$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} | \Psi \rangle_W = \frac{1}{i\hbar} (-\hat{H}^0 | \Psi \rangle_W + \hat{H}_W | \Psi \rangle_W)$$

wegen

$$e^{+\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} \hat{H}_S e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} = \hat{H}_W$$

$$e^{+\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} | \Psi \rangle_t = | \Psi \rangle_W$$

Aber:

$$\hat{H}_W = \hat{H}^0 + \hat{H}^1$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} | \Psi \rangle_W = \frac{1}{i\hbar} \hat{H}^1 | \Psi \rangle_W$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} | \Psi \rangle_W = \frac{1}{i\hbar} \hat{H}_W^1 | \Psi \rangle_W$$

$$\frac{d}{dt} \hat{F}_W(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}^0, \hat{F}_W]$$

Merke: Die Zeitentwicklung der Zustände erfolgt hier über den Störoperator im Hamiltonian:

$$| \Psi \rangle_W(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}^1 t} | \Psi \rangle_W(0)$$

Zur Verdeutlichung des Wechselwirkungsbildes soll auch der Hamiltonoperator einen Index erhalten. Dies bedeutet: Operatoren, Eigenvektoren und allgemeine Zustände sind zeitabhängig.

Operatoren  $\hat{F}_W(t)$  zeitabhängig, Abhängigkeit gegeben durch ungestörten Hamiltonoperator  $\hat{H}^0$

und damit Eigenvektoren  $|n\rangle$  zeitabhängig, ebenso durch den ungestörten Hamiltonian

Aber: Allgemeine Zustände, Zustandsvektoren:  $|\Psi\rangle_W$  zeitabhängig mit gegebener Zeitentwicklung durch den Störoperator  $\hat{H}_W$ .

## 2.6 Der harmonische Oszillator

Anwendungsbeispiel der abstrakten Darstellung im Hilbertraum: der eindimensionale harmonische Oszillator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}^2 \quad \text{Als Hamiltonoperator}$$

Es gilt die Vertauschungsrelation

$$[\hat{p}, \hat{x}] = \frac{\hbar}{i}$$

Besser:

$$[\hat{p}_l, \hat{x}_k] = \frac{\hbar}{i} \mathbf{d}_{kl}$$

Definition eines Operators, des Leiteroperators ( nicht hermitesch !!)

$$a := \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hat{p} - i\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x}$$

$$a^+ := \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hat{p} + i\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x}$$

$$\Rightarrow aa^+ = \frac{1}{2m\hbar\omega} \hat{p}^2 + \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{x}^2 + \frac{i}{2\hbar} (\hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p}) = \frac{1}{2m\hbar\omega} \hat{p}^2 + \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{x}^2 + \frac{i}{2\hbar} [\hat{p}, \hat{x}]$$

$$[\hat{p}, \hat{x}] = \frac{\hbar}{i}$$

$$\Rightarrow aa^+ = \frac{1}{2m\hbar\omega} \hat{p}^2 + \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{x}^2 + \frac{1}{2} = \frac{1}{\hbar\omega} \hat{H} + \frac{1}{2}$$

Merke:

Ausgangspunkt unserer ganzen Überlegungen ist eine Definition, nämlich die Definition der Leiteroperatoren:

$$a := \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hat{p} - i\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x}$$

$$a^+ := \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hat{p} + i\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x}$$

Ebenso:

$$a^+a = \frac{1}{2m\hbar\omega} \hat{p}^2 + \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{x}^2 - \frac{i}{2\hbar} (\hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p}) = \frac{1}{2m\hbar\omega} \hat{p}^2 + \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{x}^2 - \frac{i}{2\hbar} [\hat{p}, \hat{x}]$$

$$[\hat{p}, \hat{x}] = \frac{\hbar}{i}$$

$$\Rightarrow a^+a = \frac{1}{2m\hbar\omega} \hat{p}^2 + \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{x}^2 - \frac{1}{2} = \frac{1}{\hbar\omega} \hat{H} - \frac{1}{2}$$

$$\Rightarrow [a, a^+] = 1$$

$$aa^+ + a^+a = \frac{2}{\hbar\omega} \hat{H}$$

Somit:

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

Merke dazu:

$$aa^\dagger = \frac{1}{2m\hbar\omega} \hat{p}^2 + \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{x}^2 + \frac{i}{2\hbar} (\hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p}) = \frac{1}{2m\hbar\omega} \hat{p}^2 + \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{x}^2 + \frac{i}{2\hbar} [\hat{p}, \hat{x}]$$

Somit:

$$\frac{i}{2\hbar} [\hat{p}, \hat{x}] \text{ als verantwortlicher Term für die Grundzustandsenergie:}$$

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega$$

Also: Die Grundzustandsenergie folgt direkt aus der Unschärfe !

Weitere Vertauschungsrelationen:

$$\begin{aligned} (aa^\dagger)a &= \frac{1}{\hbar\omega} \hat{H}a + \frac{1}{2}a \\ &= a(a^\dagger a) = \frac{1}{\hbar\omega} a\hat{H} - \frac{1}{2}a \\ \Rightarrow [a, \hat{H}] &= a\hat{H} - \hat{H}a = \hbar\omega a \end{aligned}$$

Ebenso die adjungierte Version:

$$-[a^\dagger, \hat{H}] = (a\hat{H})^* - (\hat{H}a)^* = \hbar\omega a^\dagger$$

**Verallgemeinerung**

$$\left[ a, (a^\dagger)^n \right] = n(a^\dagger)^{n-1} = \frac{\partial}{\partial a^\dagger} (a^\dagger)^n$$

**Beweis: Vollständige Induktion:**

$$n=1 \quad \left[ a, (a^\dagger)^1 \right] = 1$$

$$\text{Sei } \left[ a, (a^\dagger)^n \right] = n(a^\dagger)^{n-1} = \frac{\partial}{\partial a^\dagger} (a^\dagger)^n \text{ für } n \geq 1$$

$$\left[ a, (a^\dagger)^{n+1} \right] = a(a^\dagger)^{n+1} - (a^\dagger)^{n+1}a = a(a^\dagger)^{n+1} - (a^\dagger)^n aa^\dagger + (a^\dagger)^n aa^\dagger - (a^\dagger)^{n+1}a$$

$$\Rightarrow \left[ a, (a^\dagger)^{n+1} \right] = \left[ a, (a^\dagger)^n \right] a^\dagger + (a^\dagger)^n \left[ a, a^\dagger \right]$$

$$\left[ a, (a^\dagger)^n \right] = n(a^\dagger)^{n-1}$$

$$\Rightarrow \left[ a, (a^\dagger)^{n+1} \right] = n(a^\dagger)^{n-1} a^\dagger + (a^\dagger)^n = (n+1)(a^\dagger)^n$$

**Adjungierte Version:**

$$\left[ a^\dagger, a^n \right] = -n(a)^{n-1} = -\frac{\partial}{\partial a} (a)^n$$

Somit gilt für beliebige, in Potenzreihen von Auf- oder Absteiger entwickelbare Funktionen f:

$$\left[ a, f(a^+) \right] = \frac{\partial}{\partial a^+} f(a^+)$$

$$\left[ a^+, f(a) \right] = -\frac{\partial}{\partial a} f(a)$$

### Eigenwerte von H

Sei  $|E\rangle$  ein normierter Eigenvektor von  $\hat{H}$  mit  $\hat{H}|E\rangle = E|E\rangle$

So gilt:

$$\hbar\omega \langle E|a^+a|E\rangle = \langle E|\hat{H} - \frac{\hbar\omega}{2}|E\rangle = \langle E|E - \frac{\hbar\omega}{2}|E\rangle = E - \frac{\hbar\omega}{2}$$

$$\langle E|a^+a|E\rangle = \langle \Psi|\Psi\rangle \geq 0$$

Das bedeutet:

$$E \geq \frac{\hbar\omega}{2}$$

Das Energiespektrum ist also nach unten beschränkt und gleichzeitig vernichtet der

$$E \geq \frac{\hbar\omega}{2} \Leftrightarrow a|E\rangle = 0$$

Absteigeoperator den Zustand mit der niedrigsten Energie

### **Behauptung**

$a|E\rangle$  ist Eigenzustand zu  $\hat{H}$  mit dem Eigenwert  $E - \hbar\omega$ :

$$\text{Also: } \hat{H}a|E\rangle = (E - \hbar\omega)a|E\rangle$$

**Beweis:**

$$\hat{H}a|E\rangle = (a\hat{H} - \hbar\omega)a|E\rangle = a(\hat{H} - \hbar\omega)|E\rangle = a(E - \hbar\omega)|E\rangle = (E - \hbar\omega)a|E\rangle$$

Dabei gilt

$$\hat{H}a|E\rangle = (a\hat{H} - \hbar\omega)a|E\rangle$$

wegen

$$[a, \hat{H}] = \hbar\omega a$$

Durch wiederholte Anwendung könnte man Eigenzustände  $|E\rangle \neq 0$  mit beliebig tiefer Energie erzeugen, wenn

nicht  $E \geq \frac{\hbar\omega}{2}$  gelten würde.

Daher existiert ein  $m \in \mathbb{N}$  so dass  $a^m|E\rangle = 0$  aber  $a^{m-1}|E\rangle \neq 0$

Also definiere man einen Grundzustand:

$$|0\rangle := a^{m-1}|E\rangle$$

Vorsicht ! Dieser ist gerade nicht ein NULL- KET, sondern: Der Zustand zur Quantenzahl n=0

$$\hat{H}|0\rangle = \hbar\omega \left( a^+a + \frac{1}{2} \right) |0\rangle = \frac{1}{2} \hbar\omega |0\rangle$$

wegen

$$a|0\rangle = a^m|E\rangle = 0$$

Also:

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$$

$$a|0\rangle = a^m|E\rangle = 0$$

Weiter:

$$\hat{H}a^+|0\rangle = (a^+H + \hbar\omega a^+)|0\rangle = a^+(\hat{H} + \hbar\omega)|0\rangle = a^+\left(\frac{\hbar\omega}{2} + \hbar\omega\right)|0\rangle = \frac{3\hbar\omega}{2}a^+|0\rangle$$

Der erste Schritt gilt wieder wegen der Vertauschungsrelation

$$[a^+, \hat{H}] = -\hbar\omega a^+$$

Das heißt nun aber, dass  $a^+|0\rangle$  der Eigenzustand von  $\hat{H}$  zum Eigenwert  $\frac{3\hbar\omega}{2}$  ist.

### Vollständige Induktion

$$\hat{H}(a^+)^n|0\rangle = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)(a^+)^n|0\rangle$$

Dann:

$$\hat{H}(a^+)^{n+1}|0\rangle = (a^+\hat{H} + \hbar\omega a^+)(a^+)^n|0\rangle = a^+(\hat{H} + \hbar\omega)(a^+)^n|0\rangle$$

$$(\hat{H} + \hbar\omega)(a^+)^n|0\rangle = \left(\hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega\right)(a^+)^n|0\rangle$$

$$\Rightarrow \hat{H}(a^+)^{n+1}|0\rangle = a^+(\hat{H} + \hbar\omega)(a^+)^n|0\rangle = \hbar\omega\left(n + 1 + \frac{1}{2}\right)(a^+)^{n+1}|0\rangle$$

Normierung der Eigenzustände  $(a^+)^n|0\rangle$ :

Der Grundzustand sei normiert:

$$\langle 0|0\rangle = 1$$

Dann folgt für den n-ten angeregten Zustand:

$$|n\rangle = \mathbf{a}_n (a^+)^n|0\rangle \text{ mit Normierungsfaktor } \mathbf{a}_n:$$

$$1 = \langle n|n\rangle = |\mathbf{a}_n|^2 \langle 0|a^n (a^+)^n|0\rangle$$

$$\langle 0|a^n (a^+)^n|0\rangle = \langle 0|a^{n-1} \left( (a^+)^n a + \left[ a, (a^+)^n \right] \right) |0\rangle$$

wegen

$$\left[ a, (a^+)^n \right] = n(a^+)^{n-1}$$

Somit:

$$\langle 0|a^n (a^+)^n|0\rangle = \langle 0|a^{n-1} \left( (a^+)^n a + \left[ a, (a^+)^n \right] \right) |0\rangle = \langle 0|a^{n-1} (a^+)^n a|0\rangle + n \langle 0|a^{n-1} (a^+)^{n-1}|0\rangle$$

$$\langle 0|a^{n-1} (a^+)^n a|0\rangle = 0$$

$$\Rightarrow n \langle 0|a^{n-1} (a^+)^{n-1} a|0\rangle = n(n-1) \langle 0|a^{n-2} (a^+)^{n-2} a|0\rangle \Rightarrow \dots \Rightarrow$$

Dieser Algorithmus wird n- mal angewendet:

$$\Rightarrow \langle 0|a^n (a^+)^n a|0\rangle = n! \langle 0|0\rangle = n!$$

Somit folgt bis auf einen willkürlichen Phasenfaktor:

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^n|0\rangle \text{ für NORMIERTE EIGENZUSTÄNDE des harmonischen Oszillators}$$



und diese gehören zu den Energiewerten

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

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$$

### Quantensprechweise:

$E_n - E_{n-1} = \hbar \omega \left( n + \frac{1}{2} \right) - \hbar \omega \left( n - 1 + \frac{1}{2} \right) = \hbar \omega$  ist die Energie eines "Schwingungsquants". Man sagt auch, es IST ein Schwingungsquant !

$|n\rangle$  ist ein Zustand mit n Schwingungsquanten ( Phononen) der Frequenz  $\omega$

$a$  ist der Vernichtungsoperator für Schwingungsquanten

$a^+$  der Erzeugungsoperator für Schwingungsquanten

$$a|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} a (a^+)^n |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left\{ (a^+)^n a + \left[ a, (a^+)^n \right] \right\} |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} n (a^+)^{n-1} |0\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$$

$$a^+|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^{n+1} |0\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$$

### **Teilchenzahloperator**

$$N := a^+ a$$

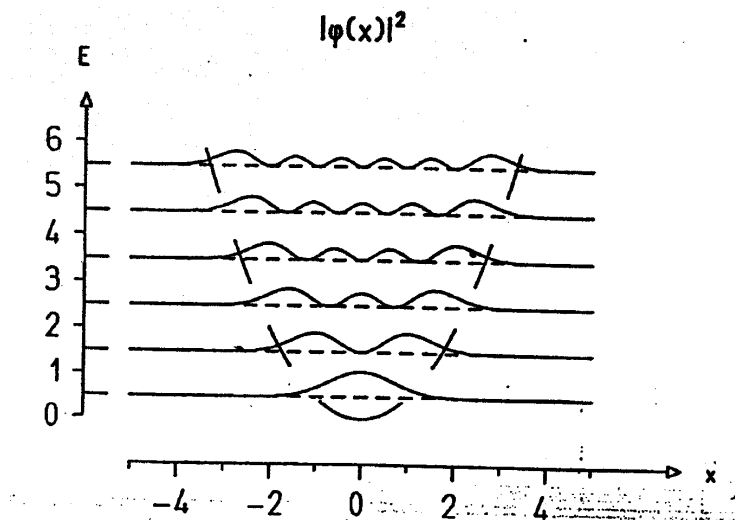
$$N|n\rangle = a^+ a|n\rangle = a^+ \sqrt{n} |n-1\rangle = \sqrt{n} \sqrt{n} |n\rangle = n|n\rangle$$

In Übereinstimmung mit

$$\hat{H}|n\rangle = \hbar \omega \left( a^+ a + \frac{1}{2} \right) |n\rangle = \hbar \omega \left( n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle$$

### **Veranschaulichung**

Die folgende Grafik demonstriert die äquidistanten Energieniveaus im Oszillatorpotenzial. Dabei werden die stationären Zustände  $|\psi_j(x)|^2$  dargestellt, also als Aufenthaltswahrscheinlichkeit

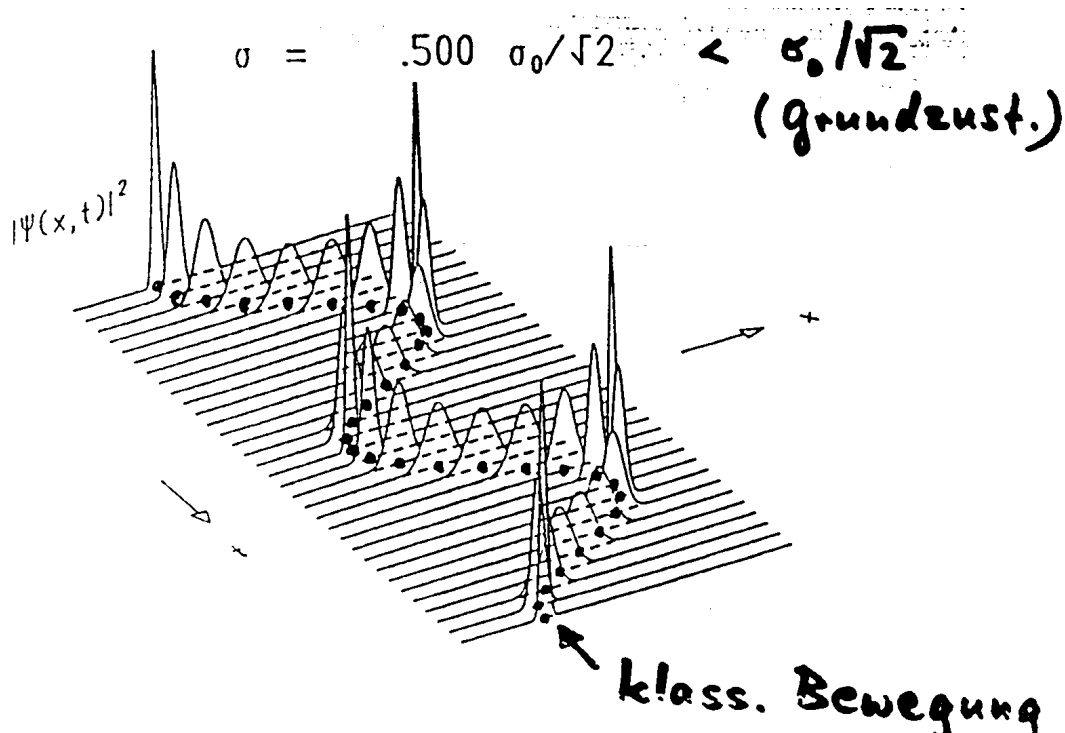


Die Bewegung eines Wellenpaketes im Harmonischen Oszillator, also im  $x^2$ - Potenzial für  $S = \frac{0,5S_0}{\sqrt{2}}$ , also

mit einem  $S < \frac{S_0}{\sqrt{2}}$ , wobei  $\frac{S_0}{\sqrt{2}}$  das  $S$  des Grundzustands darstellt, sieht folgendermaßen aus:

Es ist das  $S = \frac{S_0}{\sqrt{2}}$  für die kohärenten / Glauber - Zustände

Das heißt: Die Standardabweichung des quantenmechanischen Oszillators ist kleiner als bei Berechnung über Glauberzustände (kohärente Zustände)



### Zusammenhang mit der Ortsdarstellung

Bisher haben wir vollständig darstellungsfrei gerechnet! Nun soll die darstellungsfreie Rechnung durch Operatoren in expliziten Darstellungen ersetzt werden!

Mit  $j_n(x) = \langle x | n \rangle$  und  $a := \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hat{p} - i\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x}$  gilt:

$$a \left( x, \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right) j_n(x) = \left( \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hat{p} - i\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} \right) j_n(x)$$

$$\hat{x} := \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x}$$

$$x := \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x$$

$$\Rightarrow a \left( x, \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right) j_n(x) = \frac{1}{i\sqrt{2}} \left( \hat{x} + \frac{d}{d\mathbf{x}} \right) j_n(\mathbf{x})$$

$$\hat{x} := \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x}$$

Dabei gilt: sind dimensionslose Größen, die sogenannten Normalkoordinaten!

$$x := \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x$$

In  $\Rightarrow a\left(x, \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}\right) \mathbf{j}_n(x) = \frac{1}{i\sqrt{2}} \left(\hat{\mathbf{x}} + \frac{d}{d\mathbf{x}}\right) \mathbf{j}_n(\mathbf{x})$  wird über  $\left(\hat{\mathbf{x}} + \frac{d}{d\mathbf{x}}\right)$  der Impulsanteil durch die Ortsdarstellung des Impulsoperators ersetzt.

Den Grundzustand gewinnt man leicht aus dem Ansatz  $a|\mathbf{j}_0\rangle = 0$  mit  $|\mathbf{j}_0\rangle := |0\rangle$

Wegen  $a|0\rangle = 0$  folgt für  $n=0$ :

$$0 = \left(\hat{\mathbf{x}} + \frac{d}{d\mathbf{x}}\right) \mathbf{j}_0(\mathbf{x})$$

$$\Rightarrow \frac{d\mathbf{j}_0}{d\mathbf{x}} = -\mathbf{x} \mathbf{j}_0$$

Somit ergibt sich:

$$\mathbf{j}_0(\mathbf{x}) = A_0 e^{\left(-\frac{\mathbf{x}^2}{2}\right)}$$

$$A_0 = \left(\frac{m\omega}{\hbar p}\right)^{\frac{1}{4}}$$

Wobei sich  $A_0$  aus der Normierung ergibt. Der Grundzustand im Oszillator ist also ein Gaußzustand, eine normierte Gaußglocke mit einer Halbwertsbreite, die in  $\mathbf{x}$  enthalten ist.

**Für die angeregten Zustände gilt:**

$$\mathbf{j}_1(\mathbf{x}) = a^+ \mathbf{j}_0(\mathbf{x}) = \frac{1}{i\sqrt{2}} \left(\mathbf{x} - \frac{d}{d\mathbf{x}}\right) \mathbf{j}_0(\mathbf{x}) = -\frac{1}{i\sqrt{2}} e^{\left(\frac{\mathbf{x}^2}{2}\right)} \frac{d}{d\mathbf{x}} \left(e^{\left(-\frac{\mathbf{x}^2}{2}\right)} \mathbf{j}_0(\mathbf{x})\right)$$

$$\Rightarrow \mathbf{j}_1(\mathbf{x}) = -\frac{1}{i\sqrt{2}} e^{\left(\frac{\mathbf{x}^2}{2}\right)} \frac{d}{d\mathbf{x}} (A_0 e^{(-\mathbf{x}^2)})$$

$$A_0 = \left(\frac{m\omega}{\hbar p}\right)^{\frac{1}{4}}$$

Die angeregten Zustände werden also einfach durch Anwendung des Aufsteigeoperators aus dem Grundzustand erzeugt !

Für den  $n$ -ten angeregten Zustand ( Induktion !) damit:

$$\mathbf{j}_n(\mathbf{x}) = \frac{(a^+)^n}{\sqrt{n!}} \mathbf{j}_0(\mathbf{x}) = \frac{1}{i^n \sqrt{2^n n!}} \left(\mathbf{x} - \frac{d}{d\mathbf{x}}\right)^n \mathbf{j}_0(\mathbf{x}) = \frac{1}{i^n} \frac{A_0}{\sqrt{2^n n!}} (-1)^n e^{\left(\frac{\mathbf{x}^2}{2}\right)} \frac{d^n}{(d\mathbf{x})^n} e^{-\mathbf{x}^2}$$

$$\frac{A_0}{\sqrt{2^n n!}} := A_n$$

$$A_0 = \left(\frac{m\omega}{\hbar p}\right)^{\frac{1}{4}}$$

$$(-1)^n e^{\left(\frac{\mathbf{x}^2}{2}\right)} \frac{d^n}{(d\mathbf{x})^n} e^{-\mathbf{x}^2} := H_n(\mathbf{x}) e^{-\frac{\mathbf{x}^2}{2}}$$

Dabei kann  $\frac{1}{i^n}$  als Phasenfaktor ( für die Wahrscheinlichkeit irrelevant) weggelassen werden

und  $H_n$  bezeichnet die sogenannten Hermiteschen Polynome vom Grad n.

Die Eigenzustände des harmonischen Oszillators beinhalten also die Hermité- Polynome

$$\mathbf{j}_n(\mathbf{x}) = \frac{1}{i^n} \frac{A_0}{\sqrt{2^n n!}} (-1)^n e^{\left(\frac{\mathbf{x}^2}{2}\right)} \frac{d^n}{(d\mathbf{x})^n} e^{-\mathbf{x}^2}$$

$$\Rightarrow \mathbf{j}_n(\mathbf{x}) = \frac{\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{(-2)^n n!}} H_n(\mathbf{x}) e^{-\frac{\mathbf{x}^2}{2}}$$

Explizit lauten diese Hermiteschen Polynome ( wie aus obiger Relation berechnet werden kann):

$$H_0(\mathbf{x}) = 1$$

$$H_1(\mathbf{x}) = 2\mathbf{x}$$

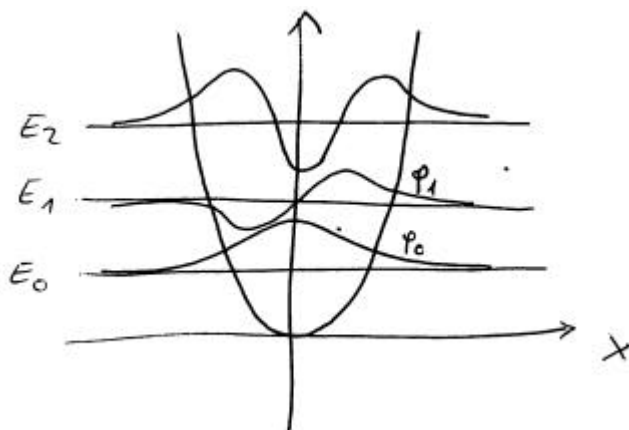
$$H_2(\mathbf{x}) = 4\mathbf{x}^2 - 2$$

$$H_3(\mathbf{x}) = 2\mathbf{x}^3 - 12\mathbf{x}$$

Letztendlich bezeichnet

$(-1)^n$  die Parität von  $\mathbf{j}_n$

Die Wellenfunktionen im Oszillatorpotenzial ( die Wurzeln der Wahrscheinlichkeiten) werden folgendermaßen schematisch dargestellt:



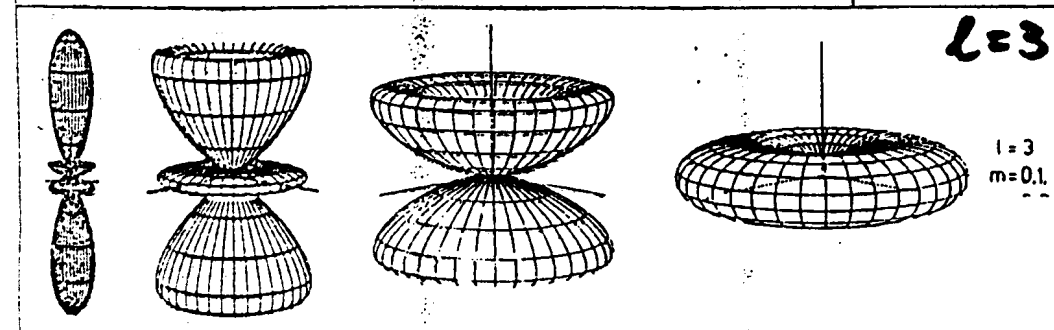
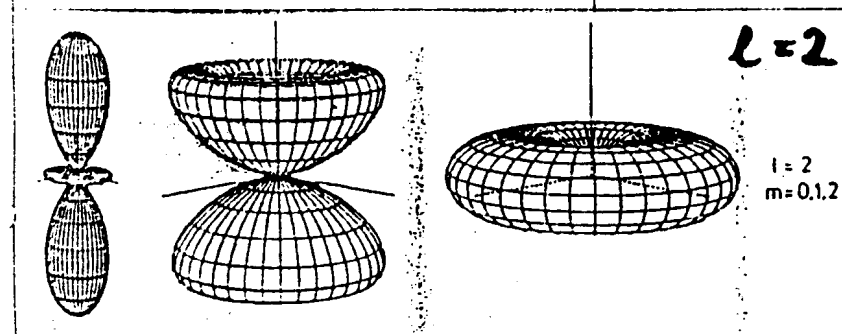
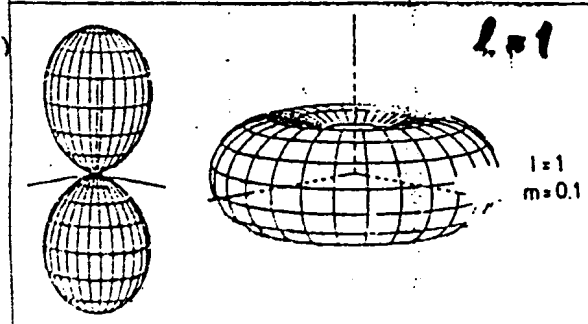
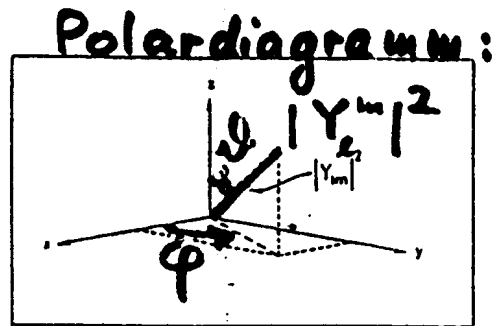
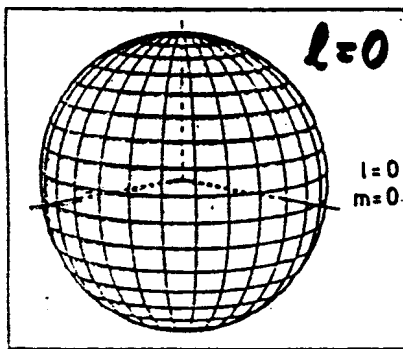
Für das Wasserstoffatom ergeben sich als Wellenfunktion die Kugelflächenfunktionen  $Y_l^m(\mathbf{J}, \mathbf{j})$ .

Bei Polardiagrammen gibt dabei der Betrag des Radiusvektors, der das Diagramm zeichnet

$r = |Y_l^m(\mathbf{J}, \mathbf{j})|^2$  das Betragsquadrat der Kugelflächenfunktion an.

Also die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Elektrons im Kraftfeld des Protons.

Dabei gibt es für verschiedene Drehimpulsquantenzahlen L verschiedene Wellenfunktionen zum gleichen Energieeigenwert. Die Niveaus sind ( ohne den Spin) L+1 - fach entartet ! die Charakterisierung erfolgt durch die magnetische Quantenzahl m



## Einwurf: Kohärente (quasiklassische) Zustände

### Abstract

Untersucht man die stationären Zustände  $|j_n\rangle$  des harmonischen Oszillators, so sind die Erwartungswerte von Ort und Impuls in einem solchen Zustand Null. Statt dessen ergeben sich von Null verschiedene Erwartungswerte  $\langle \hat{X}^2 \rangle$  und  $\langle \hat{P}^2 \rangle$ , sogenanntes Quantenrauschen, welches für die Heisenbergsche

Unschärferelation verantwortlich ist.

Aus der klassischen Mechanik ist jedoch bekannt, dass Ort und Impuls eines Oszillators sich periodisch ändern. Sie können nur dann konstant gleich null sein, wenn das auch für die Energie der Fall ist.

Für die Energie gilt jedoch:  $\langle \hat{H} \rangle = (n + \frac{1}{2})\hbar \omega$ . Bekanntlich gelangt die Quantenmechanik für große Quantenzahlen hinsichtlich ihrer Ergebnisse zu den gleichen Resultaten wie die klassische Mechanik. Es drängt sich also die Frage auf: Kann man Quantenzustände konstruieren, für die die physikalischen Voraussagen der Quantenmechanik zumindest bei einem makroskopischen Oszillator mit den Aussagen der klassischen Mechanik identisch sind ?

Derartige Zustände existieren. Es sind kohärente Überlagerungen aller stationären Zustände  $|j_n\rangle$ . Man nennt sie deshalb auch quasiklassische oder kohärente Zustände.

Bei der elektromagnetischen Strahlung kann man den Fall beobachten, dass klassische Lösungen übergehen in Effekte, die deutlichen Quantencharakter zeigen. Die Interferenz von Photonen am Doppelspalt bei äußerst geringen Intensitäten ist nur ein Beispiel. Die kohärenten Zustände spielen deshalb auch in der Quantenoptik eine große Rolle. Sie wurden von Glauber eingeführt und heißen demnach auch Glauberzustände.

Bekanntlich vertauschen die Operatoren für Ort und Impuls nicht. Ein Zustand, aus dem exakt die klassischen Ergebnisse resultieren kann demnach gar nicht existieren. Wir begnügen uns mit der Suche nach einem Zustand, für den zu einer beliebigen Zeit  $t$  die Erwartungswerte von Ort, Impuls und Energie möglichst nahe an den entsprechenden klassischen Werten liegen.

Das Ergebnis wird ein Kompromiss sein, bei dem keine der drei Observablen vollständig bestimmt ist, jedoch wird sich herausstellen, dass man im makroskopischen Grenzfall die Standardabweichungen der Größen gänzlich vernachlässigen darf. Am Beispiel eines makroskopischen Oszillators wird gezeigt, dass beispielsweise die Ortsunschärfe weit unter einem Kerndurchmesser liegt und damit die Ergebnisse der klassischen Mechanik weit genauer sind als dass man in makroskopischen Grenzfällen ihre Abweichungen mit physikalischen Methoden heute messen könnte.

## Der klassische Oszillator

Wir erinnern uns an die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen des Oszillators mit Masse  $m$  und Kreisfrequenz  $\omega$ :

$$\frac{d}{dt}x(t) = \frac{1}{m}p(t)$$

$$\frac{d}{dt}p(t) = -m\omega^2 x(t)$$

Ansatz sind immer die HAMILTONSCHEN GLEICHUNGEN !

Für den Übergang in die Quantenmechanik werden die Hamiltonschen Gleichungen mit dem Absteiger/Aufsteiger- Formalismus formuliert !

Der Einfachheit halber werden dimensionslose Größen eingeführt:

$$\hat{x}(t) = \mathbf{b}x(t)$$

$$\hat{p}(t) = \frac{1}{\hbar\mathbf{b}}p(t)$$

$$\mathbf{b} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

Damit haben wir hier:  $\hat{x}(t)$ ,  $\hat{p}(t)$  als Normalkoordinaten. Ich bitte, den wechselhaften Formalismus zu entschuldigen ! Hier beschreibt nun ausnahmsweise das "Dach" die Normalkoordinaten !

Die Bewegungsgleichungen lauten:

$$\frac{d}{dt}\hat{x}(t) = \mathbf{w}\hat{p}(t)$$

$$\frac{d}{dt}\hat{p}(t) = -\mathbf{w}\hat{x}(t)$$

Klassisch ist ein solcher Oszillator bestimmt, wenn für alle Zeiten Ort **und** Impuls bekannt sind. Das Problem des Oszillators eines Freiheitsgrades ist also zweidimensional, man fasst die beiden Größen x und p zu einer

komplexen Größe  $\mathbf{a}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\hat{x}(t) + i\hat{p}(t)]$  zusammen.

Das Gleichungssystem ist dann äquivalent zu einer Gleichung

$$\frac{d}{dt}\mathbf{a}(t) = -i\mathbf{w}\mathbf{a}(t)$$

Die Lösung lautet

$$\mathbf{a}(t) = \mathbf{a}(0)\exp(-i\mathbf{w}t) \quad \text{mit} \quad \mathbf{a}(0) = \mathbf{a}_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}[\hat{x}(0) + i\hat{p}(0)]$$

In der komplexen Ebene beschreibt  $\mathbf{a}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\hat{x}(t) + i\hat{p}(t)]$  einen Vektor, der mit der

Winkelgeschwindigkeit  $-\mathbf{w}$  um den Ursprung rotiert. Dabei gibt die Abszisse  $\frac{\hat{x}(t)}{\sqrt{2}}$  an, auf der Ordinate findet

sich  $\frac{\hat{p}(t)}{\sqrt{2}}$ . Die Darstellung ist also sehr einfach und eine Bewegung mit bestimmten Anfangsbedingungen ist

durch den Punkt  $\mathbf{a}_0$  bereits vollständig charakterisiert.

Aus  $\mathbf{a}(t) = \mathbf{a}(0)\exp(-i\mathbf{w}t)$  ergibt sich mit  $\mathbf{a}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\hat{x}(t) + i\hat{p}(t)]$  nun:

$$\hat{x}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\mathbf{a}(0)\exp(-i\mathbf{w}t) + \mathbf{a}(0)^*\exp(i\mathbf{w}t)]$$

$$\hat{p}(t) = \frac{-i}{\sqrt{2}}[\mathbf{a}(0)\exp(-i\mathbf{w}t) - \mathbf{a}(0)^*\exp(i\mathbf{w}t)]$$

Die klassische Energie des Systems ist zeitlich konstant:

$$E = \frac{1}{2m}[p(0)]^2 + \frac{1}{2}m\mathbf{w}^2[x(0)]^2$$

$$E = \frac{\hbar\mathbf{w}}{2}\{[p(0)]^2 + [x(0)]^2\} = \hbar\mathbf{w}|\mathbf{a}_0|^2$$

Für einen makroskopischen Oszillator ist die Energie viel größer als  $\hbar\mathbf{w}$ . Also gilt  $|\mathbf{a}_0| \gg 1$

## Definition der quasiklassischen Zustände

**Ziel:** Die Erwartungswerte  $\langle \hat{X} \rangle, \langle \hat{P} \rangle, \langle \hat{H} \rangle$  sollen zu allen Zeiten praktisch gleich den Werten  $\hat{x}, \hat{p}, \hat{H}$  der klassischen Bewegung sein.

Einfach ist die Berechnung der Erwartungswerte in algebraischer Schreibweise. Ort, Impuls und Energie werden dabei durch Auf- und Absteiger ausgedrückt:

$$\hat{X} = \mathbf{bX} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^+)$$

$$\hat{P} = \frac{1}{\hbar \mathbf{b}} P = -\frac{i}{\sqrt{2}}(a - a^+)$$

$$\hat{H} = \hbar \mathbf{w}(a^+ a + \frac{1}{2})$$

wegen  $\langle a^+ \rangle = \langle a \rangle^*$  ist zunächst  $a$  wieder als "komplexer, nicht hermitescher Operator" zu sehen, dessen Realteil dem Ort und dessen Imaginärteil dem Impuls entspricht.

Umgekehrt: Wir betrachten Ort- und Impuls als Real- und Imaginärteil eines noch unbestimmten und zu bestimmenden Operators, des "Aufsteigers". Dieser ist dann nicht-hermitesch !

Die zeitliche Entwicklung eines Matricelements erfolgt durch die Differentialgleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle a \rangle(t) = \langle [a, H] \rangle(t)$$

$$[a, H] = \hbar \mathbf{w} [a, a^+ a] = \hbar \mathbf{w} a$$

wegen:

$$\frac{d}{dt} \langle a \rangle(t) = \frac{i}{\hbar} \langle [H, a] \rangle(t)$$

Also folgt eine Differentialgleichung für den Absteiger

$$\langle a \rangle(t) = \langle a \rangle(0) e^{(-i\mathbf{w}t)}$$

mit  $[a^+, H] = \hbar \mathbf{w} [a^+, a^+ a] = -\hbar \mathbf{w} a^+$  folgt:

$$\langle a^+ \rangle(t) = \langle a^+ \rangle(0) e^{(i\mathbf{w}t)} = \langle a \rangle^*(0) e^{(i\mathbf{w}t)}$$

Also:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle a^+ \rangle = \langle [a^+, H] \rangle = -\hbar \mathbf{w} \langle a^+ \rangle$$

Diese Bewegungsgleichungen für Auf- und Absteiger entsprechen der klassischen Gleichung

$$\mathbf{a}(t) = \mathbf{a}(0) \exp(-i\mathbf{w}t)$$



Werden die Lösungen für die zeitliche Entwicklung dieser Operatoren in unsere Definition von Energie, Ort und Impuls eingesetzt, so ergibt sich:

$$\begin{aligned}\langle \hat{X} \rangle(t) &= \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} (a + a^+) \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [\langle a \rangle(0) e^{-i\omega t} + \langle a \rangle^*(0) e^{i\omega t}] \\ \langle \hat{P} \rangle(t) &= \left\langle \frac{i}{\sqrt{2}} (a - a^+) \right\rangle = -\frac{i}{\sqrt{2}} [\langle a \rangle(0) e^{-i\omega t} - \langle a \rangle^*(0) e^{i\omega t}] \\ \langle \hat{H} \rangle(t) &= \langle \hat{H} \rangle(0) = \hbar \omega \left\langle a^+ a + \frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \omega \langle a^+ a \rangle(0) + \frac{\hbar \omega}{2}\end{aligned}$$

Vergleicht man dies mit der Lösung für den klassischen Fall (Remember: Ort und Impuls wurden als komplexe Zahl  $\mathbf{a}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\hat{x}(t) + i\hat{p}(t)]$  zusammengefasst, deren Bewegungsgleichung  $\frac{d}{dt} \mathbf{a}(t) = -i\omega \mathbf{a}(t)$  beide Hamiltonsche Gleichungen erfüllt), die denn lauteten:

$$\begin{aligned}\hat{x}(t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\mathbf{a}(0) \exp(-i\omega t) + \mathbf{a}(0)^* \exp(i\omega t)] \\ \hat{p}(t) &= \frac{-i}{\sqrt{2}} [\mathbf{a}(0) \exp(-i\omega t) - \mathbf{a}(0)^* \exp(i\omega t)]\end{aligned}$$

So ist notwendig und hinreichend für unsere Bedingung

$$\begin{aligned}\langle \hat{X} \rangle(t) &= \hat{x}(t) \\ \langle \hat{P} \rangle(t) &= \hat{p}(t)\end{aligned}$$

dass

$$\langle a \rangle(0) = \mathbf{a}_0$$

#### Fazit:

Nach Aufstellen der Quantisierungsbedingungen (Kommutatoren) und der Bewegungsgleichungen (Ausgangspunkt) werden die eigentlichen Glauberzustände konstruiert, indem  $\langle \hat{H} \rangle$  mit dem klassischen Ergebnis verglichen wird.

Unser Ziel war es nun also, durch den Vergleich mit dem komplexen Parameter zur Charakterisierung der klassischen Bewegung Zustände zu suchen, in denen die klassische Bewegung quantenmechanisch möglichst gut approximiert wird. Diese Zustandsvektoren müssen normierbar sein und wir erhalten als erstes die Bedingung

$$\langle a \rangle(0) = \langle \Psi(0) | a | \Psi(0) \rangle = \mathbf{a}_0$$

(Normierbarkeitsbedingung)

Eine weitere Bedingung wurde uns durch die Energie geschenkt, für die gilt:

$$\langle \hat{H} \rangle(t) = \langle \hat{H} \rangle(0) = \hbar \omega \left\langle a^+ a + \frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \omega \langle a^+ a \rangle(0) + \frac{\hbar \omega}{2} = \hbar \omega |\mathbf{a}_0|^2$$

(Energiebedingung, gerade angesprochen)

Näherung:

Da für einen klassischen Operator  $|\mathbf{a}_0| \gg 1$  können wir den Term  $\frac{\hbar \omega}{2}$  vernachlässigen und es gilt als zweite

Bedingung an den Zustandsvektor  $\langle a^+ a \rangle(0) = |\mathbf{a}_0|^2$

Diese beiden Bedingungen genügen jedoch zur Bestimmung des normierten Vektors  $|\Psi(0)\rangle$  bis auf einen Phasenfaktor.

Merke: nach obiger Definition gilt:

$$|\mathbf{a}|^2 = \frac{p^2}{2m\hbar} + \frac{1}{2}q^2m\frac{\mathbf{w}}{\hbar}$$

### Grundsätzliches Vorgehen beim Problem , etwas quantisieren zu müssen:

Ausgangspunkt ist immer die Schrödingergleichung bzw. die Von-Neumann-Bewegungsgleichung und die Vertauschungsrelation. Man muss also Vertauschungsrelationen aufstellen. Das ist die eigentliche Quantisierung. Hier haben wir entsprechend dieser Aussage

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle a \rangle(t) = \langle [a, H] \rangle(t)$$

$$[a, H] = \hbar \mathbf{w} [a, a^\dagger a] = \hbar \mathbf{w} a$$

verwendet ! ( Im Heisenbergbild !)

### Wirkung des Vernichtungsoperators auf quasiklassische Zustände

Mit dem Operator

$$b = a - \mathbf{a}_0$$

Kann die Norm des Kets  $b(\mathbf{a}_0)|\Psi_0\rangle$  berechnet werden:

$$\langle \Psi_0 | b^\dagger(\mathbf{a}_0) b(\mathbf{a}_0) | \Psi_0 \rangle = \langle \Psi_0 | a^\dagger a | \Psi_0 \rangle - \mathbf{a}_0 \langle \Psi_0 | a^\dagger | \Psi_0 \rangle - \mathbf{a}_0^* \langle \Psi_0 | a | \Psi_0 \rangle + \mathbf{a}_0^* \mathbf{a}_0$$

Mit

$$\langle a \rangle(0) = \langle \Psi(0) | a | \Psi(0) \rangle = \mathbf{a}_0 \text{ und } \langle a^\dagger a \rangle(0) = |\mathbf{a}_0|^2 \text{ folgt dann:}$$

$$\langle \Psi_0 | b^\dagger(\mathbf{a}_0) b(\mathbf{a}_0) | \Psi_0 \rangle = \mathbf{a}_0^* \mathbf{a}_0 - \mathbf{a}_0 \mathbf{a}_0^* - \mathbf{a}_0 \mathbf{a}_0^* + \mathbf{a}_0^* \mathbf{a}_0 = 0$$

Jedoch ist nur der Nullvektor vom Betrag Null, woraus folgt:

$$b(\mathbf{a}_0)|\Psi_0\rangle = 0$$

also:

$$a|\Psi_0\rangle = \mathbf{a}_0|\Psi_0\rangle$$

Somit folgt aus unseren Bedingungen, dass  $|\Psi_0\rangle$  Eigenzustand zum Vernichtungsoperator mit dem Eigenwert

$\mathbf{a}_0$  sein muss, damit der Zustandsvektor  $|\Psi_0\rangle$  den Bedingungen einer klassischen Bewegung mit dem

Parameter  $\mathbf{a}_0$  genügt. Im Folgenden heiße  $|\Psi_0\rangle := |\mathbf{a}_0\rangle$ . Der Eigenvektor von  $a$  zum Eigenwert  $\mathbf{a}$  ist  $|\mathbf{a}\rangle$ :

$$a|\mathbf{a}\rangle = \mathbf{a}|\mathbf{a}\rangle$$

Aus dieser Eigenwertgleichung lassen sich die Lösungen  $|\mathbf{a}\rangle$  bestimmen, indem  $|\mathbf{a}\rangle$  in den quantenmechanischen Eigenzuständen des harmonischen Oszillators entwickelt wird. ( Diese ergeben sich durch Lösung der Schrödingergleichung):

$$|\mathbf{a}\rangle = \sum_n c_n(\mathbf{a}) |\mathbf{j}_n\rangle$$

Die Wirkung des Absteigers auf die qm- Eigenzustände ist jedoch bekannt:

$$a|\mathbf{a}\rangle = a \sum_n c_n(\mathbf{a}) |\mathbf{j}_n\rangle = \sum_n c_n(\mathbf{a}) \sqrt{n} |\mathbf{j}_{n-1}\rangle = \mathbf{a}|\mathbf{a}\rangle = \mathbf{a} \sum_n c_n(\mathbf{a}) |\mathbf{j}_n\rangle$$

$$\sum_n c_n(\mathbf{a}) \sqrt{n} |\mathbf{j}_{n-1}\rangle = \mathbf{a} \sum_n c_n(\mathbf{a}) |\mathbf{j}_n\rangle$$

(Verschiebung des Summationsindex)

$$\rightarrow c_{n+1}(\mathbf{a}) = \frac{\mathbf{a}}{\sqrt{n+1}} c_n(\mathbf{a})$$

Man hat also eine Rekursionsformel für die Entwicklungskoeffizienten gefunden:

$$c_n(\mathbf{a}) = \frac{\mathbf{a}^n}{\sqrt{n!}} c_0(\mathbf{a})$$

Es bleibt nun also,  $c_0(\mathbf{a})$  zu bestimmen. Allerdings kennen wir weitere Bedingungen an die  $c_n(\mathbf{a})$ . So sollten nämlich alle Zustände  $|\mathbf{a}\rangle$  normierbar sein. Dies bedeutet jedoch, da die quantenmechanischen Eigenzustände selbst normiert sind:

$$\sum_n |c_n(\mathbf{a})|^2 = 1 = \sum_n \frac{|\mathbf{a}|^{2n}}{n!} |c_0(\mathbf{a})|^2 = |c_0(\mathbf{a})|^2 e^{|\mathbf{a}|^2}$$

Vereinbaren wir noch, dass  $c_0(\mathbf{a})$  reell und positiv sein soll, so ergibt sich:

$$c_0(\mathbf{a}) = e^{-\frac{|\mathbf{a}|^2}{2}}$$

$$\rightarrow |\mathbf{a}\rangle = e^{-\frac{|\mathbf{a}|^2}{2}} \sum_n \frac{\mathbf{a}^n}{\sqrt{n!}} |\mathbf{j}_n\rangle$$

Die kohärenten Zustände sind damit vollständig bestimmt.

Die  $|\mathbf{j}_n\rangle$  sind die bekannten, oben bestimmten Zustände des rein quantenmechanischen Oszillators.

## Erwartungswerte und Streuungen von Energie, Ort und Impuls

Nun kann man die Energie eines Oszillators im kohärenten Zustand  $|\mathbf{a}\rangle = e^{-\frac{|\mathbf{a}|^2}{2}} \sum_n \frac{\mathbf{a}^n}{\sqrt{n!}} |\mathbf{j}_n\rangle$  berechnen und mit dem klassischen Ergebnis vergleichen:

Eine Energiemessung liefert den Wert  $E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega$  mit der

Wahrscheinlichkeit  $P_n(\mathbf{a}) = |c_n|^2 = e^{-|\mathbf{a}|^2} \frac{|\mathbf{a}|^{2n}}{n!}$ . Dies ist eine Poisson-Verteilung.

Man sieht, dass auch die Wahrscheinlichkeiten einer Rekursion genügen:

$$P_n(\mathbf{a}) = \frac{|\mathbf{a}|^2}{n} P_{n-1}(\mathbf{a})$$

Aus dieser Beziehung lässt sich ableiten, dass  $P_n(\mathbf{a})$  für  $n =$  ganzzahliger Teil von  $|\mathbf{a}|^2$  maximal wird (unter der Bedingung, dass  $n$  ganzzahlig ist).

Mit  $\langle \mathbf{a} | a^\dagger a | \mathbf{a} \rangle = \mathbf{a}^* \mathbf{a}$  sieht man:

$$\langle \hat{H} \rangle_{\mathbf{a}} = \hbar \omega \langle \mathbf{a} | \left[ a^\dagger a + \frac{1}{2} \right] | \mathbf{a} \rangle = \hbar \omega \left[ \mathbf{a}^* \mathbf{a} + \frac{1}{2} \right] = \hbar \omega \left[ |\mathbf{a}|^2 + \frac{1}{2} \right]$$

Für unserer Bedingung an makroskopische Oszillatoren:  $|\mathbf{a}| \gg 1$ , sieht man also, dass die im kohärenten Zustand zu erwartende Energie nur wenig von der Energie  $E_n$  abweicht, die bei Messung in  $|\mathbf{j}_n\rangle$  mit maximaler Wahrscheinlichkeit  $P_n(\mathbf{a})$  zu erwarten ist.

Ebenso einfach kann man mit Hilfe von  $[a, a^\dagger] = 1$  den Erwartungswert

$$\langle \hat{H}^2 \rangle_{\mathbf{a}} = \hbar^2 \omega^2 \langle \mathbf{a} | \left[ a^\dagger a + \frac{1}{2} \right]^2 | \mathbf{a} \rangle = \hbar^2 \omega^2 \left[ |\mathbf{a}|^4 + 2|\mathbf{a}|^2 + \frac{1}{4} \right] \text{ berechnen}$$

und man erhält dann eine Standardabweichung

$$\Delta \hat{H}_{\mathbf{a}} = \hbar \omega |\mathbf{a}|$$

Die relative Standardabweichung

$$\frac{\Delta \hat{H}_{\mathbf{a}}}{\langle \hat{H} \rangle_{\mathbf{a}}} \approx \frac{1}{|\mathbf{a}|} \ll 1 \text{ für große } |\mathbf{a}|$$

Damit ist die Energie im kohärenten Zustand relativ gut bestimmt

Remember:

$$\hat{X} = \frac{\hbar}{m\omega} \left( a + a^\dagger \right)$$

$$\hat{P} = \frac{\hbar}{i} \left( a - a^\dagger \right)$$

Somit, wie jeder leicht nachrechnen kann, ergibt sich:

$$\langle X \rangle_{\mathbf{a}} = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \operatorname{Re}(\mathbf{a})$$

$$\langle P \rangle_{\mathbf{a}} = \sqrt{2m\hbar\omega} \operatorname{Im}(\mathbf{a})$$

$$\langle X^2 \rangle_{\mathbf{a}} = \frac{\hbar}{2m\omega} \left[ (\mathbf{a} + \mathbf{a}^*)^2 + 1 \right]$$

$$\langle P^2 \rangle_{\mathbf{a}} = \frac{m\hbar\omega}{2} \left[ 1 - (\mathbf{a} - \mathbf{a}^*)^2 \right]$$

Also kann man direkt die Standardabweichungen angeben:

$$\Delta X_{\mathbf{a}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$$

$$\Delta P_{\mathbf{a}} = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}$$

Beide hängen nun nicht mehr von  $\mathbf{a}$  ab und Ihr Produkt liefert den nach der Unschärferelation minimalen erlaubten Wert:

$$\Delta X_{\mathbf{a}} \cdot \Delta P_{\mathbf{a}} = \frac{\hbar}{2}$$

## Erzeugung quasiklassischer Zustände aus dem gm.- Grundzustand

Wir definieren den Operator

$$D(\mathbf{a}) = e^{(\mathbf{a}\mathbf{a}^+ - \mathbf{a}^*\mathbf{a})}$$

$$D^+(\mathbf{a}) = e^{(\mathbf{a}^*\mathbf{a} - \mathbf{a}\mathbf{a}^+)}$$

Mit Hilfe von  $[\mathbf{a}^+, \mathbf{a}^*\mathbf{a}] = \mathbf{a}^*\mathbf{a} = |\mathbf{a}|^2$  und

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{\frac{-[A,B]}{2}} \text{ falls } [[A,B], A] = [[A,B], B] = 0$$

folgt:

$$D(\mathbf{a}) = e^{\frac{|\mathbf{a}|^2}{2}} e^{\mathbf{a}\mathbf{a}^+} e^{-\mathbf{a}^*\mathbf{a}}$$

Wenn wir diesen Operator nun auf den Grundzustand der quantenmechanischen Zustände  $|\mathbf{j}_0\rangle$  wirken lassen, so ergibt sich wegen

$$e^{-\mathbf{a}^*\mathbf{a}}|\mathbf{j}_0\rangle = \left[1 - \mathbf{a}^*\mathbf{a} + \frac{(\mathbf{a}^*)^2\mathbf{a}^2}{2!} + \dots\right]|\mathbf{j}_0\rangle = |\mathbf{j}_0\rangle$$

$$D(\mathbf{a})|\mathbf{j}_0\rangle = e^{\frac{|\mathbf{a}|^2}{2}} e^{\mathbf{a}\mathbf{a}^+}|\mathbf{j}_0\rangle = e^{\frac{|\mathbf{a}|^2}{2}} \sum_n \frac{(\mathbf{a}^+)^n}{n!}|\mathbf{j}_0\rangle = e^{\frac{|\mathbf{a}|^2}{2}} \sum_n \frac{\mathbf{a}^n}{\sqrt{n!}}|\mathbf{j}_n\rangle = |\mathbf{a}\rangle$$

Die Wirkung von  $D(\mathbf{a}) = e^{\frac{|\mathbf{a}|^2}{2}} e^{\mathbf{a}\mathbf{a}^+} e^{-\mathbf{a}^*\mathbf{a}}$  ist folglich die unitäre Transformation, die aus dem Grundzustand  $|\mathbf{j}_0\rangle$  den quasiklassischen Zustand  $|\mathbf{a}\rangle$  erzeugt.

Dies ist die einfachste Variante. Merke:

$$D(\mathbf{a}) = e^{(\mathbf{a}\mathbf{a}^+ - \mathbf{a}^*\mathbf{a})}$$

$$\mathbf{a}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}[x(t) + ip(t)]$$

$$a = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \hat{p} - \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x}$$

## Kohärente Wellenfunktionen in Ortsdarstellung

Bleibt noch, die Wellenfunktion

$$\Psi_{\mathbf{a}}(x) = \langle x|\mathbf{a}\rangle = \langle x|D(\mathbf{a})|\mathbf{j}_0\rangle \text{ zu berechnen (} |\mathbf{a}\rangle \text{ in Ortsdarstellung)}$$

Dazu kann man den Operator

$\mathbf{a}^+ - \mathbf{a}^*\mathbf{a}$  durch  $X$  und  $P$  ausdrücken:

$$\mathbf{a}^+ - \mathbf{a}^*\mathbf{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \left( \frac{\mathbf{a} - \mathbf{a}^*}{\sqrt{2}} \right) X - \frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}} \left( \frac{\mathbf{a} + \mathbf{a}^*}{\sqrt{2}} \right) P$$

Daraus folgt:

$$D(\mathbf{a}) = e^{(\mathbf{a}^\dagger - \mathbf{a}^*)} = e^{\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \left( \frac{\mathbf{a} - \mathbf{a}^*}{\sqrt{2}} \right) X} e^{-\frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}} \left( \frac{\mathbf{a} + \mathbf{a}^*}{\sqrt{2}} \right) P} e^{\frac{\mathbf{a}^{*2} - \mathbf{a}^2}{4}}$$

Dies kann nun zur Berechnung der Ortsdarstellung des kohärenten Zustands herangezogen werden:

$$\Psi_{\mathbf{a}}(x) = \langle x | e^{\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \left( \frac{\mathbf{a} - \mathbf{a}^*}{\sqrt{2}} \right) X} e^{-\frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}} \left( \frac{\mathbf{a} + \mathbf{a}^*}{\sqrt{2}} \right) P} e^{\frac{\mathbf{a}^{*2} - \mathbf{a}^2}{4}} | \mathbf{j}_0 \rangle$$

$$\Psi_{\mathbf{a}}(x) = e^{\frac{\mathbf{a}^{*2} - \mathbf{a}^2}{4}} \langle x | e^{\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \left( \frac{\mathbf{a} - \mathbf{a}^*}{\sqrt{2}} \right) X} e^{-\frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}} \left( \frac{\mathbf{a} + \mathbf{a}^*}{\sqrt{2}} \right) P} | \mathbf{j}_0 \rangle$$

$$\Psi_{\mathbf{a}}(x) = e^{\frac{\mathbf{a}^{*2} - \mathbf{a}^2}{4}} e^{\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \left( \frac{\mathbf{a} - \mathbf{a}^*}{\sqrt{2}} \right) X} \langle x | e^{-\frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}} \left( \frac{\mathbf{a} + \mathbf{a}^*}{\sqrt{2}} \right) P} | \mathbf{j}_0 \rangle$$

$e^{\frac{iP}{\hbar}}$  ist jedoch gerade der Translationsoperator um  $\mathbf{l}$  längs der x- Achse. Darum gilt:

$$\langle x | e^{-\frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}} \left( \frac{\mathbf{a} + \mathbf{a}^*}{\sqrt{2}} \right) P} = \left\langle x - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\mathbf{a} + \mathbf{a}^*) \right|$$

$$\Psi_{\mathbf{a}}(x) = e^{\frac{\mathbf{a}^{*2} - \mathbf{a}^2}{4}} e^{\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \left( \frac{\mathbf{a} - \mathbf{a}^*}{\sqrt{2}} \right) X} \mathbf{j}_0 \left( x - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\mathbf{a} + \mathbf{a}^*) \right)$$

Wegen

$$\langle X \rangle_{\mathbf{a}} = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \operatorname{Re}(\mathbf{a}) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\mathbf{a} + \mathbf{a}^*)$$

$$\langle P \rangle_{\mathbf{a}} = \sqrt{2m\hbar\omega} \operatorname{Im}(\mathbf{a}) = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (\mathbf{a} - \mathbf{a}^*)$$

kann man schließlich schreiben:

$$\Psi_{\mathbf{a}}(x) = e^{\frac{\mathbf{a}^{*2} - \mathbf{a}^2}{4}} e^{\frac{i\langle P \rangle_{\mathbf{a}}}{\hbar} x} \mathbf{j}_0 \left( x - \langle X \rangle_{\mathbf{a}} \right) \quad (\text{in Ortsdarstellung !})$$

Fazit: Multipliziert man die Wellenfunktion  $\mathbf{j}_0(x)$  des Grundzustands des eindimensionalen Oszillators mit

dem oszillierenden Faktor  $e^{\frac{i\langle P \rangle_{\mathbf{a}}}{\hbar} x}$  und verschiebt man sie dann um  $\langle X \rangle_{\mathbf{a}}$  längs der x- Achse, so erhält man

die Ortswellenfunktion für den Zustand  $|\mathbf{a}\rangle$ . Der Phasenfaktor  $e^{\frac{\mathbf{a}^{*2} - \mathbf{a}^2}{4}}$  kann man vernachlässigen, da er physikalisch keine Rolle spielt.

Für uns bedeutet dies: Die Gaußzustände werden gewonnen, indem man die quantenmechanischen Zustände in klassischer Weise um  $\langle X \rangle_{\mathbf{a}}$  verschiebt.

Aus der Quantenmechanik ist bekannt:

$$\mathbf{j}_0(x) = \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \quad \Delta X_{\mathbf{a}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$$

$$\mathbf{j}_n(\mathbf{x}) = \frac{1}{i^n} \frac{A_0}{\sqrt{2^n n!}} (-1)^n e^{\left(\frac{\mathbf{x}^2}{2}\right)} \frac{d^n}{(d\mathbf{x})^n} e^{-\mathbf{x}^2}$$

$$\Rightarrow \mathbf{j}_n(\mathbf{x}) = \frac{\left(\frac{m\mathbf{w}}{\hbar\mathbf{p}}\right)^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{(-2)^n n!}} H_n(\mathbf{x}) e^{-\frac{\mathbf{x}^2}{2}}$$

Also: mit  $\Delta X_a = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\mathbf{w}}}$ :

$$\mathbf{j}_0(x) = \left(\frac{m\mathbf{w}}{\hbar\mathbf{p}}\right)^{\frac{1}{4}} e^{\left(-\frac{x^2}{4(\Delta X_a)^2}\right)}$$

Somit gilt:

$$\mathbf{j}_0(x - \langle X \rangle_a) = \left(\frac{m\mathbf{w}}{\hbar\mathbf{p}}\right)^{\frac{1}{4}} e^{\left(-\frac{1}{4} \left(\frac{x - \langle X \rangle_a}{\Delta X_a}\right)^2\right)}$$

und man kann explizit angeben:

$$\Psi_a(x) = e^{\frac{\mathbf{a}^{*2} - \mathbf{a}^2}{4}} \left(\frac{m\mathbf{w}}{\hbar\mathbf{p}}\right)^{\frac{1}{4}} e^{\frac{i\langle P \rangle_a x}{\hbar}} e^{\left(-\frac{1}{4} \left(\frac{x - \langle X \rangle_a}{\Delta X_a}\right)^2\right)}$$

Dies ist im Moment noch völlig zeitunabhängig. Zeitabhängigkeit kann man jedoch leicht einbauen. Man muss lediglich  $\langle X \rangle_a$  durch  $\langle X \rangle_a(t)$  ersetzen !

Die Wahrscheinlichkeitsdichte des kohärenten Zustands im Ortsraum ergibt sich demnach zu

$$|\Psi_a(x)|^2 = \sqrt{\left(\frac{m\mathbf{w}}{\hbar\mathbf{p}}\right)} e^{\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{x - \langle X \rangle_a}{\Delta X_a}\right)^2\right)}$$

Man erhält also für jeden  $|\mathbf{a}\rangle$ -Zustand ein Gauß-Paket.

Es läßt sich zeigen, dass die kohärenten Zustände ( die ja, wie gezeigt, normierbar sind), die Orthogonalitätsbedingungen und die Vollständigkeitsrelation erfüllen.

## Zeitliche Entwicklung eines quasiklassischen Zustands

Der harmonische Oszi sei zum Anfangszustand in einem bestimmten  $|\mathbf{a}\rangle$ -Zustand:

$$|\mathbf{y}(0)\rangle = |\mathbf{a}_0\rangle$$

Wir wissen:

$$|\mathbf{a}\rangle = e^{-\frac{|\mathbf{a}|^2}{2}} \sum_n \frac{\mathbf{a}^n}{\sqrt{n!}} |\mathbf{j}_n\rangle. \text{ Die Zeitentwicklung der quantenmechanischen Eigenzustände ist jedoch}$$

aus der zeitabhängigen Schrödingergleichung bekannt:

$$\mathbf{y}_n(x, t) = e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \mathbf{y}_n(x)$$

Wir haben oben den Ortsschieber kennengelernt ! Hier sehen wir wieder hinsichtlich der konjugierten Variablen Zeit und Energie: Unser Zeitentwicklungsoperator ist ein "Zeitschieber":

$$e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \text{ als Zeitschieber !}$$

Somit kann angegeben werden:

$$|\mathbf{y}(t)\rangle = e^{-\frac{|\mathbf{a}_0|^2}{2}} \sum_n \frac{\mathbf{a}_0^n}{\sqrt{n!}} e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} |\mathbf{j}_n\rangle = e^{-\frac{|\mathbf{a}_0|^2}{2}} e^{-\frac{i\omega t}{2}} \sum_n \frac{\mathbf{a}_0^n}{\sqrt{n!}} e^{-in\omega t} |\mathbf{j}_n\rangle$$

Nun ist aber:

$$e^{-\frac{|\mathbf{a}_0|^2}{2}} e^{-\frac{i\omega t}{2}} \sum_n \frac{\mathbf{a}_0^n}{\sqrt{n!}} e^{-in\omega t} |\mathbf{j}_n\rangle = e^{-\frac{i\omega t}{2}} |\mathbf{a} = \mathbf{a}_0 e^{-i\omega t}\rangle$$

Und es ergibt sich der zeitentwickelte Zustand explizit:

$$|\mathbf{y}(t)\rangle = e^{-\frac{i\omega t}{2}} |\mathbf{a} = \mathbf{a}_0 e^{-i\omega t}\rangle$$

Es genügt also,  $\mathbf{a}_0$  durch  $\mathbf{a}_0 e^{-i\omega t}$  zu ersetzen und den so erhaltenen Ket- Vektor mit  $e^{-\frac{i\omega t}{2}}$  zu multiplizieren ,

um vom Anfangszustand zum zeitentwickelten Zustand zu gelangen.  $e^{-\frac{i\omega t}{2}}$  ist dabei ohnehin ein globaler Phasenfaktor ohne physikalische Konsequenzen. Somit bleibt der kohärente Zustand stets ein Eigenvektor zum Vernichtungsoperator mit dem Eigenwert  $\mathbf{a}_0 e^{-i\omega t}$ . Dies ist jedoch nichts anderes als der Parameter

$$\mathbf{a}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\hat{x}(t) + i\hat{p}(t)], \text{ der den Zustand des klassischen Oszillators vollständig charakterisiert.}$$

### Zeitliche Entwicklung der physikalischen Eigenschaften

Wir verwenden nun  $\mathbf{a} = \mathbf{a}_0 e^{-i\omega t}$  und erhalten sofort

$$\langle X \rangle_{\mathbf{a}} = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \operatorname{Re}(\mathbf{a}_0 e^{-i\omega t})$$

$$\langle P \rangle_{\mathbf{a}} = \sqrt{2m\hbar\omega} \operatorname{Im}(\mathbf{a}_0 e^{-i\omega t})$$



Dies entspricht nun genau den klassischen Beziehungen

$$\hat{x}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\mathbf{a}(0) \exp(-i\omega t) + \mathbf{a}(0)^* \exp(i\omega t)]$$

$$\hat{p}(t) = \frac{-i}{\sqrt{2}} [\mathbf{a}(0) \exp(-i\omega t) - \mathbf{a}(0)^* \exp(i\omega t)]$$

Wir erhalten

$$\langle H \rangle_{\mathbf{a}} = \hbar \omega \left[ |\mathbf{a}_0|^2 + \frac{1}{2} \right]$$

$$\Delta H_{\mathbf{a}} = \hbar \omega |\mathbf{a}_0|$$

$$\Delta X_{\mathbf{a}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$$

$$\Delta P_{\mathbf{a}} = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}$$

Somit sind Energie und alle Schwankungen in Energie, Ort und Impuls zeitunabhängig. Das Wellenpaket bleibt zu jedem Zeitpunkt minimal. Es zerfließt also nicht.

$$\Psi_{\mathbf{a}}(x) = e^{\frac{\mathbf{a}^{*2} - \mathbf{a}^2}{4}} \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{\frac{i\langle P \rangle_{\mathbf{a}} x}{\hbar}} e^{\left( -\frac{1}{4} \left( \frac{x - \langle X \rangle_{\mathbf{a}}}{\Delta X_{\mathbf{a}}} \right)^2 \right)}$$

$$\Psi_{\mathbf{a}}(x, t) = \langle x | \Psi(t) \rangle = e^{\frac{\mathbf{a}^{*2} - \mathbf{a}^2}{4}} \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{\frac{-i\omega t}{2}} e^{\frac{i\langle P \rangle_{\mathbf{a}} x}{\hbar}} e^{\left( -\frac{1}{4} \left( \frac{x - \langle X \rangle_{\mathbf{a}}}{\Delta X_{\mathbf{a}}} \right)^2 \right)}$$

Das Gaußsche Wellenpaket erhält also als Zeitentwicklungsfaktor lediglich eine oszillierende Phase. Die Form des Pakets bleibt vollständig erhalten.

$$\text{Zu allen Zeiten bleibt } |\Psi_{\mathbf{a}}(x)|^2 = |\mathbf{j}_0| [x - \langle X \rangle(t)]^2 = \sqrt{\left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)} e^{\left( -\frac{1}{2} \left( \frac{x - \langle X \rangle_{\mathbf{a}}}{\Delta X_{\mathbf{a}}} \right)^2 \right)}$$

Die Bewegung des Wellenpaketes ist also eine harmonische Schwingung entlang der x- Achse mit der Periode

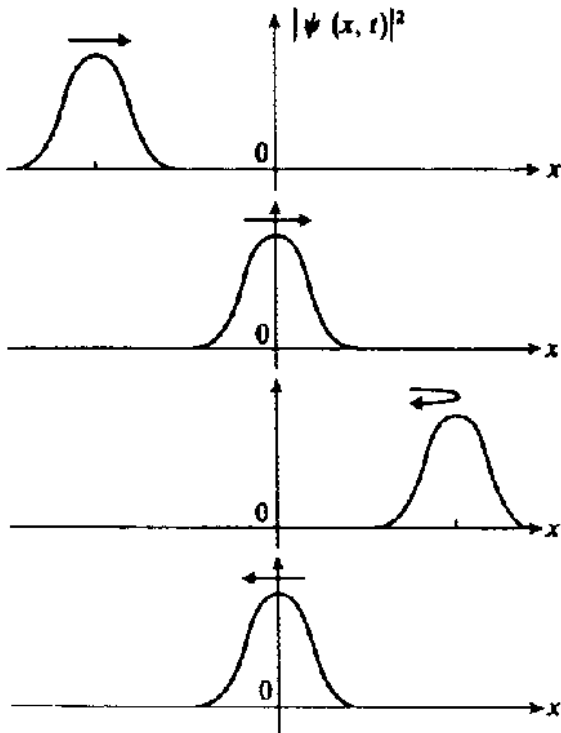
$$T = \frac{2\pi}{\omega}$$

Während das freie Gaußpaket zerfließt, passiert dies in einem parabelförmigen Potenzial nicht mehr. Man kann sich dies so vorstellen, dass das Potenzial das Paket aus Bereichen mit großem Potenzial wieder zurückdrängt und so der Verbreiterung entgegenwirkt.

Für sehr große  $|\mathbf{a}|$  ändern sich die Standardabweichungen für Ort und Impuls nicht. Statt dessen werden die

Amplituden  $\langle X \rangle(t)$  und  $\langle P \rangle(t)$  sehr groß im Vergleich zu  $\Delta X$  und  $\Delta P$ . Mit wachsendem  $|\mathbf{a}|$  kann man also eine quantenmechanische Bewegung erhalten, für die Ort und Impuls des Oszillators beliebig genau bestimmt sind (relativ beliebig genau). Für große  $|\mathbf{a}|$  beschreibt also der kohärente Zustand die Bewegung des makroskopischen Oszillators gut. Die Ergebnisse sind gleichwertig der Betrachtung von Ort, Impuls und Energie als klassische Größen

### Bewegung des Gaußpaketes



**Abb.5.23** Bewegung des zum Zustand  $|\alpha\rangle$  gehörenden Wellenpakets: Unter dem Einfluß des parabolischen Potentials  $V(x)$  oszilliert das Paket, ohne dabei seine Form zu ändern.

### Beispiel eines makroskopischen Oszillators:

Seien:  $m = 1\text{ kg}$ ,  $g \sim 10\text{ m/s}^2$ ,  $l = 0,1\text{ m}$

Es gilt:  $T = 2\pi\sqrt{\frac{l}{g}}$

Es folgt:  $T \sim 0,63\text{ s}$  und  $\omega = 10\text{ rad/s}$

Der Oszillator werde um die Amplitude  $x_m = 1\text{ cm}$  ausgelenkt

Wegen

$$\langle X \rangle_a = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \operatorname{Re}(\mathbf{a}_0 e^{-i\omega t})$$

gilt:

$$|\mathbf{a}| = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x_m$$

Dies ergibt bei uns einen Zahlenwert:

$$|\mathbf{a}| \approx 2,2 \cdot 10^{15} \gg 1$$

Die zeitunabhängigen Standardabweichungen in Energie, Ort und Impuls ergeben sich zu

$$\frac{\Delta H_{\mathbf{a}}}{\langle H \rangle_{\mathbf{a}}} \approx \frac{1}{|\mathbf{a}|} \approx 0,4 \cdot 10^{-15} \ll 1$$

$$\Delta X_{\mathbf{a}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \approx 2,2 \cdot 10^{-18} \text{ m} \ll x_m$$

$$\Delta P_{\mathbf{a}} = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \approx 2,2 \cdot 10^{-17} \text{ kgm/s}$$

$$\rightarrow \Delta v \approx 2,2 \cdot 10^{-17} \text{ m/s} \ll 0,1 \text{ m/s}$$

Man sieht: Die Ortsunschärfe ist kleiner als ein Kerndurchmesser, die Geschwindigkeitsunschärfe um ähnliche Verhältnisse kleiner als die maximale Geschwindigkeit von 0,1 m/s und auch die relative Genauigkeit der Oszillatorenergie ist ausgezeichnet.

Für die Beschreibung eines makroskopischen Oszillators reichen also die Gesetze der klassischen Mechanik in weitem Maße aus.

### 3.5.2 Eigendarstellung: (Darstellung durch Eigenwerte des Operators)

$$A_{lk} = \langle \Phi_l | \hat{A} | \Phi_k \rangle = a_l \mathbf{d}_{lk}$$

$$\hat{A} | \Phi_k \rangle = a_k | \Phi_k \rangle$$

$$\overline{\overline{A}} \text{ diagonal}$$

Matrixgleichung:

$$\overline{\overline{A}} \overline{\overline{C}}^k = a_k \overline{\overline{C}}^k$$

**Behauptung:**

$$\langle \hat{A} \rangle_{|\Phi\rangle} = \overline{\overline{C}} * \overline{\overline{A}} \overline{\overline{C}}$$

### 3.5.3 Energiedarstellung

$$i\hbar |\dot{\Phi}\rangle = H |\Phi\rangle$$

$$i\hbar \dot{c}_m = \sum_j H_{mj} c_j$$

$$\langle \mathbf{j}_m | H | \mathbf{j}_j \rangle = H_{mj} = E_j \mathbf{d}_{mj}$$

$$\Rightarrow E_m c_m = i\hbar \dot{c}_m$$

Das Problem zerfällt in einzelne Differenzialgleichungen. Die Komponenten  $c_m$  mischen dabei nicht !

$$c_m(t) = c_0 e^{-\frac{i}{\hbar} E_m t}$$

$$c_m = \langle \mathbf{j}_m | \Phi \rangle$$

**Vorlesung 20.11.02**

**Wiederholung:**

Projektor:

$$P_{|\mathbf{j}\rangle} := |\mathbf{j}\rangle \langle \mathbf{j}| = P_{|\mathbf{j}\rangle}^2$$

Statistischer Operator:

$$P := \sum_k p_k P_{|\mathbf{j}_k\rangle} = \sum_k p_k P_k$$

$$P^2 \neq P$$

Gemisch  $\leftrightarrow$

$$P_k \subset 1 \quad \forall k$$

reine Gesamtheit:

$$P := \sum_k p_k P_{|\mathbf{j}_k\rangle}$$

$$\Rightarrow \exists N \rightarrow p_k = \mathbf{d}_{kN}$$

$$\Rightarrow P = P_N = |\mathbf{j}_N\rangle \langle \mathbf{j}_N|$$

$$P^2 = P$$

bei reinen Zuständen ist der statistische Operator ein Projektor auf einen gewissen Eigenzustand.

das heißt: Bei Messung sind die Anteile der Eigenzustände für einen einfallenden beliebig aus den Eigenzuständen überlagerten Zustand bekannt.

L- Darstellung einer L- Observable:

$$L = L = \sum_k |\mathbf{j}_k\rangle \langle \mathbf{j}_k|$$

$$\langle \mathbf{j}_l | \hat{A} | \mathbf{j}_j \rangle := \hat{A}_{lj}$$

$$\langle \mathbf{j}_j | \Phi_k \rangle := c_j^k$$

$$\hat{A} | \Phi_k \rangle = a_k | \Phi_k \rangle$$

$$\rightarrow \bar{\bar{A}} \bar{\bar{c}}_k = a_k \bar{\bar{c}}_k$$

Eigendarstellung/ Energiedarstellung

### 3.5.4 Ortsdarstellung

#### 3.5.4.1 Ortsoperator

$$\hat{x} | \mathbf{j}(\bar{x}) \rangle = \bar{x} | \mathbf{j}(\bar{x}) \rangle$$

$$| f \rangle = \int d\bar{x}' | \mathbf{j}(\bar{x}') \rangle \langle \mathbf{j}(\bar{x}') | f \rangle$$

$$\langle \mathbf{j}(\bar{x}') | f \rangle := f_{\hat{x}}(\bar{x}')$$

Dies  $\langle \mathbf{j}(\bar{x}') | f \rangle := f_{\hat{x}}(\bar{x}')$  entspricht dem Anteil von  $| f \rangle$  entlang  $| \mathbf{j} \rangle$  an der Stelle  $(\bar{x}')$  im Ortsraum

$$\hat{x} | f \rangle = \int d\bar{x}' \hat{x} | \mathbf{j}(\bar{x}') \rangle \langle \mathbf{j}(\bar{x}') | f \rangle = \int d\bar{x}' f_{\hat{x}}(\bar{x}') \hat{x} | \mathbf{j}(\bar{x}') \rangle = \int d\bar{x}' f_{\hat{x}}(\bar{x}') \bar{x} | \mathbf{j}(\bar{x}') \rangle$$

$$\Rightarrow \langle \mathbf{j}(\bar{x}) | \hat{x} | f \rangle = \langle \mathbf{j}(\bar{x}) | \int d\bar{x}' f_{\hat{x}}(\bar{x}') \bar{x} | \mathbf{j}(\bar{x}') \rangle = \int d\bar{x}' f_{\hat{x}}(\bar{x}') \bar{x} \langle \mathbf{j}(\bar{x}) | \mathbf{j}(\bar{x}') \rangle =$$

$$= \int d\bar{x}' f_{\hat{x}}(\bar{x}') \bar{x} \delta(\bar{x}' - \bar{x}) = f_{\hat{x}}(\bar{x}) \bar{x}$$

$$\text{mit } f_{\hat{x}}(\bar{x}) \bar{x} = f_{\hat{x}}(\bar{x}) \hat{x}^{\hat{x}}$$

$$\bar{x} := \hat{x}^{\hat{x}}$$

Der Ort Als Auswertung des Ortsoperators im Ortsraum

$$\langle \mathbf{j}(\bar{x}') | \hat{x} | \mathbf{j}(\bar{x}') \rangle = \bar{x} \delta(\bar{x}' - \bar{x}) = \hat{x}^{\hat{x}} \delta(\bar{x}' - \bar{x})$$

#### Also haben wir ein Eigenwertproblem:

$$\hat{x}^{\hat{x}} \delta(\bar{x}' - \bar{x}) = \bar{x} \delta(\bar{x}' - \bar{x})$$

Wichtig: Kets und Bras können darstellungsfrei sein oder in einer bestimmten Darstellung gewählt werden. Dies ist sauber zu unterscheiden !!

#### 3.5.4.2 Impulsoperator

$$\hat{p} | \Phi(\bar{p}) \rangle = \bar{p} | \Phi(\bar{p}) \rangle$$

$$\hat{p} | f \rangle = \int d\bar{x} \int d\bar{x}' | \mathbf{j}(\bar{x}) \rangle \langle \mathbf{j}(\bar{x}) | \hat{p} | \mathbf{j}(\bar{x}') \rangle \langle \mathbf{j}(\bar{x}') | f \rangle$$

$$\langle \mathbf{j}(\bar{x}') | f \rangle = f_{\hat{x}}(\bar{x}')$$

Die  $\langle \mathbf{j}(\bar{x}) | \hat{p} | \mathbf{j}(\bar{x}') \rangle$  sind zu berechnen

**Betrachte:**

$$\langle \mathbf{j}(\bar{x}) | [\hat{p}, \hat{x}] \mathbf{j}(\bar{x}') \rangle = \langle \mathbf{j}(\bar{x}) | \frac{\hbar}{i} \overline{1} | \mathbf{j}(\bar{x}') \rangle = \frac{\hbar}{i} \overline{1} \mathbf{d}(\bar{x} - \bar{x}')$$

Hier wird erstmalig die 1 explizit als Einheitsmatrix dargestellt. Dies wurde möglicherweise oben hi und da versäumt !

$$\langle \mathbf{j}(\bar{x}) | \hat{p} \hat{x} | \mathbf{j}(\bar{x}') \rangle - \langle \mathbf{j}(\bar{x}) | \hat{x} \hat{p} | \mathbf{j}(\bar{x}') \rangle = \frac{\hbar}{i} \overline{1} \mathbf{d}(\bar{x} - \bar{x}')$$

$$\hat{x} | \mathbf{j}(\bar{x}') \rangle = \bar{x}' | \mathbf{j}(\bar{x}') \rangle$$

$$\langle \mathbf{j}(\bar{x}) | \hat{x} = \langle \hat{x} \mathbf{j}(\bar{x}) | = \bar{x} \langle \mathbf{j}(\bar{x}) |$$

$$\Rightarrow (\bar{x}' - \bar{x}) \langle \mathbf{j}(\bar{x}) | \hat{p} | \mathbf{j}(\bar{x}') \rangle = \frac{\hbar}{i} \overline{1} \mathbf{d}(\bar{x} - \bar{x}')$$

Betrachten wir nun das Verhalten von  $\langle \mathbf{j}(\bar{x}) | \hat{p} | \mathbf{j}(\bar{x}') \rangle$  in der Umgebung des Ortes x.

Das heißt: Wir halten x fest und lassen x' laufen und betrachten, was mit  $\langle \mathbf{j}(\bar{x}) | \hat{p} | \mathbf{j}(\bar{x}') \rangle$  derweil passiert:

Nun:

- 1)  $\mathbf{d}(\bar{x} - \bar{x}')$  ist gerade lokalisiert in x' um x. Überall sonst gleich Null
- 2)  $(\bar{x} - \bar{x}')$  ist eine ungerade Funktion um x (im Ort)
- 3)  $\langle \mathbf{j}(\bar{x}) | \hat{p} | \mathbf{j}(\bar{x}') \rangle$  ist also eine ungerade Funktion mit Deltaartigem Charakter !

$$\text{Mittels } (\bar{x}' - \bar{x}) \langle \mathbf{j}(\bar{x}) | \hat{p} | \mathbf{j}(\bar{x}') \rangle = \frac{\hbar}{i} \overline{1} \mathbf{d}(\bar{x} - \bar{x}')$$

Schreiben wir:

$$(\bar{x}' - \bar{x})^2 \langle \mathbf{j}(\bar{x}) | \hat{p} | \mathbf{j}(\bar{x}') \rangle = \frac{\hbar}{i} \overline{1} (\bar{x} - \bar{x}') \mathbf{d}(\bar{x} - \bar{x}')$$

$$(\bar{x} - \bar{x}') \mathbf{d}(\bar{x} - \bar{x}') = 0$$

Dabei wurde verwendet:

$$f(x) \mathbf{d}(x) = f(0) \mathbf{d}(x)$$

$$x \mathbf{d}(x) = 0$$

$$\int dx f(x) \mathbf{d}(x) = f(0) = \int dx f(0) \mathbf{d}(x) = f(0) \int dx \mathbf{d}(x)$$

Nun:

Entwicklung von

$$f_{\hat{x}}(\bar{x}') \text{ um } \bar{x}:$$

$$f_{\hat{x}}(\bar{x}') = f_{\hat{x}}(\bar{x}) + (\bar{x}' - \bar{x}) \frac{\partial}{\partial x'} f_{\hat{x}}(\bar{x}') \Big|_{\bar{x}} + \frac{(\bar{x}' - \bar{x})^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x'^2} f_{\hat{x}}(\bar{x}') \Big|_{\bar{x}}$$

Somit:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{j}(\bar{x}) | \hat{p} | \mathbf{j}(\bar{x}') \rangle f_{\hat{x}}(\bar{x}') &= \langle \mathbf{j}(\bar{x}) | \hat{p} | \mathbf{j}(\bar{x}') \rangle f_{\hat{x}}(\bar{x}) + \\ &+ \langle \mathbf{j}(\bar{x}) | \hat{p} | \mathbf{j}(\bar{x}') \rangle (\bar{x}' - \bar{x}) \frac{\partial}{\partial x'} f_{\hat{x}}(\bar{x}') \Big|_{\bar{x}} + \langle \mathbf{j}(\bar{x}) | \hat{p} | \mathbf{j}(\bar{x}') \rangle \frac{(\bar{x}' - \bar{x})^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x'^2} f_{\hat{x}}(\bar{x}') \Big|_{\bar{x}} + O(\bar{x}^3) \end{aligned}$$

Aber:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{j}(\bar{x}) | \hat{p} | \mathbf{j}(\bar{x}') \rangle (\bar{x}' - \bar{x})^i &= 0 \\ i &\geq 2 \end{aligned}$$

Somit ist die Entwicklung zur ersten ordnung bereits exakt:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{j}(\bar{x}) | \hat{p} | \mathbf{j}(\bar{x}') \rangle f_{\hat{x}}(\bar{x}') &= \langle \mathbf{j}(\bar{x}) | \hat{p} | \mathbf{j}(\bar{x}') \rangle f_{\hat{x}}(\bar{x}) + \langle \mathbf{j}(\bar{x}) | \hat{p} | \mathbf{j}(\bar{x}') \rangle (\bar{x}' - \bar{x}) \frac{\partial}{\partial x'} f_{\hat{x}}(\bar{x}') \Big|_{\bar{x}} \\ (\bar{x}' - \bar{x}) \langle \mathbf{j}(\bar{x}) | \hat{p} | \mathbf{j}(\bar{x}') \rangle &= \frac{\hbar}{i} \overline{1} \mathbf{d}(\bar{x} - \bar{x}') \\ \langle \mathbf{j}(\bar{x}) | \hat{p} | \mathbf{j}(\bar{x}') \rangle f_{\hat{x}}(\bar{x}') &= \langle \mathbf{j}(\bar{x}) | \hat{p} | \mathbf{j}(\bar{x}') \rangle f_{\hat{x}}(\bar{x}) + \frac{\hbar}{i} \overline{1} \mathbf{d}(\bar{x} - \bar{x}') \frac{\partial}{\partial x'} f_{\hat{x}}(\bar{x}') \Big|_{\bar{x}} \end{aligned}$$

Also:

$$\begin{aligned} \int d\bar{x}' \langle \mathbf{j}(\bar{x}) | \hat{p} | \mathbf{j}(\bar{x}') \rangle f_{\hat{x}}(\bar{x}') &= f_{\hat{x}}(\bar{x}) \int d\bar{x}' \langle \mathbf{j}(\bar{x}) | \hat{p} | \mathbf{j}(\bar{x}') \rangle + \int d\bar{x}' \frac{\hbar}{i} \overline{1} \mathbf{d}(\bar{x} - \bar{x}') \frac{\partial}{\partial x'} f_{\hat{x}}(\bar{x}') \Big|_{\bar{x}} \\ \int d\bar{x}' \langle \mathbf{j}(\bar{x}) | \hat{p} | \mathbf{j}(\bar{x}') \rangle &= 0 \end{aligned}$$

Dieses Integral verschwindet da, wie oben gezeigt wurde,

$\langle \mathbf{j}(\bar{x}) | \hat{p} | \mathbf{j}(\bar{x}') \rangle$  eine ungerade Funktion in  $x'$  ist

es verschwindet also alles bis auf die exakt erste ordnung der Entwicklung.

Nun:

$$\begin{aligned} \int d\bar{x}' \langle \mathbf{j}(\bar{x}) | \hat{p} | \mathbf{j}(\bar{x}') \rangle f_{\hat{x}}(\bar{x}') &= \int d\bar{x}' \frac{\hbar}{i} \overline{1} \mathbf{d}(\bar{x} - \bar{x}') \frac{\partial}{\partial x'} f_{\hat{x}}(\bar{x}') \Big|_{\bar{x}} \\ \int d\bar{x}' \frac{\hbar}{i} \overline{1} \mathbf{d}(\bar{x} - \bar{x}') \frac{\partial}{\partial x'} f_{\hat{x}}(\bar{x}') \Big|_{\bar{x}} &= \frac{\hbar}{i} \overline{1} \frac{\partial}{\partial x} f_{\hat{x}}(\bar{x}) \\ \Rightarrow \int d\bar{x}' \langle \mathbf{j}(\bar{x}) | \hat{p} | \mathbf{j}(\bar{x}') \rangle f_{\hat{x}}(\bar{x}') &= \frac{\hbar}{i} \overline{1} \frac{\partial}{\partial x} f_{\hat{x}}(\bar{x}) \\ \Rightarrow \int d\bar{x}' \langle \mathbf{j}(\bar{x}) | \hat{p} | \mathbf{j}(\bar{x}') \rangle &= \frac{\hbar}{i} \overline{1} \frac{\partial}{\partial x} \end{aligned}$$

Lezteres ist der Impulsoperator in ortsdarstellung

Also:

$$\begin{aligned} \hat{p} | f \rangle &= \int dx | \mathbf{j}(\bar{x}) \rangle \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} f_{\hat{x}}(\bar{x}) \\ \langle \mathbf{j}(\bar{x}) | f \rangle &= f_{\hat{x}}(\bar{x}) \\ \Rightarrow \langle \mathbf{j}(\bar{x}') | \hat{p} | f \rangle &= \int dx \langle \mathbf{j}(\bar{x}') | \mathbf{j}(\bar{x}) \rangle \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} f_{\hat{x}}(\bar{x}) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x'} f_{\hat{x}}(\bar{x}') \\ &:= \hat{\bar{x}} \hat{p} f_{\hat{x}}(\bar{x}') \end{aligned}$$

Mit dem Impulsoperator in ortsdarstellung:

$$\hat{\bar{x}} \hat{p}$$

### 3.5.4.3 Impulseigenfunktionen

Setze:  $|f\rangle = |\Phi(\bar{p})\rangle, \langle j(\bar{x}) | \Phi(\bar{p})\rangle := \Phi_{\hat{x}}(\bar{x}', \bar{p})$

$$\langle j(\bar{x}) | \hat{p} | \Phi(\bar{p})\rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Phi_{\hat{x}}(\bar{x}, \bar{p}) = \bar{p} \langle j(\bar{x}) | \Phi(\bar{p})\rangle = \bar{p} \Phi_{\hat{x}}(\bar{x}, \bar{p})$$

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Phi_{\hat{x}}(\bar{x}, \bar{p}) = \bar{p} \Phi_{\hat{x}}(\bar{x}, \bar{p})$$

Eine DGL zur Bestimmung der Impulseigenfunktionen  
DGL lösen in Ortsdarstellung:

$$\Phi_{\hat{x}}(\bar{x}, \bar{p}) = C e^{\frac{i}{\hbar} \bar{p} \bar{x}}$$

Normierung liefert:

$$\Phi_{\hat{x}}(\bar{x}, \bar{p}) = C e^{\frac{i}{\hbar} \bar{p} \bar{x}}$$

$$C = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}^3}$$

Problem:

Definitionsbereich von  $\Phi_{\hat{x}}(\bar{x}, \bar{p}) = C e^{\frac{i}{\hbar} \bar{p} \bar{x}}$  ist noch unklar

In der Ortsdarstellung  $\Phi_{\hat{x}}(\bar{x}, \bar{p}) = C e^{\frac{i}{\hbar} \bar{p} \bar{x}}$  hängt  $\Phi_{\hat{x}}(\bar{x}, \bar{p}) = C e^{\frac{i}{\hbar} \bar{p} \bar{x}}$  noch von beiden, Ort und Impuls ab.

In der Ortsdarstellung jedoch ist  $x$  als Variable und  $p$  lediglich als Parameter zu verstehen

#### 3.5.4.4 zeitunabhängige Schrödingergleichung

$$H = \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - q\hat{A} \right)^2 + q\hat{V} = \frac{1}{2m} \left( \hat{p} - q\hat{A} \right)^2 + q\hat{V}$$

$$\hat{A} = \hat{A}(\bar{x})$$

$$\hat{V} = \hat{V}(\bar{x})$$

Ersteres in Ortsdarstellung, letzteres darstellungsfrei.  
der Hamiltonian wirkt dabei auf kets:

Behauptung:

Ersteres in Ortsdarstellung:

$$\hat{x} H = \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - q\hat{A} \right)^2 + q\hat{V}$$

wirkt auf Ortsfunktionen !

In der Schrödingergleichung hat der Hamiltonian im Wesentlichen 2 Bedeutungen:

- 1) er wirkt als Zeitschiebeoperator
- 2) er wirkt als Energie- Eigenwertoperator

#### 3.5.5 Impulsdarstellung:

$$\hat{p} | \Phi(\bar{p}) \rangle = \bar{p} | \Phi(\bar{p}) \rangle$$

$$\hat{p} \hat{p} | \Phi(\bar{p} - \bar{p}') \rangle = \bar{p} \hat{p} | \Phi(\bar{p} - \bar{p}') \rangle = \bar{p}' \hat{p} | \Phi(\bar{p} - \bar{p}') \rangle$$

Vorhin hatten wir das Eigenwertproblem des Impulsoperators in Ortsdarstellung gelöst.



Nun machen wir uns an das Eigenwertproblem des Ortsoperators in Impulsdarstellung !

Trivial sind Eigenwertproblem von Ortsoperator in Ortsdarstellung und des Impulsoperators in Impulsdarstellung:

$$\langle \Phi(\bar{p}) | \hat{x} | \mathbf{j}(\bar{x}) \rangle = \langle \Phi(\bar{p}) | \bar{x} | \mathbf{j}(\bar{x}) \rangle$$

$$\langle \Phi(\bar{p}) | \mathbf{j}(\bar{x}) \rangle := \Phi_{\hat{p}}(\bar{p}, \bar{x})$$

Dabei:

$\Phi_{\hat{p}}(\bar{p}, \bar{x})$  als Ortseigenfunktion in Impulsdarstellung,

entsprechend  $\Phi_{\hat{x}}^*(\bar{p}, \bar{x})$  als Komplex Konjugiertes der Impulseigenfunktion in Ortsdarstellung

Es gilt dann

$$\hat{p} \hat{x} \Phi_{\hat{p}}(\bar{p}, \bar{x}) = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \bar{p}} \Phi_{\hat{p}}(\bar{p}, \bar{x})$$

**22.11.02**

**Wiederholung:**

$$\hat{p} | \Phi(\bar{p}) \rangle = \bar{p} | \Phi(\bar{p}) \rangle$$

$$\hat{p} \hat{p} \mathbf{d}(\bar{p} - \bar{p}') = \bar{p} \mathbf{d}(\bar{p} - \bar{p}') = \bar{p}' \mathbf{d}(\bar{p} - \bar{p}')$$

$$\hat{x} | \mathbf{j}(\bar{x}) \rangle = \bar{x} | \mathbf{j}(\bar{x}) \rangle$$

$$\langle \Phi(\bar{p}) | \hat{x} | \mathbf{j}(\bar{x}) \rangle = \langle \Phi(\bar{p}) | \bar{x} | \mathbf{j}(\bar{x}) \rangle$$

$$\langle \Phi(\bar{p}) | \mathbf{j}(\bar{x}) \rangle := \Phi_{\hat{p}}(\bar{p}, \bar{x})$$

Nun gilt:

$$\Phi_{\hat{p}}(\bar{p}, \bar{x}) = \Phi_{\hat{x}}^*(\bar{x}, \bar{p})$$

Dabei ist insbesondere die Vertauschung von Ort und Impuls von Bedeutung

$$\hat{p} \hat{x} \Phi_{\hat{p}}(\bar{p}, \bar{x}) = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \bar{p}} \Phi_{\hat{p}}(\bar{p}, \bar{x})$$

**Summary:**

**Wir gehen aus:**

Axiome der Quantenmechanik mit

$$\dot{\hat{x}} \equiv 0$$

$$\text{div} \dot{\hat{x}} \equiv 0$$

Dann : Schrödingergleichung

Wir versuchen, die physikalischen grundgrößen als Operatoren in ortsdarstellung auszudrücken:

$$\hat{\hat{x}} \hat{\hat{x}} = \bar{x}$$

$$\hat{\hat{x}} \hat{\hat{x}} \mathbf{d}(\bar{x} - \bar{x}') = \bar{x} \mathbf{d}(\bar{x} - \bar{x}')$$

$$\hat{\hat{x}} \hat{\hat{p}} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \bar{x}}$$

$$\hat{\bar{x}} \hat{p} \Phi_{\hat{x}}(\bar{x}, \bar{p}) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \bar{x}} \Phi_{\hat{x}}(\bar{p}, \bar{x}) = \bar{p} \Phi_{\hat{x}}(\bar{x}, \bar{p})$$

$$\Phi_{\hat{x}}(\bar{x}, \bar{p}) = \langle \mathbf{j}(\bar{x}) | \Phi(\bar{p}) \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} \bar{p}\bar{x}}$$

$$\hat{p} \hat{x} = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \bar{p}}$$

$$\Phi_{\hat{p}}(\bar{p}, \bar{x}) = \Phi_{\hat{x}}^*(\bar{x}, \bar{p})$$

Von den physikalischen Grundgrößen als Operatoren in Ortsdarstellung kommen wir zum Zeitableitungsoperator:

$$\hat{F}^\circ = \partial_t \hat{F} + \frac{i}{\hbar} [H, \hat{F}]$$

Nun sind demnach die Vertauschungsrelationen zu finden:

$$[\hat{p}, \hat{x}] = \frac{\hbar}{i} \mathbb{1}$$

Und wir kommen von den physikalischen Grundgrößen als Operatoren in Ortsdarstellung zu den Observablen

$$\hat{F} = \hat{F}^\dagger$$

#### **4. Anwendungen**

##### **4.1 eindimensionale Probleme**

**vergl. Bücher/ Einführung/ Übungsaufgaben**

##### **4.2 Der lineare harmonische Oszillator:**

Potenzial:

$$\hat{V}(\bar{x}) = \frac{k}{2} \hat{x}^2 = \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2$$

$$H = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2$$

$$[\hat{p}, \hat{x}] = \frac{\hbar}{i} \mathbb{1}$$

$$\hat{x}^\circ = \frac{i}{\hbar} [H, \hat{x}]$$

$$\hat{p}^\circ = \frac{i}{\hbar} [H, \hat{p}]$$

Bereits berechnet:

$$[\hat{F}, \hat{x}] = \frac{\hbar}{i} \partial_p \hat{F}$$

$$[\hat{F}, \hat{p}] = -\frac{\hbar}{i} \partial_x \hat{F}$$

$$\Rightarrow \hat{x}^\circ = \frac{i}{\hbar} [H, \hat{x}] = \partial_p H = \frac{\hat{p}}{m}$$

$$\hat{p}^\circ = \frac{i}{\hbar} [H, \hat{p}] = -\partial_x H = -m \omega^2 \hat{x}$$

Also:

$$\begin{aligned}\hat{\hat{x}}^{\circ\circ} &= \frac{i}{\hbar} [H, \hat{\hat{x}}^{\circ}] = \frac{\hat{\hat{p}}^{\circ}}{m} \\ \hat{\hat{p}}^{\circ} &= \frac{i}{\hbar} [H, \hat{\hat{p}}] = -\partial_x H = -m\mathbf{w}^2 \hat{\hat{x}} \\ \Rightarrow \hat{\hat{x}}^{\circ\circ} &= -\mathbf{w}^2 \hat{\hat{x}}\end{aligned}$$

#### Lösungsansatz im Auf- und Absteigerformalismus:

$$\begin{aligned}\hat{\hat{x}} &= A(\hat{b} + \hat{b}^+) \\ \hat{\hat{p}} &= B(\hat{b} - \hat{b}^+) \\ \hat{\hat{x}} &= \hat{\hat{x}}^+ \Rightarrow A \in \mathbb{R} \\ \hat{\hat{p}} &= \hat{\hat{p}}^+ \Rightarrow B \in i \\ [\hat{\hat{p}}, \hat{\hat{x}}] &= AB \{ (\hat{b} - \hat{b}^+) (\hat{b} + \hat{b}^+) - (\hat{b} + \hat{b}^+) (\hat{b} - \hat{b}^+) \} \\ &= 2AB [\hat{b}\hat{b}^+ - \hat{b}^+\hat{b}] = 2AB [\hat{b}, \hat{b}^+] = \frac{\hbar}{i} \overline{1}\end{aligned}$$

Wähle:

$$\begin{aligned}2AB &= \frac{\hbar}{i} \\ \Rightarrow [\hat{b}, \hat{b}^+] &= \overline{1} \\ \frac{1}{A} \hat{\hat{x}} &= (\hat{b} + \hat{b}^+) \\ \frac{1}{B} \hat{\hat{p}} &= (\hat{b} - \hat{b}^+) \\ \Rightarrow \hat{b} &= \frac{1}{2} \left( \frac{1}{A} \hat{\hat{x}} + \frac{1}{B} \hat{\hat{p}} \right) \\ \hat{b}^+ &= \frac{1}{2} \left( \frac{1}{A} \hat{\hat{x}} - \frac{1}{B} \hat{\hat{p}} \right)\end{aligned}$$

#### 4.2.3 Eigenwertproblem

$$\begin{aligned}H &= \frac{1}{2m} B^2 (\hat{b} - \hat{b}^+)^2 + \frac{1}{2} m\mathbf{w}^2 A^2 (\hat{b} + \hat{b}^+)^2 \\ 2AB &= \frac{\hbar}{i} \Rightarrow A^2 = -\frac{\hbar^2}{4B^2} \\ \Rightarrow H &= \frac{1}{2m} B^2 \left( \hat{b}^2 - \hat{b}\hat{b}^+ - \hat{b}^+\hat{b} + \hat{b}^{+2} \right)^2 + \frac{1}{2} m\mathbf{w}^2 A^2 \left( \hat{b}^2 + \hat{b}\hat{b}^+ + \hat{b}^+\hat{b} + \hat{b}^{+2} \right)\end{aligned}$$

An sich können wir A UND B frei wählen. Bisher wurde nur

$$A^2 = -\frac{\hbar^2}{4B^2}$$

verwendet.

Wähle nun weiter:

$$\frac{1}{2m} B^2 = -\frac{m\omega^2 A^2}{2}$$

Ziel:

Elimination der quadratischen terme des Aufsteigers und Absteigers

$$A^2 = -\frac{\hbar^2}{4B^2}$$

$$\frac{1}{2m} B^2 = \frac{m\omega^2}{2} \frac{\hbar^2}{4B^2}$$

Diese Gleichung besitzt 4 Lösungen.

Weiter wussten wir jedoch noch, dass B rein imaginär sein soll !!

Also:

$$B = -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}$$

$$A = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$$

Einsetzen in

$$H = \frac{1}{2m} B^2 \left( b - \hat{b}\hat{b}^+ - \hat{b}^+\hat{b} + \hat{b}^{+2} \right)^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 A^2 \left( \hat{b}^2 + \hat{b}\hat{b}^+ + \hat{b}^+\hat{b} + \hat{b}^{+2} \right)$$

$$\Rightarrow H = -\frac{\hbar\omega}{2} (-2\hat{b}\hat{b}^+ - 2\hat{b}^+\hat{b}) = \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{b}\hat{b}^+ + \hat{b}^+\hat{b}) = \frac{\hbar\omega}{2} [\hat{b}, \hat{b}^+] + 2\hat{b}^+\hat{b}$$

$$H = \hbar\omega\hat{b}^+\hat{b} + \frac{\hbar\omega}{2} [\hat{b}, \hat{b}^+]$$

Da wir nun dreidimensional rechnen, müssen wir jedoch noch den Kommutator zwischen  $[\hat{b}, \hat{b}^+]$  etwas spezialisieren:

$$[\hat{b}_j, \hat{b}^{+}_j] = 1 = \hat{b}_j\hat{b}^{+}_j - \hat{b}^{+}_j\hat{b}_j$$

$$\Rightarrow [\hat{b}_j, \hat{b}^{+}_j] = \sum_{j=1}^3 \hat{b}_j\hat{b}^{+}_j - \hat{b}^{+}_j\hat{b}_j = 3$$

Also folgt:

$$H = \hbar\omega\hat{b}^+\hat{b} + \frac{3}{2}\hbar\omega$$

**Eindimensional:**

$$H = \hbar\omega\hat{b}^+\hat{b} + \frac{1}{2}\hbar\omega$$

**Satz:**

**Es gilt:**

$$\begin{aligned}
\hat{n} &:= \hat{b}^+ \hat{b} \\
\Rightarrow [\hat{n}, \hat{b}^+] &= \hat{b}^+ \\
[\hat{n}, \hat{b}] &= -\hat{b} \\
\hat{b} \hat{n} &= (\hat{n} + 1) \hat{b} \\
\hat{b}^+ \hat{n} &= \hat{b}^+ \hat{b}^+ \hat{b} = \hat{b}^+ \hat{b} \hat{b}^+ - \hat{b}^+ [\hat{b}^+, \hat{b}] = (\hat{n} - 1) \hat{b}^+ \\
[\hat{b}^q, \hat{n}] &= q \hat{b}^q \\
\left[ (\hat{b}^+)^q, \hat{n} \right] &= -q (\hat{b}^+)^q \\
q &\in \mathbb{N}
\end{aligned}$$

**Alle Operatoren mit den angegebenen Vertauschungsrelationen besitzen sogenannte STUFENEIGENSCHAFT!**

### Stufeneigenschaft

$$\hat{n} |u_n\rangle = n |u_n\rangle$$

$$\text{Betrachte } \hat{b}^q \hat{n} |u_n\rangle = q \hat{b}^q |u_n\rangle + \hat{n} \hat{b}^q |u_n\rangle = \hat{b}^q n |u_n\rangle$$

$$\Rightarrow \hat{n} \hat{b}^q |u_n\rangle = (n - q) \hat{b}^q |u_n\rangle$$

Analog:

$$\hat{n} \left( (\hat{b}^+)^q |u_n\rangle \right) = (n + q) \left( (\hat{b}^+)^q |u_n\rangle \right)$$

Also:

Als Eigenwertproblem von  $\hat{n}$  gewinnt man folgende Reihe:

Zum Eigenwert	gehört Eigenfunktion
n-q	$ \hat{b}^q u_n\rangle$
...	...
n-1	$ \hat{b} u_n\rangle$
n	$ u_n\rangle$
n+1	$ \hat{b}^+ u_n\rangle$
...	...
n+q	$ (\hat{b}^+)^q u_n\rangle$

## Einwurf und Fortführung: Kohärente Zustände

### 1. Kohärente (quasiklassische) Zustände

#### 1.1 Abstract

Untersucht man die stationären Zustände  $|j_n\rangle$  des harmonischen Oszillators, so sind die Erwartungswerte von Ort und Impuls in einem solchen Zustand Null. Statt dessen ergeben sich von Null verschiedene

Erwartungswerte  $\langle \hat{X}^2 \rangle$  und  $\langle \hat{P}^2 \rangle$ , sogenanntes Quantenrauschen, welches für die Heisenbergsche Unschärferelation verantwortlich ist.

Aus der klassischen Mechanik ist jedoch bekannt, dass Ort und Impuls eines Oszillators sich periodisch ändern. Sie können nur dann konstant gleich null sein, wenn das auch für die Energie der Fall ist.

Für die Energie gilt jedoch:  $\langle \hat{H} \rangle = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ . Bekanntlich gelangt die Quantenmechanik für große

Quantenzahlen hinsichtlich ihrer Ergebnisse zu den gleichen Resultaten wie die klassische Mechanik. Es drängt sich also die Frage auf: Kann man Quantenzustände konstruieren, für die die physikalischen Voraussagen der Quantenmechanik zumindest bei einem makroskopischen Oszillator mit den Aussagen der klassischen Mechanik identisch sind?

Derartige Zustände existieren. Es sind kohärente Überlagerungen aller stationären Zustände  $|j_n\rangle$ . Man nennt sie deshalb auch quasiklassische oder kohärente Zustände.

Bei der elektromagnetischen Strahlung kann man den Fall beobachten, dass klassische Lösungen übergehen in Effekte, die deutlichen Quantencharakter zeigen. Die Interferenz von Photonen am Doppelspalt bei äußerst geringen Intensitäten ist nur ein Beispiel. Die kohärenten Zustände spielen deshalb auch in der Quantenoptik eine große Rolle. Sie wurden von Glauber eingeführt und heißen demnach auch Glauberzustände.

Bekanntlich vertauschen die Operatoren für Ort und Impuls nicht. Ein Zustand, aus dem exakt die klassischen Ergebnisse resultieren kann demnach gar nicht existieren.

Wir begnügen uns mit der Suche nach einem Zustand, für den zu einer beliebigen Zeit  $t$  die Erwartungswerte von Ort, Impuls und Energie möglichst nahe an den entsprechenden klassischen Werten liegen.

Das Ergebnis wird ein Kompromiss sein, bei dem keine der drei Observablen vollständig bestimmt ist, jedoch wird sich herausstellen, dass man im makroskopischen Grenzfall die Standardabweichungen der Größen gänzlich vernachlässigen darf. Am Beispiel eines makroskopischen Oszillators wird gezeigt, dass beispielsweise die Ortsunschärfe weit unter einem Kerndurchmesser liegt und damit die Ergebnisse der klassischen Mechanik weit genauer sind als dass man in makroskopischen Grenzfällen ihre Abweichungen mit physikalischen Methoden heute messen könnte.

## **2.2 Der klassische Oszillator**

Wir erinnern uns an die hamiltonschen Bewegungsgleichungen des Oszillators mit Masse  $m$  und Kreisfrequenz  $\omega$ :

$$\frac{d}{dt}x(t) = \frac{1}{m}p(t)$$

$$\frac{d}{dt}p(t) = -m\omega^2 x(t)$$

Der Einfachheit halber werden dimensionslose Größen eingeführt:

$$\hat{x}(t) = \mathbf{b}x(t)$$

$$\hat{p}(t) = \frac{1}{\hbar \mathbf{b}} p(t)$$

$$\mathbf{b} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

Die Bewegungsgleichungen lauten:

$$\frac{d}{dt} \hat{x}(t) = \omega \hat{p}(t)$$

$$\frac{d}{dt} \hat{p}(t) = -\omega \hat{x}(t)$$

Klassisch ist ein solcher Oszillator bestimmt, wenn für alle Zeiten Ort **und** Impuls bekannt sind. Das Problem des Oszillators eines Freiheitsgrades ist also zweidimensional, man fasst die beiden Größen x und p zu einer

komplexen Größe  $\mathbf{a}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\hat{x}(t) + i\hat{p}(t)]$  zusammen.

Das Gleichungssystem ist dann äquivalent zu einer Gleichung

$$\frac{d}{dt} \mathbf{a}(t) = -i\omega \mathbf{a}(t)$$

Die Lösung lautet

$$\mathbf{a}(t) = \mathbf{a}(0) \exp(-i\omega t) \quad \text{mit} \quad \mathbf{a}(0) = \mathbf{a}_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} [\hat{x}(0) + i\hat{p}(0)]$$

In der komplexen Ebene beschreibt  $\mathbf{a}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\hat{x}(t) + i\hat{p}(t)]$  einen Vektor, der mit der

Winkelgeschwindigkeit  $-\omega$  um den Ursprung rotiert. Dabei gibt die Abszisse  $\frac{\hat{x}(t)}{\sqrt{2}}$  an, auf der Ordinate findet

sich  $\frac{\hat{p}(t)}{\sqrt{2}}$ . Die Darstellung ist also sehr einfach und eine Bewegung mit bestimmten Anfangsbedingungen ist

durch den Punkt  $\mathbf{a}_0$  bereits vollständig charakterisiert.

Aus  $\mathbf{a}(t) = \mathbf{a}(0) \exp(-i\omega t)$  ergibt sich mit  $\mathbf{a}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\hat{x}(t) + i\hat{p}(t)]$  nun:

$$\hat{x}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\mathbf{a}(0) \exp(-i\omega t) + \mathbf{a}(0)^* \exp(i\omega t)]$$

$$\hat{p}(t) = \frac{-i}{\sqrt{2}} [\mathbf{a}(0) \exp(-i\omega t) - \mathbf{a}(0)^* \exp(i\omega t)]$$

Die klassische Energie des Systems ist zeitlich konstant:

$$E = \frac{1}{2m} [p(0)]^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 [x(0)]^2$$

$$E = \frac{\hbar\omega}{2} \{ [p(0)]^2 + [x(0)]^2 \} = \hbar\omega |\mathbf{a}_0|^2$$

Für einen makroskopischen Oszillator ist die Energie viel größer als  $\hbar\omega$ . Also gilt  $|\mathbf{a}_0| \gg 1$

## 2.3 Definition der quasiklassischen Zustände

**Ziel:** Die Erwartungswerte  $\langle \hat{X} \rangle, \langle \hat{P} \rangle, \langle \hat{H} \rangle$  sollen zu allen Zeiten praktisch gleich den Werten  $\hat{x}, \hat{p}, \hat{H}$  der klassischen Bewegung sein.

Einfach ist die Berechnung der Erwartungswerte in algebraischer Schreibweise. Ort, Impuls und Energie werden dabei durch Auf- und Absteiger ausgedrückt:

$$\hat{X} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^+)$$

$$\hat{P} = \frac{1}{\hbar}P = -\frac{i}{\sqrt{2}}(a - a^+)$$

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

wegen  $\langle a^+ \rangle = \langle a \rangle^*$  ist zunächst  $a$  wieder als "komplexer, hermitescher Operator" zu sehen, dessen Realteil dem Ort und dessen Imaginärteil dem Impuls entspricht.

Die zeitliche Entwicklung eines Matricelements erfolgt durch die Differentialgleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle a \rangle(t) = \langle [a, H] \rangle(t)$$

$$[a, H] = \hbar\omega[a, a^+a] = \hbar\omega a$$

Also folgt eine Differentialgleichung für den Absteiger

$$\langle a \rangle(t) = \langle a \rangle(0)e^{(-i\omega t)}$$

mit  $[a^+, H] = \hbar\omega[a^+, a^+a] = -\hbar\omega a^+$  folgt:

$$\langle a^+ \rangle(t) = \langle a^+ \rangle(0)e^{(i\omega t)} = \langle a \rangle^*(0)e^{(i\omega t)}$$

Diese Bewegungsgleichungen für Auf- und Absteiger entsprechen der klassischen Gleichung

$$\mathbf{a}(t) = \mathbf{a}(0)\exp(-i\omega t)$$

Werden die Lösungen für die zeitliche Entwicklung dieser Operatoren in unsere Definition von Energie, Ort und Impuls eingesetzt, so ergibt sich:

$$\langle \hat{X} \rangle(t) = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^+) \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [\langle a \rangle(0)e^{-i\omega t} + \langle a \rangle^*(0)e^{i\omega t}]$$

$$\langle \hat{P} \rangle(t) = \left\langle -\frac{i}{\sqrt{2}}(a - a^+) \right\rangle = -\frac{i}{\sqrt{2}} [\langle a \rangle(0)e^{-i\omega t} - \langle a \rangle^*(0)e^{i\omega t}]$$

$$\langle \hat{H} \rangle(t) = \langle \hat{H} \rangle(0) = \hbar\omega \left\langle a^+a + \frac{1}{2} \right\rangle = \hbar\omega \langle a^+a \rangle(0) + \frac{\hbar\omega}{2}$$

Vergleicht man dies mit der Lösung für den klassischen Fall (Remember: Ort und Impuls wurden als komplexe

Zahl  $\mathbf{a}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\hat{x}(t) + i\hat{p}(t)]$  zusammengefasst, deren Bewegungsgleichung  $\frac{d}{dt}\mathbf{a}(t) = -i\omega\mathbf{a}(t)$  beide

Hamiltonsche Gleichungen erfüllt), die denn lauteten:



$$\hat{x}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\mathbf{a}(0) \exp(-i\omega t) + \mathbf{a}(0)^* \exp(i\omega t)]$$

$$\hat{p}(t) = \frac{-i}{\sqrt{2}} [\mathbf{a}(0) \exp(-i\omega t) - \mathbf{a}(0)^* \exp(i\omega t)]$$

So ist notwendig und hinreichend für unsere Bedingung

$$\langle \hat{X} \rangle(t) = \hat{x}(t)$$

$$\langle \hat{P} \rangle(t) = \hat{p}(t)$$

dass

$$\langle a \rangle(0) = \mathbf{a}_0$$

Unser Ziel war es nun jedoch, durch den Vergleich mit dem komplexen Parameter zur Charakterisierung der klassischen Bewegung Zustände zu suchen, in denen die klassische Bewegung quantenmechanisch möglichst gut approximiert wird. Diese Zustandsvektoren müssen normierbar sein und wir erhalten als erstes die Bedingung

$$\langle a \rangle(0) = \langle \Psi(0) | a | \Psi(0) \rangle = \mathbf{a}_0$$

Eine weitere Bedingung wurde uns durch die Energie geschenkt, für die gilt:

$$\langle \hat{H} \rangle(t) = \langle \hat{H} \rangle(0) = \hbar\omega \left\langle \left( a^+ a + \frac{1}{2} \right) \right\rangle = \hbar\omega \langle a^+ a \rangle(0) + \frac{\hbar\omega}{2} = \hbar\omega |\mathbf{a}_0|^2$$

Näherung:

Da für einen klassischen Operator  $|\mathbf{a}_0| \gg 1$  können wir den Term  $\frac{\hbar\omega}{2}$  vernachlässigen und es gilt als zweite

Bedingung an den Zustandsvektor  $\langle a^+ a \rangle(0) = |\mathbf{a}_0|^2$

Diese beiden Bedingungen genügen jedoch zur Bestimmung des normierten Vektors  $|\Psi(0)\rangle$  bis auf einen Phasenfaktor.

### Wirkung des Vernichtungsoperators auf quasiklassische Zustände

Mit dem Operator

$$b = a - \mathbf{a}_0$$

Kann die Norm des Kets  $b(\mathbf{a}_0) | \Psi_0 \rangle$  berechnet werden:

$$\langle \Psi_0 | b^+ (\mathbf{a}_0) b (\mathbf{a}_0) | \Psi_0 \rangle = \langle \Psi_0 | a^+ a | \Psi_0 \rangle - \mathbf{a}_0 \langle \Psi_0 | a^+ | \Psi_0 \rangle - \mathbf{a}_0^* \langle \Psi_0 | a | \Psi_0 \rangle + \mathbf{a}_0^* \mathbf{a}_0$$

Mit

$$\langle a \rangle(0) = \langle \Psi(0) | a | \Psi(0) \rangle = \mathbf{a}_0 \text{ und } \langle a^+ a \rangle(0) = |\mathbf{a}_0|^2 \text{ folgt dann:}$$

$$\langle \Psi_0 | b^+ (\mathbf{a}_0) b (\mathbf{a}_0) | \Psi_0 \rangle = \mathbf{a}_0^* \mathbf{a}_0 - \mathbf{a}_0 \mathbf{a}_0^* - \mathbf{a}_0 \mathbf{a}_0^* + \mathbf{a}_0^* \mathbf{a}_0 = 0$$

Jedoch ist nur der Nullvektor vom Betrag Null, woraus folgt:

$$b(\mathbf{a}_0) | \Psi_0 \rangle = 0$$

also:

$$a | \Psi_0 \rangle = \mathbf{a}_0 | \Psi_0 \rangle$$

Somit folgt aus unseren Bedingungen, dass  $|\Psi_0\rangle$  Eigenzustand zum Vernichtungsoperator mit dem Eigenwert  $\mathbf{a}_0$  sein muss, damit der Zustandsvektor  $|\Psi_0\rangle$  den Bedingungen einer klassischen Bewegung mit dem Parameter  $\mathbf{a}_0$  genügt. Im Folgenden heie  $|\Psi_0\rangle := |\mathbf{a}_0\rangle$ . Der Eigenvektor von  $a$  zum Eigenwert  $\mathbf{a}$  ist  $|\mathbf{a}\rangle$ :  
 $a|\mathbf{a}\rangle = \mathbf{a}|\mathbf{a}\rangle$

Aus dieser Eigenwertgleichung lassen sich die Lsungen  $|\mathbf{a}\rangle$  bestimmen, indem  $|\mathbf{a}\rangle$  in den quantenmechanischen Eigenzuständen des harmonischen Oszillators entwickelt wird. (Diese ergeben sich durch Lsung der Schrdingergleichung):

$$|\mathbf{a}\rangle = \sum_n c_n(\mathbf{a}) |j_n\rangle$$

Die Wirkung des Absteigers auf die qm- Eigenzustände ist jedoch bekannt:

$$a|\mathbf{a}\rangle = a \sum_n c_n(\mathbf{a}) |j_n\rangle = \sum_n c_n(\mathbf{a}) \sqrt{n} |j_{n-1}\rangle = \mathbf{a}|\mathbf{a}\rangle = \mathbf{a} \sum_n c_n(\mathbf{a}) |j_n\rangle$$

$$\sum_n c_n(\mathbf{a}) \sqrt{n} |j_{n-1}\rangle = \mathbf{a} \sum_n c_n(\mathbf{a}) |j_n\rangle$$

(Verschiebung des Summationsindex)

$$\rightarrow c_{n+1}(\mathbf{a}) = \frac{\mathbf{a}}{\sqrt{n+1}} c_n(\mathbf{a})$$

Man hat also eine Rekursionsformel fr die Entwicklungskoeffizienten gefunden:

$$c_n(\mathbf{a}) = \frac{\mathbf{a}^n}{\sqrt{n!}} c_0(\mathbf{a})$$

Es bleibt nun also,  $c_0(\mathbf{a})$  zu bestimmen. Allerdings kennen wir weitere Bedingungen an die  $c_n(\mathbf{a})$ . So sollten nmlich alle Zustände  $|\mathbf{a}\rangle$  normierbar sein. Dies bedeutet jedoch, da die quantenmechanischen Eigenzustände selbst normiert sind:

$$\sum_n |c_n(\mathbf{a})|^2 = 1 = \sum_n \frac{|\mathbf{a}|^{2n}}{n!} |c_0(\mathbf{a})|^2 = |c_0(\mathbf{a})|^2 e^{|\mathbf{a}|^2}$$

Vereinbaren wir noch, dass  $c_0(\mathbf{a})$  reell und positiv sein soll, so ergibt sich:

$$c_0(\mathbf{a}) = e^{-\frac{|\mathbf{a}|^2}{2}}$$

$$\rightarrow |\mathbf{a}\rangle = e^{-\frac{|\mathbf{a}|^2}{2}} \sum_n \frac{\mathbf{a}^n}{\sqrt{n!}} |j_n\rangle$$

Die kohrenten Zustände sind damit vollstndig bestimmt.

## 2.4 Erwartungswerte und Streuungen von Energie, Ort und Impuls

Nun kann man die Energie eines Oszillators im kohrenten Zustand  $|\mathbf{a}\rangle = e^{-\frac{|\mathbf{a}|^2}{2}} \sum_n \frac{\mathbf{a}^n}{\sqrt{n!}} |j_n\rangle$  berechnen und mit dem klassischen Ergebnis vergleichen:

Eine Energiemessung liefert den Wert  $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$  mit der

Wahrscheinlichkeit  $P_n(\mathbf{a}) = |c_n|^2 = e^{-|\mathbf{a}|^2} \frac{|\mathbf{a}|^{2n}}{n!}$ . Dies ist eine Poisson- Verteilung.

Man sieht, dass auch die Wahrscheinlichkeiten einer Rekursion genügen:

$$P_n(\mathbf{a}) = \frac{|\mathbf{a}|^2}{n} P_{n-1}(\mathbf{a})$$

Aus dieser Beziehung lässt sich ableiten, dass  $P_n(\mathbf{a})$  für  $n =$  ganzzahliger Teil von  $|\mathbf{a}|^2$  maximal wird ( unter der Bedingung, dass  $n$  ganzzahlig ist).

Mit  $\langle \mathbf{a} | a^+ a | \mathbf{a} \rangle = \mathbf{a} * \mathbf{a}$  sieht man:

$$\langle \hat{H} \rangle_{\mathbf{a}} = \hbar\omega \langle \mathbf{a} | a^+ a + \frac{1}{2} | \mathbf{a} \rangle = \hbar\omega \left[ \mathbf{a} * \mathbf{a} + \frac{1}{2} \right] = \hbar\omega \left[ |\mathbf{a}|^2 + \frac{1}{2} \right]$$

Für unserer Bedingung an makroskopische Oszillatoren:  $|\mathbf{a}| \gg 1$ , sieht man also, dass die im kohärenten Zustand zu erwartende Energie nur wenig von der Energie  $E_n$  abweicht, die bei Messung in  $|j_n\rangle$  mit maximaler Wahrscheinlichkeit  $P_n(\mathbf{a})$  zu erwarten ist.

Ebenso einfach kann man mit Hilfe von  $[a, a^+] = 1$  den Erwartungswert

$$\langle \hat{H}^2 \rangle_{\mathbf{a}} = \hbar^2 \omega^2 \langle \mathbf{a} | \left[ a^+ a + \frac{1}{2} \right]^2 | \mathbf{a} \rangle = \hbar^2 \omega^2 \left[ |\mathbf{a}|^4 + 2|\mathbf{a}|^2 + \frac{1}{4} \right] \text{ berechnen}$$

und man erhält dann eine Standardabweichung

$$\Delta \hat{H}_{\mathbf{a}} = \hbar\omega |\mathbf{a}|$$

Die relative Standardabweichung

$$\frac{\Delta \hat{H}_{\mathbf{a}}}{\langle \hat{H} \rangle_{\mathbf{a}}} \approx \frac{1}{|\mathbf{a}|} \ll 1 \text{ für große } |\mathbf{a}|$$

Damit ist die Energie im kohärenten Zustand relativ gut bestimmt

Remember:

$$\hat{X} = \mathbf{b}X = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^+)$$

$$\hat{P} = \frac{1}{\hbar\mathbf{b}}P = -\frac{i}{\sqrt{2}}(a - a^+)$$

Somit, wie jeder leicht nachrechnen kann, ergibt sich:

$$\langle X \rangle_{\mathbf{a}} = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \text{Re}(\mathbf{a})$$

$$\langle P \rangle_{\mathbf{a}} = \sqrt{2m\hbar\omega} \text{Im}(\mathbf{a})$$

$$\langle X^2 \rangle_{\mathbf{a}} = \frac{\hbar}{2m\omega} \left[ (\mathbf{a} + \mathbf{a}^*)^2 + 1 \right]$$

$$\langle P^2 \rangle_{\mathbf{a}} = \frac{m\omega\hbar}{2} \left[ 1 - (\mathbf{a} - \mathbf{a}^*)^2 \right]$$

Also kann man direkt die Standardabweichungen angeben:

$$\Delta X_{\mathbf{a}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$$

$$\Delta P_{\mathbf{a}} = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}$$

Beide hängen nun nicht mehr von  $\mathbf{a}$  ab und Ihr Produkt liefert den nach der Unschärferelation minimalen erlaubten Wert:

$$\Delta X_{\mathbf{a}} \cdot \Delta P_{\mathbf{a}} = \frac{\hbar}{2}$$

## 2.5 Erzeugung quasiklassischer Zustände aus dem Grundzustand

Wir definieren den Operator

$$D(\mathbf{a}) = e^{(\mathbf{a}a^+ - \mathbf{a}^*a)}$$

$$D^+(\mathbf{a}) = e^{(\mathbf{a}^*a - \mathbf{a}a^+)}$$

Mit Hilfe von  $[\mathbf{a}a^+, \mathbf{a}^*a] = \mathbf{a}^*a - \mathbf{a}^*a = 0$  und

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{\frac{[A,B]}{2}} \quad \text{falls } [[A,B], A] = [[A,B], B] = 0$$

folgt:

$$D(\mathbf{a}) = e^{-\frac{|\mathbf{a}|^2}{2}} e^{\mathbf{a}a^+} e^{-\mathbf{a}^*a}$$

Wenn wir diesen Operator nun auf den Grundzustand der quantenmechanischen Zustände  $|\mathbf{j}_0\rangle$  wirken lassen, so ergibt sich wegen

$$e^{-\mathbf{a}^*a} |\mathbf{j}_0\rangle = \left[ 1 - \mathbf{a}^*a + \frac{(\mathbf{a}^*)^2 a^2}{2!} + \dots \right] |\mathbf{j}_0\rangle = |\mathbf{j}_0\rangle$$

$$D(\mathbf{a}) |\mathbf{j}_0\rangle = e^{-\frac{|\mathbf{a}|^2}{2}} e^{\mathbf{a}a^+} |\mathbf{j}_0\rangle = e^{-\frac{|\mathbf{a}|^2}{2}} \sum_n \frac{(\mathbf{a}a^+)^n}{n!} |\mathbf{j}_0\rangle = e^{-\frac{|\mathbf{a}|^2}{2}} \sum_n \frac{\mathbf{a}^n}{\sqrt{n!}} |\mathbf{j}_n\rangle = |\mathbf{a}\rangle$$

Die Wirkung von  $D(\mathbf{a}) = e^{-\frac{|\mathbf{a}|^2}{2}} e^{\mathbf{a}a^+} e^{-\mathbf{a}^*a}$  ist folglich die unitäre Transformation, die aus dem Grundzustand  $|\mathbf{j}_0\rangle$  den quasiklassischen Zustand  $|\mathbf{a}\rangle$  erzeugt.

## 2.6 Kohärente Wellenfunktionen in Ortsdarstellung

Bleibt noch, die Wellenfunktion

$$\Psi_{\mathbf{a}}(x) = \langle x | \mathbf{a} \rangle = \langle x | D(\mathbf{a}) | \mathbf{j}_0 \rangle \quad \text{zu berechnen (} |\mathbf{a}\rangle \text{ in Ortsdarstellung)}$$

Dazu kann man den Operator

$\mathbf{a}a^+ - \mathbf{a}^*a$  durch  $X$  und  $P$  ausdrücken:

$$\mathbf{a}a^+ - \mathbf{a}^*a = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \left( \frac{\mathbf{a} - \mathbf{a}^*}{\sqrt{2}} \right) X - \frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}} \left( \frac{\mathbf{a} + \mathbf{a}^*}{\sqrt{2}} \right) P$$

Daraus folgt:

$$D(\mathbf{a}) = e^{(\mathbf{a} \mathbf{a}^\dagger - \mathbf{a}^* \mathbf{a})} = e^{\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \left( \frac{\mathbf{a} - \mathbf{a}^*}{\sqrt{2}} \right) X} e^{-\frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}} \left( \frac{\mathbf{a} + \mathbf{a}^*}{\sqrt{2}} \right) P} e^{\frac{\mathbf{a}^{*2} - \mathbf{a}^2}{4}}$$

Dies kann nun zur Berechnung der Ortsdarstellung des kohärenten Zustands herangezogen werden:

$$\Psi_{\mathbf{a}}(x) = \langle x | e^{\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \left( \frac{\mathbf{a} - \mathbf{a}^*}{\sqrt{2}} \right) X} e^{-\frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}} \left( \frac{\mathbf{a} + \mathbf{a}^*}{\sqrt{2}} \right) P} e^{\frac{\mathbf{a}^{*2} - \mathbf{a}^2}{4}} | \mathbf{j}_0 \rangle$$

$$\Psi_{\mathbf{a}}(x) = e^{\frac{\mathbf{a}^{*2} - \mathbf{a}^2}{4}} \langle x | e^{\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \left( \frac{\mathbf{a} - \mathbf{a}^*}{\sqrt{2}} \right) X} e^{-\frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}} \left( \frac{\mathbf{a} + \mathbf{a}^*}{\sqrt{2}} \right) P} | \mathbf{j}_0 \rangle$$

$$\Psi_{\mathbf{a}}(x) = e^{\frac{\mathbf{a}^{*2} - \mathbf{a}^2}{4}} e^{\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \left( \frac{\mathbf{a} - \mathbf{a}^*}{\sqrt{2}} \right) X} \langle x | e^{-\frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}} \left( \frac{\mathbf{a} + \mathbf{a}^*}{\sqrt{2}} \right) P} | \mathbf{j}_0 \rangle$$

$e^{\frac{iP}{\hbar}}$  ist jedoch gerade der Translationsoperator um  $\mathbf{l}$  längs der x- Achse. Darum gilt:

$$\langle x | e^{-\frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}} \left( \frac{\mathbf{a} + \mathbf{a}^*}{\sqrt{2}} \right) P} = \left\langle x - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\mathbf{a} + \mathbf{a}^*) \right|$$

$$\Psi_{\mathbf{a}}(x) = e^{\frac{\mathbf{a}^{*2} - \mathbf{a}^2}{4}} e^{\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \left( \frac{\mathbf{a} - \mathbf{a}^*}{\sqrt{2}} \right) X} \mathbf{j}_0 \left( x - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\mathbf{a} + \mathbf{a}^*) \right)$$

Wegen

$$\langle X \rangle_{\mathbf{a}} = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \operatorname{Re}(\mathbf{a}) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\mathbf{a} + \mathbf{a}^*)$$

$$\langle P \rangle_{\mathbf{a}} = \sqrt{2m\hbar\omega} \operatorname{Im}(\mathbf{a}) = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (\mathbf{a} - \mathbf{a}^*)$$

kann man schließlich schreiben:

$$\Psi_{\mathbf{a}}(x) = e^{\frac{\mathbf{a}^{*2} - \mathbf{a}^2}{4}} e^{\frac{i \langle P \rangle_{\mathbf{a}} x}{\hbar}} \mathbf{j}_0 \left( x - \langle X \rangle_{\mathbf{a}} \right)$$

Fazit: Multipliziert man die Wellenfunktion  $\mathbf{j}_0(x)$  des Grundzustands des eindimensionalen Oszillators mit

dem oszillierenden Faktor  $e^{\frac{i \langle P \rangle_{\mathbf{a}} x}{\hbar}}$  und verschiebt man sie dann um  $\langle X \rangle_{\mathbf{a}}$  längs der x- Achse, so erhält man

die Ortswellenfunktion für den Zustand  $|\mathbf{a}\rangle$ . Der Phasenfaktor  $e^{\frac{\mathbf{a}^{*2} - \mathbf{a}^2}{4}}$  kann man vernachlässigen, da er physikalisch keine Rolle spielt.

Aus der Quantenmechanik ist bekannt:

$$\mathbf{j}_0(x) = \left( \frac{m\omega}{p\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{\left( -\frac{m\omega x^2}{2\hbar} \right)} \quad \Delta X_{\mathbf{a}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$$

$$j_0(x) = \left( \frac{m\omega}{\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{\left( -\frac{x^2}{4(\Delta X_a)^2} \right)}$$

Somit gilt:

$$j_0(x - \langle X \rangle_a) = \left( \frac{m\omega}{\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{\left( -\frac{1}{4} \left( \frac{x - \langle X \rangle_a}{\Delta X_a} \right)^2 \right)}$$

und man kann explizit angeben:

$$\Psi_a(x) = e^{\frac{\mathbf{a}^* \mathbf{a}^2}{4}} \left( \frac{m\omega}{\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{\frac{i\langle P \rangle_a x}{\hbar}} e^{\left( -\frac{1}{4} \left( \frac{x - \langle X \rangle_a}{\Delta X_a} \right)^2 \right)}$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte des kohärenten Zustands im Ortsraum ergibt sich demnach zu

$$|\Psi_a(x)|^2 = \sqrt{\left( \frac{m\omega}{\hbar} \right)} e^{\left( -\frac{1}{2} \left( \frac{x - \langle X \rangle_a}{\Delta X_a} \right)^2 \right)}$$

Man erhält also für jeden  $|\mathbf{a}\rangle$ -Zustand ein Gauß-Paket.

Es läßt sich zeigen, dass die kohärenten Zustände ( die ja, wie gezeigt, normierbar sind), die Orthogonalitätsbedingungen und die Vollständigkeitsrelation erfüllen.

## 2.7 Zeitliche Entwicklung eines quasiklassischen Zustands

Der harmonische Oszi sei zum Anfangszustand in einem bestimmten  $|\mathbf{a}\rangle$ -Zustand:

$$|y(0)\rangle = |\mathbf{a}_0\rangle$$

Wir wissen:

$$|\mathbf{a}\rangle = e^{-\frac{|\mathbf{a}|^2}{2}} \sum_n \frac{\mathbf{a}^n}{\sqrt{n!}} |j_n\rangle. \text{ Die Zeitentwicklung der quantenmechanischen Eigenzustände ist jedoch}$$

aus der zeitabhängigen Schrödingergleichung bekannt:

$$y_n(x,t) = e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} y_n(x)$$

Somit kann angegeben werden:

$$|y(t)\rangle = e^{-\frac{|\mathbf{a}_0|^2}{2}} \sum_n \frac{\mathbf{a}_0^n}{\sqrt{n!}} e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} |j_n\rangle = e^{-\frac{|\mathbf{a}_0|^2}{2}} e^{-\frac{i\omega t}{2}} \sum_n \frac{\mathbf{a}_0^n}{\sqrt{n!}} e^{-in\omega t} |j_n\rangle$$

Nun ist aber:

$$e^{-\frac{|\mathbf{a}_0|^2}{2}} e^{-\frac{i\omega t}{2}} \sum_n \frac{\mathbf{a}_0^n}{\sqrt{n!}} e^{-in\omega t} |j_n\rangle = e^{-\frac{i\omega t}{2}} |\mathbf{a} = \mathbf{a}_0 e^{-i\omega t}\rangle$$

Und es ergibt sich der zeitentwickelte Zustand explizit:

$$|y(t)\rangle = e^{\frac{-i\omega t}{2}} |a = a_0 e^{-i\omega t}\rangle$$

Es genügt also,  $a_0$  durch  $a_0 e^{-i\omega t}$  zu ersetzen und den so erhaltenen Ket- Vektor mit  $e^{\frac{-i\omega t}{2}}$  zu multiplizieren ,

um vom Anfangszustand zum zeitentwickelten Zustand zu gelangen.  $e^{\frac{-i\omega t}{2}}$  ist dabei ohnehin ein globaler Phasenfaktor ohne physikalische Konsequenzen. Somit bleibt der kohärente Zustand stets ein Eigenvektor zum Vernichtungsoperator mit dem Eigenwert  $a_0 e^{-i\omega t}$ . Dies ist jedoch nichts anderes als der Parameter

$a(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\hat{x}(t) + i\hat{p}(t)]$ , der den Zustand des klassischen Oszillators vollständig charakterisiert.

### Zeitliche Entwicklung der physikalischen Eigenschaften

Wir verwenden nun  $a = a_0 e^{-i\omega t}$  und erhalten sofort

$$\langle X \rangle_a = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \operatorname{Re}(a_0 e^{-i\omega t})$$

$$\langle P \rangle_a = \sqrt{2m\hbar\omega} \operatorname{Im}(a_0 e^{-i\omega t})$$

Dies entspricht nun genau den klassischen Beziehungen

$$\hat{x}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [a(0) \exp(-i\omega t) + a(0)^* \exp(i\omega t)]$$

$$\hat{p}(t) = \frac{-i}{\sqrt{2}} [a(0) \exp(-i\omega t) - a(0)^* \exp(i\omega t)]$$

Wir erhalten

$$\langle H \rangle_a = \hbar\omega \left[ |a_0|^2 + \frac{1}{2} \right]$$

$$\Delta H_a = \hbar\omega |a_0|$$

$$\Delta X_a = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$$

$$\Delta P_a = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}$$

Somit sind Energie und alle Schwankungen in Energie, Ort und Impuls zeitunabhängig. Das Wellenpaket bleibt zu jedem Zeitpunkt minimal. Es zerfließt also nicht.

$$\Psi_a(x) = e^{\frac{a^{*2} - a^2}{4}} \left( \frac{m\omega}{p\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{\frac{i\langle P \rangle_a x}{\hbar}} e^{\left( -\frac{1}{4} \left( \frac{x - \langle X \rangle_a}{\Delta X_a} \right)^2 \right)}$$

$$\Psi_a(x, t) = \langle x | \Psi(t) \rangle = e^{\frac{a^{*2} - a^2}{4}} \left( \frac{m\omega}{p\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{\frac{-i\omega t}{2}} e^{\frac{i\langle P \rangle_a x}{\hbar}} e^{\left( -\frac{1}{4} \left( \frac{x - \langle X \rangle_a}{\Delta X_a} \right)^2 \right)}$$

Das Gaußsche Wellenpaket erhält also als Zeitentwicklungsfaktor lediglich eine oszillierende Phase. Die Form des Pakets bleibt vollständig erhalten.

$$\text{Zu allen Zeiten bleibt } |\Psi_a(x)|^2 = |j_0[x - \langle X \rangle(t)]|^2 = \sqrt{\left( \frac{m\omega}{p\hbar} \right)} e^{\left( -\frac{1}{2} \left( \frac{x - \langle X \rangle_a}{\Delta X_a} \right)^2 \right)}$$

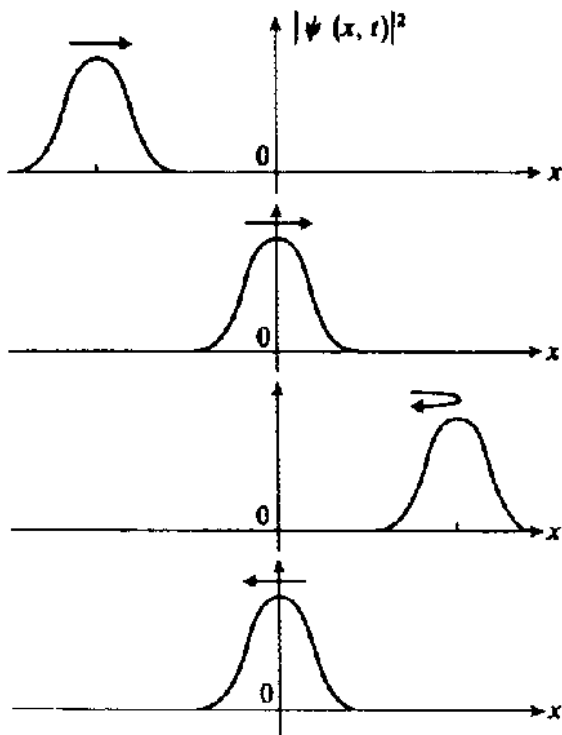
Die Bewegung des Wellenpaketes ist also eine harmonische Schwingung entlang der x- Achse mit der Periode

$$T = \frac{2p}{\omega}$$

Während das freie Gaußpaket zerfließt, passiert dies in einem parabelförmigen Potenzial nicht mehr. an kann sich dies so vorstellen, dass das Potenzial das Paket aus Bereichen mit großem Potenzial wieder zurückdrängt und so der Verbreiterung entgegenwirkt.

Für sehr große  $|a|$  ändern sich die Standardabweichungen für Ort und Impuls nicht. Statt dessen werden die Amplituden  $\langle X \rangle(t)$  und  $\langle P \rangle(t)$  sehr groß im Vergleich zu  $\Delta X$  und  $\Delta P$ . Mit wachsendem  $|a|$  kann man also eine quantenmechanische Bewegung erhalten, für die Ort und Impuls des Oszillators beliebig genau bestimmt sind (relativ beliebig genau). Für große  $|a|$  beschreibt also der kohärente Zustand die Bewegung des makroskopischen Oszillators gut. Die Ergebnisse sind gleichwertig der Betrachtung von Ort, Impuls und Energie als klassische Größen

### Bewegung des Gaußpaketes



**Abb.5.23** Bewegung des zum Zustand  $|\alpha\rangle$  gehörenden Wellenpakets: Unter dem Einfluß des parabolischen Potentials  $V(x)$  oszilliert das Paket, ohne dabei seine Form zu ändern.

## 2.8 Beispiel eines makroskopischen Oszillators:

Seien:  $m = 1\text{ kg}$ ,  $g \sim 10\text{ m/s}^2$ ,  $l = 0,1\text{ m}$

Es gilt:  $T = 2\pi \sqrt{\frac{l}{g}}$

Es folgt:  $T \sim 0,63\text{ s}$  und  $\omega = 10\text{ rad/s}$

Der Oszillator werde um die Amplitude  $x_m = 1\text{ cm}$  ausgelenkt



Wegen

$$\langle X \rangle_a = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \operatorname{Re}(a_0 e^{-i\omega t})$$

gilt:

$$|a| = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x_m$$

Dies ergibt bei uns einen Zahlenwert:

$$|a| \approx 2,2 \cdot 10^{15} \gg 1$$

Die zeitunabhängigen Standardabweichungen in Energie, Ort und Impuls ergeben sich zu

$$\frac{\Delta H_a}{\langle H \rangle_a} \approx \frac{1}{|a|} \approx 0,4 \cdot 10^{-15} \ll 1$$

$$\Delta X_a = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \approx 2,2 \cdot 10^{-18} \text{ m} \ll x_m$$

$$\Delta P_a = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \approx 2,2 \cdot 10^{-17} \text{ kg m/s}$$

$$\rightarrow \Delta v \approx 2,2 \cdot 10^{-17} \text{ m/s} \ll 0,1 \text{ m/s}$$

Man sieht: Die Ortsunschärfe ist kleiner als ein Kerndurchmesser, die Geschwindigkeitsunschärfe um ähnliche Verhältnisse kleiner als die maximale Geschwindigkeit von 0,1 m/s und auch die relative Genauigkeit der Oszillatorenergie ist ausgezeichnet.

Für die Beschreibung eines makroskopischen Oszillators reichen also die Gesetze der klassischen Mechanik in weitem Maße aus.

## Literaturverzeichnis

Bronstein, Taschenbuch der Mathematik

Cohen-Tannoudji, Quantenmechanik I

Dallmann, Elster, Einführung in die höhere Mathematik III

Fließbach, Quantenmechanik

Langenscheidt, Taschenwörterbuch Englisch-Deutsch

Schwabel, Quantenmechanik

Werner, Bound entangled Gaussian states

Werner, Quantum Information and Quantum Computing

?, Probability Theory



## Vorlesung 27.11.2002

$$\hat{V}(\bar{x}) = \frac{k}{2} \hat{x}^2 = \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2$$

$$H = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2$$

$$[\hat{p}, \hat{x}] = \frac{\hbar}{i} \mathbb{1}$$

$$\hat{x}^{\circ\circ} = \frac{i}{\hbar} [H, \hat{x}^{\circ}] = \frac{\hat{p}^{\circ}}{m}$$

$$\hat{p}^{\circ} = \frac{i}{\hbar} [H, \hat{p}] = -\partial_x H = -m \omega^2 \hat{x}$$

$$\Rightarrow \hat{x}^{\circ\circ} = -\omega^2 \hat{x}$$

$$\hat{b} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + i \sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega}} \hat{p}$$

$$\hat{b}^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - i \sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega}} \hat{p}$$

Vertauschungsrelationen:

$$\hat{n} := \hat{b}^+ \hat{b}$$

$$\Rightarrow [\hat{n}, \hat{b}^+] = \hat{b}^+$$

$$[\hat{n}, \hat{b}] = -\hat{b}$$

$$\hat{b} \hat{n} = (\hat{n} + 1) \hat{b}$$

$$\hat{b}^+ \hat{n} = \hat{b}^+ \hat{b}^+ \hat{b} = \hat{b}^+ \hat{b} \hat{b}^+ - \hat{b}^+ [\hat{b}^+, \hat{b}] = (\hat{n} - 1) \hat{b}^+$$

$$[\hat{b}^q, \hat{n}] = q \hat{b}^q$$

$$[(\hat{b}^+)^q, \hat{n}] = -q (\hat{b}^+)^q$$

$$q \in \mathbb{N}, q \geq 0$$

Dies definiert Operatoren mit sogenannter Stufeneigenschaft

$$H = \hbar \omega \hat{b}^+ \hat{b} + \frac{3}{2} \hbar \omega$$

**Eindimensional:**

$$H = \hbar \omega \hat{b}^+ \hat{b} + \frac{1}{2} \hbar \omega$$

**Stufeneigenschaft:**

$$\hat{n} |u_n\rangle = n |u_n\rangle$$

$$\text{Betrachte } \hat{b}^q \hat{n} |u_n\rangle = q \hat{b}^q |u_n\rangle + \hat{n} \hat{b}^q |u_n\rangle = \hat{b}^q n |u_n\rangle$$

$$\Rightarrow \hat{n} | \hat{b}^q u_n \rangle = (n - q) | \hat{b}^q u_n \rangle$$

Analog:

$$\hat{n} | (\hat{b}^+)^q u_n \rangle = (n + q) | (\hat{b}^+)^q u_n \rangle$$

Also:

Als Eigenwertproblem von  $\hat{n}$  gewinnt man folgende Reihe:

Zum Eigenwert	gehört Eigenfunktion
n-q	$ \hat{b}^q u_n\rangle$
...	...
n-1	$ \hat{b} u_n\rangle$
n	$ u_n\rangle$
n+1	$ \hat{b}^+ u_n\rangle$
...	...
n+q	$ (\hat{b}^+)^q u_n\rangle$

$$\hat{n}|\hat{b}^q u_n\rangle = (n-q)|\hat{b}^q u_n\rangle$$

$$\hat{n}|(\hat{b}^+)^q u_n\rangle = (n+q)|(\hat{b}^+)^q u_n\rangle$$

Weiter:

$$\langle \hat{b}^{q+1} u_n | \hat{b}^{q+1} u_n \rangle \geq 0$$

$$\langle \hat{b}^{q+1} u_n | \hat{b}^{q+1} u_n \rangle = \langle \hat{b}^q u_n | \hat{b}^+ \hat{b} \hat{b}^q u_n \rangle = \langle \hat{b}^q u_n | \hat{n} \hat{b}^q u_n \rangle = (n-q) \langle \hat{b}^q u_n | \hat{b}^q u_n \rangle$$

$$\langle \hat{b}^q u_n | \hat{b}^q u_n \rangle \geq 0$$

$$\Rightarrow (n-q) \geq 0 \Rightarrow n \geq q \geq 0$$

Die Eigenwerte von  $\hat{n}$  sind nicht negativ !

Für n=q

$$\langle \hat{b}^{n+1} u_n | \hat{b}^{n+1} u_n \rangle = 0$$

$$\Rightarrow |\hat{b}^{n+1} u_n\rangle = 0$$

Speziell: n=0

$$|\hat{b} u_0\rangle = 0$$

**Ist n Ganzzahlig ?**

**Annahme: n ist nicht Ganz :**

**Sei [n]** die kleinste ganze Zahl mit der Eigenschaft [n]>n

Beispiel: [27,3]=28

Somit:

$$\hat{n}|\hat{b}^{[n]} u_n\rangle = (n-[n])|\hat{b}^{[n]} u_n\rangle$$

$$(n-[n]) \leq 0$$

Dies ist nicht möglich ( negativer Eigenwert), es sei denn:

$$1) |\hat{b}^{[n]} u_n\rangle = 0$$

2) oder :  $[n] = n$ , also n ganzzahlig

nehmen wir, um dies zu klären

$$\langle \hat{b}^{q+1} u_n | \hat{b}^{q+1} u_n \rangle \geq 0$$

$$\langle \hat{b}^{q+1} u_n | \hat{b}^{q+1} u_n \rangle = \langle \hat{b}^q u_n | \hat{b}^+ \hat{b} \hat{b}^q u_n \rangle = \langle \hat{b}^q u_n | \hat{n} \hat{b}^q u_n \rangle = (n - q) \langle \hat{b}^q u_n | \hat{b}^q u_n \rangle$$

$$\langle \hat{b}^q u_n | \hat{b}^q u_n \rangle \geq 0$$

$$\Rightarrow (n - q) \geq 0 \Rightarrow n \geq q \geq 0$$

und ersetzen q durch q-1

Also:

$$\langle \hat{b}^q u_n | \hat{b}^q u_n \rangle \geq 0$$

$$\langle \hat{b}^q u_n | \hat{b}^q u_n \rangle (n - q + 1) \langle \hat{b}^{q-1} u_n | \hat{b}^{q-1} u_n \rangle = \dots = (n - q + 1)(n - q + 2)(n - q + 3) \dots (n - 1)n \langle \hat{b}^0 u_n | \hat{b}^0 u_n \rangle$$

$$\langle \hat{b}^0 u_n | \hat{b}^0 u_n \rangle = \langle u_n | u_n \rangle = 1$$

Setze:

$$q = [n]:$$

$$\langle \hat{b}^{[n]} u_n | \hat{b}^{[n]} u_n \rangle \geq 0 =$$

$$(n - [n] + 1) \langle \hat{b}^{[n]-1} u_n | \hat{b}^{[n]-1} u_n \rangle = \dots = (n - [n] + 1)(n - [n] + 2)(n - [n] + 3) \dots (n - 1)n$$

$$(n - [n] + 1) > 0$$

$$(n - [n] + 2) > 0 \dots$$

$$(n - 1) > 0$$

$$n > 0$$

$$\Rightarrow \langle \hat{b}^{[n]} u_n | \hat{b}^{[n]} u_n \rangle > 0$$

$$\Rightarrow |\hat{b}^{[n]} u_n \rangle \neq 0$$

Somit ist Annahme 1) falsch.

Also muss n ganzzahlig sein !

**Es gilt:**

$$H|u_n \rangle = \hbar \omega \hat{b}^+ \hat{b} |u_n \rangle + \frac{1}{2} \hbar \omega |u_n \rangle = E_n |u_n \rangle$$

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

$$n = 0, 1, 2, \dots$$

$$E_0 = \frac{\hbar \omega}{2}$$

Die Energieeigenwerte des harmonischen Oszillators sind also äquidistant.

Es handelt sich somit auch bei Gitterschwingungen, die durch den harmonischen Oszillator beschrieben werden, um quantisierte Erscheinungen

n ist dann als Anzahloperator der Phononen mit Frequenz  $\omega$  zu betrachten !

#### 4.2.4 Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

$$\hat{n} \left| \hat{b}^q u_n \right\rangle = (n - q) \left| \hat{b}^q u_n \right\rangle$$

$$\hat{n} \left| \hat{b}^{+q} u_n \right\rangle = (n + q) \left| \hat{b}^{+q} u_n \right\rangle$$

Speziell:  $N=0, q=0$

$$\hat{n} |u_0\rangle = 0 |u_0\rangle = 0$$

$n=0, q=1$

$$\hat{n} \left| \hat{b} u_0 \right\rangle = -1 \left| \hat{b} u_0 \right\rangle$$

Dies darf jedoch nicht sein ( siehe oben)

Also:

$$\left| \hat{b} u_0 \right\rangle = 0$$

Andererseits ( $n=0, q=1$ ):

$$\hat{n} \left| \hat{b}^+ u_0 \right\rangle = 1 \left| \hat{b}^+ u_0 \right\rangle$$

Somit bezeichnet man  $\hat{b}$  als Phonone- Vernichtungsoperator und  $\hat{b}^+$  als Phononen- Erzeugungsoperator

**Satz:**

$$\left| \hat{b}^+ u_n \right\rangle = \sqrt{n+1} \left| u_{n+1} \right\rangle$$

$$\left| \left( \hat{b}^+ \right)^q u_0 \right\rangle = \sqrt{q!} \left| u_q \right\rangle$$

**Satz:**

Die Oszillator- Eigenfunktionen sind vollständig:

$$\sum_n |u_n\rangle \langle u_n| = 1$$

In der Eigendarstellung des Anzahloperators ist  $\hat{n}$  diagonal

**Matrixschreibweise mit  $b_{kl} = \langle u_k | \hat{b} u_l \rangle$ :**

$$\hat{b} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & & \\ & 0 & \sqrt{2} & \\ & & 0 & \sqrt{3} \dots \\ & & & 0 \\ \dots & & & & \end{pmatrix}$$

$$\hat{b}^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & & \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & \\ & \sqrt{2} & 0 & 0 \dots \\ & & \sqrt{3} & 0 \\ \dots & & & & \end{pmatrix}$$

$$\hat{n} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & & \\ 0 & 1 & 0 & \\ & 0 & 2 & 0 \dots \\ & & 0 & 3 \\ \dots & & & \end{pmatrix}$$

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & & \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & \\ & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} \dots \\ & & \sqrt{3} & 0 \\ \dots & & & \end{pmatrix}$$

$$\hat{p} = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{1} & & \\ \sqrt{1} & 0 & -\sqrt{2} & \\ & \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{3} \dots \\ & & \sqrt{3} & 0 \\ \dots & & & \end{pmatrix}$$

Abstrakt lässt sich zwar leichter rechnen, jedoch hat man dann keine Wellenfunktion in Ortsdarstellung und damit auch keine Dichteinterpretation.

Es können also keinerlei Wahrscheinlichkeitsaussagen gegeben werden.

Wir brauchen einfach Wellenfunktionen in Ortsdarstellung !

#### **4.2.6 Ortsdarstellung**

$$\hat{x}|\mathbf{j}(\bar{x})\rangle = \bar{x}|\mathbf{j}(\bar{x})\rangle$$

Für den eindimensionalen Fall:

$$\hat{x}|\mathbf{j}(x)\rangle = x|\mathbf{j}(x)\rangle$$

Eigenwertproblem:

Wir brauchen  $\hat{n}$  in Ortsdarstellung, wissen dass  $\hat{n} = \hat{b}^+ \hat{b}$ .

Also brauchen wir  $\hat{b}^+ \hat{b}$  in Ortsdarstellung.

$$|u\rangle = \int dx |\mathbf{j}(x)\rangle \langle \mathbf{j}(x)|u\rangle$$

$$\langle \mathbf{j}(x)|\hat{b}u\rangle = \hat{b} \langle \mathbf{j}(x)|u\rangle$$

$$\langle \mathbf{j}(x)|u\rangle := \Phi(x)$$

Dies ist der typische Ansatz für den Übergang in die Ortsdarstellung !!

$$\hat{b}^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - i \sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega}} \hat{p}$$

$$\hat{x} \hat{b}^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - i \sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega}} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\hat{b} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + i \sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega}} \hat{p}$$

$$\hat{x} \hat{b} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + i \sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega}} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\hat{x} \hat{b} \Phi(x) = \left( \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Phi(x)$$

$$\hat{x} \hat{b}^+ \Phi(x) = \left( \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Phi(x)$$

Schreibe:

$$\mathbf{x} := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$$

$$\hat{x} \hat{b} \Phi(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \mathbf{x} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \right) \Phi(\mathbf{x})$$

$$\hat{x} \hat{b}^+ \Phi(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \mathbf{x} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \right) \Phi(\mathbf{x})$$

Wir wissen über den Grundzustand:

$$|u_0\rangle : \hat{b} u_0 = 0$$

$$\Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \mathbf{x} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \right) \Phi_0(\mathbf{x}) = 0$$

Weiter über die Erzeugung der angeregten Zustände aus dem Grundzustand:

$$|u_n\rangle :$$

$$\Rightarrow |u_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{b}^+)^n |u_0\rangle$$

$$\Rightarrow \Phi_n(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left( \mathbf{x} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \right)^n \Phi_0(\mathbf{x})$$

Dies ist gerade die Hermite- Differenzialgleichung.

Lösung dieser Diffgleichung sind die Hermiteschen Polynome:

$$\Phi_n(\mathbf{x}) = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar p}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\mathbf{x}) e^{-\frac{\mathbf{x}^2}{2}}$$

Mit

$$H_n(\mathbf{x}) = (-1)^n e^{\mathbf{x}^2} \frac{d^n}{d\mathbf{x}^n} e^{-\mathbf{x}^2}$$

**Vorlesung 29.11.2002**

**Wiederholung:**

$$H = \hbar \omega \hat{b}^+ \hat{b} + \frac{1}{2} \hbar \omega$$



$$H|\mathbf{j}_n\rangle = E_n|\mathbf{j}_n\rangle$$

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

$$\hat{n}|u_n\rangle = n|u_n\rangle, n = 0, 1, 2, \dots$$

$$\hat{b}^+|u_n\rangle = \sqrt{n+1}|u_{n+1}\rangle$$

**Ortsdarstellung**

$$\hat{x}\hat{b}\Phi(x) = \left( \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{\partial}{\partial x} \right)\Phi(x)$$

$$\hat{x}\hat{b}^+\Phi(x) = \left( \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{\partial}{\partial x} \right)\Phi(x)$$

Mit

$$\left( \mathbf{x} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \right)\Phi_0(\mathbf{x}) = 0$$

$$\Phi_n(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left( \mathbf{x} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \right)^n \Phi_0(\mathbf{x})$$

$$\mathbf{x} := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$$

Lösung dieses DGL- Systems führt auf die Hermiteischen Polynome

#### **4.4 Präparation und Messung**

##### **4.4.1 Streuung einer Observablen**

**Remember:**

$$\langle \hat{F} | \Phi \rangle := \sum_k q_k |\Phi\rangle \mathbf{I}_k = \langle \Phi | \hat{F} | \Phi \rangle$$

Als Erwartungswert einer Observablen F

**Streuung und Varianz:**

**Streuung/ Varianz:**

$$V(\hat{F}|\Phi) = \sum_k q_k |\Phi\rangle \left[ \mathbf{I}_k - \langle \hat{F} | \Phi \rangle \right]^2 = \sum_k q_k |\Phi\rangle \left[ \mathbf{I}_k^2 - 2\mathbf{I}_k \langle \hat{F} | \Phi \rangle + \langle \hat{F} | \Phi \rangle^2 \right]$$

$$\Rightarrow V(\hat{F}|\Phi) = \sum_k q_k |\Phi\rangle \left[ \mathbf{I}_k^2 - \langle \hat{F} | \Phi \rangle^2 \right] = \sum_k q_k |\Phi\rangle \mathbf{I}_k^2 - \langle \hat{F} | \Phi \rangle^2$$

$$\begin{aligned}
\sum_k q_k |\Phi\rangle \left[ \mathbf{I}_k^2 - \langle \hat{F} | \Phi \rangle^2 \right] &= \sum_k q_k |\Phi\rangle \mathbf{I}_k^2 - \langle \hat{F} | \Phi \rangle^2 \\
\sum_k q_k |\Phi\rangle \mathbf{I}_k^2 &= \sum_k \langle \Phi | \mathbf{j}_k \rangle \langle \mathbf{j}_k | \Phi \rangle \mathbf{I}_k^2 = \sum_{k,l} \langle \Phi | \mathbf{j}_k \rangle \mathbf{I}_k \langle \mathbf{j}_k | \mathbf{j}_l \rangle \mathbf{I}_l \langle \mathbf{j}_l | \Phi \rangle \\
\sum_k |\mathbf{j}_k \rangle \mathbf{I}_k \langle \mathbf{j}_k | &= \hat{F} = \sum_l |\mathbf{j}_l \rangle \mathbf{I}_l \langle \mathbf{j}_l | \\
\Rightarrow \sum_{k,l} \langle \Phi | \mathbf{j}_k \rangle \mathbf{I}_k \langle \mathbf{j}_k | \mathbf{j}_l \rangle \mathbf{I}_l \langle \mathbf{j}_l | \Phi \rangle &= \langle \Phi | \hat{F}^2 | \Phi \rangle \\
\Rightarrow \sum_k q_k |\Phi\rangle \left[ \mathbf{I}_k^2 - \langle \hat{F} | \Phi \rangle^2 \right] &= \langle \hat{F}^2 | \Phi \rangle - \langle \hat{F} | \Phi \rangle^2 = V(\hat{F} | \Phi) \\
V(\hat{F} | \Phi) &= \langle \hat{F}^2 | \Phi \rangle - \langle \hat{F} | \Phi \rangle^2
\end{aligned}$$

**Betrachte:**

$$\begin{aligned}
\langle \Phi | (\hat{F} - \langle \Phi | \hat{F} | \Phi \rangle)^2 | \Phi \rangle &= \langle \Phi | (\hat{F}^2 - 2\hat{F} \langle \Phi | \hat{F} | \Phi \rangle + \langle \Phi | \hat{F} | \Phi \rangle^2) | \Phi \rangle \\
&= \langle \Phi | (\hat{F}^2 - \langle \Phi | \hat{F} | \Phi \rangle^2) | \Phi \rangle = \langle \Phi | \hat{F}^2 | \Phi \rangle - \langle \Phi | \hat{F} | \Phi \rangle^2 = V(\hat{F} | \Phi)
\end{aligned}$$

**Satz:**

Ist  $\hat{F}$  selbstadjungiert, so ist auch  $\hat{F} + a, a = a^*$  selbstadjungiert

**Beweis:**

$$\langle \Phi | (\hat{F} + a) | \Psi \rangle = \langle \Phi | \hat{F} | \Psi \rangle + a \langle \Phi | \Psi \rangle = \langle \hat{F} \Phi | \Psi \rangle + \langle a \Phi | \Psi \rangle = \langle (\hat{F} + a) \Phi | \Psi \rangle$$

Mit

$$\begin{aligned}
V(\hat{F} | \Phi) &= \langle \Phi | (\hat{F} - \langle \Phi | \hat{F} | \Phi \rangle)^2 | \Phi \rangle = \langle (\hat{F} - \langle \Phi | \hat{F} | \Phi \rangle) \Phi | (\hat{F} - \langle \Phi | \hat{F} | \Phi \rangle) \Phi \rangle \\
&= \|\hat{F} - \langle \Phi | \hat{F} | \Phi \rangle\|^2
\end{aligned}$$

**Satz**

Ist  $|\Phi\rangle$  streuungsfrei bezüglich der Observablen  $\hat{F}$ , so liegt  $|\Phi\rangle$  in einem Eigenraum zu  $\hat{F}$ .

Besitzt  $\hat{F}$  nur eindimensionale Eigenräume, so gilt:

$$\exists m: |\Phi\rangle = c_m |\mathbf{j}_m\rangle$$

**Beweis:**

Streuungsfrei:

$$\begin{aligned}
V(\hat{F} | \Phi) &= 0 = \langle \Phi | (\hat{F} - \langle \Phi | \hat{F} | \Phi \rangle)^2 | \Phi \rangle = \langle (\hat{F} - \langle \Phi | \hat{F} | \Phi \rangle) \Phi | (\hat{F} - \langle \Phi | \hat{F} | \Phi \rangle) \Phi \rangle \\
&\Rightarrow (\hat{F} - \langle \Phi | \hat{F} | \Phi \rangle) \Phi = 0
\end{aligned}$$

$$\hat{F} |\Phi\rangle = |\Phi\rangle \langle \Phi | \hat{F} | \Phi \rangle$$

Also ist

$|\Phi\rangle$  Eigenvektor zu  $\hat{F}$  mit dem Eigenwert  $\hat{F} | \Phi \rangle$ .

Nun:

$$\hat{F}|\mathbf{j}_k^{\mathbf{a}}\rangle = \mathbf{I}_k |\mathbf{j}_k^{\mathbf{a}}\rangle$$

Mit

$\mathbf{a} = 1, 2, \dots, t_k$  Eigenvektoren der entarteten Eigenwertgleichung

$t_k$  damit Entartungsgrad (= Dimension des Eigenraumes zum Eigenwert  $\mathbf{I}_k$ ).

Somit:

$$\exists m: |\Phi\rangle = \sum_{\mathbf{b}} c_{\mathbf{m}} |\mathbf{j}_m^{\mathbf{b}}\rangle$$

Sei  $\mathbf{I}_k$  nicht entartet:

$$\exists m \rightarrow |\Phi\rangle = c |\mathbf{j}_m\rangle$$

$$|c|^2 = 1$$

$$c = e^{id}$$

#### **4.4.2 Wahrscheinlichkeit von Messwerten:**

##### **Intensitäten im diskreten Spektrum:**

$$q_k^{|\Phi\rangle} = \langle \Phi | \mathbf{j}_k \rangle \langle \mathbf{j}_k | \Phi \rangle = |\langle \mathbf{j}_k | \Phi \rangle|^2$$

ohne Entartung

und

$$q_k^{|\Phi\rangle} = \langle \Phi | \sum_{\mathbf{a}} |\mathbf{j}_k^{\mathbf{a}}\rangle \langle \mathbf{j}_k^{\mathbf{a}}| | \Phi \rangle = |\langle \mathbf{j}_k | \Phi \rangle|^2$$

$$\mathbf{a} = 1, \dots, t_k$$

mit Entartung

Dabei ist

$$\sum_{\mathbf{a}} |\mathbf{j}_k^{\mathbf{a}}\rangle \langle \mathbf{j}_k^{\mathbf{a}}|$$

$$\mathbf{a} = 1, \dots, t_k$$

Der Projektor  $P_k$  auf den Eigenraum zu  $\mathbf{I}_k$  mit der Dimension  $t_k$

$$q_k^{|\Phi\rangle} = \langle \Phi | \sum_{\mathbf{a}} |\mathbf{j}_k^{\mathbf{a}}\rangle \langle \mathbf{j}_k^{\mathbf{a}}| | \Phi \rangle = \langle \Phi | P_k | \Phi \rangle = \langle P_k | \Phi \rangle$$

$$\langle P_k | \Phi \rangle = \text{sp}(P_k P_{|\Phi\rangle}) = \text{sp}\left(\sum_{\mathbf{a}} |\mathbf{j}_k^{\mathbf{a}}\rangle \langle \mathbf{j}_k^{\mathbf{a}}| P_{|\Phi\rangle}\right)$$

$$\sum_{\mathbf{a}} |\mathbf{j}_k^{\mathbf{a}}\rangle \langle \mathbf{j}_k^{\mathbf{a}}| = P_k$$

$$\begin{aligned}
q_k^{|\Phi\rangle} &= \langle \Phi | P_k | \Phi \rangle = \langle \Phi | \sum_{l,a} | \mathbf{j}_l^a \rangle \langle \mathbf{j}_l^a P_k | | \Phi \rangle = \\
&= \sum_{l,a} \langle \mathbf{j}_l^a P_k | | \Phi \rangle \langle \Phi | | \mathbf{j}_l^a \rangle \\
| \Phi \rangle \langle \Phi | &:= P_{|\Phi\rangle} \\
\Rightarrow q_k^{|\Phi\rangle} &= \sum_{l,a} \langle \mathbf{j}_l^a P_k | P_{|\Phi\rangle} | \mathbf{j}_l^a \rangle = \text{sp}(P_k P_{|\Phi\rangle})
\end{aligned}$$

**Beispiel: Stern- Gerlach- Versuch:**

**Der Stern- gerlach Apparat erzeuge bei SPin 1/2 zwei teilstrahlen:**

Beispiel: Bei Errichtung entlang der z- achse:

$$\begin{aligned}
&| \mathbf{j}_+^z \rangle \\
&| \mathbf{j}_-^z \rangle \\
\hat{L}_z | \mathbf{j}_+^z \rangle &= \mathbf{L}_+^z | \mathbf{j}_+^z \rangle \\
\hat{L}_z | \mathbf{j}_-^z \rangle &= \mathbf{L}_-^z | \mathbf{j}_-^z \rangle
\end{aligned}$$

Das Gleiche in x- Richtung:

$$\begin{aligned}
&| \mathbf{j}_+^x \rangle \\
&| \mathbf{j}_-^x \rangle \\
\hat{L}_x | \mathbf{j}_+^x \rangle &= \mathbf{L}_+^x | \mathbf{j}_+^x \rangle \\
\hat{L}_x | \mathbf{j}_-^x \rangle &= \mathbf{L}_-^x | \mathbf{j}_-^x \rangle
\end{aligned}$$

Dabei:

$$\begin{aligned}
\mathbf{L}_+^i &= 1 \\
\mathbf{L}_-^i &= -1
\end{aligned}$$

Somit haben wir die Spektraldarstellung des Stern- gerlach Apparats:

$$\begin{aligned}
\hat{L}_z &= | \mathbf{j}_+^z \rangle \langle \mathbf{j}_+^z | - | \mathbf{j}_-^z \rangle \langle \mathbf{j}_-^z | \\
\hat{L}_x &= | \mathbf{j}_+^x \rangle \langle \mathbf{j}_+^x | - | \mathbf{j}_-^x \rangle \langle \mathbf{j}_-^x | \\
| \mathbf{j}_+^z \rangle \langle \mathbf{j}_+^z | + | \mathbf{j}_-^z \rangle \langle \mathbf{j}_-^z | &= | \mathbf{j}_+^x \rangle \langle \mathbf{j}_+^x | + | \mathbf{j}_-^x \rangle \langle \mathbf{j}_-^x | = \overline{1} \\
&\text{als Vollständigkeitsrelation} \\
\hat{L} &= \sum_{k,a} l_k | \mathbf{j}_k^a \rangle \langle \mathbf{j}_k^a | \\
\hat{L} | \mathbf{j}_k \rangle &= l_k | \mathbf{j}_k \rangle
\end{aligned}$$

Wir schreiben:

$$\hat{L}_z + \bar{1} = |\mathbf{j}_+^z\rangle\langle\mathbf{j}_+^z| - |\mathbf{j}_-^z\rangle\langle\mathbf{j}_-^z| + |\mathbf{j}_+^z\rangle\langle\mathbf{j}_+^z| + |\mathbf{j}_-^z\rangle\langle\mathbf{j}_-^z| = 2|\mathbf{j}_+^z\rangle\langle\mathbf{j}_+^z| = 2P_{\mathbf{j}_+^z}$$

$$\hat{L}_x + \bar{1} = |\mathbf{j}_+^x\rangle\langle\mathbf{j}_+^x| - |\mathbf{j}_-^x\rangle\langle\mathbf{j}_-^x| + |\mathbf{j}_+^x\rangle\langle\mathbf{j}_+^x| + |\mathbf{j}_-^x\rangle\langle\mathbf{j}_-^x| = 2P_{\mathbf{j}_+^x}$$

$$\hat{L}_x - \bar{1} = |\mathbf{j}_+^x\rangle\langle\mathbf{j}_+^x| - |\mathbf{j}_-^x\rangle\langle\mathbf{j}_-^x| - |\mathbf{j}_+^x\rangle\langle\mathbf{j}_+^x| - |\mathbf{j}_-^x\rangle\langle\mathbf{j}_-^x| = -2P_{\mathbf{j}_-^x}$$

Somit:

$$(\hat{L}_z + \bar{1})(\hat{L}_x + \bar{1}) = 4P_{\mathbf{j}_+^z}P_{\mathbf{j}_+^x} = \hat{L}_z\hat{L}_x + \hat{L}_x + \hat{L}_z + \bar{1}$$

$$(\hat{L}_z + \bar{1})(\hat{L}_x - \bar{1}) = -4P_{\mathbf{j}_+^z}P_{\mathbf{j}_-^x} = \hat{L}_z\hat{L}_x + \hat{L}_x - \hat{L}_z - \bar{1}$$

$$(\hat{L}_x + \bar{1})(\hat{L}_z + \bar{1}) = 4P_{\mathbf{j}_+^x}P_{\mathbf{j}_+^z} = \hat{L}_x\hat{L}_z + \hat{L}_x + \hat{L}_z + \bar{1}$$

$$(\hat{L}_x - \bar{1})(\hat{L}_z + \bar{1}) = -4P_{\mathbf{j}_-^x}P_{\mathbf{j}_+^z} = \hat{L}_x\hat{L}_z + \hat{L}_x - \hat{L}_z - \bar{1}$$

Gleichungen 1/2 und 3/4 zusammenfassen und dann subtrahieren:

$$\hat{L}_z\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{L}_z = [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = 4\left(\pm P_{\mathbf{j}_+^z}P_{\mathbf{j}_\pm^x} \mp P_{\mathbf{j}_\pm^x}P_{\mathbf{j}_+^z}\right)$$

Annahme ( experimentell als falsch erwiesen:

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = 4\left(\pm P_{\mathbf{j}_+^z}P_{\mathbf{j}_\pm^x} \mp P_{\mathbf{j}_\pm^x}P_{\mathbf{j}_+^z}\right) = 0$$

$$\Rightarrow P_{\mathbf{j}_+^z}P_{\mathbf{j}_\pm^x} = P_{\mathbf{j}_\pm^x}P_{\mathbf{j}_+^z}$$

$$\Rightarrow |\mathbf{j}_+^z\rangle\langle\mathbf{j}_+^z| |\mathbf{j}_\pm^x\rangle\langle\mathbf{j}_\pm^x| = |\mathbf{j}_\pm^x\rangle\langle\mathbf{j}_\pm^x| |\mathbf{j}_+^z\rangle\langle\mathbf{j}_+^z| \cdot |\mathbf{j}_\mp^x\rangle\langle\mathbf{j}_\mp^x|$$

$$\langle\mathbf{j}_\pm^x| \cdot |\mathbf{j}_\mp^x\rangle = 0$$

$$\Rightarrow 0 = |\mathbf{j}_\pm^x\rangle\langle\mathbf{j}_\pm^x| |\mathbf{j}_+^z\rangle\langle\mathbf{j}_+^z| |\mathbf{j}_\mp^x\rangle\langle\mathbf{j}_\mp^x|$$

$$\Rightarrow \langle\mathbf{j}_\pm^x| |\mathbf{j}_+^z\rangle\langle\mathbf{j}_+^z| |\mathbf{j}_\mp^x\rangle = 0$$

$$\Rightarrow \langle\mathbf{j}_\pm^x| |\mathbf{j}_+^z\rangle = 0 \quad \text{oder} \quad \langle\mathbf{j}_+^z| |\mathbf{j}_\mp^x\rangle = 0$$

Wir wissen:

$$|\mathbf{j}_+^z\rangle = |\mathbf{j}_+^x\rangle\langle\mathbf{j}_+^x| |\mathbf{j}_+^z\rangle + |\mathbf{j}_-^x\rangle\langle\mathbf{j}_-^x| |\mathbf{j}_+^z\rangle$$

mit

$$\langle\mathbf{j}_+^x| |\mathbf{j}_+^z\rangle = 0 \quad \text{oder} \quad \langle\mathbf{j}_-^x| |\mathbf{j}_+^z\rangle$$

Somit dürfte in x- Richtung an Lx nur EIN STrahl austreten.

Dies ist jedoch experimentell falsch. Statt dessen treten wieder zwei STrahle aus.

Somit:

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_x] \neq 0$$

## Vorlesung 4.12.

### Wiederholung

#### Streuung/Varianz

$$V(\hat{F}|\Phi) = \sum_k q_k |\Phi\rangle \left[ I_k - \langle \hat{F}|\Phi\rangle \right]^2 = \langle \hat{F}^2|\Phi\rangle - \langle \hat{F}|\Phi\rangle^2$$

$$\begin{aligned} V(\hat{F}|\Phi) &= \langle \Phi | (\hat{F} - \langle \Phi | \hat{F} | \Phi \rangle)^2 | \Phi \rangle = \langle (\hat{F} - \langle \Phi | \hat{F} | \Phi \rangle) \Phi | (\hat{F} - \langle \Phi | \hat{F} | \Phi \rangle) \Phi \rangle \\ &= \|\hat{F} - \langle \Phi | \hat{F} | \Phi \rangle\|^2 \end{aligned}$$

Streuungsfreie Messung im Eigenzustand:

$$V(\hat{F}|\Phi) = 0 \Rightarrow \hat{F}|\Phi\rangle = |\Phi\rangle \langle \Phi | \hat{F} | \Phi \rangle$$

$$q_k^{|\Phi\rangle} = \langle \Phi | \sum_a |j_k^a\rangle \langle j_k^a| |\Phi\rangle = \langle \Phi | P_k | \Phi \rangle = \langle P_k | \Phi \rangle$$

$$\langle P_k | \Phi \rangle = sp(P_k P_{|\Phi\rangle}) = sp\left(\sum_a |j_k^a\rangle \langle j_k^a| P_{|\Phi\rangle}\right)$$

$$\sum_a |j_k^a\rangle \langle j_k^a| = P_k$$

#### 4.4.3 Verträglichkeit von Messungen:

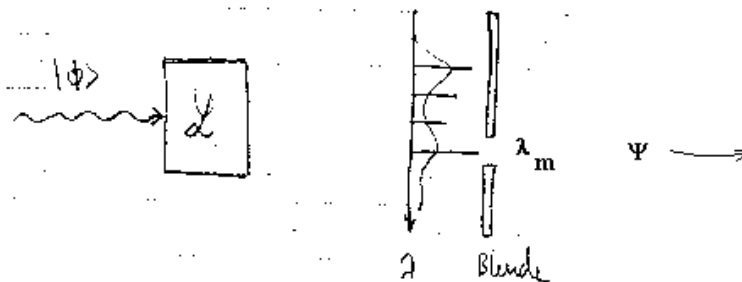
$$|\Phi\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{a=0}^{t_k} |j_k^a\rangle \langle j_k^a| |\Phi\rangle$$

$$\sum_{a=0}^{t_k} |j_k^a\rangle \langle j_k^a| := P_k$$

Mit dem Entartungsgrad  $t_k$

$$|\Phi\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} P_k |\Phi\rangle$$

$$N_m^2 \langle P_m \Phi | P_m \Phi \rangle = 1 \Rightarrow |\Psi\rangle = \frac{P_m |\Phi\rangle}{\sqrt{\langle P_m \Phi | P_m \Phi \rangle}}$$



**Das Ausblenden des m. Eigenwerts** des Spektrums bewirkt:

$$|\Phi\rangle \rightarrow N_m P_m |\Phi\rangle$$

Wir wissen: Kommensurabel entspricht vertauschbar  $\leftrightarrow$  gemeinsames System von Eigenvektoren

**Def.:**

Eine Menge vertauschbarer Operatoren  $\hat{L}, \hat{M}, \hat{N}, \dots$

heißt vollständiger Satz, wenn ihre GEMEINSAMEN Eigenräume alle eindimensional sind:

Sei eine Eigenfunktion gegeben (eindeutig, also keine Entartung) mit:

$$|\Phi\rangle = |\Phi(I, m, \dots)\rangle$$

$$\hat{L}|\Phi\rangle = I|\Phi\rangle$$

$$\hat{M}|\Phi\rangle = m|\Phi\rangle$$

Mit jeweils eindimensionalen gemeinsamen Eigenräumen !

#### **4.4.4 Unschärferelation**

Für Observablen

$$\hat{B} = \hat{B}^+$$

$$\hat{A} = \hat{A}^+$$

Gilt die Ungleichung:

$$\langle \hat{A}^2 \rangle \langle \hat{B}^2 \rangle \geq -\frac{1}{4} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle^2$$

Also: Die Nichtvertauschbarkeit hat quasi eine obere Grenze !

**Beweis:**

$$\langle (\hat{A} + i\hat{B})\Phi | (\hat{A} + i\hat{B})\Phi \rangle \geq 0$$

$$(\hat{A} + i\hat{B})\Phi \neq (\hat{A} + i\hat{B})^+\Phi$$

möglich. Der Ausdruck muss nicht unbedingt selbstadjungiert sein !

Also:

$$\langle \Phi | (\hat{A} + i\hat{B})^+ (\hat{A} + i\hat{B}) \Phi \rangle \geq 0$$

$$\langle (\hat{A} + i\hat{B})^+ (\hat{A} + i\hat{B}) \rangle_{|\Phi\rangle} \geq 0 \Rightarrow \langle (\hat{A}^* - i\hat{B}^+) (\hat{A} + i\hat{B}) \rangle_{|\Phi\rangle} \geq 0$$

$$\Rightarrow \langle |\hat{A}|^2 \hat{A}^2 + \hat{A}^* i\hat{A}\hat{B} - i\hat{B}^+ \hat{A} + \hat{B}^2 \rangle_{|\Phi\rangle} \geq 0$$

$$\Rightarrow \langle |\hat{A}|^2 \hat{A}^2 \rangle_{|\Phi\rangle} + \langle \hat{B}^2 \rangle_{|\Phi\rangle} + \hat{A}^* i \langle \hat{A}\hat{B} \rangle_{|\Phi\rangle} - i \langle \hat{B}\hat{A} \rangle_{|\Phi\rangle} \geq 0$$

Wähle  $\hat{A}$  reell:

$$\Rightarrow \langle \mathbf{a}^2 \hat{A}^2 \rangle_{|\Phi\rangle} + \langle \hat{B}^2 \rangle_{|\Phi\rangle} + i\mathbf{a} \langle [\hat{A}\hat{B}] \rangle_{|\Phi\rangle} \geq 0$$

$$\Rightarrow \langle \mathbf{a}^2 \rangle_{|\Phi\rangle} + \frac{\langle \hat{B}^2 \rangle_{|\Phi\rangle}}{\langle \hat{A}^2 \rangle_{|\Phi\rangle}} + \frac{i}{\langle \hat{A}^2 \rangle_{|\Phi\rangle}} \mathbf{a} \langle [\hat{A}\hat{B}] \rangle_{|\Phi\rangle} \geq 0$$

Dies ist eine quadratische Gleichung in  $\mathbf{a}$ , welches reell gewählt wurde.

Dabei ist der Ausdruck (der quadratische) immer dann größer als Null, wenn die Diskriminante des Ausdrucks kleiner als Null, bzw. gibt es eine Nullstelle (Berührungspunkt), wenn die Diskriminante gleich Null.

Also:

$$-\frac{i \langle [\hat{A}\hat{B}] \rangle_{|\Phi\rangle}}{\langle \hat{A}^2 \rangle_{|\Phi\rangle}} \pm \sqrt{\left( \frac{i \langle [\hat{A}\hat{B}] \rangle_{|\Phi\rangle}}{\langle \hat{A}^2 \rangle_{|\Phi\rangle}} \right)^2 - 4 \frac{\langle \hat{B}^2 \rangle_{|\Phi\rangle}}{\langle \hat{A}^2 \rangle_{|\Phi\rangle}}} = \mathbf{a}_{1/2}$$

Eine / keine Lösung der Nullstellenfrage:

$$\left( \frac{i \langle [\hat{A}\hat{B}] \rangle_{|\Phi\rangle}}{\langle \hat{A}^2 \rangle_{|\Phi\rangle}} \right)^2 - 4 \frac{\langle \hat{B}^2 \rangle_{|\Phi\rangle}}{\langle \hat{A}^2 \rangle_{|\Phi\rangle}} \leq 0$$

$$\Rightarrow -\frac{1}{4} \frac{\langle [\hat{A}\hat{B}] \rangle_{|\Phi\rangle}^2}{\langle \hat{A}^2 \rangle_{|\Phi\rangle}} - \frac{\langle \hat{B}^2 \rangle_{|\Phi\rangle}}{\langle \hat{A}^2 \rangle_{|\Phi\rangle}} \leq 0$$

$$\Rightarrow -\frac{1}{4} \langle [\hat{A}\hat{B}] \rangle_{|\Phi\rangle}^2 - \langle \hat{A}^2 \rangle_{|\Phi\rangle} \langle \hat{B}^2 \rangle_{|\Phi\rangle} \leq 0$$

**Zusammenhang zur Varianz der Messung:**

**Setze:**

$$\hat{A} = \hat{L} - \langle \hat{L} \rangle$$

$$\hat{B} = \hat{M} - \langle \hat{M} \rangle$$

$$\Rightarrow \hat{A}\hat{B} = (\hat{L} - \langle \hat{L} \rangle)(\hat{M} - \langle \hat{M} \rangle) = \hat{L}\hat{M} - \hat{L}\langle \hat{M} \rangle - \hat{M}\langle \hat{L} \rangle + \langle \hat{L} \rangle \langle \hat{M} \rangle$$

$$\hat{B}\hat{A} = \hat{M}\hat{L} - \hat{L}\langle \hat{M} \rangle - \hat{M}\langle \hat{L} \rangle + \langle \hat{L} \rangle \langle \hat{M} \rangle$$

$$\Rightarrow [\hat{A}, \hat{B}] = [\hat{L}, \hat{M}]$$

**Nun:**



$$-\frac{1}{4} \langle [\hat{A}\hat{B}]^2 \rangle_{|\Phi\rangle} \leq \langle \hat{A}^2 \rangle_{|\Phi\rangle} \langle \hat{B}^2 \rangle_{|\Phi\rangle}$$

$$\hat{A} = \hat{L} - \langle \hat{L} \rangle$$

$$\hat{B} = \hat{M} - \langle \hat{M} \rangle$$

$$[\hat{A}, \hat{B}] = [\hat{L}, \hat{M}]$$

$$\Rightarrow -\frac{1}{4} \langle [\hat{L}, \hat{M}]^2 \rangle_{|\Phi\rangle} \leq \langle (\hat{L} - \langle \hat{L} \rangle)^2 \rangle_{|\Phi\rangle} \langle (\hat{M} - \langle \hat{M} \rangle)^2 \rangle_{|\Phi\rangle}$$

$$V(\hat{F})_{|\Phi\rangle} = \left\langle \left( \hat{F} - \langle \hat{F} \rangle_{|\Phi\rangle} \right)^2 \right\rangle_{|\Phi\rangle}$$

$$\Rightarrow -\frac{1}{4} \langle [\hat{L}, \hat{M}]^2 \rangle_{|\Phi\rangle} \leq V(\hat{L}) V(\hat{M})$$

Bleibt zu zeigen, damit das Ganze Sinn macht:

$$-\frac{1}{4} \langle [\hat{A}, \hat{B}]^2 \rangle_{|\Phi\rangle} \geq 0$$

Gilt, wenn Erwartungswerte von Kommutatoren grundsätzlich rein imaginär sind !

**Beweis:**

$$\langle [\hat{L}, \hat{M}] \rangle_{|\Phi\rangle}^* = \langle \Phi | [\hat{L}, \hat{M}] | \Phi \rangle^* = \langle [\hat{L}, \hat{M}] | \Phi \rangle = \langle (\hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L}) | \Phi \rangle$$

$$\hat{M} = \hat{M}^+$$

$$\hat{L} = \hat{L}^+$$

$$(\hat{M}\hat{L})^+ = \hat{L}^+ \hat{M}^+ = \hat{L}\hat{M}$$

$$\Rightarrow \langle \Phi | [\hat{L}, \hat{M}] | \Phi \rangle = \langle (\hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L}) | \Phi \rangle = \langle \Phi | (\hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L})^+ | \Phi \rangle = \langle \Phi | ((\hat{L}\hat{M})^+ - (\hat{M}\hat{L})^+) | \Phi \rangle$$

$$= \langle \Phi | (\hat{M}\hat{L} - \hat{L}\hat{M}) | \Phi \rangle = \langle \Phi | [\hat{M}, \hat{L}] | \Phi \rangle$$

$$\Rightarrow \langle \Phi | [\hat{L}, \hat{M}] | \Phi \rangle^* = \langle \Phi | [\hat{M}, \hat{L}] | \Phi \rangle = -\langle \Phi | [\hat{L}, \hat{M}] | \Phi \rangle$$

$$\Rightarrow \langle \Phi | [\hat{L}, \hat{M}] | \Phi \rangle \in \text{Im}$$

**Standardabweichung:**

$$\Delta \hat{F} := \sqrt{V(\hat{F})} \geq 0$$

$$\Rightarrow \Delta \hat{L} \Delta \hat{M} \geq \left| \pm \frac{1}{2} i \langle \Phi | [\hat{L}, \hat{M}] | \Phi \rangle \right|$$

$$\langle \Phi | [\hat{L}, \hat{M}] | \Phi \rangle = i a$$

$$a \in \mathbb{R}$$

$$\Rightarrow \Delta \hat{L} \Delta \hat{M} \geq \frac{1}{2} |\langle \Phi | [\hat{L}, \hat{M}] | \Phi \rangle|$$

Interpretation:

Je größer der Betrag des Erwartungswertes des Kommutators in einem beliebigen Zustand, das bedeutet, je weiter die Observablen von der Kommensurabilität entfernt sind, je unverträglicher die Observablen also zueinander sind, desto größer ist die Varianz des Produktes von Messungen der beiden Observablen !

Aussage:

Wenn  $\hat{L}$  in gewissen Grenzen genau bestimmt ist, so kann abhängig von dieser Genauigkeit  $\Delta \hat{M}$  nicht beliebig klein sein !

Beispiel für Ort und Impuls:

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i \hbar \mathbb{1}$$

$$\Delta \hat{L} \Delta \hat{M} \geq \frac{1}{2} |\langle \Phi | [\hat{L}, \hat{M}] | \Phi \rangle|$$

$$\Rightarrow \Delta \hat{x} \Delta \hat{p} \geq \frac{1}{2} \hbar \mathbb{1}$$

und zwar komponentenweise.

Merke:

$$\Delta \hat{L} \Delta \hat{M} \geq \frac{1}{2} |\langle \Phi | [\hat{L}, \hat{M}] | \Phi \rangle|$$

gilt für beliebige Operatoren !!

Sei

$$[\hat{L}, \hat{M}] = 0$$

$$\Rightarrow \Delta \hat{L} \Delta \hat{M} \geq 0$$

Also sind

$$\Delta \hat{L} = 0$$

$$\Delta \hat{M} = 0$$

möglich.

Wann jedoch werden diese unteren Schranken, also Varianzen des Wertes Null angenommen ?/ Wann verschwinden die Varianzen ?

Dann, wenn wir sicher EINEN Wert messen !

Wir messen an einem Zustand  $|\Phi\rangle$  und die Varianz verschwindet genau dann, wenn

$$|\Phi\rangle = |\Phi(\mathbf{I}, \mathbf{m}, \dots)\rangle$$

$$\hat{L}|\Phi\rangle = \mathbf{I}|\Phi\rangle$$

$$\hat{M}|\Phi\rangle = \mathbf{m}|\Phi\rangle$$

Falls also

$$[\hat{L}, \hat{M}] = 0$$

$$\Rightarrow \Delta \hat{L} \Delta \hat{M} \geq 0$$

dann macht die obige Definition also Sinn:

**Def.:**

Eine Menge vertauschbarer Operatoren  $\hat{L}, \hat{M}, \hat{N}, \dots$

heißt vollständiger Satz, wenn ihre GEMEINSAMEN Eigenräume alle eindimensional sind:

Sei eine Eigenfunktion gegeben (eindeutig, also keine Entartung) mit:

$$|\Phi\rangle = |\Phi(\mathbf{l}, \mathbf{m}, \dots)\rangle$$

$$\hat{L}|\Phi\rangle = \mathbf{l}|\Phi\rangle$$

$$\hat{M}|\Phi\rangle = \mathbf{m}|\Phi\rangle$$

Mit jeweils eindimensionalen gemeinsamen Eigenräumen !

### Die Energie / zeit Unschärfe

- Energieoperator H
- - Zeitoperator -> existiert nicht !
- t ist vielmehr eine C- Zahl, ein sogenannter Parameter !

Vergleiche: Priogines versuche, durch einen Zeitoperator eine irreversible QM zu konstruieren !

Die Theorie bei uns ist bisher völlig reversibel !

Zeitoperator müsste ein kontinuierliches Spektrum haben, weil die zeit nicht quantisiert ist

Aber: H hat ein diskretes Spektrum -> Hauptproblem !

So kann der zeitoperator folglich nicht eingeführt werden !

( Warum geht man nicht davon aus, dass der Zeitoperator doch ein diskretes Spektrum hat ? -> Dies würde auch die Divergenzprobleme der QUantenfeldtheorie zumindest teilweise beseitigen.

Vielleicht lässt sich die ART durch ein diskretes Raumzeitspektrum quantisieren . Man könnte dadurch die Divergenzen im Gravitonenfeld vermeiden ! )

Schließlich könnte jedes Graviton nur noch Elementarteilchen mit begrenzter Energie aus seinem Feld emittieren, da die Lebensdauer über dem quantisierten Schwellwert liegen muss !

$$[\hat{L}, \hat{M}] = 0$$

$$\Rightarrow \Delta \hat{L} \Delta \hat{M} \geq 0$$

gilt nur, falls

$$|\Phi\rangle = |\Phi(\mathbf{l}, \mathbf{m}, \dots)\rangle$$

$$\hat{L}|\Phi\rangle = \mathbf{l}|\Phi\rangle$$

$$\hat{M}|\Phi\rangle = \mathbf{m}|\Phi\rangle$$

Also  $|\Phi\rangle$  aus dem gemeinsamen Eigenraum gewählt wird !

Entartung fordert dann, dass lediglich eine Varianz verschwindet.



## 5. Dynamik

### 5.1 Grundgleichungen ( Vergl. Fick 3.5, §2 )

Betrachte:

$$\langle \Psi | \Phi \rangle = C$$

$$\dot{C} = \langle \dot{\Psi} | \Phi \rangle + \langle \Psi | \dot{\Phi} \rangle$$

$$\langle \dot{\Psi} | = \frac{i}{\hbar} H \langle \Psi |$$

$$\dot{C} = \frac{i}{\hbar} \langle H \Psi | \Phi \rangle + \langle \Psi | \left[ -\frac{i}{\hbar} H \Phi \right] = \frac{i}{\hbar} \langle \Psi | H \Phi \rangle - \frac{i}{\hbar} \langle \Psi | H \Phi \rangle = 0$$

Das bedeutet:

Die Existenz der Schrödingergleichung bedingt,

dass in der Schrödingerdynamik Skalarprodukte prinzipiell zeitunabhängig, also zeitlich konstant sind !

Die natürliche Dynamik läßt also Skalarprodukte invariant !

Wenn bra und ket der gleichen Dynamik folgen, also wenn beide Faktoren der gleichen Dynamik unterliegen.

$$|C|^2 = \langle \Psi | \Phi \rangle \langle \Psi | \Phi \rangle^* = \langle \Psi | \Phi \rangle \langle \Phi | \Psi \rangle = \langle \Psi | P_{|\Phi\rangle} | \Psi \rangle$$

$$\frac{d}{dt} |C|^2 = \frac{d}{dt} \langle \Psi | P_{|\Phi\rangle} | \Psi \rangle = 0$$

$$\Rightarrow \langle \Psi | \dot{P}_{|\Phi\rangle} | \Psi \rangle = 0 \quad \forall \Psi$$

$$\Rightarrow \dot{P}_{|\Phi\rangle} = 0$$

Schrödinger axiomatisierte:

Die Dynamik wird durch  $\dot{P}_{|\Phi\rangle} = 0$  gekennzeichnet !

Also:

$$-\frac{i}{\hbar} [H, P_{|\Phi\rangle}] = \partial_t P_{|\Phi\rangle}$$

Wegen

$$\hat{L}^\circ = \frac{i}{\hbar} [H, \hat{L}] + \partial_t \hat{L}$$

So ist die Dynamik vollständig beschrieben.

Aber: Man braucht die Schrödingergleichung dennoch !

Vergleiche Übungsaufgaben !

Verwendet man die DGL

$$-\frac{i}{\hbar} [H, P_{|\Phi\rangle}] = \partial_t P_{|\Phi\rangle}$$

Als Ersatz für die Schrödingergleichung, so ändert sich nicht viel ( Die Schrödingergleichung) kommt wieder raus !

1926: Schrödinger rät Schrödingergleichung !

### 5.2 Bilder

Betrachten wir eine Familie unitärer Trafos:  
 $\Xi(t)$

$$\Xi^+(t)\Xi(t) = \Xi(t)\Xi^+(t) = \overline{1}$$

$$\Xi(t)\hat{L}_0\Xi^+(t) := \hat{L}(t)$$

$$\Xi(0) := \overline{1}$$

Dabei soll die zeitliche Entwicklung per Definition durch diese unitäre Trafo beschrieben werden !

Die Zeitliche Entwicklung ist gegeben durch

$$\hat{L}^\circ = \frac{i}{\hbar} [H, \hat{L}] + \partial_t \hat{L}$$

Sei zu untersuchen mittels

$$\Xi(t)\hat{L}_0\Xi^+(t) := \hat{L}(t)$$

$$\hat{L}(t, \mathbf{t}) := \hat{L}(\hat{x}(t), \hat{p}(t), \mathbf{t})$$

$$\Xi(t)\hat{L}_0\Xi^+(t) := \hat{L}(t)$$

$$\hat{L}(t, \mathbf{t}) \big|_{t=\mathbf{t}} = \hat{L}(t, t) \equiv \hat{L}(t)$$

$$\hat{L}(t) = \hat{L}(\hat{x}(t), \hat{p}(t), t) = \Xi(t)\hat{L}_0\Xi^+(t) = \hat{L}(\Xi(t)\hat{x}\Xi^+(t), \Xi(t)\hat{p}\Xi^+(t), t)$$

**Betrachten wir das Eigenwertproblem**

$$\hat{L}|\mathbf{j}_k\rangle = \mathbf{I}_k|\mathbf{j}_k\rangle$$

$$\Xi(t)\hat{L}_0\Xi^+(t)\Xi(t)|\mathbf{j}_k\rangle = \Xi(t)\mathbf{I}_k|\mathbf{j}_k\rangle$$

$$\Rightarrow \Xi(t)\hat{L}_0|\mathbf{j}_k\rangle = \Xi(t)\mathbf{I}_k|\mathbf{j}_k\rangle$$

$$\Xi(t)|\mathbf{j}_k\rangle = |\mathbf{j}_k(t)\rangle$$

$$\hat{L}(t)\Xi(t)|\mathbf{j}_k\rangle = \mathbf{I}_k\Xi(t)|\mathbf{j}_k\rangle$$

$$\hat{L}(t)|\mathbf{j}_k(t)\rangle = \mathbf{I}_k|\mathbf{j}_k(t)\rangle$$

$$t \neq t_0$$

$$\Xi(t)\hat{L}_0\Xi^+(t) := \hat{L}(t)$$

$$\hat{L}(t_0) = \Xi(t_0)\hat{L}_0\Xi^+(t_0)$$

$$\Rightarrow \hat{L}_0 = \Xi^+(t_0)\hat{L}(t_0)\Xi(t_0)$$

$$\hat{L}(t) = \Xi(t)\Xi^+(t_0)\hat{L}(t_0)\Xi(t_0)\Xi^+(t)$$

$$\Xi(t)\Xi^+(t_0) := U(t, t_0)$$

$$\Xi(t_0)\Xi^+(t) := U^+(t, t_0)$$

$$\hat{L}(t) = U(t, t_0)\hat{L}(t_0)U^+(t, t_0)$$

$$U(t, t_0)U^+(t, t_0) = \Xi(t)\Xi^+(t_0)\Xi(t_0)\Xi^+(t) = \Xi(t)\Xi^+(t) = \overline{1}$$

Wir bezeichnen

$U(t, t_0)$  als Zeitschiebeoperator !

Sei:

$$\hat{L}(0) = \hat{L}$$

$$U(t) = \Xi(t)$$

$$\Xi(0) = \overline{1}$$

$$U(t, t_0) \text{ schiebt } t_0 \rightarrow t$$

$$\Rightarrow U(t, t_0) = \Xi(t)\Xi^+(t_0) = \Xi(t)\Xi^+(t_1)\Xi(t_1)\Xi^+(t_0)$$

$$\Xi^+(t_1)\Xi(t_1) = \overline{1}$$

$$\Rightarrow U(t, t_0) = U(t, t_1)U(t_1, t_0)$$

$$t_1 \rightarrow t \text{ nach } t_0 \rightarrow t_1$$

**Definition:**

**Ein Bild wird durch die Wahl eines Zeitschiebeoperators festgelegt, der folgende Eigenschaften hat:**

$U(t, t_0)$  als Zeitschiebeoperator !

$$U(t, t) = \overline{1}$$

$$U(t, t_0) = U(t_0, t)^+$$

$$U(t, t_0) = U(t, t_1)U(t_1, t_0)$$

Diese Bedingungen ergeben sich aus der reversiblen Quantenmechanik

Dann:

$$\hat{L}(t) = U(t, t_0)\hat{L}(t_0)U^+(t, t_0)$$

und für die Eigenvektoren:

$$|\mathbf{j}_k(t)\rangle = \Xi(t)|\mathbf{j}_k\rangle = \Xi(t)\Xi^+(t_0)\Xi(t_0)|\mathbf{j}_k\rangle = \Xi(t)\Xi^+(t_0)|\mathbf{j}_k(t_0)\rangle = U(t, t_0)|\mathbf{j}_k(t_0)\rangle$$

### **5.2.2 Zeitableitung eines Operators**

$$\begin{aligned}
\hat{L}(t) &= \hat{U}(t,0)\hat{L}(\hat{x},\hat{p},0)\hat{U}^+(t,0) \\
\dot{\hat{L}}(t) &= \dot{\hat{U}}(t,0)\hat{L}(\hat{x},\hat{p},0)\hat{U}^+(t,0) + \hat{U}(t,0)\left(\partial_t \hat{L}(\hat{x},\hat{p},0)\right)\hat{U}^+(t,0) + \hat{U}(t,0)\hat{L}(\hat{x},\hat{p},0)\dot{\hat{U}}^+(t,0) \\
&= \dot{\hat{U}}(t,0)\hat{U}^+(t,0)\hat{U}(t,0)\hat{L}(\hat{x},\hat{p},0)\hat{U}^+(t,0) + \left(\partial_t \hat{L}(\hat{x},\hat{p},0)\right)\Big|_t + \hat{U}(t,0)\hat{L}(\hat{x},\hat{p},0)\hat{U}^+(t,0)\dot{\hat{U}}^+(t,0) \\
&= \dot{\hat{U}}(t,0)\hat{U}^+(t,0)\hat{L}(\hat{x},\hat{p},t) + \left(\partial_t \hat{L}(\hat{x},\hat{p},0)\right)\Big|_t + \hat{L}(\hat{x},\hat{p},t)\hat{U}(t,0)\dot{\hat{U}}^+(t,0)
\end{aligned}$$

$$\hat{U}(t,0)\hat{U}^+(t,0) = 1$$

$$\Rightarrow \dot{\hat{U}}(t,0)\hat{U}^+(t,0) + \hat{U}(t,0)\dot{\hat{U}}^+(t,0) = 0$$

$$\Rightarrow \hat{U}(t,0)\dot{\hat{U}}^+(t,0) = -\dot{\hat{U}}(t,0)\hat{U}^+(t,0)$$

$$\Rightarrow \dot{\hat{L}}(t) = \dot{\hat{U}}(t,0)\hat{U}^+(t,0)\hat{L}(\hat{x},\hat{p},t) + \left(\partial_t \hat{L}(\hat{x},\hat{p},0)\right)\Big|_t - \hat{L}(\hat{x},\hat{p},t)\dot{\hat{U}}(t,0)\hat{U}^+(t,0)$$

$$\dot{\hat{L}}(t) = \left[ \dot{\hat{U}}(t,0)\hat{U}^+(t,0), \hat{L}(\hat{x},\hat{p},t) \right] + \left(\partial_t \hat{L}(\hat{x},\hat{p},0)\right)\Big|_t$$

Dies gilt für die Dynamik der Operatoren in einem beliebigen Bild, wenn ein unitärer Operator gefunden wurde, mit der Eigenschaft

$U(t, t_0)$  als Zeitschiebeoperator !

$$U(t, t) = \overline{1}$$

$$U(t, t_0) = U(t_0, t)^+$$

$$U(t, t_0) = U(t, t_1)U(t_1, t_0)$$

**Definiere**

$$\hat{X}(t, t_0) := \frac{\hbar}{i} \dot{\hat{U}}(t, t_0) \hat{U}^+(t, t_0)$$

$$\Rightarrow \dot{\hat{L}}(t) = \frac{i}{\hbar} \left[ \hat{X}(t, t_0), \hat{L}(\hat{x}, \hat{p}, t) \right] + \left( \partial_t \hat{L}(\hat{x}, \hat{p}, 0) \right) \Big|_t = \left[ \dot{\hat{U}}(t, 0) \hat{U}^+(t, 0), \hat{L}(\hat{x}, \hat{p}, t) \right] + \left( \partial_t \hat{L}(\hat{x}, \hat{p}, 0) \right) \Big|_t$$

**Satz:**

$$\hat{X}(t, t_0) = \hat{X}(t)$$

$$\hat{X}^+(t) = \hat{X}(t)$$

**SOmit:**

$$\hat{X}(t, t_0) := \frac{\hbar}{i} \dot{\hat{U}}(t, t_0) \hat{U}^+(t, t_0)$$

$$\Rightarrow \dot{\hat{L}}(t) = \frac{i}{\hbar} \left[ \hat{X}(t), \hat{L}(t) \right] + \left( \partial_t \hat{L} \right) (t)$$

Wegen:

$$\hat{L}^\circ = \frac{i}{\hbar} \left[ H, \hat{L} \right] + \left( \partial_t \hat{L} \right)$$

$$\Rightarrow \hat{L}^\circ(t) = \frac{i}{\hbar} \left[ H(t), \hat{L}(t) \right] + \left( \partial_t \hat{L} \right) (t)$$

$$\Rightarrow \dot{\hat{L}}(t) = \hat{L}^\circ(t) - \frac{i}{\hbar} \left[ H(t) - \hat{X}(t), \hat{L}(t) \right]$$



$$(\partial_t P_{|\Phi\rangle}) = -\frac{i}{\hbar} [H, P_{|\Phi\rangle}]$$

$$\hat{U}(t,0) (\partial_t P_{|\Phi\rangle}) \hat{U}^\dagger(t,0) =: (\partial_t P_{|\Phi\rangle})(t) = -\frac{i}{\hbar} [H(t), P_{|\Phi\rangle}(t)]$$

$$\Rightarrow \dot{P}_{|\Phi\rangle} = P_{|\Phi\rangle}^\circ(t) - \frac{i}{\hbar} [H(t) - \hat{X}(t), P_{|\Phi\rangle}(t)]$$

Wir verwenden das Dynamik- Axiom:

$$P_{|\Phi\rangle}^\circ(t) = 0$$

$$\dot{P}_{|\Phi\rangle} = -\frac{i}{\hbar} [H(t) - \hat{X}(t), P_{|\Phi\rangle}(t)] = (\partial_t P_{|\Phi\rangle}) + \frac{i}{\hbar} [\hat{X}(t), P_{|\Phi\rangle}(t)]$$

$$\dot{P}_{|\Phi\rangle} := -\frac{i}{\hbar} [\hat{J}(t), P_{|\Phi\rangle}(t)]$$

$$\hat{J}(t) := H(t) - \hat{X}(t)$$

$$\hat{J}(t) = \hat{J}^\dagger(t)$$

**Speziell:**

$$\hat{L} = H$$

$$\dot{H}(t) = H^\circ(t) + \frac{i}{\hbar} [\hat{X}(t), H(t)]$$

$$H^\circ(t) = \partial_t H(t)$$

$$\dot{H}(t) = +\frac{i}{\hbar} [\hat{X}(t), H(t)] + \partial_t H(t)$$

- ➔ Wenn der X- Operator einen endlichen Wert hat, so wird die Zeitableitung des Hamiltonian durch den Wert des Kommutators dieses X- Operators mit H bestimmt.
- ➔ Spezialfall Schrödingerbild: der X- Operator ist Null !

### 5.2.3 Zeitableitung von Kets

$$\dot{P}_{|\Phi\rangle} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{J}(t), P_{|\Phi\rangle}(t)] = |\dot{\Phi}\rangle\langle\Phi| + |\Phi\rangle\langle\dot{\Phi}| = -\frac{i}{\hbar} \hat{J}(t) |\Phi(t)\rangle\langle\Phi(t)| + \frac{i}{\hbar} |\Phi(t)\rangle\langle\Phi(t)| \hat{J}(t)$$

$$\left| \dot{\Phi}(t) + \frac{i}{\hbar} \hat{J}(t) \Phi(t) \right\rangle \langle\Phi(t)| + |\Phi(t)\rangle \left\langle \dot{\Phi}(t) - \left( -\frac{i}{\hbar} \right) \hat{J}(t) \Phi(t) \right| = 0$$

$$\left| \dot{\Phi}(t) + \frac{i}{\hbar} \hat{J}(t) \Phi(t) \right\rangle \langle\Phi(t)| + |\Phi(t)\rangle \left\langle \dot{\Phi}(t) + \frac{i}{\hbar} \hat{J}(t) \Phi(t) \right| = 0$$

### Vorlesung 11.12.02

**Dynamik:**

$$(\partial_t P_{|\Phi\rangle}) = -\frac{i}{\hbar} [H, P_{|\Phi\rangle}]$$

$$\hat{U}(t,0) (\partial_t P_{|\Phi\rangle}) \hat{U}^\dagger(t,0) =: (\partial_t P_{|\Phi\rangle})(t) = -\frac{i}{\hbar} [H(t), P_{|\Phi\rangle}(t)]$$

gegeben durch

$$P_{|\Phi\rangle}^\circ(t) = 0$$

Bilder

$U(t, t_0)$  als Zeitschiebeoperator !

$$U(t, t) = \overline{1}$$

$$U(t, t_0) = U(t_0, t)^+$$

$$U(t, t_0) = U(t, t_1)U(t_1, t_0)$$

$$\Xi(t)\hat{L}_0\Xi^+(t) := \hat{L}(t)$$

$$\hat{L}(t) = \hat{L}(\hat{x}(t), \hat{p}(t), t) = \Xi(t)\hat{L}_0\Xi^+(t) = \hat{L}(\Xi(t)\hat{x}\Xi^+(t), \Xi(t)\hat{p}\Xi^+(t), t)$$

**Betrachten wir das Eigenwertproblem**

$$\hat{L}(t)|\mathbf{j}_k(t)\rangle = \mathbf{l}_k|\mathbf{j}_k(t)\rangle$$

$$\Xi(t)|\mathbf{j}_k\rangle := |\mathbf{j}_k(t)\rangle$$

**Observable**

$$\hat{L}(t) = \hat{U}(t, 0)\hat{L}(\hat{x}, \hat{p}, 0)\hat{U}^+(t, 0)$$

$$\Xi(t)\Xi^+(t_0) = U(t, t_0)$$

$$\dot{\hat{L}}(t) = \left[ \dot{\hat{U}}(t, 0)\hat{U}^+(t, 0), \hat{L}(\hat{x}, \hat{p}, t) \right] + \left( \partial_t \hat{L}(\hat{x}, \hat{p}, 0) \right) \Big|_t$$

$$\hat{X}(t, t_0) := \frac{\hbar}{i} \dot{\hat{U}}(t, 0)\hat{U}^+(t, 0) = \hat{X}^+(t, t_0)$$

$$\Rightarrow \dot{\hat{L}}(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{X}(t), \hat{L}(t)] + (\partial_t \hat{L})(t)$$

$$\hat{L}^\circ = \frac{i}{\hbar} [H, \hat{L}] + (\partial_t \hat{L})$$

$$\Rightarrow \hat{L}^\circ(t) = \frac{i}{\hbar} [H(t), \hat{L}(t)] + (\partial_t \hat{L})(t)$$

$$\Rightarrow \dot{\hat{L}}(t) = \hat{L}^\circ(t) - \frac{i}{\hbar} [H(t) - \hat{X}(t), \hat{L}(t)]$$

$$\dot{P}_{|\Phi\rangle} = -\frac{i}{\hbar} [H(t) - \hat{X}(t), P_{|\Phi\rangle}(t)] = (\partial_t P_{|\Phi\rangle}) + \frac{i}{\hbar} [\hat{X}(t), P_{|\Phi\rangle}(t)]$$

$$\dot{P}_{|\Phi\rangle} := -\frac{i}{\hbar} [\hat{J}(t), P_{|\Phi\rangle}(t)]$$

$$\hat{J}(t) := H(t) - \hat{X}(t)$$

$$\hat{J}(t) = \hat{J}^+(t)$$

$$\hat{L} = H$$

$$\dot{H}(t) = H^\circ(t) + \frac{i}{\hbar} [\hat{X}(t), H(t)]$$

$$H^\circ(t) = \partial_t H(t)$$

$$\dot{H}(t) = +\frac{i}{\hbar} [\hat{X}(t), H(t)] + \partial_t H(t)$$

### 5.2.3 Zeitableitung von Kets

$$\begin{aligned}
\dot{P}|\Phi\rangle &= -\frac{i}{\hbar}[\hat{J}(t), P]|\Phi\rangle(t) = |\dot{\Phi}\rangle\langle\Phi| + |\Phi\rangle\langle\dot{\Phi}| = -\frac{i}{\hbar}\hat{J}(t)|\Phi(t)\rangle\langle\Phi(t)| + \frac{i}{\hbar}|\Phi(t)\rangle\langle\Phi(t)|\hat{J}(t) \\
&- \frac{i}{\hbar}\hat{J}(t)|\Phi(t)\rangle\langle\Phi(t)| = -\left|\frac{i}{\hbar}\hat{J}(t)\Phi(t)\right\rangle\langle\Phi(t)| \\
&\frac{i}{\hbar}|\Phi(t)\rangle\langle\Phi(t)|\hat{J}(t) = -\left|\Phi(t)\right\rangle\left\langle\frac{i}{\hbar}\hat{J}(t)\Phi(t)\right| \\
\left|\dot{\Phi}(t) + \frac{i}{\hbar}\hat{J}(t)\Phi(t)\right\rangle\langle\Phi(t)| + |\Phi(t)\rangle\left\langle\dot{\Phi}(t) - \left(-\frac{i}{\hbar}\right)\hat{J}(t)\Phi(t)\right| &= 0 \\
\left|\dot{\Phi}(t) + \frac{i}{\hbar}\hat{J}(t)\Phi(t)\right\rangle\langle\Phi(t)| + |\Phi(t)\rangle\left\langle\dot{\Phi}(t) + \frac{i}{\hbar}\hat{J}(t)\Phi(t)\right| &= 0
\end{aligned}$$

**Satz:**

$$|\mathbf{a}\rangle\langle\mathbf{b}| + |\mathbf{b}\rangle\langle\mathbf{a}| = 0$$

$$\Rightarrow |\mathbf{a}\rangle = im|\mathbf{b}\rangle$$

$$m \in \mathbb{R}$$

**Beweis:**

$$|\mathbf{a}\rangle\langle\mathbf{b}| + |\mathbf{b}\rangle\langle\mathbf{a}| = 0$$

Somit ist  $|\mathbf{a}\rangle \parallel |\mathbf{b}\rangle$ , damit sich beide Vektoren zu Null addieren können !

Also:

$$|\mathbf{a}\rangle = m|\mathbf{b}\rangle$$

$$\Rightarrow m|\mathbf{b}\rangle\langle\mathbf{b}| + m^*|\mathbf{b}\rangle\langle\mathbf{b}| = 0$$

$$m \in \mathbb{Im}$$

Somit:

$$\left|\dot{\Phi}(t) + \frac{i}{\hbar}\hat{J}(t)\Phi(t)\right\rangle = i\mathbf{w}|\Phi(t)\rangle$$

$$\mathbf{w} \in \mathbb{R}$$

Dies ist eine DGL für  $|\Phi(t)\rangle$ .

Wir wählen den Lösungsansatz:

$$|\Phi(t)\rangle = e^{i\int \mathbf{w}(t)dt}|\Phi'(t)\rangle$$

$$\Rightarrow |\dot{\Phi}(t)\rangle = i\mathbf{w}|\Phi(t)\rangle + e^{i\int \mathbf{w}(t)dt}|\dot{\Phi}'(t)\rangle$$

$$\begin{aligned}
\left| \dot{\Phi}(t) + \frac{i}{\hbar} \hat{J}(t) \Phi(t) \right\rangle &= i \mathbf{w} | \Phi(t) \rangle \\
\Rightarrow e^{i \int \mathbf{w}(t) dt} \left| \dot{\Phi}'(t) \right\rangle + \frac{i}{\hbar} \hat{J}(t) | \Phi(t) \rangle + | \dot{\Phi}(t) \rangle &= | \dot{\Phi}(t) \rangle \\
\Rightarrow e^{i \int \mathbf{w}(t) dt} \left| \dot{\Phi}'(t) \right\rangle + \frac{i}{\hbar} \hat{J}(t) | \Phi(t) \rangle &= 0 \\
| \Phi(t) \rangle &= e^{i \int \mathbf{w}(t) dt} | \Phi'(t) \rangle \\
\Rightarrow \left| \dot{\Phi}'(t) \right\rangle + \frac{i}{\hbar} \hat{J}(t) | \Phi'(t) \rangle &= 0 \\
\left| \dot{\Phi}(t) \right\rangle &= -\frac{i}{\hbar} \hat{J}(t) | \Phi(t) \rangle
\end{aligned}$$

Wir haben dabei noch kein  $U(t, t_0)$  und damit noch keinen X- Operator, also auch keinen J- Operator näher spezifiziert.

Es gilt ganz allgemein

$$| \dot{\Phi}(t) \rangle = -\frac{i}{\hbar} \hat{J}(t) | \Phi(t) \rangle$$

#### **Der Zeitschieber für die Kets**

$$| \Phi(t) \rangle = \hat{C}(t, t_0) | \Phi(t_0) \rangle$$

einsetzen in

$$| \dot{\Phi}(t) \rangle = -\frac{i}{\hbar} \hat{J}(t) | \Phi(t) \rangle$$

Also:

$$\dot{\hat{C}}(t, t_0) = -\frac{i}{\hbar} \hat{J}(t) \hat{C}(t, t_0)$$

$$\dot{\hat{C}}(t, t_0) = -\frac{i}{\hbar} (H(t) - \hat{X}(t)) \hat{C}(t, t_0)$$

Für den alten zeitschieber  $U(t, t_0)$ :

$$| \mathbf{j}(t) \rangle = \hat{U}(t, t_0) | \mathbf{j}(t_0) \rangle$$

$$| \dot{\mathbf{j}}(t) \rangle = \dot{\hat{U}}(t, t_0) | \mathbf{j}(t_0) \rangle$$

$$\dot{\hat{U}}(t, t_0) = \frac{i}{\hbar} \hat{X}(t, t_0) \hat{U}(t, t_0)$$

Wegen

$$\hat{X}(t, 0) := \frac{\hbar}{i} \dot{\hat{U}}(t, 0) \hat{U}^\dagger(t, 0)$$

$$\Rightarrow \dot{\hat{U}}(t, 0) = \frac{i}{\hbar} \hat{X}(t, 0) \hat{U}(t, 0)$$

$$| \dot{\mathbf{j}}(t) \rangle = \frac{i}{\hbar} \hat{X}(t, t_0) \hat{U}(t, 0) | \mathbf{j}(t_0) \rangle = \frac{i}{\hbar} \hat{X}(t, t_0) | \mathbf{j}(t) \rangle$$

#### **5.2.4 Bildunabhängigkeit der Schrödingergleichung**

$$\Phi(\mathbf{I}, t) := \langle \mathbf{j}(\mathbf{I}, t) | \Phi(t) \rangle$$

$$\dot{\Phi}(\mathbf{I}, t) := \langle \dot{\mathbf{j}}(\mathbf{I}, t) | \Phi(t) \rangle + \langle \mathbf{j}(\mathbf{I}, t) | \dot{\Phi}(t) \rangle$$

Sprechweise:

$$\langle \mathbf{j}(\mathbf{I}, t) | \Phi(t) \rangle$$

Klein phi- Punkt ( Bra) kontrahiert mit Phi !

$$\dot{\Phi}(\mathbf{I}, t) := \langle \dot{\mathbf{j}}(\mathbf{I}, t) | \Phi(t) \rangle + \langle \mathbf{j}(\mathbf{I}, t) | \dot{\Phi}(t) \rangle$$

$$\langle \mathbf{j}(\mathbf{I}, t) | = \left\langle \frac{i}{\hbar} \hat{X}(t) \mathbf{j}(\mathbf{I}, t) \right|$$

$$| \dot{\Phi}(t) \rangle = \left| -\frac{i}{\hbar} (H(t) - \hat{X}(t)) \Phi(t) \right\rangle$$

$$\dot{\Phi}(\mathbf{I}, t) := \left\langle \frac{i}{\hbar} \hat{X}(t) \mathbf{j}(\mathbf{I}, t) \right| \Phi(t) \rangle + \langle \mathbf{j}(\mathbf{I}, t) | \left| -\frac{i}{\hbar} (H(t) - \hat{X}(t)) \Phi(t) \right\rangle$$

$$= -\frac{i}{\hbar} \left\{ \langle \hat{X}(t) \mathbf{j}(\mathbf{I}, t) | \Phi(t) \rangle + \langle \mathbf{j}(\mathbf{I}, t) | (H(t) - \hat{X}(t)) \Phi(t) \rangle \right\}$$

$$= -\frac{i}{\hbar} \langle \mathbf{j}(\mathbf{I}, t) | H(t) \Phi(t) \rangle = -\frac{i}{\hbar} H(t) \Phi(\mathbf{I}, t)$$

Also: Die Zeitableitung der Operatoren und Kets ist bildabhängig, die Schrödingergleichung dagegen ist invariant gegen Bildwechsel !

### **5.25 Schrödinger- Bild**

Der Anteil der Dynamik der Operatoren ist Null, somit ist der X- Operator Null !

$$\hat{X}^S(t) = 0$$

Also gilt:

$$\dot{\hat{L}}^S(t) = \hat{L}^{\circ S}(t) - \frac{i}{\hbar} [H^S(t), \hat{L}^S(t)] = \partial_t \hat{L}^S(t)$$

$$\hat{L}^{\circ S}(t) = \frac{i}{\hbar} [H^S(t), \hat{L}^S(t)] + \partial_t \hat{L}^S(t)$$

Besser: Die Dynamik der Operatoren ist Null, wenn sie nicht explizit zeitabhängig sind !

$$| \dot{\Phi}^S(t) \rangle = -\frac{i}{\hbar} (H^S(t)) | \Phi^S(t) \rangle$$

### **5.2.6 Heisenbergbild**

Der Anteil der Dynamik der Operatoren ist alles, somit ist der X- Operator der Hamiltonoperator !  
es verschwindet die Dynamik der Ket- Zustände

$$\hat{X}^H(t) = H^H(t)$$

Also gilt:

$$\dot{\hat{L}}^H(t) = \hat{L}^{\circ H}(t) = \frac{i}{\hbar} [H^H(t), \hat{L}^H(t)] + \partial_t \hat{L}^H(t)$$

$$| \dot{\Phi}^H(t) \rangle = 0$$

### 5.27 Wechselwirkungsbild

Die Dynamik teilt sich auf Operatoren und Zustände auf.

Die Störung des ungestörten Hamiltonian bestimmt die Dynamik der Zustände. Der ungestörte Hamiltonian

dagegen bestimmt die Dynamik der Operatoren. Somit ist der X- Operator gerade der ungestörte Hamiltonian.

Die Dynamik der Zustände wird durch die Differenz zwischen H und  $H_0$  bestimmt, also durch den Störoperator.

Das heißt, wenn die Störung verschwindet, so geht das Wechselwirkungsbild ins Heisenbergbild über !

$$H^W(t) = H_0(t) + H_1(t)$$

$$\hat{X}^W(t) = H_0^W(t)$$

Also gilt:

$$\dot{\hat{L}}^W(t) = \hat{L}^{oW}(t) - \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_1^W(t), \hat{L}^W(t)]$$

$$\hat{L}^{oW}(t) = \frac{i}{\hbar} [H^W(t), \hat{L}^W(t)] + \partial_t \hat{L}^W(t) = \frac{i}{\hbar} [H_0^W(t) + H_1^W(t), \hat{L}^W(t)] + \partial_t \hat{L}^W(t)$$

$$\Rightarrow \dot{\hat{L}}^W(t) = \frac{i}{\hbar} [H_0^W(t) + H_1^W(t), \hat{L}^W(t)] + \partial_t \hat{L}^W(t) - \frac{i}{\hbar} [H_1^W(t), \hat{L}^W(t)]$$

$$\dot{\hat{L}}^W(t) = \frac{i}{\hbar} [H_0^W(t), \hat{L}^W(t)] + \partial_t \hat{L}^W(t)$$

$$|\dot{\Phi}^W(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar} H_1^W(t) |\Phi^W(t)\rangle$$

### Alternativer Zugang: Dynamik im Schrödinger- heisenberg- und Wechselwirkungsbild

Betrachte die Zeitabhängigen Zustände  $|\Psi\rangle_t$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle_t = \hat{H} |\Psi\rangle_t$$

Die zeitabhängige Schrödingergleichung kann formal gelöst werden:

$$|\Psi\rangle_t = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} |\Psi\rangle_0 = U(t,0) |\Psi\rangle_0$$

Definition des Operators U geschieht über eine Potenzreihe:

$$U(t,0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( -\frac{i}{\hbar} \hat{H} t \right)^n \text{ Zeitentwicklungsoperator}$$

Setzt man dies in die Schrödingergleichung ein, so folgt:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( -\frac{i}{\hbar} t \right)^n \hat{H}^n |\Psi\rangle_0 = \hat{H} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( -\frac{i}{\hbar} t \right)^n \hat{H}^n |\Psi\rangle_0 = \hat{H} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n-1!} \left( -\frac{i}{\hbar} t \right)^{n-1} \hat{H}^{n-1} |\Psi\rangle_0$$

Da H hermitesch ist, muss  $U(t,0)$  ein unitärer Operator sein !

$$H^+ = H$$

Klar:

$$\Rightarrow U^+ = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( \frac{i}{\hbar} t \right)^n \hat{H}^n \Rightarrow U^+ U = 1$$

Die adjungierte Schrödingergleichung lautet:

$$\langle \Psi |_t \hat{H} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \Psi |_t$$

Mit der formalen Lösung:

$$\langle \Psi |_t = \langle \Psi |_0 e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} = \langle \Psi |_0 U^+(t, 0)$$

Der Erwartungswert eines Operators, der auch explizit zeitabhängig sein kann, z.B. über  $\bar{A}(t)$  ergibt sich für

$$\hat{F} = \hat{F}(\hat{r}, \hat{p}, t):$$

$$\langle \hat{F} \rangle = \langle \Psi |_t \hat{F} | \Psi \rangle_t$$

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{F} \rangle = \frac{d}{dt} \langle \Psi |_t \hat{F} | \Psi \rangle_t = \langle \Psi |_t \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} | \Psi \rangle_t + \left( \frac{\partial}{\partial t} \langle \Psi |_t \right) \frac{d}{dt} \hat{F} | \Psi \rangle_t + \langle \Psi |_t \hat{F} \left( \frac{\partial}{\partial t} | \Psi \rangle_t \right)$$

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} \langle \Psi |_t \right) = -\frac{1}{i\hbar} \langle \Psi |_t \hat{H}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} | \Psi \rangle_t = \frac{1}{i\hbar} \hat{H} | \Psi \rangle_t$$

Also:

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{F} \rangle = \frac{d}{dt} \langle \Psi |_t \hat{F} | \Psi \rangle_t = \langle \Psi |_t \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}] | \Psi \rangle_t$$

Ein nicht explizit abhängiger Operator ist grundsätzlich zeitlich konstant, wenn er mit dem Hamiltonoperator vertauscht.

Für ein nicht explizit zeitabhängigen Operator gilt folglich:

$$[\hat{H}, \hat{F}] = 0 \Rightarrow \frac{d}{dt} \langle \hat{F} \rangle = 0$$

### Klassisches Analogon: Poisson- Klammern

- in der klassischen mechanik finden wir analog die Poissonklammern:

Sei  $F(\bar{q}, \bar{p}, t)$  eine klassische Observable und  $H(\bar{q}, \bar{p})$  die klassische Hamiltonfunktion, so gilt:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} F(\bar{q}, \bar{p}, t) &= \frac{\partial}{\partial t} F(\bar{q}, \bar{p}, t) + \sum_{i=1}^3 \left( \frac{\partial F(\bar{q}, \bar{p}, t)}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial F(\bar{q}, \bar{p}, t)}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) \\ \frac{d}{dt} F(\bar{q}, \bar{p}, t) &= \frac{\partial}{\partial t} F(\bar{q}, \bar{p}, t) + \sum_{i=1}^3 \left( \frac{\partial F(\bar{q}, \bar{p}, t)}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial F(\bar{q}, \bar{p}, t)}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) = \frac{\partial}{\partial t} F(\bar{q}, \bar{p}, t) + \{H, F\} \end{aligned}$$

So gilt in der Quantenmechanik die anschauliche Relation:

$$\{H, F\} \rightarrow \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}]$$

Definiere:

Observable " zeitliche Veränderung von  $F(\bar{q}, \bar{p}, t)$  " als Operator:

$$\hat{F}^\circ = \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}]$$

**Fundamentalbeziehung** der Dynamik der Quantentheorie, aber keine Differenzialgleichung für  $\hat{F}$ , da im Allgemeinen:

$$\hat{F}^\circ \neq \frac{d\hat{F}}{dt}$$

Der Operator der zeitlichen Veränderung ist lediglich über einen Erwartungswert definiert:

$$\langle \hat{F}^\circ \rangle = \frac{d}{dt} \langle \hat{F} \rangle$$

**Speziell gilt**, analog zu den klassischen Hamiltonschen Gleichungen:

$$\hat{r}^\circ = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{r}]$$

$$\hat{p}^\circ = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{p}]$$

Mit der Allgemeinen Hamiltonfunktion für ein Potenzial, nämlich

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r})$$

folgt:

$$[\hat{H}, \hat{x}_k] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}_k}$$

$$[\hat{H}, \hat{p}_k] = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{x}_k}$$

Also:

$$\hat{r}^\circ = \frac{\hat{p}}{m}$$

$$\hat{p}^\circ = -\nabla V(\hat{r})$$

Woraus das Ehrenfestsche Theorem folgt:

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{r} \rangle = \frac{1}{m} \langle \hat{p} \rangle$$

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle = -\langle \nabla V(\hat{r}) \rangle$$

das heißt, die Erwartungswerte quantenmechanischer Observablen gehorchen den klassischen Bewegungsgleichungen

### **Bilder:**

Da die Erwartungswerte invariant bei unitären Transformationen  $U$  sind, sind Operatoren und Zustände nur bis auf UNITÄR-ÄQUIVALENZ festgelegt:

$$|\Psi\rangle \rightarrow |\Psi'\rangle = U|\Psi\rangle$$

$$\hat{F} \rightarrow \hat{F}' = U\hat{F}U^\dagger$$

Für verschiedene, zeitabhängige  $U$  erhält man sogenannte verschiedene "Bilder":

Im Folgenden gelte  $\frac{\partial \hat{F}}{\partial t} = 0$ , also keine explizite Zeitabhängigkeit !

### **Schrödingerbild:**

Operatoren  $\hat{F}_S(\hat{r}, \hat{p})$  zeitunabhängig

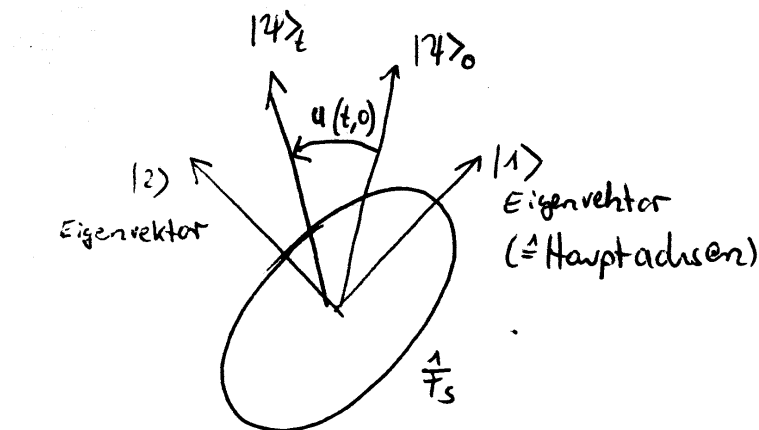


Eigenvektoren  $|n\rangle$  zeitunabhängig

Aber: Allgemeine Zustände, Zustandsvektoren:  $|\Psi\rangle$  zeitabhängig:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle_t = \hat{H} |\Psi\rangle_t$$

Veranschaulichung im  $R^2$ :



Im  $R^2$  entspricht  $\hat{F}_S$  einer 2x2- Matrix, definiert eine symmetrische, quadratische Form. ( Übungsaufgabe !)

Die Eigenvektoren des Systems sind Hauptachsen und die Zeitentwicklung des Zustandes folgt:

$$|\Psi\rangle_t = U(t,0) |\Psi\rangle_0$$

### Das heisenbergbild

$$\langle \hat{F}_S \rangle = \langle \Psi | \hat{F}_S | \Psi \rangle_t = \langle \Psi |_0 U^\dagger(t,0) \hat{F}_S U(t,0) | \Psi \rangle_0$$

$$U^\dagger(t,0) \hat{F}_S U(t,0) = \hat{F}_H(t)$$

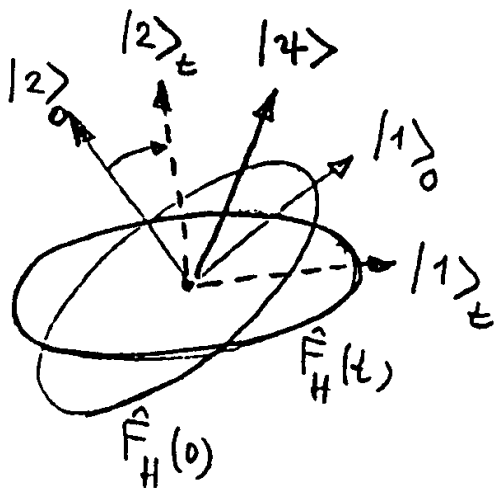
In diesem Bild sind die

Operatoren  $\hat{F}_H(t)$  zeitabhängig

und damit Eigenvektoren  $|n\rangle$  zeitabhängig

Aber: Allgemeine Zustände, Zustandsvektoren:  $|\Psi\rangle = |\Psi\rangle_0$  zeitunabhängig:

Veranschaulichung im  $R^2$ :



Aus

$$\hat{F}_H(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \hat{F}_S e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}$$

folgt:

$$\frac{d}{dt} \hat{F}_H(t) = \frac{i}{\hbar} \hat{H} e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \hat{F}_S e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} + e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \hat{F}_S \left( -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \right) e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}$$

Also:

$$\frac{d}{dt} \hat{F}_H(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}_H]$$

Somit folgt für das Heisenbergbild:

$$\hat{F}^{\circ}_H = \frac{d}{dt} \hat{F}_H(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}_H]$$

Insbesondere gilt:

$$\frac{d}{dt} \hat{H}_H = 0$$

also die bildunabhängige Darstellung

$$\hat{H}_H = \hat{H}_S = \hat{H}$$

### Wechselwirkungsbild

Sei  $\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}^1$

mit dem ungestörten Hamiltonoperator  $\hat{H}^0$  und der Störung  $\hat{H}^1$ .

Es gilt die Zeitentwicklung des Operators F für das Wechselwirkungsbild:

$$\hat{F}_W(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} \hat{F}_S e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t}$$

Somit gilt wieder die Relation

$$\frac{d}{dt} \hat{F}_W(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}^0, \hat{F}_W]$$

Also:

$$\frac{d}{dt} \hat{H}^0 = 0$$

Somit ist auch hier der ungestörte Hamiltonian  $\hat{H}^0 = \hat{H}_S = \hat{H}_H$  bildunabhängig.

Aber:

$$\frac{d}{dt} \hat{H}_W(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}^0, \hat{H}_W] = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}^0, \hat{H}^1] \neq 0 \text{ im Allgemeinen}$$

$$\langle \hat{F}_S \rangle = \langle \Psi |_t \hat{F}_S | \Psi \rangle_t = \langle \Psi |_t e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} e^{+\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} \hat{F}_S e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} e^{+\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} | \Psi \rangle_t$$

$$\langle \Psi |_t e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} = \langle \Psi |_W$$

$$e^{+\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} \hat{F}_S e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} = \hat{F}_W(t)$$

$$e^{+\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} | \Psi \rangle_0 = | \Psi \rangle_W$$

$$\langle \hat{F}_S \rangle = \langle \Psi |_W \hat{F}_W(t) | \Psi \rangle_W$$

Bemerkung: Die erwartungswertbildung formal gilt natürlich für alle Bilder.

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} | \Psi \rangle_W = \frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 e^{+\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} | \Psi \rangle_t + e^{+\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} \frac{\partial}{\partial t} | \Psi \rangle_t$$

$$\frac{\partial}{\partial t} | \Psi \rangle_t = \frac{1}{i\hbar} \hat{H}_S | \Psi \rangle_t = \frac{1}{i\hbar} \hat{H}_S e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} | \Psi \rangle_W$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} | \Psi \rangle_W = \frac{1}{i\hbar} \left( -\hat{H}^0 | \Psi \rangle_W + \hat{H}_W | \Psi \rangle_W \right)$$

wegen

$$e^{+\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} \hat{H}_S e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} = \hat{H}_W$$

$$e^{+\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} | \Psi \rangle_t = | \Psi \rangle_W$$

Aber:

$$\hat{H}_W = \hat{H}^0 + \hat{H}^1$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} | \Psi \rangle_W = \frac{1}{i\hbar} \hat{H}^1 | \Psi \rangle_W$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} | \Psi \rangle_W = \frac{1}{i\hbar} \hat{H}_W^1 | \Psi \rangle_W$$

$$\frac{d}{dt} \hat{F}_W(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}^0, \hat{F}_W]$$

Zur Verdeutlichung des Wechselwirkungsbildes soll auch der Hamiltonoperator einen index erhalten.

Dies bedeutet: Operatoren, Eigenvektoren und allgemeine Zustände sind zeitabhängig.

Operatoren  $\hat{F}_W(t)$  zeitabhängig, Abhängigkeit gegeben durch ungestörten Hamiltonoperator  $\hat{H}^0$

und damit Eigenvektoren  $|n\rangle$  zeitabhängig, ebenso durch den ungestörten Hamiltonian

Aber: Allgemeine Zustände, Zustandsvektoren:  $| \Psi \rangle_W$  zeitabhängig mit gegebener Zeitentwicklung durch den

STöroperator  $\hat{H}_W^1$ .

### 5.2.8 Zusammenhang zweier Bilder

Seien B und B' zwei Bilder, die zu einem Zeitpunkt t\* übereinstimmen sollen !

$$\hat{L}^B(t^*) = \hat{L}^{B'}(t^*)$$

für einen beliebigen Operator

$$\hat{L}$$

Satz ( Ohne Beweis)

$$\hat{L}^{B'}(t) = U^{B'}(t, t^*) U^{B+}(t_1, t^*) \hat{L}^B(t_1) U^B(t_1, t^*) U^{B'+}(t, t^*)$$

Dabei ist die Trafo

$$U^{B+}(t_1, t^*) \hat{L}^B(t_1) U^B(t_1, t^*)$$

in umgekehrter zeitlicher Reihenfolge ( von t\* nach t1) vorzunehmen !

$$\left| \Phi^{B'}(t) \right\rangle = \hat{C}^{B'}(t, t^*) \hat{C}^{B+}(t_1, t^*) \left| \Phi^B(t_1) \right\rangle$$

$$\left| \mathbf{j}_k^{B'}(t) \right\rangle = U^{B'}(t, t^*) U^{B+}(t_1, t^*) \left| \mathbf{j}_k^B(t_1) \right\rangle$$

### 5.3 Ehrenfest'sches Theorem

$$\left\langle \hat{L}^\circ(t) \right\rangle_{|\Phi\rangle} = \frac{d}{dt} \left\langle \hat{L}(t) \right\rangle_{|\Phi\rangle}$$

Im heisenbergbild:

$$\dot{\hat{L}}^H(t) = \hat{L}^{\circ H}(t)$$

$$\Rightarrow \left\langle \dot{\hat{L}}(t) \right\rangle_{|\Phi\rangle} = \frac{d}{dt} \left\langle \hat{L}(t) \right\rangle_{|\Phi\rangle}$$

$$\left\langle \hat{L}^\circ \right\rangle = \left\langle \frac{i}{\hbar} [H, \hat{L}] + (\partial_t \hat{L}) \right\rangle$$

$$\hat{L}^\circ(t) = \dot{\hat{L}}(t) + \frac{i}{\hbar} [H(t) - \hat{X}(t), \hat{L}(t)]$$

$$\Rightarrow \left\langle \hat{L}^\circ \right\rangle = \left\langle \dot{\hat{L}}(t) + \frac{i}{\hbar} [H(t) - \hat{X}(t), \hat{L}(t)] \right\rangle$$

$$\Rightarrow \left\langle \hat{L}^\circ \right\rangle = \left\langle \dot{\hat{L}}(t) \right\rangle + \frac{i}{\hbar} \left\langle (H(t) - \hat{X}(t)) \hat{L}(t) \right\rangle - \frac{i}{\hbar} \left\langle \hat{L}(t) (H(t) - \hat{X}(t)) \right\rangle$$

$$\Rightarrow \left\langle \hat{L}^\circ \right\rangle = \langle \Phi | \dot{\hat{L}}(t) | \Phi \rangle + \frac{i}{\hbar} \langle \Phi | (H(t) - \hat{X}(t)) \hat{L}(t) | \Phi \rangle - \frac{i}{\hbar} \langle \Phi | \hat{L}(t) (H(t) - \hat{X}(t)) | \Phi \rangle$$

$$\Rightarrow \left\langle \hat{L}^\circ \right\rangle = \langle \Phi | \dot{\hat{L}}(t) | \Phi \rangle + \langle \dot{\Phi} | \hat{L}(t) | \Phi \rangle + \langle \Phi | \hat{L}(t) | \dot{\Phi} \rangle = \frac{d}{dt} \langle \Phi | \hat{L}(t) | \Phi \rangle = \frac{d}{dt} \left\langle \hat{L} \right\rangle$$

$$\left\langle \hat{L}^\circ \right\rangle_{|\Phi(t)\rangle} = \frac{d}{dt} \left\langle \hat{L} \right\rangle_{|\Phi(t)\rangle}$$

**Definition:**

Eine Observable  $\hat{L}$  heißt Erhaltungsgröße, wenn gilt:

$$\left\langle \hat{L}^\circ \right\rangle_{|\Phi(t)\rangle} = \frac{d}{dt} \left\langle \hat{L} \right\rangle_{|\Phi(t)\rangle} = 0 \forall |\Phi(t)\rangle$$

Ehrenfest:

$$\left\langle \hat{L}^\circ \right\rangle_{|\Phi(t)\rangle} = 0 \forall |\Phi(t)\rangle$$

$$\hat{L}^\circ = 0$$

**Beispiel: Zeitableitung einer Erhaltungsgröße/ Vergleich verschiedener Bilder**

$$\hat{L}^\circ = 0 \rightarrow \hat{L}^\circ(t) = 0$$

$$\hat{X}^S(t) = 0$$

$$\dot{\hat{L}}^S(t) = -\frac{i}{\hbar} [H^S(t), \hat{L}^S(t)] = (\partial_t \hat{L}^S(t))$$

$$\hat{X}^H(t) = H^H(t)$$

$$\dot{\hat{L}}^H(t) = \hat{L}^\circ(t) = 0$$

$$\hat{X}^W(t) = H_0^W(t)$$

$$\dot{\hat{L}}^{SW}(t) = -\frac{i}{\hbar} [H_1^W(t), \hat{L}^W(t)]$$

$$\hat{L}^\circ(t) = 0 = \frac{i}{\hbar} [H, \hat{L}(t)] + \partial_t \hat{L}(t)$$

$$\partial_t \hat{L}(t) = 0 \Rightarrow [H, \hat{L}(t)] = 0$$

**Satz:**

Explizit zeitunabhängige Observablen, die mit H vertauschen, sind Erhaltungsgrößen.

**Beispiel:**

Unter welchen Bedingungen ist der Drehimpuls bei verschwindendem Magnetfeld eine Erhaltungsgröße?

$$\hat{L} = \hat{x} \times \hat{p}$$

Drehimpuls

$$\Rightarrow [H, \hat{L}] = \left[ \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}), \hat{x} \times \hat{p} \right]$$

**Satz**

$$[\hat{p}^2, \hat{x} \times \hat{p}] = 0$$

$$[V(\hat{x}), \hat{x} \times \hat{p}] = -\frac{\hbar}{i} \hat{x} \times \frac{\partial V(\hat{x})}{\partial \hat{x}} := -\frac{\hbar}{i} \hat{x} \times \hat{k}$$

$$\hat{k} := \frac{\partial V(\hat{x})}{\partial \hat{x}}$$

k als Kraftdichteoperator

Falls  $\hat{x} \times \hat{k} = 0 \rightarrow$  Der Drehimpuls ist Erhaltungsgröße. Dies stimmt für Zentralkraftfelder!

**5.4 Energie- zeit- Unschärfe**

**aus 4.4.4**

$$\Delta \hat{L} \Delta \hat{M} \geq \frac{1}{2} |\langle \Phi | [\hat{L}, \hat{M}] | \Phi \rangle|$$

$$\Delta E \equiv \Delta H \geq \sqrt{\langle \Phi | (\hat{H} - E)^2 | \Phi \rangle}$$

$$\Rightarrow \Delta E \Delta \hat{M} \geq \frac{\hbar}{2} |\langle \hat{M}^\circ \rangle|$$

Denn:

$$[H, \hat{M}] = \frac{\hbar}{i} (-\partial_t \hat{M} + \hat{M}^\circ)$$

$$\partial_t \hat{M} = 0$$

da keine explizite Zeitabhängigkeit

$$\Rightarrow [H, \hat{M}] = \frac{\hbar}{i} \hat{M}^\circ$$

$$\Delta E \Delta \hat{M} \geq \frac{\hbar}{2} \left| \frac{d}{dt} \langle \hat{M} \rangle \right|$$

$$\left| \frac{d}{dt} \langle \hat{M} \rangle \right| := \frac{\Delta \hat{M}}{t}$$

Was ist die Zeit  $t$  ?

Sie ist zu interpretieren als die Zeit, die vergehen muss, damit sich die Observable  $\hat{M}$  um ihre Unschärfe  $\Delta \hat{M}$  ändern kann !

Also die zeitliche Änderung der Variable  $\hat{M}$  beim Messprozess ist etwa die gesamte Unschärfe / Änderungszeit um den Betrag dieser gesamten Unschärfe

$$\Delta E \Delta \hat{M} \geq \frac{\hbar}{2} \frac{\Delta \hat{M}}{t}$$

$$\Rightarrow \Delta E t \geq \frac{\hbar}{2}$$

So kommt man zu einer Form der Unschärfe !

## **6. Drehimpuls und Spin !**

### **6.1 Drehimpuls**

#### **6.1.1 Vertauschungsrelationen**

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{x}} \times \hat{\vec{p}}$$

$$\hat{L}_j = \epsilon_{jkl} \hat{r}_k \hat{p}_l$$

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} \text{ ist hermitesch:}$$

$$\hat{L}_j^+ = \epsilon_{jkl} (\hat{r}_k \hat{p}_l)^+ = \epsilon_{jkl} \hat{p}_l^+ \hat{r}_k^+ = \epsilon_{jkl} \hat{p}_l \hat{r}_k = \epsilon_{jkl} \hat{r}_k \hat{p}_l$$

#### **Vertauschungs- relationen:**

$$\begin{aligned} [\hat{L}_1, \hat{L}_2] &= [(\hat{r}_2 \hat{p}_3 - \hat{r}_3 \hat{p}_2), (\hat{r}_3 \hat{p}_1 - \hat{r}_1 \hat{p}_3)] = \hat{r}_2 \hat{p}_3 \hat{r}_3 \hat{p}_1 - \hat{r}_2 \hat{p}_3 \hat{r}_1 \hat{p}_3 - \hat{r}_3 \hat{p}_2 \hat{r}_3 \hat{p}_1 + \hat{r}_3 \hat{p}_2 \hat{r}_1 \hat{p}_3 \\ &\quad - \hat{r}_3 \hat{p}_1 \hat{r}_2 \hat{p}_3 + \hat{r}_3 \hat{p}_1 \hat{r}_3 \hat{p}_2 + \hat{r}_1 \hat{p}_3 \hat{r}_2 \hat{p}_3 - \hat{r}_1 \hat{p}_3 \hat{r}_3 \hat{p}_2 \\ &= \hat{r}_2 \hat{p}_3 \hat{r}_3 \hat{p}_1 - \hat{r}_1 \hat{p}_3 \hat{r}_3 \hat{p}_2 + \hat{r}_3 \hat{p}_2 \hat{r}_1 \hat{p}_3 - \hat{r}_3 \hat{p}_1 \hat{r}_2 \hat{p}_3 = \hat{r}_2 \hat{p}_3 \hat{r}_3 \hat{p}_1 - \hat{r}_2 \hat{p}_3 \hat{r}_3 \hat{p}_1 + \hat{r}_1 \hat{p}_3 \hat{r}_3 \hat{p}_2 - \hat{r}_1 \hat{p}_3 \hat{r}_3 \hat{p}_2 \\ &= \hat{r}_2 [\hat{p}_3, \hat{r}_3] \hat{p}_1 + \hat{r}_1 [\hat{r}_3, \hat{p}_3] \hat{p}_2 = \frac{\hbar}{i} \hat{r}_2 \hat{p}_1 - \frac{\hbar}{i} \hat{r}_1 \hat{p}_2 = i \hbar \hat{L}_3 \end{aligned}$$

Allgemein:  $[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i \hbar \hat{L}_l$  mit (jkl) zyklisch

$$\hat{L}_1 \hat{L}_2 - \hat{L}_2 \hat{L}_1 = i\hbar \hat{L}_3$$

$$\hat{L}_2 \hat{L}_3 - \hat{L}_3 \hat{L}_2 = i\hbar \hat{L}_1$$

$$\hat{L}_3 \hat{L}_1 - \hat{L}_1 \hat{L}_3 = i\hbar \hat{L}_2$$

$$\rightarrow \hat{L} \times \hat{L} = i\hbar \hat{L}$$

Also kann es keine gemeinsamen Eigenvektoren zu je zwei Drehimpulskomponenten geben.

Aber:

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_k] = 0 \quad \text{für } k = 1, 2, 3$$

**Beweis: Übung**

**Merke:**

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_k] = [\hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2 + \hat{L}_3^2, \hat{L}_k]$$

$$[\hat{L}_1^2, \hat{L}_k] = \hat{L}_1 [\hat{L}_1, \hat{L}_k] + [\hat{L}_1, \hat{L}_k] \hat{L}_1$$

Es gibt also gemeinsame Eigenvektoren zu EINEM  $L_k$ , konventionshalber  $\hat{L}_3$  und  $\hat{L}^2$ .

**Definition von Leiteroperatoren (vergl. harmonischer Oszi):**

$$\hat{L}_+ := \hat{L}_1 + i\hat{L}_2 \quad \text{nicht hermitesch}$$

$$\hat{L}_- := \hat{L}_1 - i\hat{L}_2$$

Es gilt vielmehr:

$$(\hat{L}_+)^+ = \hat{L}_-$$

$$(\hat{L}_-)^+ = \hat{L}_+$$

**Vertauschungsrelationen**

$$[\hat{L}_+, \hat{L}_3] = [\hat{L}_1, \hat{L}_3] + i[\hat{L}_2, \hat{L}_3] = -i\hbar \hat{L}_2 - \hbar \hat{L}_1 = -\hbar(\hat{L}_1 + i\hat{L}_2)$$

$$[\hat{L}_+, \hat{L}_3] = -\hbar \hat{L}_+$$

$$[\hat{L}_-, \hat{L}_3] = \hbar \hat{L}_-$$

$L_{\pm}$  Form und adjungierte Form.

Auch dies kann verallgemeinert werden:

$$[(\hat{L}_+)^n, \hat{L}_3] = -n\hbar (\hat{L}_+)^n$$

$$[(\hat{L}_-)^n, \hat{L}_3] = n\hbar (\hat{L}_-)^n$$

Beweis: Durch vollständige Induktion:

Für  $n = 1$  gezeigt. Sei es nun richtig für ein  $n$  größer/gleich 1

Dann:

$$[(\hat{L}_+)^{n+1}, \hat{L}_3] = (\hat{L}_+)^n [\hat{L}_+, \hat{L}_3] + [(\hat{L}_+)^n, \hat{L}_3] \hat{L}_+ = (\hat{L}_+)^n (-\hbar \hat{L}_+) - n\hbar (\hat{L}_+)^n \hat{L}_+ = -(n+1)\hbar (\hat{L}_+)^{n+1}$$

**Weiter gilt:**



$$\hat{L}_+ \hat{L}_- = (\hat{L}_1 + i\hat{L}_2)(\hat{L}_1 - i\hat{L}_2) = \hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2 - i[\hat{L}_1, \hat{L}_2] = \hat{L}^2 - \hat{L}_3^2 + \hbar\hat{L}_3$$

$$\hat{L}_- \hat{L}_+ = \hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2 + i[\hat{L}_1, \hat{L}_2] = \hat{L}^2 - \hat{L}_3^2 - \hbar\hat{L}_3$$

$$\rightarrow [\hat{L}_+, \hat{L}_-] = 2\hbar\hat{L}_3$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_+] = 0$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_-] = 0$$

Mittels  $\hat{L}_+, \hat{L}_-$  gelingt die zerlegung von  $\hat{L}^2$  in mit  $\hat{L}^2$  vertauschbare Operatoren  $\hat{L}_3, \hat{L}_+, \hat{L}_-$ :

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2 + \hat{L}_3^2 = \hat{L}_3^2 + \hat{L}_+ \hat{L}_- - \hbar\hat{L}_3$$

### Merke

$$[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i\hbar\hat{L}_l \text{ mit (jkl) zyklisch}$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_k] = 0 \text{ für } k = 1, 2, 3$$

$$[\hat{L}_+, \hat{L}_-] = 2\hbar\hat{L}_3$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_+] = 0$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_-] = 0$$

mit 1=x, 2=y, 3=z

$$[\hat{L}_+, \hat{L}_3] = -\hbar\hat{L}_+$$

$$[\hat{L}_-, \hat{L}_3] = \hbar\hat{L}_-$$

$$[(\hat{L}_+)^n, \hat{L}_3] = -n\hbar(\hat{L}_+)^n$$

$$[(\hat{L}_-)^n, \hat{L}_3] = n\hbar(\hat{L}_-)^n$$

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2 + \hat{L}_3^2 = \hat{L}_3^2 + \hat{L}_+ \hat{L}_- - \hbar\hat{L}_3 = \frac{1}{2}(\hat{L}_+ \hat{L}_- + \hat{L}_- \hat{L}_+) + \hat{L}_3^2$$

$$\hat{L}_+ \hat{L}_- = \hat{L}^2 - \hat{L}_3^2 + \hbar\hat{L}_3$$

$$\hat{L}_- \hat{L}_+ = \hat{L}^2 - \hat{L}_3^2 - \hbar\hat{L}_3$$

$$\hat{L}_+ := \hat{L}_1 + i\hat{L}_2 \quad \text{nicht hermitesch}$$

$$\hat{L}_- := \hat{L}_1 - i\hat{L}_2$$

$$\hat{L}_1 := \frac{1}{2}(\hat{L}_+ + \hat{L}_-)$$

$$\hat{L}_2 = \frac{1}{2i}(\hat{L}_+ - \hat{L}_-)$$

### Eigenwertproblem

Die gemeinsamen normierten Eigenvektoren  $|a, m\rangle$  von  $\hat{L}^2$  und  $\hat{L}_3$  gehorchen den Eigenwertgleichungen

$$\hat{L}^2 |a, m\rangle = a\hbar^2 |a, m\rangle$$

$$\hat{L}_3 |a, m\rangle = m\hbar |a, m\rangle$$

Da  $\hat{L}$  hermitesch ist, gilt:

$$a\hbar^2 = \langle a, m | \hat{L}^2 | a, m \rangle = \sum_{i=1}^3 \langle a, m | \hat{L}_i^\dagger \hat{L}_i | a, m \rangle$$

$$\langle a, m | \hat{L}_i^\dagger \hat{L}_i | a, m \rangle := \langle \Phi | \Phi \rangle \geq 0$$

$$a\hbar^2 = \langle a, m | \hat{L}^2 | a, m \rangle = \sum_{i=1}^3 \langle a, m | \hat{L}_i^\dagger \hat{L}_i | a, m \rangle \geq \langle a, m | \hat{L}_3^2 | a, m \rangle \geq 0$$

$$\langle a, m | \hat{L}_3^2 | a, m \rangle = m^2 \hbar^2$$

$$\rightarrow a\hbar^2 \geq m^2 \hbar^2 \geq 0$$

**Setze**

$$|a, m\rangle = |u\rangle$$

Betrachte:

$$\hat{L}_3 \hat{L}_\pm |u\rangle = \hat{L}_\pm \hat{L}_3 |u\rangle \pm \hbar \hat{L}_\pm |u\rangle$$

$$[\hat{L}_3, \hat{L}_\pm] = \pm \hbar \hat{L}_\pm$$

$$\hat{L}_3 \hat{L}_\pm |u\rangle = \hat{L}_\pm |u\rangle (m \pm 1) \hbar$$

$$\hat{L}_3 |\hat{L}_\pm u\rangle = (m \pm 1) \hbar |\hat{L}_\pm u\rangle$$

Also:

$\hat{L}_\pm$  sind die Auf- und Absteigeoperatoren im Spektrum von  $L_z$

**Satz:**

$$\hat{L}_3 \left| (\hat{L}_\pm)^q u \right\rangle = (m \pm q) \hbar \left| (\hat{L}_\pm)^q u \right\rangle$$

$$q = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Was machen die  $\hat{L}_\pm$  im Spektrum von  $L^2$  ?

$$\hat{L}^2 \hat{L}_\pm |u\rangle = \hat{L}_\pm \hat{L}^2 |u\rangle$$

$$\hat{L}_\pm \hat{L}^2 |u\rangle = \hat{L}_\pm a \hbar^2 |u\rangle$$

$$\hat{L}^2 |\hat{L}_\pm u\rangle = a \hbar^2 |\hat{L}_\pm u\rangle$$

**Satz:**

$$\hat{L}^2 \left| (\hat{L}_\pm)^q u \right\rangle = a \hbar^2 \left| (\hat{L}_\pm)^q u \right\rangle$$

$$a \hbar^2 \geq m^2 \hbar^2 \geq 0$$

$$\Rightarrow a \geq m^2 \geq 0$$

$$\Rightarrow \sqrt{a} \geq m \geq -\sqrt{a}$$

Das Spektrum von  $\hat{L}_3$  ist nach oben und nach unten beschränkt:

$$a\hbar^2 = \langle a, m | \hat{L}^2 | a, m \rangle = \sum_{i=1}^3 \langle a, m | \hat{L}_i^+ \hat{L}_i | a, m \rangle$$

$$\langle a, m | \hat{L}_i^+ \hat{L}_i | a, m \rangle = \langle \Phi | \Phi \rangle \geq 0$$

$$a\hbar^2 = \langle a, m | \hat{L}^2 | a, m \rangle = \sum_{i=1}^3 \langle a, m | \hat{L}_i^+ \hat{L}_i | a, m \rangle \geq \langle a, m | \hat{L}_3^2 | a, m \rangle \geq 0$$

$$\langle a, m | \hat{L}_3^2 | a, m \rangle = m^2 \hbar^2$$

$$\rightarrow \sqrt{a} \geq m \geq -\sqrt{a}$$

Also existiert ein größter Eigenwert  $m_{\max} = m_0 + n_{\max} \hbar$  und ein kleinster Eigenwert  $m_{\min} = m_0 - k_{\max} \hbar$  mit

$$\hat{L}_+ |a, m_{\max}\rangle = \hat{L}_- |a, m_{\min}\rangle = 0$$

Daraus folgt:

$$0 = \hat{L}_- \hat{L}_+ |a, m_{\max}\rangle = (\hat{L}^2 - \hat{L}_3^2 - \hbar \hat{L}_3) |a, m_{\max}\rangle = (a - m_{\max}^2 - \hbar m_{\max}) \hbar^2 |a, m_{\max}\rangle$$

$$0 = \hat{L}_+ \hat{L}_- |a, m_{\min}\rangle = (\hat{L}^2 - \hat{L}_3^2 + \hbar \hat{L}_3) |a, m_{\min}\rangle = (a - m_{\min}^2 + \hbar m_{\min}) \hbar^2 |a, m_{\min}\rangle$$

Also:

$$a = m_{\max}^2 + \hbar m_{\max} = m_{\min}^2 - \hbar m_{\min}$$

$$\text{Andererseits existiert ein } n \in N_0 \text{ mit } |a, m_{\max}\rangle = (\hat{L}_+)^n |a, m_{\min}\rangle$$

$$\text{Also: } m_{\max} \hbar = m_{\min} \hbar + n \hbar$$

Setzt man dies in  $a\hbar^2 = \hbar^2 m_{\max}^2 + \hbar^2 m_{\max} = \hbar^2 m_{\min}^2 - \hbar^2 m_{\min}$  ein, so folgt:

$$\hbar^2 m_{\min}^2 + 2n\hbar^2 m_{\min} + n^2 \hbar^2 + \hbar(\hbar m_{\min} + n\hbar) = \hbar^2 m_{\min}^2 - \hbar^2 m_{\min}$$

$$2n\hbar^2 m_{\min} + n^2 \hbar^2 + \hbar(2m_{\min} + n\hbar) = 0$$

$$\Rightarrow m_{\min} \hbar = -\frac{n(n+1)\hbar^2}{2(n+1)\hbar} = -\frac{n}{2} \hbar =: -l\hbar$$

mit

$$l := \frac{n}{2}, n \text{ ganzzahlig}$$

Somit:

$$a\hbar^2 = \hbar^2 m_{\min} (m_{\min} - \hbar) = (-l)(-l-1)\hbar^2$$

$$a = l(l+1)$$

$$m_{\max} \hbar = m_{\min} \hbar + 2l\hbar = l\hbar$$

$$m_{\min} \hbar = -l\hbar$$

**Mögliche Eigenwerte von  $\hat{L}^2$ :**  $a\hbar^2 = l(l+1)\hbar^2$

$$n \in N$$

$$\Rightarrow l = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$$

Mögliche Eigenwerte von  $\hat{L}_3$  für festes l:

$$m\hbar$$

mit

$$m = -l, -l+1, -l+2, \dots, l-2, l-1, l$$

$m=-1 \rightarrow$  gehört zu  $b_{\min}$   
 $m=+1 \rightarrow$  gehört zu  $b_{\max}$

Es können keine weiteren Eigenwerte von  $\hat{L}_3$  zwischen diesen Werten liegen, weil man sonst durch wiederholte Anwendung von  $\hat{L}_+$  bzw.  $\hat{L}_-$  die Schranken  $|m| \leq l$  verletzen könnte.

Zu jedem  $l$  gibt es  $2l + 1$  Werte von  $m$ :

Dies entspricht der energetisch gleichen  $2l + 1$ -fachen Richtungsentartung von  $\hat{L}^2$

Tabelle:

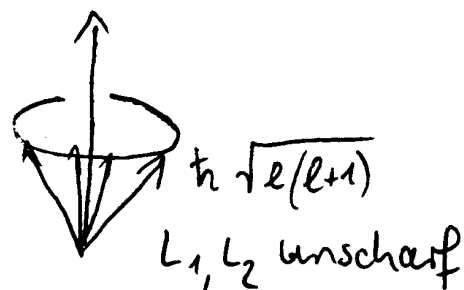
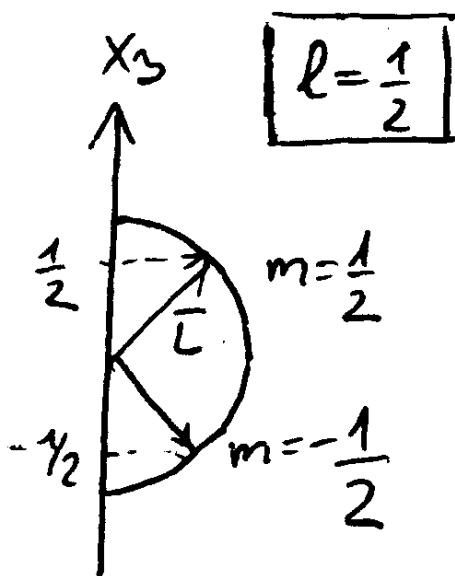
Quantenzahlen	Eigenwert von $\hat{L}$	Richtungsquantenzahl $m$
1	$\hbar\sqrt{l(l+1)}$	$m$
0	0	0
$\frac{1}{2}$	$\hbar\sqrt{\frac{3}{4}}$	$-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$
1	$\hbar\sqrt{2}$	$-1, 0, 1$
$\frac{3}{2}$	$\hbar\sqrt{\frac{15}{4}}$	$-\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$

$$\hat{L}^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle$$

$$\hat{L}_3 |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle$$

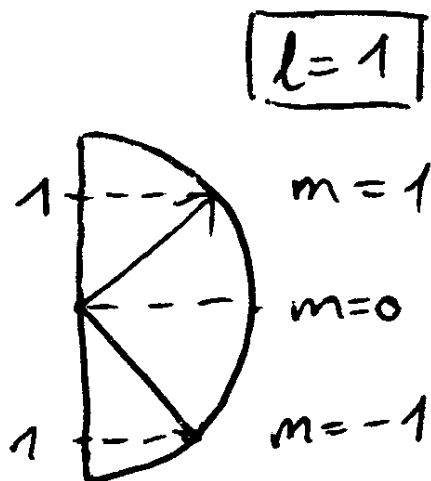
**Diracsches Vektormodell:**

**Darstellung der Richtungsquantisierung:**



$m=1/2 \rightarrow$  Der Drehimpuls steht parallel zur  $x_3$ -Achse

$m=-1/2 \rightarrow$  der Drehimpuls steht antiparallel zur  $x_3$ -Achse



Zur Übung ist zu zeigen:

$$\langle l, m | \hat{L}_i | l, m \rangle = 0 \text{ für } i=1,2$$

$$\langle l, m | (\hat{L}_i - \langle \hat{L}_i \rangle)^2 | l, m \rangle = 0 \text{ soll berechnet werden}$$

**Nebenbemerkung:** Die Drehimpulsquantisierung ist eine Folge der Nichtvertauschbarkeit der einzelnen Komponenten des Drehimpulses !

### Ortsdarstellung des Bahndrehimpulses

$$\langle \vec{r} | \hat{p} | l, m \rangle = \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi_{lm}(\vec{r})$$

$$\langle \vec{r} | \vec{r} | l, m \rangle = \vec{r} \Psi_{lm}(\vec{r})$$

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}$$

ergibt:

$$\langle \vec{r} | \hat{L}_3 | l, m \rangle = \frac{\hbar}{i} (\hat{x}_1 \partial_2 - \hat{x}_2 \partial_1) \Psi_{lm}(\vec{r}) = \hbar m \Psi_{lm}(\vec{r})$$

In Kugelkoordinaten:

$$x_1 = r \sin \theta \cos \phi$$

$$x_2 = r \sin \theta \sin \phi$$

$$x_3 = r \cos \theta$$

$$x_1 \partial_2 - x_2 \partial_1 = \frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$\Rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \Psi_{lm}(r, \theta, \phi) = \hbar m \Psi_{lm}(r, \theta, \phi) \text{ Eigenwertgleichung für } \hat{L}_3.$$

**Lösung**

$$\Psi_{lm}(r, \theta, \phi) = e^{im\phi} f_{lm}(r, \theta)$$

$$m = -l, \dots, l$$

Eindeutigkeit:

$$e^{im\phi} = e^{im(\phi + 2\pi)}$$

$$\Rightarrow m \in \mathbb{Z}$$

$\Rightarrow$  Für Bahndrehimpulse sind nur GANZZAHLIGE l-WERTE zulässig.

**Leiteroperatoren:**

$$\langle \bar{r} | \hat{L}_{\pm} | l, m \rangle = \frac{\hbar}{i} (\hat{x}_2 \partial_3 - \hat{x}_3 \partial_2 \pm i \hat{x}_3 \partial_1 \mp i \hat{x}_1 \partial_3) \Psi_{lm}(\bar{r}) = \hbar e^{\pm i j} \left( \pm \frac{\partial}{\partial J} + i \cot J \frac{\partial}{\partial j} \right) \Psi_{lm}(r, J, j)$$

$$\hbar e^{\pm i j} \left( \pm \frac{\partial}{\partial J} + i \cot J \frac{\partial}{\partial j} \right) \Psi_{lm}(r, J, j) = \hbar e^{i(m \pm 1)j} \left( \pm \frac{\partial}{\partial J} - m \cot J \right) f_{lm}(r, J)$$

Für  $m=l$  (Maximalwert) ist

$$\hat{L}_+ |l, l\rangle = 0$$

$$\Rightarrow \hbar e^{i(l+1)j} \left( \frac{\partial}{\partial J} - l \cot J \right) f_{ll}(r, J) = 0$$

**Lösung:**

$$\int \frac{df_{ll}(r, J)}{f} = l \int \cot J dJ$$

$$f_{ll}(r, J) = (-1)^l \sqrt{\frac{(2l+1)!}{2}} \frac{1}{2^l l!} (\sin J)^l R_{ll}(r)$$

Mit dem Normierungsfaktor

$$\sqrt{\frac{(2l+1)!}{2}} \frac{1}{2^l l!}$$

Erzeugung der anderen  $f_{lm}(r, J)$ :

$$\Psi_{l, l-1}(\bar{r}) \propto \langle \bar{r} | \hat{L}_- | ll \rangle = \hbar e^{i(l-1)j} \left( -\frac{\partial}{\partial J} - l \cot J \right) f_{ll}(r, J) = \hbar e^{i(l-1)j} (\sin J)^{l-1} \frac{\partial}{\partial \cos J} [(\sin J)^l f_{ll}(r, J)]$$

**Normierung:**

$$\Psi_{l, m}(r, J, j) = R_{lm}(r) Y_l^m(J, j)$$

Mit den Kugelflächenfunktionen

$$Y_l^m(J, j) = \frac{e^{imj}}{\sqrt{2p}} \cdot \frac{(-1)^m}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!}} \frac{1}{(\sin J)^m} \frac{d^{l-m}}{d(\cos J)^{l-m}} (\sin J)^{2l}$$

$$Y_l^m(J, j) = \frac{e^{imj}}{\sqrt{2p}} \cdot (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!}} P_l^m(\cos J)$$

Wobei

$$P_l(x) := \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{(dx)^l} (x^2 - 1)^l \text{ Legendre- Polynom l- ten Grades}$$

$$P_l^m(x) := (1 - x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{(dx)^m} P_l(x) \text{ zugeordnetes Legendre- Polynom}$$

Dabei variiert die Definition in der Literatur je nach Wahl der Phase

Die Kugelflächenfunktionen sind orthonormiert

$$\int_0^{2\pi} d\mathbf{j} \int_0^{\pi} dJ \sin J [Y_l^m(\mathbf{J}, \mathbf{j})]^* Y_l^{m'}(\mathbf{J}, \mathbf{j}) = \mathbf{d}_{ll'} \mathbf{d}_{mm'}$$

Dies ist ein vollständiges Orthonormalsystem, nach dem sich alle Funktionen auf der Einheitskugel entwickeln lassen:

$$F(\mathbf{J}, \mathbf{j}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l c_l^m Y_l^m(\mathbf{J}, \mathbf{j})$$

Eine weitere Eigenschaft der Kugelflächenfunktionen:

$$Y_l^{m*}(\mathbf{J}, \mathbf{j}) = (-1)^m Y_l^{-m}$$

Die Inversion am Ursprung liefert: ( also:  $\bar{r} \rightarrow -\bar{r}$  ), also  $(\mathbf{J}, \mathbf{j}) \rightarrow (\mathbf{p} - \mathbf{J}, \mathbf{j} + \mathbf{p})$  :

$$Y_l^m(\mathbf{p} - \mathbf{J}, \mathbf{j} + \mathbf{p}) = (-1)^l Y_l^m(\mathbf{J}, \mathbf{j})$$

Fazit: Die Bahndrehimpuls Eigenzustände  $|l, m\rangle$  haben die Parität  $(-1)^l$

Eigenfunktion	Knotenlinien von $\text{Re}\{Y_l^m\}$	l	m	Bemerkungen
$Y_0^0 = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$	0	0	0	gerade (s-Orbitale)
$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos J$	1	1	0	ungerade (p-Orbitale)
$Y_1^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin J e^{\pm i j}$	1	1	$\pm 1$	ungerade (ebenfalls p-Orb.) $\Psi_{P_x} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin J \cos j$ $\Psi_{P_y} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin J \sin j$
$Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 J - 1)$	2	2	0	gerade (d-Orbitale)
$Y_2^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin J \cos J e^{\pm i j}$	2	2	$\pm 1$	gerade (d-Orbitale)
$Y_2^{\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 J e^{\pm 2 i j}$	2	2	$\pm 2$	gerade (d-Orbitale)

#### Keine Knotenlinie

$$Y_0^0 = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$$



#### Eine Knotenlinie

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos J$$



$$Y_1^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin J e^{\pm i j}$$



**Zwei Knotenlinien**

$$Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16p}} (3 \cos^2 J - 1)$$



$$Y_2^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{8p}} \sin J \cos J e^{\pm ij}$$

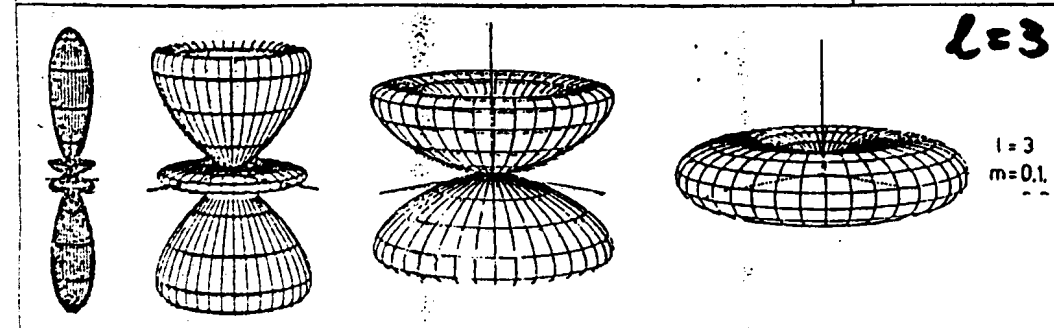
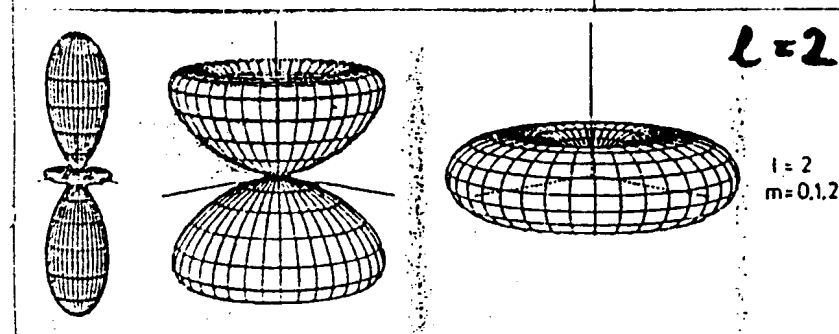
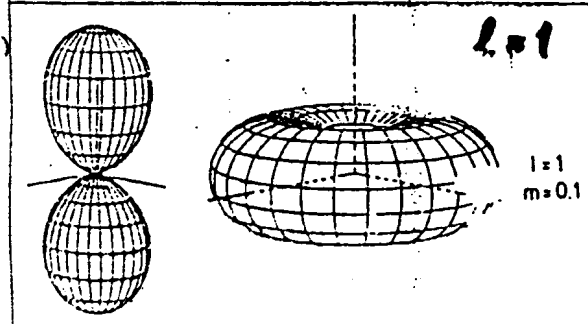
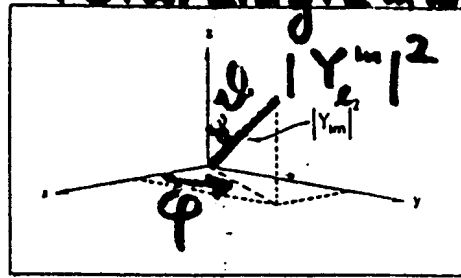
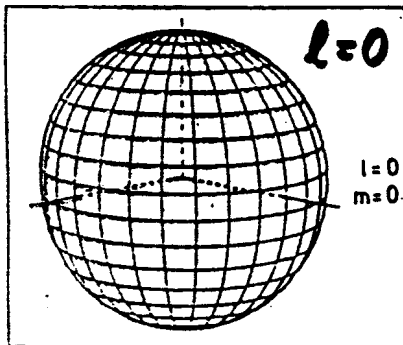


$$Y_2^{\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32p}} \sin^2 J e^{\pm 2ij}$$





# Polardiagramm:



Kleiner Einwurf

Vorlesung 08.01.2003



### Vorlesung 08.01.2003

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{x}} \times \hat{\vec{p}}$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_k] = 0$$

$$\hat{L}^2 |u^M_J\rangle = J(J+1)\hbar^2 |u^M_J\rangle$$

folgt alleine aus dem Virialtheorem

$$\hat{L}_z |u^M_J\rangle = m\hbar |u^M_J\rangle$$

Dabei indiziert m den Entartungsgrad der Drehimpulslänge, nämlich versteckt als Möglichkeiten, diese Länge entlang z auszurichten (vergl. Diracsches vektormodell)

$$J = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$$

$$M = J, J-1, \dots, -J+1, -J$$

Der Entartungsgrad ist gerade  $2J+1$  (Potenzialunabhängig)

### **Merke**

$$[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i\hbar \hat{L}_l \text{ mit (jkl) zyklisch}$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_k] = 0 \text{ für } k = 1, 2, 3$$

$$[\hat{L}_+, \hat{L}_-] = 2\hbar \hat{L}_3$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_+] = 0$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_-] = 0$$

mit 1=x, 2=y, 3=z

$$[\hat{L}_+, \hat{L}_3] = -\hbar \hat{L}_+$$

$$[\hat{L}_-, \hat{L}_3] = \hbar \hat{L}_-$$

$$[(\hat{L}_+)^n, \hat{L}_3] = -n\hbar (\hat{L}_+)^n$$

$$[(\hat{L}_-)^n, \hat{L}_3] = n\hbar (\hat{L}_-)^n$$

### **Drehoperator**

$$\hat{R}(\mathbf{a}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{a} \cdot \hat{\vec{L}}}$$

$$\hat{\vec{x}} |\mathbf{j}(\bar{x})\rangle = \bar{x} |\mathbf{j}(\bar{x})\rangle$$

speziell

$$\bar{x} = (0, 0, 2)$$

$$|\mathbf{j}((0, 0, 2))\rangle = \sum_{\substack{J \\ \text{Ganz}}} c_J |u_J^0\rangle$$

$$\hat{L}_3 |\mathbf{j}((0, 0, 2))\rangle = (\hat{x}_1 \hat{p}_2 - \hat{x}_2 \hat{p}_1) |\mathbf{j}((0, 0, 2))\rangle$$

Sei

$$\hat{R}(\mathbf{a}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{L}}}$$

$$\hat{x}_0 |\mathbf{j}(\bar{x})\rangle = \bar{x}_0 |\mathbf{j}(\bar{x})\rangle$$

$$\Rightarrow \hat{R}(\mathbf{a}) \hat{x}_0 |\mathbf{j}(\bar{x})\rangle = \bar{x}_0 |\hat{R}(\mathbf{a}) \mathbf{j}(\bar{x})\rangle$$

$$\Rightarrow \hat{R}(\mathbf{a}) \hat{x}_0 \hat{R}(\mathbf{a})^{-1} |\hat{R}(\mathbf{a}) \mathbf{j}(\bar{x})\rangle = \bar{x}_0 |\hat{R}(\mathbf{a}) \mathbf{j}(\bar{x})\rangle$$

$$\hat{R}(\mathbf{a}) \hat{x}_0 \hat{R}(\mathbf{a})^{-1} := \hat{x}$$

$$|\hat{R}(\mathbf{a}) \mathbf{j}(\bar{x})\rangle := |\mathbf{j}(\bar{x}_0)\rangle$$

$$\hat{x} |\mathbf{j}(\bar{x}_0)\rangle = \bar{x}_0 |\mathbf{j}(\bar{x}_0)\rangle$$

Man sagt

$\bar{x}_0$  aus  $\bar{x}$  durch Drehung erzeugt !

$$\bar{x}_0 = \bar{Q} \bar{x}$$

$$\bar{Q} \bar{Q}^T = \bar{Q}^T \bar{Q} = \bar{1}$$

**Satz von Euler-DAlembert**

$$\bar{\mathbf{a}} = \mathbf{a} \bar{\mathbf{a}}_0$$

mit dem Winkel  $\mathbf{a}$  und der Drehachse  $\bar{\mathbf{a}}_0$ .

Spezielle Erzeugung durch Drehung von  $|\mathbf{j}((0,0,2))\rangle$ :

$$\hat{R}(\mathbf{a}) |\mathbf{j}((0,0,2))\rangle = |\mathbf{j}(\bar{x})\rangle$$

$$\bar{x} = (0,0,2)$$

$$|\mathbf{j}(\bar{x})\rangle = \sum_{\substack{J \\ \text{Ganz}}} c_J^0 \hat{R}(\mathbf{a}) |u_J^0\rangle$$

mit

$$\hat{R}(\mathbf{a}) |u_J^M\rangle = \sum_{M'} \hat{R}_J^{MM'}(\bar{\mathbf{a}}) |u_J^{M'}\rangle$$

$$|\mathbf{j}(\bar{x})\rangle = \sum_{\substack{J \\ \text{Ganz}}} c_J^0 \sum_{M'} \hat{R}_J^{0M'}(\bar{\mathbf{a}}) |u_J^{M'}\rangle$$

Dieses Ziel wurde erreicht durch Ausgehen von einem beliebigen  $\bar{x} = (0,0,2)$  ( hier !)

Zu einem beliebigen  $\bar{x}'$  kommt man dann immer alleine durch Wahl des richtigen Drehoperators.

**Ganzzahlige J reichen uns nun also, um eine Basis  $\{|\mathbf{j}(\bar{x})\rangle\}$  darzustellen.**

Was bedeuten dann jedoch halbzahlige J ?

➔ Spin !

( siehe später=)

bisher:  $l=0,1,2,3$ , entspricht  $l=s,p,d,f$ , ( historisch)

### Ortsdarstellung

$$\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p} = \hat{r} \times \frac{\hbar}{i} \nabla = \begin{pmatrix} y\partial_z - z\partial_y \\ z\partial_x - x\partial_z \\ x\partial_y - y\partial_x \end{pmatrix} \frac{\hbar}{i}$$

$$\hat{L}_z = (x\partial_y - y\partial_x) \frac{\hbar}{i}$$

$$\hat{L}_{\pm} = (y\partial_z - z\partial_y) \frac{\hbar}{i} \pm i(z\partial_x - x\partial_z) \frac{\hbar}{i} = \frac{\hbar}{i} [(y \mp ix)\partial_z - z(\partial_y \mp i\partial_x)]$$

In Kugelkoordinaten:

$$x_1 = r \sin J \cos j$$

$$x_2 = r \sin J \sin j$$

$$x_3 = r \cos J$$

$$x_1\partial_2 - x_2\partial_1 = \frac{\partial}{\partial j} = -r \sin J \sin j \partial_x + r \sin J \cos j \partial_y$$

$$\frac{\partial}{\partial J} = r \cos J \cos j \partial_x + r \cos J \sin j \partial_y - r \sin J \partial_z$$

$$\hat{L}_z = (x\partial_y - y\partial_x) \frac{\hbar}{i} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial j}$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin J} \frac{\partial}{\partial J} \left( \sin J \frac{\partial}{\partial J} \right) + \frac{1}{\sin^2 J} \frac{\partial^2}{\partial j^2} \right]$$

➔ Kugelflächenfunktionen ( Legendre- Polynome)

### 6.3 Kugelsymmetrische Hamiltonoperatoren

Zentralkräfte:

$$\hat{L} = 0 \Rightarrow [H, \hat{L}] = 0$$

Beispiele:

$V_0 = \text{const}$

freies Teilchen

$$\frac{Q_1 Q_2}{r}$$

Coulomb

$$g^2 \frac{e^{-\frac{r}{r_0}}}{r}$$

Yukawa ( starke Kernkraft)

$$-V_0 \Theta(r_0 - r)$$

Potenzialtopf

$$\frac{1}{2} m \omega^2 r^2$$

Oszillator

### Lösung der Schrödingergleichung durch Separationsansatz:

$$H|\mathbf{j}_k\rangle = E_k|\mathbf{j}_k\rangle$$

$$\langle \mathbf{j}(\bar{x}) | \mathbf{j}_k \rangle = j_k(r, \mathbf{J}, \mathbf{j})$$

$$\Psi(r, \mathbf{J}, \mathbf{j}) = R(r)Y(\mathbf{J}, \mathbf{j})$$

mit

$$L^2 Y(\mathbf{J}, \mathbf{j}) = \hbar^2 l(l+1) Y(\mathbf{J}, \mathbf{j})$$

Also:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (rR) + \frac{R}{2mr^2} (L^2 Y) + Y(V(r) - E)R = 0$$

$$L^2 Y = \hbar^2 l(l+1) Y$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (rR) + \frac{R}{2mr^2} (\hbar^2 l(l+1) Y) + Y(V(r) - E)R = 0$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} (rR) + \left( \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) - E \right) (rR) = 0$$

Dabei wird  $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$  analog zur klassischen mechanik als Zentrifugalpotenzial bezeichnet

Im Endeffekt können wir von einer radialen Schrödingergleichung mit einem effektiven Potenzial sprechen:

$$V_{\text{eff.}} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r)$$

### **Bindungszustände im anziehenden Zentralpotenzial:**

$$\text{Sei } \lim_{r \rightarrow 0} |V(r)| \leq \frac{M}{r^a} \text{ mit } a < 2$$

Also: dominiere das Zentrifugalpotenzial gegenüber  $V$  für  $r \rightarrow 0$ ,  
so gilt:

Es existieren für ein anziehendes Potenzial  $V(r)$ , also negatives Potenzial wie im 1dimensionalen Fall grundsätzlich endlich oder unendlich viele gebundene Zustände.

Dabei existiert eine Serie  $E_{nl}$   $n=0,1,2,3,\dots$  usw... zu jedem  $l$

Jeder Zustand ist dabei bezüglich  $m$  ( $m=-l,\dots,+l$ )  $2l+1$  fach entartet.

Also: es existieren endlich oder unendlich viele  $E_{nl}$  zu jedem  $l$  mit jeweils  $2l+1$  facher Entartung.

Voraussetzung: Am Ursprung muss die Zentrifugalbarriere dominieren !

### **Zusammenfassung Kugelsymmetrische Potenziale:**

Jeweils vertauschbar sind:

$$L^2 \text{ mit } L_j, H$$

und

$$H \text{ mit } L^2, L_j.$$

Also existieren gemeinsame Eigenzustände zu  $H, L^2, L_3$ . Es ist möglich, einen Operator, z.B. den Hamiltonian durch diese Größen auszudrücken

Wir haben jedoch gesehen, dass

$$[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i\hbar \epsilon_{jkl} \hat{L}_l \Leftrightarrow \hat{L} \times \hat{L} = i\hbar \hat{L}$$

Wir haben als Leiteroperatoren:

$$\hat{L}_+ := \hat{L}_1 + i\hat{L}_2 \quad \text{nicht hermitesch}$$

$$\hat{L}_- := \hat{L}_1 - i\hat{L}_2$$

mit  $\hat{L}_\pm |l, m\rangle \sim |l, m \pm 1\rangle$  nicht hermitesch. Es handelt sich also um Leiteroperatoren für die magnetische Quantenzahl.

$$\Rightarrow \hat{L}^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle$$

$$\hat{L}_3 |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle$$

$$\Rightarrow l = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots$$

$$m = -l, -l+1, \dots, l$$

Der Bahndrehimpulsoperator kann zusammengesetzt werden:

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}$$

Das Spektrum ist einzuschränken:

$$\Rightarrow l = 0, 1, 2, \dots$$

$$m = -l, -l+1, \dots, l$$

Schließlich kann eine Wellenfunktion in der Ortsdarstellung angegeben werden:

$$\langle \hat{\vec{r}} | nlm \rangle = \Psi_{nlm} = \Psi(r, \mathbf{J}, \mathbf{j}) = R_{nl}(r) Y_l^m(\mathbf{J}, \mathbf{j})$$

als Separationsansatz.

Direkt aus der Existenz gemeinsamer Eigenzustände zu  $H, L^2, L_3$  kann man den Hamiltonian zusammenstellen:

$$\begin{aligned} H\Psi &= \left( \frac{p^2}{2m} + V(r) \right) \Psi = \left( \frac{(\vec{r} \cdot \vec{p}) \left[ (\vec{r} \cdot \vec{p}) + \frac{\hbar}{i} \right]}{2mr^2} + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r) \right) \Psi \\ &= H\Psi = \frac{1}{2m} \left[ -\frac{\hbar^2}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r\Psi) \right] + \frac{L^2}{2mr^2} \Psi + V(r) \Psi \\ &\quad - \frac{\hbar^2}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r\Psi) = p_r^2 \end{aligned}$$

Dabei:

$$p_r^2 \neq \frac{(\vec{r} \cdot \vec{p})^2}{r^2} \quad (\text{klassisch})$$

Es ergibt sich die Schrödingergleichung:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} (rR) + \left( \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) - E \right) (rR) = 0$$

als radiale Schrödingergleichung mit dem Zentrifugalpotenzial  $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$

und dem effektiven Potenzial  $V_{eff.}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$

Der Separationsansatz liefert den Zustand als Produkt:

$$\langle \hat{r} | nlm \rangle = \Psi_{nlm}(\bar{r}) = \Psi(r, \mathbf{J}, \mathbf{j}) = R_{nl}(r) Y_l^m(\mathbf{J}, \mathbf{j}) = \frac{u_{nl}(r)}{r} Y_l^m(\mathbf{J}, \mathbf{j})$$

$$R_{nl}(r) = \frac{u_{nl}(r)}{r}$$

Aus der Normierbarkeit

$$\int d^3r |\Psi_{nlm}|^2 = \int d\Omega |Y_l^m(\mathbf{J}, \mathbf{j})|^2 \int_0^\infty r^2 \left| \frac{u_{nl}(r)}{r} \right|^2 = \int d\Omega |Y_l^m(\mathbf{J}, \mathbf{j})|^2 \int_0^\infty |u_{nl}(r)|^2 < \infty$$

folgt:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} |u_{nl}(r)| \leq \frac{a}{r^e}$$

$$\text{mit } e > \frac{1}{2}$$

Asymptotisches Verhalten für  $r \rightarrow \infty$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} u = Eu$$

$$\Rightarrow u \sim e^{-kr}$$

$$k := \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(-E)}$$

Verhalten für  $r \rightarrow 0$ :

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] u = 0$$

Ansatz:  $u(r) \sim r^s$ :

$$-s(s-1) + l(l+1) = 0$$

$$\Rightarrow s_1 = l+1; s_2 = -l$$

Jedoch ist  $s_2 = -l$  nicht zulässig, da  $R(r) \sim r^{-l-1}$  singulär an der Stelle  $r=0$

. Es ist notwendig, dass  $\lim_{r \rightarrow 0} u(r) = 0$

**Nebenbemerkung:**

Für  $l=0$  ist die radiale Schrödingergleichung



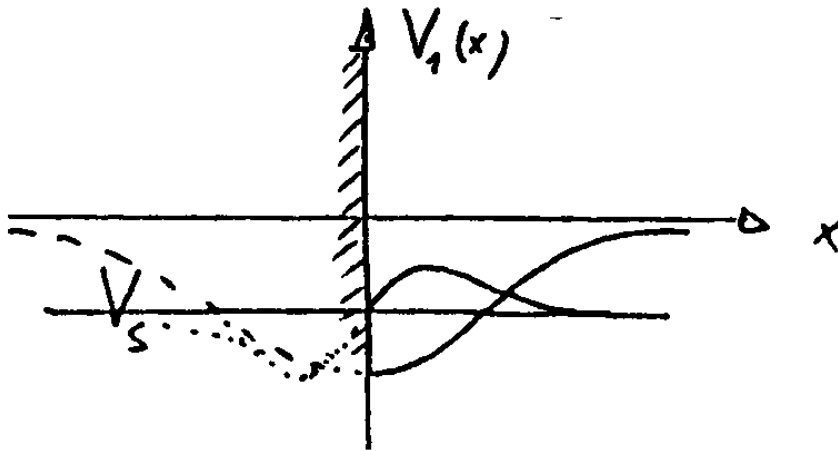
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} u + (V(r) - E)u = 0 \text{ mit } u(0) = 0 \text{ äquivalent zur eindimensionalen Schrödingergleichung mit}$$

$$V_1(x) = V(x) \text{ für } x > 0$$

Vergleiche: Harmonischer Oszi !

$$V_1(x) = \infty \text{ für } x \leq 0$$

Symmetrische Fortsetzung des Potentials  $V_s$ :



Nur die antisymmetrischen Eigenzustände von  $V_s$  sind auch Eigenzustände von  $V_1$

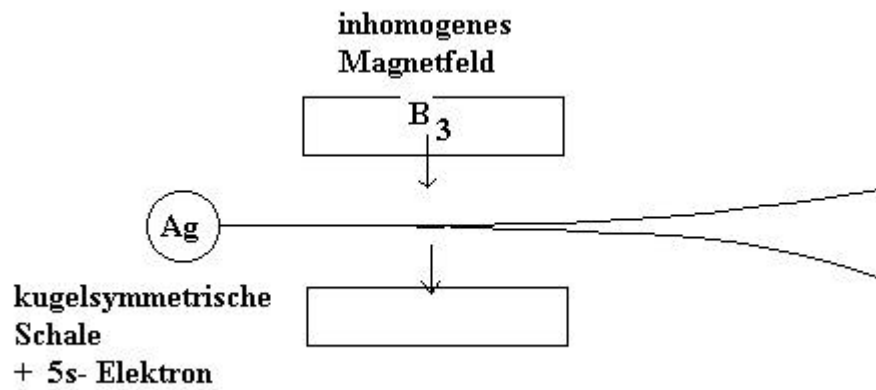
Fazit: Der Grundzustand von  $V_1$  entspricht dem ersten angeregten Zustand von  $V_s$  (radialsymmetrisches Potenzial der Schrödingergleichung).

Es gilt: Das eindimensionale symmetrische Potenzial besitzt mindestens einen Bindungszustand !  
Dreidimensionale Potenziale besitzen dagegen nicht immer Bindungszustände.

## 6.4 Spin

### 6.4.1 Experimentelles

**Stern- Gerlach Experiment: 1922:**



Für das inhomogene Magnetfeld gilt:  $\nabla B_3 \perp \text{Strahl}$

Die Kraft auf das magnetische Moment ergibt sich gemäß

$$\vec{F} = \nabla(\vec{m}_3 B_3) = \vec{m}_3 \nabla B_3$$

Somit: Ablenkung parallel zu  $\mu_B$  !!

Bahndrehimpuls  $l$  ergäbe  $2l + 1$ -fache Strahlaufspaltung (also in jedem Fall ungeradzahlige Strahlaufspaltung)  
beobachtet wurde zweifache Aufspaltung !!

$\Rightarrow \vec{m} \sim \vec{S}$  Eigendrehimpuls (Spin) des Elektrons !

Stern-gerlach mit  
Wasserstoffatomen

Im s- Zustand ( $l=0$ )  
Grundzustand  $\rightarrow m=0$

Man erwartete für einen Wasserstoffstrahl in einem Feld parallel zur z- Achse demnach keine Aufspaltung.  
Dies war jedoch ein Irrtum.  
Stattdessen spaltete der Atomstrahl in 2 Strahlen auf !

Der Zustand ist also zweifach entartet.  
Demnach kann  $J=0$  nicht sein, sondern:

$$(2J + 1) = 2 \Rightarrow J = \frac{1}{2}$$

Lösung:

Erweiterung des Hilbertraumes und Zusammentensorierung !

1. Problem: Halbzahligkeit
2. Problem: widerspruchsfreie tensorierung der teilträume

$$J = \frac{1}{2}$$

$$\Rightarrow m = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$$

#### **6.4.2 Spinraum**

Der Spinraum ist ein zweidimensionaler unitärer Hilbertraum

$$U_S$$

$$U_{ges.} = U \otimes U_S$$

$$\hat{L}_- > \hat{S}$$

Spinoperator !

$$J = \frac{1}{2}$$

$$\Rightarrow m_s = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$$

$$\hat{S}^2 |u^\pm\rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 |u^\pm\rangle$$

$$\hat{S}_z |u^\pm\rangle = \pm \frac{1}{2} \hbar |u^\pm\rangle$$

**Es gilt zu den Stufenoperatoren**

$$\hat{S}_\pm = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y$$

**Es gilt ( kann mittels des verwendeten gezeigt werden, vergl. Drehimpuls):**

$$\hat{L}_\pm |u^m_J\rangle = \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} \hbar |u^{m \pm 1}_J\rangle$$

allgemein für Drehimpulsoperatoren

$$\hat{S}_+ |u^+\rangle = 0$$

$$\hat{S}_+ |u^-\rangle = \hbar |u^+\rangle$$

$$\hat{S}_- |u^-\rangle = 0$$

$$\hat{S}_- |u^+\rangle = \hbar |u^-\rangle$$

$$\langle u^\pm | u^\pm \rangle = 1$$

$$\langle u^\pm | u^\mp \rangle = 0$$

## Matrizelemente der Spinoperatoren

sz- Darstellung

$$\langle u^m | \hat{S}_+ | u^{m'} \rangle = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\langle u^m | \hat{S}_- | u^{m'} \rangle = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\langle u^m | \hat{S}_x | u^{m'} \rangle = \langle u^m | \frac{1}{2} (\hat{S}_+ + \hat{S}_-) | u^{m'} \rangle = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\langle u^m | \hat{S}_y | u^{m'} \rangle = \langle u^m | \frac{i}{2} (\hat{S}_- - \hat{S}_+) | u^{m'} \rangle = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\langle u^m | \hat{S}_z | u^{m'} \rangle = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

## Pauli- Spinmatrizen

$$\hat{\mathbf{S}}_i := \frac{2}{\hbar} \hat{S}_i$$

$$(\hat{\mathbf{S}}_1)_{ab} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$(\hat{\mathbf{S}}_2)_{ab} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$(\hat{\mathbf{S}}_3)_{ab} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Relationen:

$$\hat{S}_\pm^2 = 0$$

$$\hat{S}_x^2 = \hat{S}_y^2 = \hat{S}_z^2 = \frac{1}{4} \hbar^2 \mathbb{1}$$

$$\hat{\mathbf{S}}_1 \hat{\mathbf{S}}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} = i \hat{\mathbf{S}}_3$$

$$\hat{\mathbf{S}}_2 \hat{\mathbf{S}}_1 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = -i \hat{\mathbf{S}}_3$$

$$\Rightarrow [\hat{\mathbf{S}}_1, \hat{\mathbf{S}}_2] = 2i \hat{\mathbf{S}}_3$$

und zyklisch vertauschbar

$$\hat{\mathbf{S}}_1 \hat{\mathbf{S}}_2 = -\hat{\mathbf{S}}_2 \hat{\mathbf{S}}_1$$

$$[\hat{\mathbf{S}}_1, \hat{\mathbf{S}}_2] = 2\hat{\mathbf{S}}_1 \hat{\mathbf{S}}_2$$

$$\Rightarrow \hat{\mathbf{S}}_1 \hat{\mathbf{S}}_2 = i \hat{\mathbf{S}}_3$$

und zyklisch vertauschbar

### Summary nur für Pauli- Matrizen ( leichter zu merken)

$$\hat{\mathbf{S}}_1^2 + \hat{\mathbf{S}}_2^2 + \hat{\mathbf{S}}_3^2 = \overline{1}$$

$$[\hat{\mathbf{S}}_1, \hat{\mathbf{S}}_2] = 2i\hat{\mathbf{S}}_3 \quad u.zyklisch$$

$$\{\hat{\mathbf{S}}_1, \hat{\mathbf{S}}_2\} = 0 \quad u.zyklisch$$

$$\hat{\mathbf{S}}_1\hat{\mathbf{S}}_2 = -\hat{\mathbf{S}}_2\hat{\mathbf{S}}_1 = i\hat{\mathbf{S}}_3 \quad u.zyklisch$$

$$\hat{\mathbf{S}}_1\hat{\mathbf{S}}_2\hat{\mathbf{S}}_3 = i\overline{1}$$

$$Sp(\hat{\mathbf{S}}_i) = 0$$

$$Det(\hat{\mathbf{S}}_i) = -1$$

### Tensorierte Räume

Gesamtraum:  $U \otimes V$

Es gilt:

$$U : \{|e_k\rangle\} \dim : N$$

$$V : \{|E_l\rangle\} \dim : n$$

Tensoriert:

$$U \otimes V : \{|e_k\rangle \otimes |E_l\rangle\}$$

$$a|e_k E_l\rangle = |ae_k E_l\rangle$$

$$\langle e_{k'} E_{l'} | e_k E_l \rangle = d_{kk'} d_{ll'}$$

$$\dim U \otimes V : nN$$

Direkte Summe

$$U \oplus V : \{|e_k\rangle \oplus |E_l\rangle\}$$

$$a|e_k \oplus E_l\rangle = |ae_k \oplus aE_l\rangle$$

$$\langle e_{k'} \oplus E_{l'} | e_k \oplus E_l \rangle = d_{kk'} + d_{ll'}$$

$$\dim U \oplus V : n + N$$

### Die Erweiterung um den Spanteil

$$|\Phi\rangle = |j\rangle |s\rangle$$

$$|j\rangle \in U$$

$$|s\rangle \in U_s$$

mit  $|j\rangle$  spinfrei und  $|s\rangle$  = reiner Spinanteil

$$\langle \Psi | \Phi \rangle = \langle y | \langle v | j \rangle | s \rangle = \langle y | j \rangle \langle v | s \rangle$$

Distributivgesetz:

$$|j\rangle |u\rangle + |j\rangle |v\rangle = |j\rangle |u+v\rangle$$

Entwicklungssatz:

$$|\Phi\rangle = \sum_{k,j} a_{kj} |j_k\rangle |u_j\rangle$$

Wirkung von Operatoren:

$$(\hat{A} \otimes \hat{B})|\mathbf{j} \otimes s\rangle = |\hat{A}\mathbf{j} \otimes \hat{B}s\rangle$$

$$|\mathbf{j}\rangle \in U$$

$$|s\rangle \in U_s$$

$$(\hat{A} \otimes \hat{B})|\mathbf{j}\rangle|s\rangle = |\hat{A}\mathbf{j}\rangle|\hat{B}s\rangle$$

$$|\mathbf{j}\rangle \in U$$

$$|s\rangle \in U_s$$

**Vollständigkeitsrelation**

$$\sum_k |\mathbf{j}_k\rangle\langle\mathbf{j}_k| = \overline{1}$$

$$\sum_{k,j} |\mathbf{j}_k\rangle\langle\mathbf{j}_k| \otimes |u_j\rangle\langle u_j| = \sum_{k,j} |\mathbf{j}_k\rangle\langle\mathbf{j}_k| \otimes |u_j\rangle\langle u_j| = \overline{1}$$

## **6.5 Magnetisches Moment**

### **6.5.1 Magnetischer Parallelismus**

$$H(\hat{x}, \hat{p}, t) = \frac{1}{2m} \left( \hat{p} - q\hat{A}(\hat{x}, t) \right)^2 - q\hat{V}(\hat{x}, t)$$

Von außen werde ein homogenes, statisches Magnetfeld  $\overline{B}_0 = \text{const}$  angelegt:

$$\hat{A}(\hat{x}, t) = \frac{1}{2} (\hat{x} \times \overline{B}_0)$$

$$\text{rot}\hat{A}(\hat{x}, t) = \overline{B}_0 \quad \text{in Coulomb- Eichung}$$

$$\text{div}\hat{A}(\hat{x}, t) = 0$$

Magnetfeldanteil:

$$H(\hat{x}, \hat{p}, t)_m = -\frac{q}{2m} \hat{p}\hat{A}(\hat{x}, t) - \frac{q}{2m} \hat{A}(\hat{x}, t)\hat{p} + \frac{q^2}{2m} \hat{A}^2(\hat{x}, t)$$

**Remind:**

$$[\hat{p}, \hat{F}] = \frac{\hbar}{i} \partial_{\hat{x}} \hat{F}$$

$$\hat{p}_i \hat{A}_i(\hat{x}, t) - \hat{A}_i(\hat{x}, t) \hat{p}_i = \frac{\hbar}{i} \partial_{\hat{x}i} \hat{A}(\hat{x}, t)_i = \frac{\hbar}{i} \partial_{\hat{x}i} \frac{1}{2} (\hat{x} \times \overline{B}_0)_i = 0 \#$$

$$\Rightarrow \hat{p}_i \hat{A}_i(\hat{x}, t) = \hat{A}_i(\hat{x}, t) \hat{p}_i$$

Somit:

$$H_m(\hat{x}, \hat{p}, t) = -\frac{q}{2m} \hat{p}\hat{A}(\hat{x}, t) - \frac{q}{2m} \hat{A}(\hat{x}, t)\hat{p} + \frac{q^2}{2m} \hat{A}^2(\hat{x}, t) = \frac{q}{m} \hat{A}(\hat{x}, t)\hat{p} + \frac{q^2}{2m} \hat{A}^2(\hat{x}, t)$$

Weiter:

$$\hat{A}(\hat{x}, t) \hat{p} = \frac{1}{2} (\bar{B}_0 \times \hat{x}) \hat{p} = \frac{1}{2} (\hat{x} \times \hat{p}) \bar{B}_0 = \frac{1}{2} \bar{B}_0 (\hat{x} \times \hat{p})$$

$$\hat{A}(\hat{x}, t)^2 = \frac{1}{4} (\hat{x} \times \bar{B}_0)^2 = \frac{1}{4} (\hat{x} \times \bar{B}_0) (\hat{x} \times \bar{B}_0) = \frac{1}{4} (\hat{x} \cdot \hat{x}) (\bar{B}_0 \cdot \bar{B}_0) - \frac{1}{4} (\bar{B}_0 \cdot \hat{x}) (\hat{x} \cdot \bar{B}_0)$$

$$\hat{A}(\hat{x}, t)^2 = \frac{1}{4} \bar{B}_0 ((\hat{x} \cdot \hat{x}) \bar{B}_0 - (\bar{B}_0 \cdot \hat{x}) \hat{x})$$

$$((\hat{x} \cdot \hat{x}) \bar{B}_0 - (\bar{B}_0 \cdot \hat{x}) \hat{x}) = -\hat{x} \times (\hat{x} \times \bar{B}_0)$$

SOmit:

$$H_m(\hat{x}, \hat{p}, t) = \frac{q}{m} \hat{A}(\hat{x}, t) \hat{p} + \frac{q^2}{2m} \hat{A}^2(\hat{x}, t)$$

$$\Rightarrow H_m(\hat{x}, \hat{p}, t) = -\frac{q}{2m} \bar{B}_0 \cdot (\hat{x} \times \hat{p}) - \frac{q^2}{8m} \bar{B}_0 [\hat{x} \times (\hat{x} \times \bar{B}_0)]$$

Der magnetische Hamiltonian setzt sich also zusammen aus einem Teil, der

$$(\hat{x} \times \hat{p}) = \hat{l} \text{ beinhaltet.}$$

Dieser Teil macht den magnetischen B- Feld Effekt und ist als mechanischer teil zu verstehen.

Der zweite Term ist von der Form nach eine Zentrifugalkraft.

Das Ganze läuft unter dem Namen mechanisch magnetischer Parallelismus

Es existiert also ein permanentes magnetisches Bahnmoment:

$$\bar{m} := \frac{q}{2m} \bar{l}$$

Auf dieses gehen alle paramagnetischen Effekte zurück ( Paramagnetismus).

Dieses Moment wirkt beispielsweise auch auf Eisen/ Kobalt.

Im anderen term  $\frac{q^2}{8m} \bar{B}_0 [\hat{x} \times (\hat{x} \times \bar{B}_0)]$  findet sich ein induzierter Teil. Ein induziertes magnetisches Moment..

Dieses wirkt nur auf Magnete !

$$\bar{m}_{ind.} = \frac{q^2}{8m} [\hat{x} \times (\hat{x} \times \bar{B}_0)]$$

Es handelt sich dabei um den diamagnetischen term

Im konstanten Magnetfeld kommt es also zur Linienaufspaltung !

$$\bar{m}_z := \frac{q}{2m} \bar{l}_z$$

Mit den Eigenwerten

$$\frac{q}{2m} \hbar m_z$$

$$m = l, l-1, \dots, -l+1, -l$$

Einheit ist das Bohrsche Magneton:

$$\mathbf{m}_B = -\frac{q}{2m} \hbar = 9,2732 \cdot 10^{-24} \text{ J/T}$$

**Betachte**

$(\hat{x} \times \bar{B}_0)^2$  Dieser Term ist invariant gegen das vertauschen von ort und Magnetfeld !

Zentrifugalkraft:  $[\bar{\omega} \times (\bar{\omega} \times \bar{x})]$  hat die gleiche Struktur !

Bei Vertauschung von Ort und Magnetfeld  $(\hat{x} \times \bar{B}_0)^2 \rightarrow (\bar{B}_0 \times \hat{x})^2$   
 $\Rightarrow [\hat{x} \times (\hat{x} \times \bar{B}_0)] \rightarrow [\bar{B}_0 \times (\bar{B}_0 \times \hat{x})]$

Bei der Zentrifugalkraft lautet die Interpretation: Bei links- statt rechtsdrehen bleibt die Zentrifugalkraft erhalten !

Hier:

Wechsele von B -> -B

$$(\hat{x} \times \bar{B}_0) \rightarrow -(\hat{x} \times \bar{B}_0) = (\bar{B}_0 \times \hat{x})$$

und der Diamagnetismus bleibt erhalten !

### Einstein - De- Haas, 1915

Messung des gyromagnetischen Verhältnisses mittels Magnetkern an Torsionsfaden !

Die Magnetisierung des Magnetkerns ergibt sich zu

$$\bar{M} = \bar{m} V$$

$$\Rightarrow \hat{M} = \hat{m} V = V \frac{q}{2m} \hat{l} := \frac{q}{2m} \hat{\Lambda}$$

Nun kommt man von

$$\dot{B} \rightarrow \dot{\bar{M}} \rightarrow \dot{\Lambda}$$

Experimentell:

$$\frac{|\dot{\bar{M}}|}{|\dot{\Lambda}|} = \frac{q}{m}$$

ohne den Faktor 1/2 -> der Spin wurde vergessen !

Dies ist typisch. Wenn ein Faktor 1/2 auftritt, so wurde der Spin vergessen -> der Spinraum muss einen mechanisch magnetischen Parallelismus besitzen !

Spin <-> magnetisches Moment

$$\bar{m}_s = g_s \frac{q}{2m} \hat{s}$$

gs heißt Gyromagnetischer Faktor !

➔ Fazit: Der Spin kommt nicht aus der Theorie. Er musste erst gemessen werden und nachträglich eingebaut werden !

Einstein De Haas bestimmten  $g_s = 2$

$$\hat{m}_s = g_s \frac{q}{2m} \hat{s}$$

Der Spin wird in der Quanten- Elektrodynamik gewonnen !

Dabei gilt:

$$g_s^e = 2 \left( 1 + \frac{a}{2p} + \dots \right)$$

$$a = \frac{1}{137} = \frac{e^2}{\hbar c}$$



## Schrödingergleichung im Spin- Bahn- Raum

Elektronen:

$$\vec{m}_s = \frac{q}{2m} \hat{s}$$

Das Elektron hat die potenzielle Energie U im Magnetfeld  $B_0$

$$U = -\vec{m}_s \cdot \vec{B}_0 = -g_s \frac{q}{2m} \hat{s} \cdot \vec{B}_0 = H_S$$

Hamilton- Operator für Bahn:

$$\hat{H}_B = \frac{1}{2m_0} (\vec{p} + e\vec{A})^2 - eV(r) \quad \text{Elektron mit Ladung } e < 0$$

Wirkt alleine im Hilbertraum  $H_B$

Hamilton- Operator für Spin:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_0} (\vec{p} - q\vec{A})^2 + qV(r) + \hat{H}_S$$

$$\hat{H}_S = -g_s \frac{q}{2m} \hat{s} \cdot \vec{B}_0$$

$\hat{H}_S$  wirkt dabei nur im Hilbertraum  $H_S$

Ohne Berücksichtigung von  $\hat{H}_S$ :

$$\hat{H}_B |\Psi_a\rangle_t = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_a\rangle_t$$

$$a = 1, 2$$

Also haben wir je nach Spinzustand schon 2 Schrödingergleichungen in  $H_B$ :

Es gilt (äquivalente Darstellung):

$$\hat{H}_B |\Psi_a\rangle_t = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_a\rangle_t \Leftrightarrow (\hat{H}_B \times 1) |\Psi\rangle_t = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle_t$$

$$a = 1, 2$$

Für den gesamten Hamiltonian gilt:

$$\hat{H} |\Psi\rangle_t = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle_t$$

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_0} (\vec{p} - q\vec{A})^2 + qV(r) - g_s \frac{q}{2m} \hat{s} \cdot \vec{B}_0$$

Dabei

$1$  = Einsoperator im Spinraum -> Spin bleibt unberücksichtigt. Einheitsmatrix für beliebigen Vorgang im

$$\text{Spinraum: } 1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

MIT Berücksichtigung von  $\hat{H}_S$ :

$$\left( \hat{H}_B \times 1 + \hat{H}_S \right) |\Psi\rangle_t = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle_t$$

In Matrix- Darstellung:

$$\hat{H}_S = -\hbar \mathbf{w}_l \hat{\mathbf{S}}_3$$

$$\mathbf{w}_l = \frac{|e|\hbar B}{2m}$$

In Matrix- Darstellung:

$$\begin{pmatrix} \hat{H}_B + \hbar \mathbf{w}_l & 0 \\ 0 & \hat{H}_B - \hbar \mathbf{w}_l \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\Psi_1\rangle_t \\ |\Psi_2\rangle_t \end{pmatrix} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} |\Psi_1\rangle_t \\ |\Psi_2\rangle_t \end{pmatrix}$$

$$\Leftrightarrow \left( \hat{H}_B + \hbar \mathbf{w}_l \right) |\Psi_1\rangle_t = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_1\rangle_t \quad \text{PAULI- GLEICHUNG}$$

$$\left( \hat{H}_B - \hbar \mathbf{w}_l \right) |\Psi_2\rangle_t = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_2\rangle_t$$

Dies ist äquivalent zu folgender Darstellung:

$$\hat{H} |\Psi\rangle_t = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle_t$$

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_0} (\vec{p} - q\vec{A})^2 + qV(r) - g_s \frac{q}{2m} \hat{\mathbf{s}} \cdot \vec{B}_0$$

**Pauli- Gleichung !**

### 6.5.3 Normaler ( einfacher) Zeeman- Effekt

- einfacher Zeeman- Effekt mit Spin. 1 Elektron im kugelsymmetrischen Potenzial ( Kern (H) oder Atomrumpf(Na)) und homogenen Magnetfeld  $\vec{B} = B\vec{e}_3$

$$\hat{H} = \hat{H}_B \otimes 1 + H_S = \left[ \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + qV(r) \right] \otimes 1 - \frac{q}{2m} \hat{B}_0 \cdot \hat{\vec{l}} - g_s \frac{q}{2m} \hat{B}_0 \cdot \hat{\vec{s}} + O(B_0^2)$$

$$\left[ \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + qV(r) \right] := H_0$$

Dabei wird durch  $\hat{H}_B \otimes 1$  der Bahndrehimpuls Hamiltonian durch den Spinraum erweitert.

$$\hat{H} = H_0 - \frac{q}{2m} \hat{B}_0 \left( \hat{l} + g_s \hat{s} \right)$$

$$\left[ \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + qV(r) \right] := H_0$$

Für  $\vec{B} = B\vec{e}_3$

$$\hat{H} = H_0 - \frac{q}{2m} \hat{B}_0 \left( \hat{l}_z + g_s \hat{s}_z \right)$$

$$\left[ \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + qV(r) \right] := H_0$$

Wirkung auf die Zustände:

$$H_0 |\Psi_{nlm}\rangle |u^\pm\rangle = E_{nlm}^0 |\Psi_{nlm}\rangle |u^\pm\rangle$$

$$\Leftrightarrow (H_0 \otimes 1) |\Psi_{nlm} \otimes u^\pm\rangle = E_{nlm}^0 |\Psi_{nlm} \otimes u^\pm\rangle$$

n= Hauptquantenzahl

l= Nebenquantenzahl ( Eigenwerte von  $l^2$ )

m= magnetische Quantenzahl ( Eigenwerte von  $l_z$ )

$$(H_0 \otimes 1) |\Psi_{nlm} \otimes u^\pm\rangle + \left( \hat{l}_z \otimes 1 + 1 \otimes g_s \hat{s}_z \right) \left( -\frac{q}{2\mathbf{m}} \right) B_0 |\Psi_{nlm} \otimes u^\pm\rangle$$

$$= E_{nlm}^0 |\Psi_{nlm} \otimes u^\pm\rangle - \frac{q}{2\mathbf{m}} \left[ m\hbar + g_s \left( \pm \frac{\hbar}{2} \right) \right] |\Psi_{nlm} \otimes u^\pm\rangle$$

Man bekommt also mit dem Korrekturterm

$$\frac{q}{2\mathbf{m}} \left[ m\hbar + g_s \left( \pm \frac{\hbar}{2} \right) \right]$$

eine Korrektur an die Energie !!

Merke:

$H_0, H$  haben die GLEICHEN Eigenfunktionen, jedoch unterschiedliche Eigenwerte !

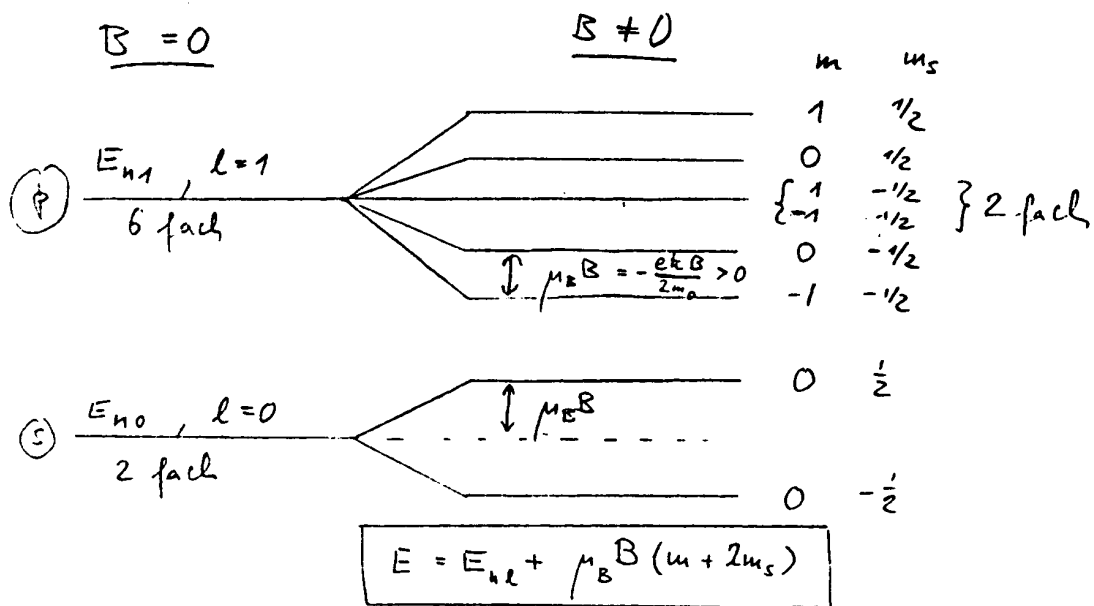
Für Elektronen mit  $g_s \sim 2$  und  $q = -e$

ergibt sich:

$$(H_0 \otimes 1) |\Psi_{nlm} \otimes u^\pm\rangle + \left( \hat{l}_z \otimes 1 + 1 \otimes g_s \hat{s}_z \right) \left( -\frac{q}{2\mathbf{m}} \right) B_0 |\Psi_{nlm} \otimes u^\pm\rangle$$

$$= E_{nlm}^0 |\Psi_{nlm} \otimes u^\pm\rangle + B_0 \frac{e}{2\mathbf{m}} [m\hbar \pm \hbar] |\Psi_{nlm} \otimes u^\pm\rangle$$

$$\Rightarrow E_{nlm} = E_{nlm}^0 + \frac{e}{2\mathbf{m}} B_0 \hbar [m \pm 1]$$



$n=2, l=1, m=-1, 0, 1$ : Zeeman- Triplett  
 $n=1, l=0, m=0 \rightarrow$  Singulett

Tabelle: Landé- Faktoren

Teilchen	s	g	Q
Elektron	1/2	2	-e
Proton	1/2	5,59	e
Neutron	1/2	-3,83	0
Neutrino	1/2	0	0
Photon	1	0	0

#### 6.5.4 Larmour- Frequenz

$$\hat{s}^\circ = \partial_t \hat{s} + \frac{i}{\hbar} [H, \hat{s}]$$

$$\partial_t \hat{s} = 0$$

$$H = H_0 - \frac{q}{2\mathbf{m}} \bar{B}_0 \cdot \left( \hat{l} + g_s \hat{s} \right)$$

$$[H_0, \hat{s}] = 0$$

$$[\hat{l}, \hat{s}] = 0$$

$$\hat{s}^\circ = -\frac{i}{\hbar} \frac{q}{2\mathbf{m}} g_s [\bar{B}_0 \cdot \hat{s}, \hat{s}]$$

$$\hat{s}_z^\circ = -\frac{i}{\hbar} \frac{q}{2\mathbf{m}} g_s [\bar{B}_0 \cdot \hat{s}, \hat{s}_z] = -\frac{i}{\hbar} \frac{q}{2\mathbf{m}} g_s \sum_i (B_{0i} \hat{s}_i \hat{s}_z - \hat{s}_z B_{0i} \hat{s}_i)$$

Wegen:

$$\hat{s}_x \hat{s}_z - \hat{s}_z \hat{s}_x = \frac{\hbar}{i} \hat{s}_y$$

$$\hat{s}_y \hat{s}_z - \hat{s}_z \hat{s}_y = -\frac{\hbar}{i} \hat{s}_x$$

$$\hat{s}_z^\circ = -\frac{i}{\hbar} \frac{q}{2\mathbf{m}} g_s \frac{\hbar}{i} (B_{0x} \hat{s}_y - B_{0y} \hat{s}_x) = \frac{q}{2\mathbf{m}} g_s (B_{0y} \hat{s}_x - B_{0x} \hat{s}_y)$$

$$= \hat{m}_{sx} B_{0y} - \hat{m}_{sy} B_{0x} = (\hat{\mathbf{m}}_S \times \bar{B}_0)_z$$

$$\hat{s}^\circ = \hat{\mathbf{m}}_S \times \bar{B}_0$$

**Ehrenfest:**

$$\frac{d}{dt} \hat{s} = \hat{\mathbf{m}}_S \times \bar{B}_0$$

Wähle z- Achse || B0 → B0 kein Vektor mehr

$$\frac{d}{dt} \hat{s}_x = \hat{m}_{sy} B_0 = g_s \frac{q}{2\mathbf{m}} \hat{s}_y B_0$$

$$\frac{d}{dt} \hat{s}_y = -\hat{m}_{sx} B_0 = -g_s \frac{q}{2\mathbf{m}} \hat{s}_x B_0$$

$$\frac{d}{dt} \hat{s}_z = 0$$

Damit haben wir ein DGL System 1. ordnung:

$$\hat{s}_x(t) = \hat{s}_y(0) \sin\left(g_s \frac{q}{2\mathbf{m}} B_0 t\right) + \hat{s}_x(0) \cos\left(g_s \frac{q}{2\mathbf{m}} B_0 t\right)$$

$$\hat{s}_y(t) = \hat{s}_y(0) \cos\left(g_s \frac{q}{2\mathbf{m}} B_0 t\right) - \hat{s}_x(0) \sin\left(g_s \frac{q}{2\mathbf{m}} B_0 t\right)$$

$$\hat{s}_z(t) = \hat{s}_z(0)$$

Das heißt: Der Spinvektor präzediert in der x/y- Ebene mit der Larmour- Frequenz  $\omega = g_s \frac{q}{2\mathbf{m}} B_0$ , während

die Ausrichtung zur z- Achse ( parallel zum Magnetfeld) zeitlich konstant bleibt !

## 6.6 Gesamtdrehimpuls

### 6.6.1 vertauschungsrelationen

$$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$$

$[\hat{L}_j, \hat{S}_k] = 0$  Beide Operatoren wirken in verschiedenen Räumen. Wäre der Operator nicht Null, so wären die zugehörigen Eigenzustände nicht separabel.

$$\sum_k [\hat{L}_k, \hat{S}_k] = 0 = \sum_k (\hat{L}_k \hat{S}_k - \hat{S}_k \hat{L}_k) = \hat{L} \hat{S} - \hat{S} \hat{L}$$

$$\Rightarrow \hat{L} \hat{S} = \hat{S} \hat{L}$$

$$\Rightarrow [\hat{J}_j, \hat{J}_k] = [\hat{L}_j, \hat{L}_k] + [\hat{S}_j, \hat{S}_k]$$

$$[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i\hbar \epsilon_{jkl} \hat{L}_l$$

$$[\hat{S}_j, \hat{S}_k] = i\hbar \epsilon_{jkl} \hat{S}_l$$

$$\Rightarrow [\hat{J}_j, \hat{J}_k] = i\hbar \epsilon_{jkl} \hat{J}_l$$

Aber:

$[\hat{J}_j, \hat{J}_k] = i\hbar \epsilon_{jkl} \hat{J}_l$  ist als Vertauschungsrelation hinreichend zur Definition eines Drehimpulses. Also ist J auch ein Drehimpuls

#### **Satz**

Gekoppelte Drehimpulse sind ebenfalls Drehimpulse !

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_k] = 0$$

$$[\hat{J}_3, \hat{L}^2] = [\hat{L}_3 + \hat{S}_3, \hat{L}^2] = 0$$

$$[\hat{J}_k, \hat{L}^2] = 0$$

$$[\hat{J}^2, \hat{L}^2] = [\hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{L} \cdot \hat{S}, \hat{L}^2] = 0$$

$$[\hat{J}^2, \hat{S}^2] = [\hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{L} \cdot \hat{S}, \hat{S}^2] = 0$$

$$[\hat{J}_k, \hat{S}^2] = [\hat{L}_k + \hat{S}_k, \hat{S}^2] = 0$$

$$[\hat{J}^2, \hat{L} \cdot \hat{S}] = 0$$

### 6.6.2 Clebsch- Gordan-Koeffizienten ( auch: Wigner- Koeffizienten)

Eigenwertproblem:

$$\hat{J}^2 |jm_{ges}\rangle = \hbar^2(j(j+1)) |jm_{ges}\rangle$$

$$\hat{J}_3 |jm_{ges}\rangle = \hbar m_{ges} |jm_{ges}\rangle$$

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots$$

$$m_{ges.} = j, j-1, \dots, -j$$

Basis für

$$U \otimes U_s:$$

$$\{|l m_l\rangle \otimes |s m_s\rangle\}$$

$$[\hat{J}^2, \hat{L}^2] = [\hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{L} \cdot \hat{S}, \hat{L}^2] = 0$$

$$[\hat{J}_3, \hat{L}^2] = [\hat{L}_3 + \hat{S}_3, \hat{L}^2] = 0$$

Es werden die Eigenfunktionen

$|j m_{ges}\rangle$  gesucht, die auch Eigenfunktionen zu  $\hat{L}^2$  bei festem  $l$  sind:

$$|j m_{ges}\rangle = \sum_{m, m_s} C_{m_{ges}, j}^{m, m_s} |l m_l\rangle |s m_s\rangle$$

$$\hat{J}_z = \hat{J}_3$$

$$\hat{J}_3 |j m_{ges}\rangle = \hbar m_{ges} |j m_{ges}\rangle = \sum_{m, m_s} C_{m_{ges}, j}^{m, m_s} (\hat{L}_z + \hat{S}_z) |l m_l\rangle |s m_s\rangle = \sum_{m, m_s} C_{m_{ges}, j}^{m, m_s} (m\hbar + m_s\hbar) |l m_l\rangle |s m_s\rangle$$

$$\Rightarrow \sum_{m, m_s} (m_{ges} - m_l - m_s) C_{m_{ges}, j}^{m, m_s} |l m_l\rangle |s m_s\rangle = 0$$

$$\Rightarrow (m_{ges} - m_l - m_s) C_{m_{ges}, j}^{m, m_s} = 0$$

$$\Rightarrow C_{m_{ges}, j}^{m, m_s} = 0, \text{ falls } (m_{ges} - m_l - m_s) \neq 0$$

$$C_{m_{ges}, j}^{m, m_s} \neq 0, \text{ falls } (m_{ges} - m_l - m_s) = 0 \Rightarrow m_l = m_{ges} - m_s$$

Speziell

$$m_s = \pm \frac{1}{2}$$

-> Die Clebsh-Gordan-Koeffizienten sind unabhängig von  $ml$

$$|j m_{ges}\rangle = C_{m_{ges}, j}^{-\frac{1}{2}} \left| l, m_l - \frac{1}{2} \right\rangle \left| -\frac{1}{2} \right\rangle + C_{m_{ges}, j}^{+\frac{1}{2}} \left| l, m_l + \frac{1}{2} \right\rangle \left| +\frac{1}{2} \right\rangle$$

Vergleiche Fick, 4.3 § 6

### **6.6.3 Addition von Drehimpulsen (Vergl. Schwabl)**

Der Gesamtdrehimpuls kann folgendermaßen dargestellt werden:

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$$

Die Vertauschungsrelationen:

$[\hat{L}_j, \hat{S}_k] = 0$  Beide Operatoren wirken in verschiedenen Räumen. Wäre der Operator nicht Null, so wären die zugehörigen Eigenzustände nicht separabel.

$$\Rightarrow [\hat{J}_j, \hat{J}_k] = [\hat{L}_j, \hat{L}_k] + [\hat{S}_j, \hat{S}_k]$$

$$[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i\hbar \mathbf{e}_{jkl} \hat{L}_l$$

$$[\hat{S}_j, \hat{S}_k] = i\hbar \mathbf{e}_{jkl} \hat{S}_l$$

$$\Rightarrow [\hat{J}_j, \hat{J}_k] = i\hbar \mathbf{e}_{jkl} \hat{J}_l$$

Drehimpuls Vertauschungsrelationen !

$$[\hat{J}^2, \hat{L}_3] = [\hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{L} \cdot \hat{S}, \hat{L}_3] = 2\hat{S}_j [\hat{L}_j, \hat{L}_3] = 2i\hbar(\hat{S}_2 \hat{L}_1 - \hat{S}_1 \hat{L}_2) \neq 0$$

Ebenso:

$$[\hat{J}^2, \hat{S}_3] \neq 0$$

Also:

Die  $2(2l+1)$  Produktzustände  $|lmm_s\rangle = |lm\rangle |m_s\rangle$  sind Eigenzustände zu  $\hat{L}^2, \hat{L}_3, \hat{S}^2, \hat{S}_3$  aber nicht zu  $\hat{J}^2$ , da  
 $[\hat{J}^2, \hat{L}_3] \neq 0$  bzw.  $[\hat{J}^2, \hat{S}_3] \neq 0$

**Ziel: Suche gemeinsame Eigenzustände zu  $\hat{J}^2, \hat{J}_3, \hat{L}^2, \hat{S}^2$ .**

Dies muss möglich sein, da

$$[\hat{J}^2, \hat{L}^2] = [\hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{L} \cdot \hat{S}, \hat{L}^2] = 0$$

$$[\hat{J}^2, \hat{S}^2] = [\hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{L} \cdot \hat{S}, \hat{S}^2] = 0$$

$$[\hat{J}_3, \hat{L}^2] = [\hat{L}_3 + \hat{S}_3, \hat{L}^2] = 0$$

$$[\hat{J}_3, \hat{S}^2] = [\hat{L}_3 + \hat{S}_3, \hat{S}^2] = 0$$

Die Eigenwertgleichungen lauten:

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

$$\hat{J}_3 |jm_jls\rangle = \hbar m_j |jm_jls\rangle$$

$$\hat{L}^2 |jm_jls\rangle = \hbar^2(l(l+1)) |jm_jls\rangle$$

$$\hat{S}^2 |jm_jls\rangle = \hbar^2(s(s+1)) |jm_jls\rangle$$

Durch Einschub eines Vollständigen Satzes orthonormierter Eigenfunktionen, durch Einschub eines Projektors auf diesen vollständigen atz, also durch Einschub einer "1" kann der neue eigenzustand  $|jm_jls\rangle$  bezüglich des alten Zustandes  $|lmsm_s\rangle$  entwickelt werden:

$$|jm_jls\rangle = \sum_{\substack{m \\ m_s = m_j - m}} |lmsm_s\rangle \langle lmsm_s | jm_jls\rangle$$

Zu beachten ist: Es wird ausschließlich über die Komponenten der alten basis summiert, die sich von der neuen basis unterscheiden ( das heißt: Nur dieser Teil der basis wird transformiert) !

Dabei heißen die Entwicklungskoeffizienten der neuen basis bezüglich der alten Basisvektoren, also die Koordinaten der neuen basis in der alten Basis



Clebsh- Gordan- Koeffizienten !

$$\langle l m s m_s \| j m_j l s \rangle$$

Dabei gilt:

$s = \frac{1}{2}$	$m_s = \frac{1}{2}$	$m_s = -\frac{1}{2}$
$j = l + \frac{1}{2}$	$\left( \frac{l + m_j + \frac{1}{2}}{2l + 1} \right)^{\frac{1}{2}}$	$\left( \frac{l - m_j + \frac{1}{2}}{2l + 1} \right)^{\frac{1}{2}}$
$j = l - \frac{1}{2}$	$-\left( \frac{l - m_j + \frac{1}{2}}{2l + 1} \right)^{\frac{1}{2}}$	$\left( \frac{l + m_j + \frac{1}{2}}{2l + 1} \right)^{\frac{1}{2}}$

Wobei:

$$j = l \pm \frac{1}{2}$$

$$m_j = m + m_s$$

$$m = -l, \dots, +l$$

$$m_s = -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$$



## 5. Näherungsmethoden

### 5.1 Zeitabhängige Störungsrechnung (Dirac)

Es soll die zeitliche Entwicklung eines Zustandes  $|\Psi\rangle_t$  aus der Schrödingergleichung

$$\hat{H}|\Psi\rangle_t = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle_t$$

berechnet werden, wobei

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1(t)$$

durch den ungestörten Hamilton- Operator mit einer kleinen Störung repräsentiert wird.

Die Störung lasse sich als Potenzialstörung darstellen, die mittels des von Null verschiedenen jedoch kleinen Parameters  $\epsilon$

linear entwickelt werden kann:

$$\hat{H}_1(t) = \epsilon \hat{V} \quad (\text{dabei kann die Störung natürlich explizit zeitabhängig sein !})$$

Die Eigenzustände und Eigenwerte von  $H_0$  seien bekannt:

$$\hat{H}_0|n\rangle = E_n|n\rangle$$

( ungestörte Problem)

Dabei gilt natürlich weiterhin die Orthonormierung und Vollständigkeit des Basissystems:

$$\langle n' | n \rangle = \delta_{n'n}$$

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = 1 \quad \text{Annahme: diskretes Spektrum}$$

Die Entwicklung von  $|\Psi\rangle_t$  nach den Eigenzuständen des ungestörten Systems liefert:

$$\sum_n |n\rangle \langle n | \Psi \rangle_t = \sum_n c_n(t) |n\rangle$$

$$\langle n | \Psi \rangle_t := c_n(t)$$

Die Anfangsbedingung sei ein noch ungestörter Zustand  $|n_0\rangle$

$$|\Psi\rangle_{t=0} = |n_0\rangle$$

Damit:

$$\langle n | n_0 \rangle := c_n(0) = \delta_{nn_0}$$

Die Zeitentwicklung unter dem Einfluß der Störung lautet ( Einsetzen von  $\sum_n |n\rangle \langle n | \Psi \rangle_t = \sum_n c_n(t) |n\rangle$  in die  $\langle n | \Psi \rangle_t := c_n(t)$

Schrödingergleichung: :

$$\hat{H}|\Psi\rangle_t = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle_t$$

$$\Rightarrow \sum_n c_n(t) \hat{H} |n\rangle = i\hbar \sum_n \frac{d}{dt} c_n(t) |n\rangle = \sum_n c_n(t) (\hat{H}_0 + \hat{H}_1(t)) |n\rangle = \sum_n c_n(t) (E_n + \hat{H}_1(t)) |n\rangle$$

Charakteristisch für diese entwickelten Probleme ist das Auftreten der Summe, wie hier zu sehen. Diese kann man beseitigen, indem von links mit einem zweiten Zustand "herausprojiziert wird":

$$\begin{aligned} i\hbar \sum_n \frac{d}{dt} c_n(t) \langle m | n \rangle &= \sum_n c_n(t) \langle m | (\hat{H}_0 + \hat{H}^1(t)) | n \rangle = \sum_n c_n(t) \langle m | (E_n + \hat{H}^1(t)) | n \rangle \\ &= \sum_n c_n(t) (\langle m | E_n | n \rangle + \langle m | \hat{H}^1(t) | n \rangle) = \sum_n c_n(t) E_n \delta_{mn} + \sum_n c_n(t) \langle m | \hat{H}^1(t) | n \rangle \\ \Rightarrow i\hbar \sum_n \frac{d}{dt} c_n(t) \langle m | n \rangle &= c_m(t) E_m + \sum_n c_n(t) \langle m | \hat{H}^1(t) | n \rangle = i\hbar \frac{d}{dt} c_m(t) \end{aligned}$$

Hilfreich ist die Definition eines

$$c_n(t) := e^{-\left(i \frac{E_n t}{\hbar}\right)} g_n(t)$$

mit Hilfe des Zeitentwicklungsoperators für die ungestörten Zustände:

$$e^{-\left(i \frac{E_n t}{\hbar}\right)}$$

Somit kann die Differenzialgleichung für die Entwicklungskoeffizienten umgeschrieben werden:

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_m(t) = c_m(t) E_m + \sum_n c_n(t) \langle m | \hat{H}^1(t) | n \rangle$$

mit

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_m(t) = c_m(t) E_m + e^{-\left(i \frac{E_m t}{\hbar}\right)} i\hbar \frac{d}{dt} g_m(t)$$

Setzt man dies ein, so folgt:

$$c_m(t) E_m + e^{-\left(i \frac{E_m t}{\hbar}\right)} i\hbar \frac{d}{dt} g_m(t) = c_m(t) E_m + \sum_n c_n(t) \langle m | \hat{H}^1(t) | n \rangle$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{d}{dt} g_m(t) = e^{\left(i \frac{E_m t}{\hbar}\right)} \sum_n c_n(t) \langle m | \hat{H}^1(t) | n \rangle$$

und wegen

$$c_n(t) := e^{-\left(i \frac{E_n t}{\hbar}\right)} g_n(t)$$

also:

$$i\hbar \frac{d}{dt} g_m(t) = \sum_n e^{\left(i \frac{(E_m - E_n) t}{\hbar}\right)} \langle m | \hat{H}^1(t) | n \rangle g_n(t)$$

Die eigentliche Störungsrechnung kommt erst jetzt:

Wir machen eine Störungsentwicklung für kleines  $\mathbf{e}$ :

$$\hat{H}_1(t) = \mathbf{e} \hat{V} \quad (\text{dabei kann die Störung natürlich explizit zeitabhängig sein !})$$

Man motiviert dass bei kleinen Potenzialstörungen höhere Ordnungen von  $\langle m | \hat{H}^1(t) | n \rangle$  polynomial in  $\mathbf{e}$  fallen, was für die Entwicklungskoeffizienten bedeutet:

$$g_n(t) = g_n^{(0)}(t) + \mathbf{e} g_n^{(1)}(t) + \mathbf{e}^2 g_n^{(2)}(t) + \dots$$

Da aber die Differenzialgleichung für unsere  $g_m(t)$

$$i\hbar \frac{d}{dt} g_m(t) = \sum_n e^{\left(i \frac{(E_m - E_n)t}{\hbar}\right)} \langle m | \hat{H}^1(t) | n \rangle g_n(t)$$

ebenso beidseitig entwickelt werden kann:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \left( g_m^{(0)}(t) + \mathbf{e} g_m^{(1)}(t) + \mathbf{e}^2 g_m^{(2)}(t) + \dots \right) = \sum_n e^{\left(i \frac{(E_m - E_n)t}{\hbar}\right)} \langle m | \hat{H}^1(t) | n \rangle \left( g_n^{(0)}(t) + \mathbf{e} g_n^{(1)}(t) + \mathbf{e}^2 g_n^{(2)}(t) + \dots \right)$$

und dies für beliebige  $\mathbf{e}$  gilt, kann an der Gleichung ein Koeffizientenvergleich in der Ordnung  $\mathbf{e}^k$  durchgeführt werden und es folgt:  $k = 0$ :

$$i\hbar \frac{d}{dt} g_m^{(0)}(t) = 0$$

$$\Rightarrow g_m^{(0)}(t) = \text{const} \stackrel{!}{=} \mathbf{d}_{mn_0}$$

Exakte Lösung für  $\mathbf{e} = 0$ :

$$c_m^{(0)}(t) = e^{-i \frac{E_m}{\hbar} t} \mathbf{d}_{mn_0}$$

**Für k=1**

$$i\hbar \frac{d}{dt} g_m^{(1)}(t) = \sum_n e^{\left(i \frac{(E_m - E_n)t}{\hbar}\right)} \langle m | \hat{V} | n \rangle g_n^{(0)}$$

Dabei wurde  $\mathbf{e}^k = \mathbf{e}^1$  bereits beidseitig gekürzt.

Wir wissen:  $g_m^{(0)}(t) = \text{const} \stackrel{!}{=} \mathbf{d}_{mn_0}$

Somit:

$$i\hbar \frac{d}{dt} g_m^{(1)}(t) = \sum_n e^{\left(i \frac{(E_m - E_n)t}{\hbar}\right)} \langle m | \hat{V} | n \rangle g_n^{(0)}$$

also:

$$i\hbar \frac{d}{dt} g_m^{(1)}(t) = e^{\left(i \frac{(E_m - E_{n_0})t}{\hbar}\right)} \langle m | \hat{V} | n_0 \rangle$$

und mit der Anfangsbedingung  $g_n^{(1)}(0) = 0$  kann formal integriert werden:

$$g_m^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t d\mathbf{t} e^{\left(i \frac{(E_m - E_{n_0})\mathbf{t}}{\hbar}\right)} \langle m | \hat{V} | n_0 \rangle$$

**Übergangswahrscheinlichkeit**

Per Definition die Wahrscheinlichkeit zur Zeit t den Zustand  $|n\rangle$  zu finden, wenn zu t=0 der Zustand  $|n_0\rangle$  vorliegt.

$$\left| \langle m | \Psi \rangle_t \right|^2 = \left| \sum_{n'} c_{n'}(t) \langle n | n' \rangle \right|^2 = |c_n(t)|^2 = |g_n(t)|^2$$

Als Näherung wird nur die niedrigste, nichtverschwindende Ordnung betrachtet:

$$g_n(t) = g_n^{(0)} = \mathbf{d}_{nn0} = 1 \quad \text{für } n=n_0$$

und

$$g_n(t) = \mathbf{e} g_n^{(1)} \quad \text{für } n \neq n_0:$$

**Zeitunabhängige Störung:**  $\hat{V} = \text{const.}$ :

$$g_n^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt e^{i \frac{(E_n - E_{n0})t}{\hbar}} \langle n | \hat{V} | n_0 \rangle = -\langle n | \hat{V} | n_0 \rangle \frac{e^{i \frac{(E_n - E_{n0})t}{\hbar}} - 1}{E_n - E_{n0}}$$

$$\left| g_n^{(1)}(t) \right|^2 = \left| \langle n | \hat{V} | n_0 \rangle \right|^2 \left\{ \frac{e^{-i \frac{(E_n - E_{n0})t}{\hbar}} - 1}{E_n - E_{n0}} \right\} \left\{ \frac{e^{i \frac{(E_n - E_{n0})t}{\hbar}} - 1}{E_n - E_{n0}} \right\} = \left| \langle n | \hat{V} | n_0 \rangle \right|^2 \left\{ \frac{e^{(-i\Omega t)} - 1}{\Omega^2 \hbar^2} \left( e^{(i\Omega t)} - 1 \right) \right\}$$

$$\Omega := \frac{(E_n - E_{n0})}{\hbar}$$

$$\Rightarrow \left| g_n^{(1)}(t) \right|^2 = \left| \langle n | \hat{V} | n_0 \rangle \right|^2 \frac{2(1 - \cos \Omega t)}{\Omega^2 \hbar^2} = \left| \langle n | \hat{V} | n_0 \rangle \right|^2 \frac{4 \sin^2 \frac{\Omega}{2} t}{\Omega^2 \hbar^2}$$

$$\frac{4 \sin^2 \frac{\Omega}{2} t}{\Omega^2 \hbar^2} := D_t(E_n - E_{n0})$$

$$\Rightarrow \left| g_n^{(1)}(t) \right|^2 = \left| \langle n | \hat{V} | n_0 \rangle \right|^2 D_t(E_n - E_{n0})$$

Die Größe  $\Omega := \frac{(E_n - E_{n0})}{\hbar}$  heißt Übergangsfrequenz. Und bezieht sich auf den Übergang von  $|n_0\rangle$  auf  $|n\rangle$ :

Für die Darstellung der Übergangswahrscheinlichkeit um die optimale Energie gilt (grafisch):

$$D_t(0) = \left( \frac{t}{\hbar} \right)^2$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} (D_t(0)) = \infty$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} D_t(E) = \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{4 \sin^2 \left( \frac{Et}{2\hbar} \right)}{E^2} = \frac{2t}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{x} \frac{\sin^2 \mathbf{x}}{\mathbf{x}^2}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{x} \frac{\sin^2 \mathbf{x}}{\mathbf{x}^2} = \mathbf{p}$$

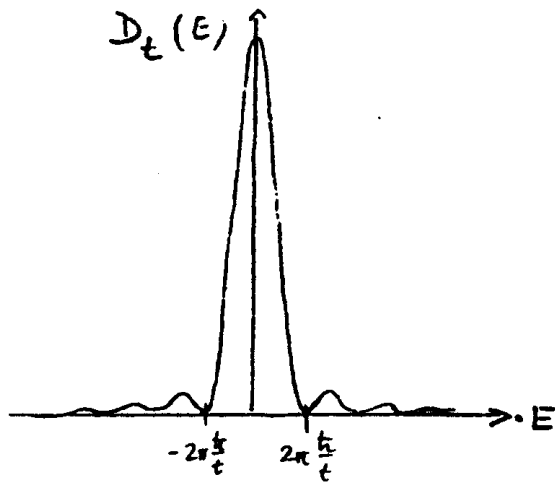
$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} D_t(E) = \frac{2\mathbf{p}}{\hbar} t$$

Also:

$$D_t(E) =: \frac{2p}{\hbar} t d_t(E)$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} D_t(E) = \frac{2p}{\hbar} t d(E)$$

Grafisch



$$\Rightarrow \left| \langle m | \Psi \rangle_t \right|^2 = |g_n(t)|^2 = \frac{2p}{\hbar} \left| \langle n | \hat{H}^1 | n_0 \rangle \right|^2 \cdot t \cdot d_t(E_n - E_{n_0})$$

Für  $t \rightarrow \infty$  Energieerhaltung:  $E_n - E_{n_0} = 0$

Für  $t < \infty$  hat  $D_t(E) =: \frac{2p}{\hbar} t d_t(E)$  die Breite  $\Delta E \cong \frac{4p\hbar}{t}$

Damit folgt die Energie- Zeit Unschärferelation:

$$\Delta E t \cong 4p\hbar$$

**Übergangswahrscheinlichkeit pro zeiteinheit ( von  $|n_0\rangle$  auf  $|n\rangle$  ):**

$$W_{m0} = \frac{d}{dt} \left| \langle n | \Psi \rangle_t \right|^2 = \frac{2p}{\hbar} \left| \langle n | \hat{H}^1 | n_0 \rangle \right|^2 d_t(E_n - E_{n_0})$$

Dies ist Fermis Goldene Regel, abgeleitet aus der Störungstheorie 1. ordnung.  
Dabei gilt:

$$\mathbf{d}_t \rightarrow \mathbf{d}$$

für  $t \rightarrow \infty$

### Harmonische zeitabhängige Störung

$$\hat{H}^1(t) = \hat{F}e^{-i\omega t} + \hat{F}^+e^{i\omega t} \text{ hermitesch !}$$

Es folgt:

$$g_n(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt e^{i \frac{(E_n - E_{n_0} - \hbar\omega)t}{\hbar}} \langle n | \hat{F} | n_0 \rangle - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt e^{i \frac{(E_n - E_{n_0} + \hbar\omega)t}{\hbar}} \langle n | \hat{F}^+ | n_0 \rangle$$

$$\Rightarrow g_n(t) = \langle n | \hat{F} | n_0 \rangle \left[ \frac{e^{i \frac{(E_n - E_{n_0} - \hbar\omega)t}{\hbar}} - 1}{E_n - E_{n_0} - \hbar\omega} \right] - \langle n | \hat{F}^+ | n_0 \rangle \left[ \frac{e^{i \frac{(E_n - E_{n_0} + \hbar\omega)t}{\hbar}} - 1}{E_n - E_{n_0} + \hbar\omega} \right]$$

SOmit folgt für die Übergangswahrscheinlichkeit von  $|n_0\rangle$  auf  $|n\rangle$ :



$$\begin{aligned}
\left| \langle n | \Psi \rangle_t \right|^2 &= |g_n|^2 = \frac{2\mathbf{p}}{\hbar} \left| \langle n | \hat{F} | n_0 \rangle \right|^2 t \mathbf{d}(E_n - E_{n0} - \hbar \mathbf{w}) \\
&+ \frac{2\mathbf{p}}{\hbar} \left| \langle n | \hat{F}^+ | n_0 \rangle \right|^2 t \mathbf{d}(E_n - E_{n0} + \hbar \mathbf{w}) + \langle n | \hat{F} | n_0 \rangle^* \langle n | \hat{F}^+ | n_0 \rangle \left\{ \frac{e \left( -i \frac{(E_n - E_{n0} - \hbar \mathbf{w})t}{\hbar} \right) - 1}{E_n - E_{n0} - \hbar \mathbf{w}} \right\} \left\{ \frac{e \left( i \frac{(E_n - E_{n0} + \hbar \mathbf{w})t}{\hbar} \right) - 1}{E_n - E_{n0} + \hbar \mathbf{w}} \right\} \\
&+ \langle n | \hat{F}^+ | n_0 \rangle^* \langle n | \hat{F} | n_0 \rangle \left\{ \frac{e \left( -i \frac{(E_n - E_{n0} + \hbar \mathbf{w})t}{\hbar} \right) - 1}{E_n - E_{n0} + \hbar \mathbf{w}} \right\} \left\{ \frac{e \left( i \frac{(E_n - E_{n0} - \hbar \mathbf{w})t}{\hbar} \right) - 1}{E_n - E_{n0} - \hbar \mathbf{w}} \right\}
\end{aligned}$$

$$\Omega^\pm := \Omega \pm \mathbf{w} = \frac{(E_n - E_{n0} \pm \hbar \mathbf{w})}{\hbar}$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \left| \langle n | \Psi \rangle_t \right|^2 &= |g_n|^2 = \frac{2\mathbf{p}}{\hbar} \left| \langle n | \hat{F} | n_0 \rangle \right|^2 t \mathbf{d}(E_n - E_{n0} - \hbar \mathbf{w}) \\
&+ \frac{2\mathbf{p}}{\hbar} \left| \langle n | \hat{F}^+ | n_0 \rangle \right|^2 t \mathbf{d}(E_n - E_{n0} + \hbar \mathbf{w}) + \langle n | \hat{F} | n_0 \rangle^* \langle n | \hat{F}^+ | n_0 \rangle \left\{ \frac{(e^{(-i\Omega^- t)} - 1)(e^{(i\Omega^+ t)} - 1)}{\hbar^2 \Omega^+ \Omega^-} \right\} \\
&+ \langle n | \hat{F}^+ | n_0 \rangle^* \langle n | \hat{F} | n_0 \rangle \left\{ \frac{(e^{(-i\Omega^+ t)} - 1)(e^{(i\Omega^- t)} - 1)}{\hbar^2 \Omega^+ \Omega^-} \right\}
\end{aligned}$$

$$\langle n | \hat{F} | n_0 \rangle^* \langle n | \hat{F}^+ | n_0 \rangle = A e^{-i\mathbf{g}}$$

$$\langle n | \hat{F}^+ | n_0 \rangle^* \langle n | \hat{F} | n_0 \rangle = A e^{i\mathbf{g}}$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \left| \langle n | \Psi \rangle_t \right|^2 &= |g_n|^2 = \frac{2\mathbf{p}}{\hbar} \left| \langle n | \hat{F} | n_0 \rangle \right|^2 t \mathbf{d}(E_n - E_{n0} - \hbar \mathbf{w}) \\
&+ \frac{2\mathbf{p}}{\hbar} \left| \langle n | \hat{F}^+ | n_0 \rangle \right|^2 t \mathbf{d}(E_n - E_{n0} + \hbar \mathbf{w}) + A e^{-i\mathbf{g}} \left\{ \frac{(e^{(-i\Omega^- t)} - 1)(e^{(i\Omega^+ t)} - 1)}{\hbar^2 \Omega^+ \Omega^-} \right\} \\
&+ A e^{i\mathbf{g}} \left\{ \frac{(e^{(-i\Omega^+ t)} - 1)(e^{(i\Omega^- t)} - 1)}{\hbar^2 \Omega^+ \Omega^-} \right\}
\end{aligned}$$

Weiter gilt

$$A e^{-i\mathbf{g}} \left\{ \frac{(e^{(-i\Omega^- t)} - 1)(e^{(i\Omega^+ t)} - 1)}{\hbar^2 \Omega^+ \Omega^-} \right\} + A e^{i\mathbf{g}} \left\{ \frac{(e^{(-i\Omega^+ t)} - 1)(e^{(i\Omega^- t)} - 1)}{\hbar^2 \Omega^+ \Omega^-} \right\} = \frac{4A}{\hbar^2 \Omega^+ \Omega^-} \cos(\mathbf{w}t - \mathbf{g}) [\cos(\mathbf{w}t) - \cos(\Omega t)]$$

Für  $\mathbf{w} \neq 0, \Omega \neq 0$  sind diese Terme jedoch rein oszillierend. Für  $t \rightarrow \infty$  sind diese jedoch vernachlässigbar gegen

$$\text{Terme} \sim t \mathbf{d}(E_n - E_{n0} \pm \hbar \mathbf{w}) = t \mathbf{d}(\hbar \Omega^\pm)$$

Somit folgt für  $t \rightarrow \infty$ :

$$\left| \langle n | \Psi \rangle_t \right|^2 = |g_n|^2 = \frac{2p}{\hbar} \left| \langle n | \hat{F} | n_0 \rangle \right|^2 t d(E_n - E_{n_0} - \hbar \omega) + \frac{2p}{\hbar} \left| \langle n | \hat{F}^\dagger | n_0 \rangle \right|^2 t d(E_n - E_{n_0} + \hbar \omega)$$

Für Zeit gegen unendlich kann man dann leicht die Übergangswahrscheinlichkeit zwischen  $|n_0\rangle$  und  $|n\rangle$  pro Zeiteinheit, durch Ableitung nach der Zeit erhalten:

$$W_{nn_0} = \frac{2p}{\hbar} \left| \langle n | \hat{F} | n_0 \rangle \right|^2 d(E_n - E_{n_0} - \hbar \omega) + \frac{2p}{\hbar} \left| \langle n_0 | \hat{F} | n \rangle \right|^2 d(E_n - E_{n_0} + \hbar \omega)$$

Die Terme lassen sich identifizieren:

$$\frac{2p}{\hbar} \left| \langle n | \hat{F} | n_0 \rangle \right|^2 d(E_n - E_{n_0} - \hbar \omega) \text{ steht für die Absorption eines Quants der Energie } \hbar \omega \text{ bei gleichzeitiger}$$

Anregung des Übergangs von  $|n_0\rangle$  auf  $|n\rangle$ , was einem Energiesprung von  $E_n - E_{n_0}$  entspricht.

Das Quant wird also von Niveau  $|n_0\rangle$  auf  $|n\rangle$  gehievt

$$\frac{2p}{\hbar} \left| \langle n_0 | \hat{F} | n \rangle \right|^2 d(E_n - E_{n_0} + \hbar \omega) \text{ steht für die Emission eines Quants der Energie } \hbar \omega \text{ bei gleichzeitiger}$$

Anregung des Übergangs von  $|n\rangle$  auf  $|n_0\rangle$ , was einer Energieabgabe von  $E_{n_0} - E_n$  entspricht.

Das Quant fällt dabei vom diesmal höheren Niveau  $|n_0\rangle$  auf das Niveau  $|n\rangle$  herunter.

### **Zusammenhang mit dem Wechselwirkungsbild**

Für  $t=0$  stimmen Schrödinger- und Wechselwirkungsbild überein ( Siehe oben, S. 63)

Im Wechselwirkungsbild gilt:

$$\hat{H}_W^{-1}(t) = e^{\left(\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t\right)} \hat{H}_S^{-1} e^{\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t\right)}$$

Im Wechselwirkungsbild wird die Zeitentwicklung der Operatoren mit  $\hat{H}_0$  gewonnen, während die Zustände mit  $\hat{H}_W^{-1}(t)$  evolutionieren:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi\rangle_W = \hat{H}_W^{-1}(t) |\Psi\rangle_W$$

Die formale Integration führt auf eine Integralgleichung:

$$|\Psi\rangle_W(t) = |\Psi\rangle_W(t=0) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt \left( \hat{H}_W^{-1}(t) |\Psi\rangle_W(t) \right)$$

$$|\Psi\rangle_W(t=0) = |n_0\rangle$$

Für kleine  $\hat{H}_W^{-1}$  liefert eine Iteration:

$$|\Psi\rangle_W(t) = |\Psi\rangle_W(t=0) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt \left( \hat{H}_W^1(t) |\Psi\rangle_W(t) \right) \approx \left( 1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt \hat{H}_W^1(t) \right) |n_0\rangle$$

$$|\Psi\rangle_W(t) \approx \left( 1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt \hat{H}_W^1(t) \right) |n_0\rangle = \left( 1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} \hat{H}_S^1 e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} \right) |n_0\rangle$$

Mit

$$|\Psi\rangle_S(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} |\Psi\rangle_W(t) \approx e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} \left( 1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} \hat{H}_S^1 e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} \right) |n_0\rangle$$

und

$$e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} \left( 1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} \hat{H}_S^1 e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} \right) := U(t,0) \text{ Zeitentwicklungsoperator im Schrödingerbild}$$

**Übergangsamplitude** im Schrödinger- Bild:

$$c_n(t) = \langle n | \Psi \rangle = \langle n | U(t,0) | n_0 \rangle = \langle n | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} \left( 1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} \hat{H}_S^1 e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} \right) | n_0 \rangle$$

$$\Rightarrow c_n(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \left( d_{nn_0} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt e^{\frac{i}{\hbar} E_n t} \langle n | \hat{H}_S^1 | n_0 \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_{n_0} t} \right)$$

$$d_{nn_0} = g_n^{(0)}$$

$$- \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt e^{\frac{i}{\hbar} E_n t} \langle n | \hat{H}_S^1 | n_0 \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_{n_0} t} = e g_n^{(1)}$$

$$c_n(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \left( d_{nn_0} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt e^{\frac{i}{\hbar} E_n t} \langle n | \hat{H}_S^1 | n_0 \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_{n_0} t} \right) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} g_n(t)$$

In Übereinstimmung mit unserem Ergebnis von Seite 113 !

## **5.2 Induzierte Emission und Absorption von Lichtquanten in ATomen**

Ein Elektron im kugelsymmetrischen Coulomb- Potenzial  $V(r)$  eines Atomrumpfes hat den ungestörten Hamiltonian:

$$\hat{H}^0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r)$$

Es soll untersucht werden, wie sich dieses Elektron unter dem Einfluss einer elektromagnetischen Welle mit

$$\bar{A}(\vec{r}, t) = \bar{A}_0 \cos(\vec{k}\vec{r} - \omega t) \text{ verhält.}$$

$\vec{w} = c|\vec{k}|$  und es gilt Coulomb- Eichung:

$$\nabla \cdot \bar{A}(\vec{r}, t) = 0$$

So wird:

$$\begin{aligned} \bar{E}(\vec{r}, t) &= -\frac{\partial}{\partial t} \bar{A}(\vec{r}, t) = -\omega \bar{A}_0 \sin(\vec{k}\vec{r} - \omega t) \\ -\omega \bar{A}_0 &:= \bar{E}_0 \end{aligned}$$

$$\bar{B}(\vec{r}, t) = \nabla \times \bar{A}(\vec{r}, t) = -\vec{k} \times \bar{A}_0 \sin(\vec{k}\vec{r} - \omega t)$$

Analog zu S. 92 haben wir den Hamiltonoperator:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_0 - \frac{e}{m} \bar{A} \cdot \hat{p} = \hat{H}_0 + \hat{H}^1 \\ \hat{H}^1 &:= -\frac{e}{m} \cos(\vec{k}\vec{r} - \omega t) \bar{A}_0 \hat{p} = -\frac{e}{2m} e^{i\vec{k}\vec{r}} \bar{A}_0 \hat{p} e^{-i\omega t} - \frac{e}{2m} e^{-i\vec{k}\vec{r}} \bar{A}_0 \hat{p} e^{i\omega t} \\ &- \frac{e}{2m} e^{i\vec{k}\vec{r}} \bar{A}_0 \hat{p} := \hat{F} \\ &- \frac{e}{2m} e^{-i\vec{k}\vec{r}} \bar{A}_0 \hat{p} := \hat{F}^+ \\ \hat{H}^1 &= \hat{F} e^{-i\omega t} + \hat{F}^+ e^{i\omega t} \end{aligned}$$

Gemäß S. 116 haben wir die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit ( differenziation der Übergangswahrscheinlichkeit):

$$\begin{aligned} W_{nm0} &= \frac{2p}{\hbar} \left| \langle n | \hat{F} | n_0 \rangle \right|^2 \mathbf{d}(E_n - E_{n0} - \hbar \omega) + \frac{2p}{\hbar} \left| \langle n_0 | \hat{F} | n \rangle \right|^2 \mathbf{d}(E_n - E_{n0} + \hbar \omega) \\ W_{nm0} &= \frac{2p}{\hbar} \left( \frac{e}{2m} \right)^2 \left\{ \left| \langle n | e^{i\vec{k}\vec{r}} \bar{A}_0 \hat{p} | n_0 \rangle \right|^2 \mathbf{d}(E_n - E_{n0} - \hbar \omega) + \left| \langle n_0 | e^{-i\vec{k}\vec{r}} \bar{A}_0 \hat{p} | n \rangle \right|^2 \mathbf{d}(E_n - E_{n0} + \hbar \omega) \right\} \end{aligned}$$

### **Dipolnäherung:**

Annahme: Die Wellenlänge ( einige tausend Angström) ist deutlich größer als der Atomdurchmesser ( einige Angström)

$$\begin{aligned} \vec{k}\vec{r} &\ll 1 \\ \rightarrow e^{\mp i\vec{k}\vec{r}} &= 1 + O(\vec{k}\vec{r}) \end{aligned}$$

Außerdem:  $[\hat{H}_0, \hat{r}] = \frac{\hbar}{i} \frac{\hat{p}}{m}$  und  $e\hat{r}$  = Operator des elektrischen Dipolmoments

Damit wird das Matrixelement des Störoperators

$$-\frac{e}{m} \langle n | e^{i\vec{k}\vec{r}} \vec{A}_0 \cdot \hat{\vec{p}} | n_0 \rangle \equiv -\frac{i}{\hbar} \frac{em}{2m} \vec{A}_0 \langle n | \hat{H}_0 \hat{\vec{r}} - \hat{\vec{r}} \hat{H}_0 | n_0 \rangle = -\frac{i}{2\hbar} (E_n - E_{n_0}) \vec{A}_0 \langle n | \hat{\vec{r}} | n_0 \rangle$$

$$\vec{A}_0 = -\frac{\vec{E}_0}{\omega}$$

$$e \langle n | \hat{\vec{r}} | n_0 \rangle := \vec{d}_{nn_0}$$

Mit den elektrischen Dipol- Matrixelementen  $e \langle n | \hat{\vec{r}} | n_0 \rangle := \vec{d}_{nn_0}$

Die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit ergibt sich gemäß

$$W_{nn_0} = \frac{2\mathbf{P}}{\hbar} \frac{(E_n - E_{n_0})^2}{4(\hbar\omega)^2} (\vec{E}_0 \cdot \vec{d}_{nn_0})^2 \{ \mathbf{d}(E_n - E_{n_0} - \hbar\omega) + \mathbf{d}(E_n - E_{n_0} + \hbar\omega) \}$$

### **Kontinuierliches Einstrahlungsspektrum:**

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \int_0^\infty d\omega \vec{E}_0(\omega) \sin(\vec{k}\vec{r} - \omega t)$$

$$\Rightarrow W_{nn_0} = \frac{\mathbf{P}}{2\hbar^2} \int_0^\infty d(\hbar\omega) (\vec{E}_0(\omega) \cdot \vec{d}_{nn_0})^2 \{ \mathbf{d}(E_n - E_{n_0} - \hbar\omega) + \mathbf{d}(E_n - E_{n_0} + \hbar\omega) \}$$

Dabei liefert

$\mathbf{d}(E_n - E_{n_0} - \hbar\omega)$  einen Beitrag für  $E_n > E_{n_0}$  (Absorption) und

$\mathbf{d}(E_n - E_{n_0} + \hbar\omega)$  einen Beitrag für  $E_n < E_{n_0}$  als induzierte Emission. Die Wahrscheinlichkeit ist  $\sim \vec{E}_0(\omega)^2$  also proportional zur Energiedichte der elektromagnetischen Welle.

Die Ausführung der Integration liefert:

$$W_{nn_0} = \frac{\mathbf{P}}{2\hbar^2} \int_0^\infty d(\hbar\omega) (\vec{E}_0(\omega) \cdot \vec{d}_{nn_0})^2 \{ \mathbf{d}(E_n - E_{n_0} - \hbar\omega) + \mathbf{d}(E_n - E_{n_0} + \hbar\omega) \}$$

$$\Rightarrow W_{nn_0} = \frac{\mathbf{P}}{2\hbar^2} \left( \vec{E}_0 \left( \frac{|E_n - E_{n_0}|}{\hbar} \right) \cdot \vec{d}_{nn_0} \right)^2$$

$$\vec{d}_{nn_0} = e \langle n | \hat{\vec{r}} | n_0 \rangle$$

### **Bemerkungen**

- 1) Spontane Emission kann in der semiklassischen Theorie (Atom wird quantenmechanisch beschrieben, das Strahlungsfeld jedoch klassisch) nicht beschrieben werden! Hierzu ist die Quantisierung des Strahlungsfeldes nötig (Quantenfeldtheorie).
- 2) Die Auswahlregeln für erlaubte elektrische Dipolübergänge sind durch das Dipolmatrixelement  $\vec{d}_{nn_0} = e \langle n | \hat{\vec{r}} | n_0 \rangle$  gegeben. Für  $e \langle n | \hat{\vec{r}} | n_0 \rangle = 0$  können erlaubte Multipolübergänge (magnetischer Dipol, elektrischer Quadrupol etc...) durch die Entwicklung von  $e^{\pm i\vec{k}\vec{r}}$  in höherer Ordnung berechnet werden.

### **Diskussion der Dipolmatrixelemente:**

Wir begeben uns wieder in den Ortsraum der Kugelkoordinatendarstellung:

Die ungestörte Wellenfunktion:

$$\Psi_{nlm}(\vec{r}) = \frac{u_{nl}(r)}{r} Y_l^m(\mathbf{J}, \mathbf{j}) \sim P_l^m(\cos J) e^{imj}$$

$$|n\rangle = |n'l'm\rangle$$

$$|n_0\rangle = |nlm\rangle$$

Kugelkoordinaten

$$\Psi_{nlm}(\vec{r}) = \frac{u_{nl}(r)}{r} Y_l^m(\mathbf{J}, \mathbf{j}) \sim P_l^m(\cos J) e^{imj}$$

$$x_1 = r \sin J \cos j$$

$$x_2 = r \sin J \sin j$$

$$x_3 = r \cos J$$

betrachte

$$\mathbf{x} = x_1 + ix_2 = r \sin J e^{ij}$$

$$\mathbf{x}^* = x_1 - ix_2 = r \sin J e^{-ij}$$

Einsetzen liefert:

$$\Psi_{nlm}(\vec{r}) = \frac{u_{nl}(r)}{r} Y_l^m(\mathbf{J}, \mathbf{j}) \sim P_l^m(\cos J) e^{imj}$$

$$\langle n'l'm' | \hat{\mathbf{x}} | nlm \rangle \sim \int_0^P dJ \sin^2(J) P_{l'}^{m'}(\cos J) P_l^m(\cos J) \int_0^{2P} dj e^{i(m-m'+1)j}$$

$$\int_0^{2P} dj e^{i(m-m'+1)j} \sim \mathbf{d}_{m',m+1}$$

$$\Rightarrow \langle n'l'm' | \hat{\mathbf{x}} | nlm \rangle \sim \int_0^P dJ \sin^2(J) P_{l'}^{m+1}(\cos J) P_l^m(\cos J)$$

$$\int_0^P dJ \sin^2(J) P_{l'}^{m+1}(\cos J) P_l^m(\cos J) \sim \mathbf{d}_{l',l\pm 1}$$

$$\Rightarrow \langle n'l'm' | \hat{\mathbf{x}} | nlm \rangle \sim \mathbf{d}_{m',m+1} \mathbf{d}_{l',l\pm 1}$$

Analog kann man ausrechnen:

$$\langle n'l'm' | \hat{\mathbf{x}}^* | nlm \rangle \sim \mathbf{d}_{m',m-1} \mathbf{d}_{l',l\pm 1}$$

$$\langle n'l'm' | \hat{x}_3 | nlm \rangle \sim \mathbf{d}_{m',m} \mathbf{d}_{l',l\pm 1}$$

Also gewinnen wir die Auswahlregeln für Dipol- erlaubte Übergänge:

$$\Delta l = \pm 1$$

$$\Delta m = 0, \pm 1$$

### 5.3 Zeitunabhängige Störungsrechnung ohne Entartung ( schrödinger)

Betrachte zeitunabhängige Schrödingergleichung:

$$\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$$

berechnet werden, wobei

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}^1$$

durch den ungestörten Hamilton- Operator mit einer kleinen Störung repräsentiert wird.  
 Die Störung lasse sich als Potenzialstörung darstellen, die mittels des von Null verschiedenen jedoch kleinen Parameters  $\epsilon$

linear entwickelt werden kann:

$$\hat{H}_1 = \epsilon \hat{V} \quad (\text{dabei ist die Störung zeitunabhängig sein !})$$

Das ungestörte Problem schreibt sich:

$$\hat{H}_0 |n\rangle = E_n^{(0)} |n\rangle$$

Für kleine  $\epsilon$  sollten sich Eigenwerte und Eigenzustände von  $\hat{H}$  entwickeln lassen:

$$E_k = E_k^{(0)} + \epsilon E_k^{(1)} + \epsilon^2 E_k^{(2)} + \dots$$

$$|\Psi_k\rangle = |\Psi_k^{(0)}\rangle + \epsilon |\Psi_k^{(1)}\rangle + \epsilon^2 |\Psi_k^{(2)}\rangle + \dots$$

Also:

$$(\hat{H}_0 + \epsilon \hat{V}) (|\Psi_k^{(0)}\rangle + \epsilon |\Psi_k^{(1)}\rangle + \epsilon^2 |\Psi_k^{(2)}\rangle + \dots) = (E_k^{(0)} + \epsilon E_k^{(1)} + \epsilon^2 E_k^{(2)} + \dots) (|\Psi_k^{(0)}\rangle + \epsilon |\Psi_k^{(1)}\rangle + \dots)$$

Die Koeffizienten lassen sich dann in der Ordnung  $\epsilon^f$  vergleichen:

**f=0**

$$\hat{H}_0 |\Psi_k^{(0)}\rangle = E_k^{(0)} |\Psi_k^{(0)}\rangle \quad \text{ungestörtes Problem}$$

**f=1**

$$(\hat{H}_0 - E_k^{(0)}) |\Psi_k^{(1)}\rangle = (E_k^{(1)} - \hat{V}) |\Psi_k^{(0)}\rangle \quad \text{1. Näherung}$$

**f=2**

$$(\hat{H}_0 - E_k^{(0)}) |\Psi_k^{(2)}\rangle = (E_k^{(1)} - \hat{V}) |\Psi_k^{(1)}\rangle + E_k^{(2)} |\Psi_k^{(0)}\rangle$$

... -> Rekursionsformeln

**Die Bestimmung der Energieeigenwerte und Eigenzustände kann erfolgen....**

AUs **f=0**:  $|\Psi_k^{(0)}\rangle = |k\rangle$

AUs **f=1**: **Störungsrechnung erster Ordnung möglich:**

:

Wir entwickeln nach der ungestörten Basis  $|\Psi_k^{(1)}\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n | \Psi_k^{(1)}\rangle$  und setzen dies in

$$(\hat{H}_0 - E_k^{(0)}) |\Psi_k^{(1)}\rangle = (E_k^{(1)} - \hat{V}) |\Psi_k^{(0)}\rangle \quad \text{ein:}$$

$$\sum_n \left( \hat{H}_0 - E_k^{(0)} \right) |n\rangle \langle n| \Psi_k^{(1)} \rangle = \left( E_k^{(1)} - \hat{V} \right) |k\rangle$$

$$\left( \hat{H}_0 - E_k^{(0)} \right) |n\rangle = \left( E_n^{(0)} - E_k^{(0)} \right) |n\rangle$$

Skalarprodukt mit  $\langle l| \rightarrow \langle l|n\rangle = \mathbf{d}_{ln}$  "projiziert" wieder die Korrektur des l-ten Zustand ( seines Eigenwertes und seines zugehörigen Zustandes ) heraus:

$$\left( E_l^{(0)} - E_k^{(0)} \right) \langle l| \Psi_k^{(1)} \rangle = \left( E_k^{(1)} - \hat{V} \right) \mathbf{d}_{lk} - \langle l| \hat{V} |k\rangle$$

Somit haben wir für  $l=k$  die erste Korrektur zum Energieeigenwert gefunden:

$$E_k^{(1)} = \langle k| \hat{V} |k\rangle$$

und für  $l \neq k$  ergibt sich die 1. Korrektur zum Eigenvektor:

$$\langle l| \Psi_k^{(1)} \rangle = \frac{\langle l| \hat{V} |k\rangle}{E_k^{(0)} - E_l^{(0)}}$$

$\langle k| \Psi_k^{(1)} \rangle$  wird durch Normierung festgelegt:

$$1 = \langle \Psi_k | \Psi_k \rangle = \langle \Psi_k^{(0)} | \Psi_k^{(0)} \rangle + \mathbf{e} \left( \langle \Psi_k^{(0)} | \Psi_k^{(1)} \rangle + \langle \Psi_k^{(1)} | \Psi_k^{(0)} \rangle \right) + \mathbf{e}^2 (\dots)$$

$$\langle \Psi_k^{(0)} | \Psi_k^{(0)} \rangle = 1$$

Da die Summe rechts aber für beliebige Epsilon Null werden muss folgt:

$$\left( \langle \Psi_k^{(0)} | \Psi_k^{(1)} \rangle + \langle \Psi_k^{(1)} | \Psi_k^{(0)} \rangle \right) = 0 \quad \text{usw.. für jede Klammer hinter einer zusammengefassten Abhängigkeit}$$

$$(\dots = 0$$

fester Ordnung von  $\mathbf{e}$  :

Also für die erste Ordnung:

$$\langle \Psi_k^{(0)} | \Psi_k^{(1)} \rangle = - \langle \Psi_k^{(1)} | \Psi_k^{(0)} \rangle$$

$$\langle k | \Psi_k^{(1)} \rangle = - \langle \Psi_k^{(1)} | k \rangle \equiv - \langle k | \Psi_k^{(1)} \rangle^*$$

Fazit:

$$\langle k | \Psi_k^{(1)} \rangle = i\mathbf{g} \quad \text{mit } \mathbf{g} \in \mathbb{R}$$

Wegen

$$e^{i\mathbf{e}\mathbf{g}} \approx 1 + i\mathbf{e}\mathbf{g} + O(\mathbf{e}^2) \quad \text{ändert der Term } \sim \mathbf{g} \text{ die Phase von } |\Psi_k\rangle \text{ relativ zu } |k\rangle$$



in der Entwicklung  $|\Psi_k\rangle = |k\rangle(1 + i\mathbf{e}\mathbf{g}) + \mathbf{e} \sum_{n \neq k} |n\rangle \langle n | \Psi_k^{(1)} \rangle + O(\mathbf{e}^2)$ .

Die Festlegung erfolgt durch die Forderung :

$$\langle k | \Psi_k \rangle = 1$$

$$\Rightarrow \mathbf{g} = 0$$

Im entartungsfreien Fall (keine Entartung) folgt dann:

$$|\Psi_k^{(1)}\rangle = \sum_{n \neq k} |n\rangle \frac{\langle n | \hat{V} | k \rangle}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}}$$

Voraussetzung:  $E_k^{(0)} \neq E_n^{(0)}$  (keine Entartung)

#### 5.4 Zeitunabhängige Störungsrechnung bei Entartung

Betrachte zeitunabhängige Schrödingergleichung:

$$\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$$

berechnet werden, wobei

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$$

durch den ungestörten Hamilton- Operator mit einer kleinen Störung repräsentiert wird.

Die Störung lasse sich als Potenzialstörung darstellen, die mittels des von Null verschiedenen jedoch kleinen Parameters  $\mathbf{e}$

linear entwickelt werden kann:

$$\hat{H}_1 = \mathbf{e}\hat{V} \text{ (dabei ist die Störung zeitunabhängig sein !)}$$

Wenn wir nun annehmen, dass zur Energie  $E_n^{(0)}$  mehrere (orthonormal) entartete Zustände gehören, so müssen wir das Problem anpassen:

Das ungestörte Problem schreibt sich dann:

$$\hat{H}_0 |n, \mathbf{a}\rangle = E_n^{(0)} |n, \mathbf{a}\rangle \quad \mathbf{a} = 1, \dots, s$$

Durch  $\hat{H}_1 = \mathbf{e}\hat{V}$  wird die Entartung jedoch im Allgemeinen aufgehoben:

$$\hat{H} |\Psi_k\rangle = E_k |\Psi_k\rangle$$

Die Störungsreihe/ Störungsentwicklung

$$|\Psi_k\rangle = |\Psi_k^{(0)}\rangle + \mathbf{e} |\Psi_k^{(1)}\rangle + \mathbf{e}^2 |\Psi_k^{(2)}\rangle + \dots$$

ist unter diesen Bedingungen nur für ein bestimmtes, geeignetes

$$|\Psi_k^{(0)}\rangle = \sum_{\mathbf{a}} c_{\mathbf{a}} |k, \mathbf{a}\rangle \text{ möglich:}$$

Wähle nun  $|\Psi_k^{(0)}\rangle$  im ungestörten Eigenraum so, dass für  $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} |\Psi_k\rangle = |\Psi_k^{(0)}\rangle$  (eindeutig bestimmt).

Das Einsetzen in die Entwicklung der Ordnung  $\epsilon^f$  liefert:

**f=1**

$$(\hat{H}_0 - E_k^{(0)})|\Psi_k^{(1)}\rangle = (E_k^{(1)} - \hat{V}) \sum_{\mathbf{a}} c_{\mathbf{a}} |k, \mathbf{a}\rangle \quad \text{1. Näherung}$$

Das Skalarprodukt mit  $\langle k, \mathbf{b} | \rightarrow \langle k, \mathbf{b} | k, \mathbf{a} \rangle = \mathbf{d}_{\mathbf{ab}}$  "projiziert" wieder die Korrektur des jeweils entarteten Terms der Nummer  $\mathbf{b}$  heraus:

$$\langle k, \mathbf{b} | (\hat{H}^{(0)} - E_k^{(0)}) |\Psi_k^{(1)}\rangle = \sum_{\mathbf{a}} c_{\mathbf{a}} (\langle k, \mathbf{b} | k, \mathbf{a} \rangle E_k^{(1)} - \langle k, \mathbf{b} | \hat{V} | k, \mathbf{a} \rangle)$$

$$\langle k, \mathbf{b} | (\hat{H}^{(0)} - E_k^{(0)}) |\Psi_k^{(1)}\rangle = 0$$

$$\langle k, \mathbf{b} | k, \mathbf{a} \rangle = \mathbf{d}_{\mathbf{ba}}$$

$$\langle k, \mathbf{b} | \hat{V} | k, \mathbf{a} \rangle =: \hat{V}_{\mathbf{ba}}$$

Somit folgt:

$$0 = \sum_{\mathbf{a}} (\hat{V}_{\mathbf{ba}} - E_k^{(1)} \mathbf{d}_{\mathbf{ba}}) c_{\mathbf{a}}$$

Dies ist aber gerade eine Eigenwertgleichung für die sogenannte Störmatrix  $\hat{V}_{\mathbf{ba}}$ :

$$0 = \sum_{\mathbf{a}} (\hat{V}_{\mathbf{ba}} - E_k^{(1)} \mathbf{d}_{\mathbf{ba}}) c_{\mathbf{a}} = (\hat{V} - E_k^{(1)} \mathbf{1}) \vec{c}$$

$$\vec{c} \in C^s$$

$$\hat{V} \in C^s \times C^s$$

Die Gleichung heißt auch "Säkulargleichung" zur Berechnung von Eigenwerten und bildet ein homogenes, lineares Gleichungssystem.

Die Bezeichnung folgt in Anlehnung an die früheren Anwendungen: Berechnung der astronomischen säkularen Störungen.

Nichttriviale Lösungen existieren genau dann, wenn die Determinante  $\det(\hat{V} - E_k^{(1)} \mathbf{1})$ , die sogenannte Säkulardeterminante, verschwindet, also  $\det(\hat{V} - E_k^{(1)} \mathbf{1}) = 0$  also:

$$\begin{vmatrix} \hat{V}_{11} - E_k^{(1)} & \hat{V}_{12} & \dots & \hat{V}_{1s} \\ \hat{V}_{21} & \hat{V}_{22} - E_k^{(1)} & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \hat{V}_{s1} & \dots & \dots & \hat{V}_{ss} - E_k^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

Für den Fall  $\hat{V}$  hermitesch folgt  $\hat{V}_{\mathbf{ba}} = \hat{V}_{\mathbf{ab}}^*$

Dann existieren reelle Eigenwerte  $E_k^{(1)}$  und die Eigenvektoren zu  $E_k^{(1)} \neq E_l^{(1)}$  sind orthogonal !

**Bemerkung:** Die Entartung muss NICHT vollständig aufgehoben werden !

### Beispiel: 2 entartete Zustände

Säkulardeterminante

$$\begin{vmatrix} \hat{V}_{11} - E_k^{(1)} & \hat{V}_{12} \\ \hat{V}_{21} & \hat{V}_{22} - E_k^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

$$(E_k^{(1)})^2 - (\hat{V}_{11} + \hat{V}_{22})E_k^{(1)} + (\hat{V}_{11}\hat{V}_{22} - \hat{V}_{12}\hat{V}_{21}) = 0$$

$$\hat{V}_{12}\hat{V}_{21} = |\hat{V}_{12}|^2$$

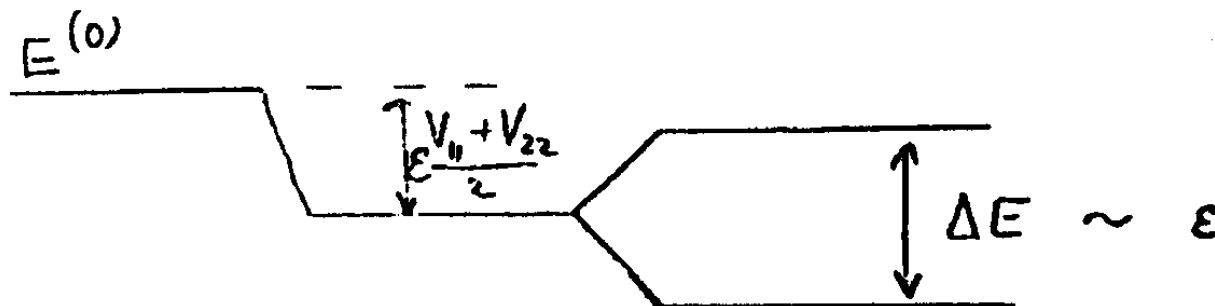
$$\Rightarrow E_k^{(1)} = \frac{1}{2} \left[ (\hat{V}_{11} + \hat{V}_{22}) \pm \sqrt{(\hat{V}_{11} - \hat{V}_{22})^2 + 4|\hat{V}_{12}|^2} \right]$$

Dies als Korrekturterm. Somit folgt für ein Energieniveau der Energie E:

$$E = E^{(0)} + \epsilon E_k^{(1)} = E^{(0)} + \frac{\epsilon}{2} \left[ (\hat{V}_{11} + \hat{V}_{22}) \pm \sqrt{(\hat{V}_{11} - \hat{V}_{22})^2 + 4|\hat{V}_{12}|^2} \right]$$

Dabei gibt  $\sqrt{(\hat{V}_{11} - \hat{V}_{22})^2 + 4|\hat{V}_{12}|^2}$  die Energieaufspaltung an.

E ist, wie angegeben die gesamte Energie in 1. Störungstheoretischer Ordnung. Die Aufspaltung erfolgt linear in  $\epsilon$ , also linear zur Störung:



### 5.5 Stark Effekt im H- Atom

Anwendung der Störungsrechnung bei Entartung. Das H- Atom befinde sich dabei in einem homogenen äußeren elektrischen Feld  $\vec{E}$ .

Für den Hamiltonian gilt:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hat{r}} - e\vec{E}\hat{r}$$

$$-e\vec{E}\hat{r} = \hat{H}^{(1)}$$

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hat{r}} = \hat{H}^{(0)}$$

Sei das elektrische Feld parallel zur z- Achse:

$$-e\bar{E}\hat{x}_3 = \hat{H}^{(1)}$$

**Eigenwerte und -zustände von  $\hat{H}^{(0)}$ :**

$$\hat{H}^{(0)}|n, l, m\rangle = E_n^{(0)}|n, l, m\rangle$$

$$E_n^{(0)} = -R_H \frac{1}{n^2}$$

Die Energie ist im Bahndrehimpuls insgesamt  $n^2 = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1)$  entartet. ( zu jedem n gibt es n-1 mögliche verschiedene Bahndrehimpulszustände, die jeweils 2l+1 mögliche Einstellungen bezüglich der z- Achse einnehmen können ( magnetische Quantenzahl m). Mit dem SPin ist die Entartung sogar  $2n^2 = \sum_{l=0}^{n-1} 2(2l+1)$  - fach. Dies ist

leicht zu verstehen: Durch den Spin wird der bestehende Hilbertraum um einen zusätzlichen zweidimensionalen Hilbertraum erweitert. Dadurch können alle vorherigen Zustände noch einen Spinzustand aus dem neuen Hilbertraum mit beinhalten ohne dass sie ihre Eigenschaft, Eigenzustände zu sein, verlieren können. Die Zahl der möglichen Eigenzustände zu einem Energieeigenwert verdoppelt sich also !

**Beispiel: n=2** (4fache Entartung)

mögliche Zustände:

$$|2,0,0\rangle, |2,1,-1\rangle, |2,1,0\rangle, |2,1,+1\rangle$$

$$\langle \vec{r} \| nlm \rangle = \frac{u_{nl}(r)}{r} Y_l^m(\mathbf{J}, \mathbf{j})$$

**Keine Knotenlinie**

$$Y_0^0 = \sqrt{\frac{1}{4p}}$$



**Eine Knotenlinie**

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4p}} \cos J$$



$$Y_1^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8p}} \sin J e^{\pm iJ}$$



$$\frac{u_{20}(r)}{r} = \frac{2}{(2a_0)^{\frac{3}{2}}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

$$\frac{u_{21}(r)}{r} = \frac{1}{\sqrt{3}(2a_0)^{\frac{3}{2}} a_0} r e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

Mit dem Bohr- Radius  $a_0 = \frac{\hbar^2 4\pi e_0}{me^2}$

**Matrizelemente des elektischen Dipolmoments**  $\hat{d} = e\hat{x}_3$  mit  $\langle n'l'm'|\hat{x}_3|nlm\rangle \sim d_{l'l\pm 1} d_{mm'}$

Vergleiche Seite 121:

n=n'=2	l=0, m=0	l=1, m=1	l=1, m=0	l=1, m=-1	<b>a</b>
l'=0, m'=0	0	0	$d_{13}$	0	1
l'=1, m'=1	0	0	0	0	2
l'=1, m'=0	$d_{13}^*$	0	0	0	3
l'=1, m'=-1	0	0	0	0	4

Der Störoperator:

$$\hat{H}^{(1)} = -|\vec{E}|\hat{d}$$

Wir haben also mit  $d_{13}$  das einzige nichtverschwindende Matrizelement:

$$d_{13} = \langle 200|e\hat{x}_3|210\rangle$$

$$\hat{x}_3 = r \cos \theta$$

$$d_{13} = \langle 200 | e\hat{x}_3 | 210 \rangle$$

$$= e \int_0^\infty d^3r r^2 \frac{2}{(2a_0)^{\frac{3}{2}}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}} r \frac{1}{\sqrt{3}(2a_0)^{\frac{3}{2}} a_0} r e^{-\frac{r}{2a_0}} \int_0^{2p} d\mathbf{j} \int_0^p d\mathbf{J} \sin \mathbf{J} \sqrt{\frac{1}{4p}} \cos \mathbf{J} \sqrt{\frac{3}{4p}} \cos \mathbf{J}$$

$$\frac{u_{20}(r)}{r} = \frac{2}{(2a_0)^{\frac{3}{2}}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

$$\frac{u_{21}(r)}{r} = \frac{1}{\sqrt{3}(2a_0)^{\frac{3}{2}} a_0} r e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

$$\sqrt{\frac{1}{4p}} = Y_0^0$$

$$\sqrt{\frac{3}{4p}} \cos \mathbf{J} = Y_1^0$$

$$\int_0^{2p} d\mathbf{j} \int_0^p d\mathbf{J} \sin \mathbf{J} \sqrt{\frac{1}{4p}} \cos \mathbf{J} \sqrt{\frac{3}{4p}} \cos \mathbf{J} = \frac{1}{\sqrt{3}}$$

$$\Rightarrow d_{13} = \langle 200 | e\hat{x}_3 | 210 \rangle = \frac{e}{\sqrt{3}} \int_0^\infty d^3r r^2 \frac{2}{(2a_0)^{\frac{3}{2}}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}} r \frac{1}{\sqrt{3}(2a_0)^{\frac{3}{2}} a_0} r e^{-\frac{r}{2a_0}} = -3ea_0 \quad \text{S}$$

omit existiert ein Erwartungswert des Dipolmomentes

$$d_{13} = \langle 200 | e\hat{x}_3 | 210 \rangle = -3ea_0$$

Dies entspricht einem PERMANENTEN Dipolmoment des H- AToms, welches Konsequenz der l- Entartung ist !

Die charakteristische Größenordnung dieses Dipolmomentes ist  $a_0$ , also die Ausdehnung der Wellenfunktion !

**Störungsrechnung:** Aufspaltung des Energieniveaus  $n=2$  im elektrischen Feld

$\bar{E}$  :

$$\text{Säkulargleichung: } \sum_{\mathbf{a}=1}^4 \left( -|\bar{E}| d_{\mathbf{a}\mathbf{b}} - E d_{\mathbf{a}\mathbf{b}} \right) c_{\mathbf{a}} = 0$$

Säkulardeterminante:

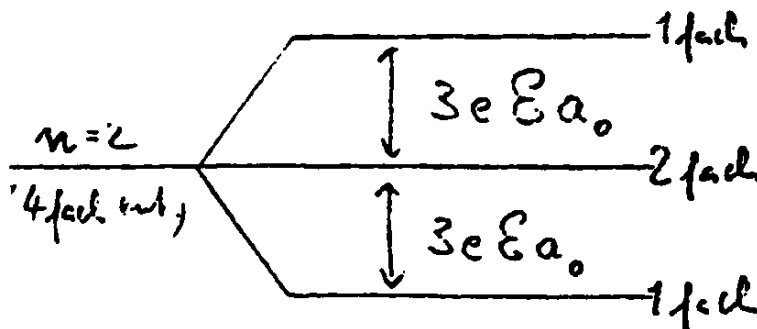
$$\begin{vmatrix} -E & 0 & -|\bar{E}|d_{13} & 0 \\ 0 & -E & 0 & 0 \\ -|\bar{E}|d_{13} & 0 & -E & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -E \end{vmatrix} = 0 = E^2 \left[ E^2 - (|\bar{E}|d_{13})^2 \right]$$

$$\Rightarrow E = 0 \text{ als zweifach entartetes Niveau und } E = \pm |\bar{E}|d_{13} = \mp 3e|\bar{E}|a_0$$

Der Stark- Effekt ist also proportional zur eingestrahlten feldstärke. Man spricht deshalb auch vom linearen Stark- Effekt.

Daneben gibt es noch den quadratischen Stark- Effekt in allgemeinen kugelsymmetrischen Potenzialen  $V \neq \frac{1}{r}$ , also ohne  $l$ - Entartung. Also existiert in diesem Fall gar kein permanentes Dipolmoment und Störungsrechnung 2. Ordnung wird nötig.

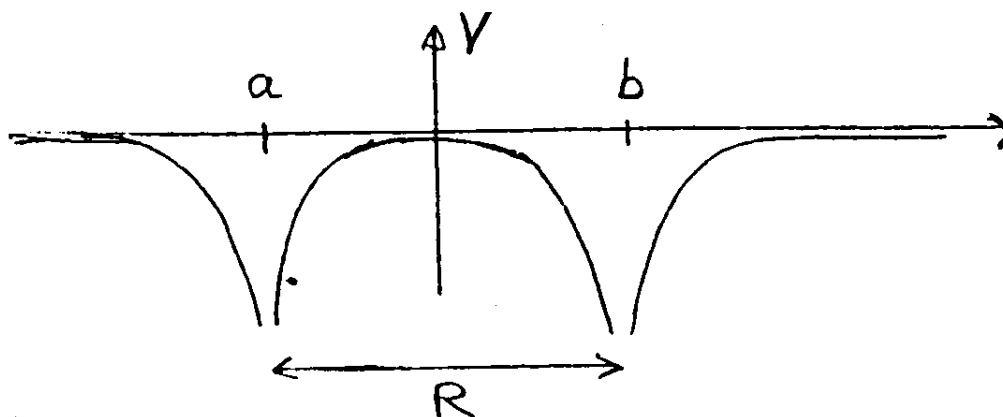
Ausgehend vom Niveau  $E_2^{(0)}$  (4- fach entartet) erhalten wir das folgende Bild:



## 5.6 Homöopolare chemische Bindung des Wasserstoffmoleküls

Hier haben wir eine Anwendung der entarteten Störungsrechnung auf ein Zwei- Teilchen- Problem. Dies wurde 1927 durchgeführt von Heitler und London:

Das Potenzial der ATomkerne, wenn diese als fest angenommen werden ist:



Dabei bezeichnen  $a$  und  $b$  die festen ATomkerne und 1,2 die bewegten Elektronen. Der kernabstand  $R$  ist ein fester Parameter.

### Ungestörtes System ( ohne Spin):

2 nicht wechselwirkende H- ATome:

$$\hat{H}_{a1}|a\rangle_1 = E_a|a\rangle_1 \quad \text{Elektron 1 am Kern a}$$

$$\hat{H}_{b2}|b\rangle_2 = E_b|b\rangle_2 \quad \text{Elektron 2 am Kern b}$$

mit den Hamilton- Operatoren

$$\hat{H}_{a1} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{a1}}$$

$$\hat{H}_{b2} = \frac{\hat{p}_2^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{b2}}$$

$$r_{a1} = |\vec{r}_1 - \vec{R}_a|$$

$$r_{b2} = |\vec{r}_2 - \vec{R}_b|$$

**Eigenzustände** von  $\hat{H}_a^{(0)} = \hat{H}_{a1} + \hat{H}_{b2}$  bzw.  $\hat{H}_b^{(0)} = \hat{H}_{a2} + \hat{H}_{b1}$  zu  $E^{(0)} = E_a + E_b$ :

$$|\Psi_a\rangle = |a\rangle_1 |b\rangle_2$$

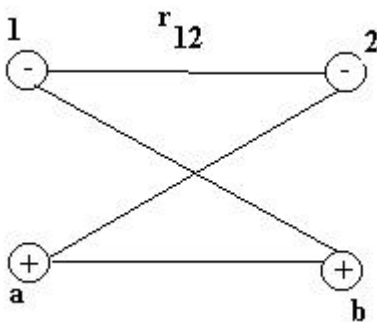
$$|\Psi_b\rangle = |a\rangle_2 |b\rangle_1$$

Man spricht in diesem Fall von Austauschentartung der Energie  $E^{(0)}$

Die Entartung ist in diesem Fall zweifach. Zu beiden Varianten gehört die Energie  $E^{(0)}$ :

$$\hat{H}_{a,b} |\Psi_{a,b}\rangle = E^{(0)} |\Psi_{a,b}\rangle$$

Eine Störung dieses Systems sind nun alle denkbaren weiteren Wechselwirkungen:



$$\hat{H}_a^{(1)} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{1}{r_{a2}} + \frac{1}{r_{b1}} - \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{R} \right)$$

Genau genommen haben wir dann den Hamiltonian

$$\hat{H}_{a,b} = \hat{H}_{a,b}^{(0)} + \hat{H}_{a,b}^{(1)} \quad \text{kurz:} \quad \hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}^{(1)}$$

Die Störungsrechnung 1. Ordnung liefert

$$E \approx E^{(0)} + E^{(1)}$$

$$|\Psi\rangle \approx |\Psi^{(0)}\rangle + |\Psi^{(1)}\rangle$$

mit

$$|\Psi^{(0)}\rangle = c_a |\Psi_a\rangle + c_b |\Psi_b\rangle = c_a |a\rangle_1 |b\rangle_2 + c_b |a\rangle_2 |b\rangle_1$$



**Bemerkung:**

Da sich  $|a\rangle$  und  $|b\rangle$  auf verschiedene Koordinaten beziehen, sind  $|\Psi_a\rangle$  und  $|\Psi_b\rangle$  nicht orthogonal (Nur für R  $\rightarrow$  unendlich!, also Trennung der Kerne).

$$\langle \Psi_a | \Psi_b \rangle = {}_1 \langle a | b \rangle {}_2 \langle a | b \rangle = TT^* \neq 0$$

mit dem **Überlapp- Integral**

$$T := {}_1 \langle a | b \rangle = \int \Psi_a^*(\vec{r}_1) \Psi_b^*(\vec{r}_1) d^3 r_1$$

$$\Rightarrow T = \int d^3 r_1 R_{nl}^*(r_{a1}) Y_l^{m*}(J_a, \mathbf{j}_a) R_{n'l'}(r_{b1}) Y_{l'}^{m'}(J_b, \mathbf{j}_b)$$

Daher erhält man aus der Störungsentwicklung

$$\left( \hat{H}^{(0)}_{a,b} - E^{(0)} \right) \left( |\Psi^{(1)}\rangle \right) = \left( E^{(1)} - \hat{H}^{(1)} \right) \left( c_a |\Psi_a\rangle + c_b |\Psi_b\rangle \right)$$

dann die Säkulargleichung, wenn man mit  $\langle \Psi_{a,b} |$  multipliziert:

$$0 = \left( \hat{H}^{(1)}_{a,a} - E^{(1)} \right) c_a + \left( \hat{H}^{(1)}_{a,b} - E^{(1)} |T|^2 \right) c_b$$

$$0 = \left( \hat{H}^{(1)}_{b,a} - E^{(1)} |T|^2 \right) c_a + \left( \hat{H}^{(1)}_{b,b} - E^{(1)} \right) c_b$$

Mit

$$\hat{H}^{(1)}_{a,a} = \langle \Psi_a | \hat{H}^{(1)} | \Psi_a \rangle = {}_1 \langle a | {}_2 \langle b | \hat{H}^{(1)} | b \rangle {}_2 | a \rangle {}_1$$

$$\Rightarrow \hat{H}^{(1)}_{a,a} = \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 |\Psi_a(\vec{r}_1)|^2 |\Psi_b(\vec{r}_2)|^2 \hat{H}^{(1)} = \hat{H}^{(1)}_{bb}$$

Dies sieht man an der Möglichkeit, die Elektronen 1  $\leftrightarrow$  2 in

$\hat{H}^{(1)}$  zu tauschen.

$\hat{H}^{(1)}_{a,a} = \hat{H}^{(1)}_{bb} =: D$  sogenannte "direkt Coulombenergie" (klassische Energie einer Ladungsverteilung)

Weiter:

$$\hat{H}^{(1)}_{ab} = \langle \Psi_a | \hat{H}^{(1)} | \Psi_b \rangle = {}_1 \langle a | {}_2 \langle b | \hat{H}^{(1)} | a \rangle {}_2 | b \rangle {}_1$$

$$\Rightarrow \hat{H}^{(1)}_{ab} = \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \Psi_a^*(\vec{r}_1) \Psi_b(\vec{r}_1) \Psi_b^*(\vec{r}_2) \Psi_a(\vec{r}_2) \hat{H}^{(1)} = \hat{H}^{(1)}_{ba} =: A$$

A als sogenannte "Austauschenergie" (nichtklassisch).

**Säkulardeterminante:**

$$\begin{vmatrix} D - E^{(1)} & A - E^{(1)} |T|^2 \\ A - E^{(1)} |T|^2 & D - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

$$\left( D - E^{(1)} \right)^2 - \left( A - E^{(1)} |T|^2 \right)^2 = 0 = E^{(1)2} \left( 1 - |T|^4 \right) - 2E^{(1)} \left( D - |T|^2 \right) + D^2 - A^2$$

Damit kann die Energieaufspaltung angegeben werden und es erfolgt:

$$E^{(1)} = \frac{D \pm A}{1 \pm |T|^2}$$

Die Energieaufspaltung hier steht für die Aufhebung der Austauschentartung.

Ein wesentliches Grundverständnis hierbei ist, dass Zustände von natur aus immer unendlich oft entartet sind. Man kann das Niveau jedoch so weit einschränken (kein Spin, kein 2. Atom, etc...), dass es nur einen Eigenzustand im gegebenen, beschränkten Hilbertraum gibt, der Eigenzustand zum Energieeigenwert ist. Jede zusätzliche Störung von außen kann unterschiedlich auf unterschiedliche Eigenschaften der Elektronen wirken und demnach zu einem Energieniveau verschiedene Zustände zu lassen, die dann aber mit der äußeren Wechselwirkung auch leicht verschobene Energieniveaus bilden können.

Dadurch bekommt ein bisschen ein Bild davon, wie durch die Aufhebung der Entartung quasi neue Energieniveaus geschaffen werden.

Für die Gesamtenergie des Niveaus gilt dann:

$$E_{\pm} \approx E^{(0)} + E^{(1)} = E_a + E_b + \frac{D \pm A}{1 \pm |T|^2}$$

Die zugehörigen Eigenzustände sind zwei der Art, ein zwischen  $|a\rangle|b\rangle$  symmetrisierter und entsprechend der antisymmetrisierte Zustand:

$$\Psi_{\pm}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2(1 \pm |T|^2)}} (|a\rangle_1 |b\rangle_2 \pm |a\rangle_2 |b\rangle_1)$$

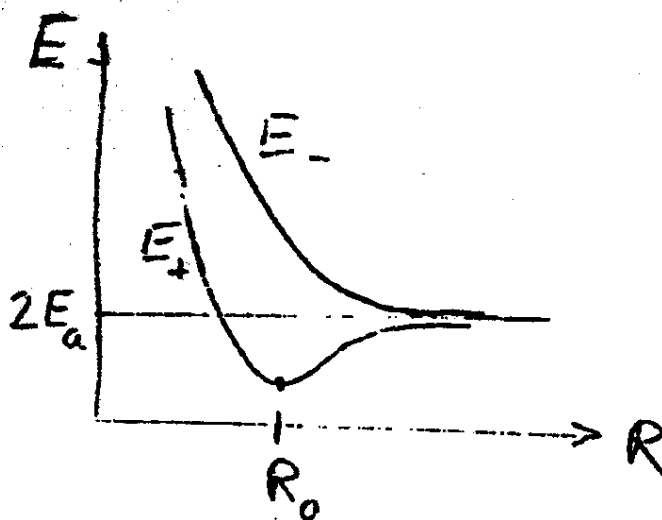
$$|a\rangle_1 |b\rangle_2 = \Psi_a$$

$$|a\rangle_2 |b\rangle_1 = \Psi_b$$

Wie man sieht, hängt  $E_{\pm}$  parametrisch vom Kernabstand  $R$  ab:

Man wähle  $|a\rangle, |b\rangle$  als Grundzustand der H-Atome.

Es ergibt sich für  $E_+$  bzw.  $E_-$  der folgende Verlauf der Energie:



Das Energieniveau  $E_-(R)$  wirkt dabei abstoßend, während  $E_+(R)$  ein attraktives Minimum besitzt. Es kommt zur homöopolaren Bindung (kovalent), einer sogenannten (AUSTAUSCHBINDUNG), denn die Grundlage für die Existenz dieses Niveaus ist die Austauschentartung, die aufgehoben wird.

Die Bindung an sich ist nur quantenmechanisch zu verstehen, wie aber ja auch schon der gebundene Zustand eines Elektrons am Kern.

### **Berücksichtigung des SPin**

Der gesamte 2- Elektronenzustand

$|\Psi\rangle = |Ort\rangle |Spin\rangle$  muss antisymmetrisch sein bei Permutation von Spin und Bahn, da die Elektronen Fermionen sind.

das heißt, es muss einer der beiden Produktbildenden Zustände  $|Ort\rangle, |Spin\rangle$  antisymmetrisch sein und der andere symmetrisch.

### **2 Möglichkeiten:**

1) der Spin- Anteil ist symmetrisch und der Bahn Anteil antisymmetrisch:

$$S = s_1 + s_2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1 \quad \text{ein Triplett- Zustand also !}$$

$$m_s = 0, \pm 1$$

Merke: Multipllett- Zustände sind multi- fach entartet in dem Sinn, dass die charakterisierenden Eigenschaften der Wellenfunktion gegeben sind und daraus die bestehende Entartung multi- fach ist.

Das bedeutet. Bei Spin und Bahndrehimpuls ist das n. Energieniveau ein  $2n^2$ - pllett, wenn keine Wechselwirkung mit äußeren Feldern stattfindet. ( In Wahrheit sind jedoch auch diese Zustände nicht mehr vollständig entartet, da schon das magnetische Moment des Elektronenspins mit dem des Bahndrehimpuls wechselwirkt und die Entartung teilweise aufhebt.

Im Fall 1) wäre nun der Bahn- Anteil antisymmetrisch:

$\Psi_-^{(0)}, E_-$ . Dieser Potenzialverlauf ist jedoch grundsätzlich abstoßend. Es kann nicht zur Bindung kommen. Das Orbital ist antibindend.

2) der Spin- Anteil ist antisymmetrisch und der Bahn- Anteil symmetrisch:

$$S = s_1 + s_2 = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0 \quad \text{Die beiden Spins stehen also antiparallel und der Zustand ist bindend. Es kommt zur}$$

$$m_s = 0$$

Bindung.

Denn: Der Bahn- Anteil ist symmetrisch:

$$\Psi_+^{(0)}, E_+$$

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen zwischen den Kernen ist erhöht.

### **5.7 Variationsverfahren**

Diese Näherungsmethode von W. Ritz ist nützlich, falls der Hamiltonoperator NICHT in einen ungestörten Anteil und eine KLEINE Störung zerlegbar ist, was den Abbruch der Störungsreihe rechtfertigt.

Die zeitunabhängige Schrödingergleichung:

$$\hat{H}|\Psi_k\rangle = E_k|\Psi_k\rangle$$

$\langle\Psi_n|\Psi_k\rangle = \delta_{nk}$  bilden ein vollständiges Orthonormalsystem

Dies sind die nötigen Voraussetzungen zur Durchführung des Variationsprinzips:

Weiter seien die Energie- Eigenwert der Größe nach geordnet:

$$E_0 \leq E_1 \leq E_2 \leq E_3 \dots$$

Dann gilt für einen beliebigen Zustand  $|\Psi\rangle$ , im Allgemeinen kein Eigenzustand:

$$\langle\Psi|\hat{H}|\Psi\rangle = \sum_n \langle\Psi|\hat{H}|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|\Psi\rangle = \sum_n E_n \langle\Psi|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|\Psi\rangle$$

$$E_n \geq E_0$$

$$\Rightarrow \sum_n E_n \langle\Psi|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|\Psi\rangle \geq E_0 \sum_n \langle\Psi|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|\Psi\rangle = E_0 \langle\Psi|\Psi\rangle$$

Wodurch uns die Ungleichung geben ist:

$$\frac{\sum_n E_n \langle\Psi|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} \geq E_0$$

Also:

$$\frac{\langle\Psi|\hat{H}|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} \geq E_0 \quad \text{als Extremal- Prinzip}$$

### Näherung für den Grundzustand:

- 1) Mache einen geeigneten Ansatz für eine Testfunktion  $|\Psi\rangle$  mit verschiedenen Parametern, also  $\Psi(\vec{r}, \mathbf{a}, \mathbf{b}, \dots)$ .
- 2) Dabei sollten Symmetrien und Asymptotik beachtet werden.
- 3) Variiere dann die Parameter, bis  $\frac{\langle\P|\hat{H}|\Psi\rangle}{\langle\P|\Psi\rangle} = E$  minimal wird:

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{a}} E = \frac{\partial}{\partial \mathbf{b}} E = \dots = 0$$

$$\Rightarrow \mathbf{a}_0, \mathbf{b}_0, \dots$$

Damit ist eine Näherung für die Grundzustandsenergie  $E_0 \approx E(\mathbf{a}_0, \mathbf{b}_0, \dots)$ .

Die Parameter in der testfunktion setzen dann gleichzeitig eine Näherung für den grundzustands- Eigenzustand

$$\Psi_0 \approx \Psi(\vec{r}, \mathbf{a}_0, \mathbf{b}_0, \dots)$$

### Bemerkung

Die Näherung von  $E_0 \approx E(\mathbf{a}_0, \mathbf{b}_0, \dots)$  ist ebsser als die Näherung  $\Psi_0 \approx \Psi(\vec{r}, \mathbf{a}_0, \mathbf{b}_0, \dots)$  in folgendem Sinn:

$$\Psi(\vec{r}, \mathbf{a}_0, \mathbf{b}_0, \dots) = \Psi_0 + \mathbf{Ij}$$

Wobei die genäherte Funktion  $\Psi(\vec{r}, \mathbf{a}_0, \mathbf{b}_0, \dots)$  die exakte  $\Psi_0$  um den Term  $\mathbf{Ij}$  verfehle:

Mit

$\langle \mathbf{j} | \Psi_0 \rangle = 0$  Für kleine  $|\mathbf{I}|$  gilt, da  $E$  bei  $E_0$  ein Minimum hat:

$$E(\mathbf{a}_0, \mathbf{b}_0, \dots) = E_0 + I^2 A + \dots$$

Der Fehler geht also nur quadratisch ein. Die Energie ist besser genähert.

#### Näherung für angeregte Zustände:

$E_0 \approx E(\mathbf{a}_0, \mathbf{b}_0, \dots)$  und  $\Psi_0 \approx \Psi(\bar{r}, \mathbf{a}_0, \mathbf{b}_0, \dots)$  sind also näherungsweise bekannt.

Nun wähle man eine Testfunktion  $\Psi(\bar{r}, \mathbf{a}, \mathbf{b}, \dots)$  mit  $\langle \Psi(\bar{r}, \mathbf{a}, \mathbf{b}, \dots) | \Psi_0 \rangle = 0$ . Dies muss natürlich für beliebige Belegung der Parameter gelten !

Nun kann man die Parameter erneut variieren, bis  $\frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = E$  minimal wird.

Dann hat man eine Näherung  $E_1 \approx E$  und  $\Psi_1 \approx \Psi(\bar{r}, \mathbf{a}_1, \mathbf{b}_1, \dots)$

#### **Beweis:**

$$\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \sum_n \langle \Psi | \hat{H} | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \Psi \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} E_n \langle \Psi | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \Psi \rangle$$

$$\langle \Psi | \Psi_n \rangle = 0, \text{ für } n = 0$$

$$\Rightarrow \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} E_n \langle \Psi | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \Psi \rangle$$

$$\Rightarrow E_n \geq E_1$$

$$\Rightarrow \sum_{n=1}^{\infty} E_n \langle \Psi | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \Psi \rangle \geq E_1 \sum_{n=1}^{\infty} \langle \Psi | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \Psi \rangle$$

$$\Rightarrow \sum_{n=1}^{\infty} E_n \langle \Psi | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \Psi \rangle \geq E_1 \langle \Psi | \Psi \rangle \Rightarrow E_1 \leq \frac{\sum_{n=1}^{\infty} E_n \langle \Psi | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}$$

$$\Rightarrow E_1 \leq \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}$$

#### Weitere Näherungsmethoden

- beispielsweise WKB- Näherung (, Wentzel, Kramer, Brillouin (1926)
- sogenannte "quasiklassische Näherung":

Gut, falls die De- Broglie Wellenlänge viel kleiner ist als die Länge, auf der sich das Potenzial wesentlich ändert.

Fließbach, S. 155 ff.