

Integrierter Kurs IV

Theoretische Physik II
Tom Folgmann

29. Juli 2023

[Das Passwort für die offiziellen Kursfolien ist „2023ik4“.]

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung und Wellenfunktion	4
1.1	Die Heisenbergsche Unschärferelation (I)	8
1.2	Die Schrödingergleichung für freie Teilchen	9
1.3	Allgemeine Form der Schrödingergleichung	12
1.4	Normierung und Erwartungswert	14
1.5	Operatoren	16
1.6	Der Kommutator	19
1.7	Die Heisenbergsche Unschärferelation (II)	21
2	Lösen von Bewegungsgleichungen der Schrödingergleichung	24
2.1	Arbeitspunkt 1: Fundamentalsystem und Bedingungsgleichung	25
2.2	Arbeitspunkt 2: Normierbarkeit	26
2.3	Arbeitspunkt 3: Stetigkeitsbedingungen an kritischen Stellen	26
2.4	Potentialbarrieren	28
2.5	Potentialtopf und gebundene Zustände	31
2.6	Der harmonische Oszillator I	32
3	Drehimpuls und Bewegung im Zentralfeld	36
3.1	Orientierungs- und Drehimpulsalgebra	36
3.2	Ortsdarstellung und Kugelflächenfunktionen	38
4	Mathematische Grundlagen	41
4.1	Zustände und Observablen	41
4.2	Der Hilbertraum	41
4.3	Uneigentliche Dirac Vektoren	41
4.4	Das Eigenwertproblem	43
4.5	Messprozess in der Quantenmechanik	44
4.6	Postulate der Quantenmechanik	46
4.7	Erweiterung: Gemischte Zustände	46
4.8	Harmonischer Oszillator (II)	46

5	Störungstheorie	48
5.1	Stationäre Störungstheorie	48
5.2	Entartete Störungstheorie	51
5.3	Zeitabhängige Störungstheorie	52
6	Spin einhalb und Zweiniveausysteme	55
6.1	Spin einhalb Eigenzustände	55
6.2	Die zweidimensionalen Spinoperatoren	55
6.3	Die Blochkugel	55
6.4	Zeitentwicklung mit konstanten Magnetfeld	55

1 Einleitung und Wellenfunktion

VL 1 Einleitung

25.04.2023,
08:15

Bei der Auffassung kleinster Teilchen gab es Probleme mit dem Teilchenmodell.

- (§1) □ Stelle dieses Problem *deutlich* dar. Skizziere eine Lösung desselben.

Schwarzkörperstrahlung

Jede sogenannte *Mode* mit der Frequenz $\nu = c_0/\lambda$ des elektromagnetischen Feldes kann beliebige Energien enthalten, enthält jedoch nach dem *Äquipositionsprinzip* im Mittel die Energie $E = k_B \cdot T$, bekannt als das *Rayleigh-Jeans-Gesetz*.

Photoeffekt

Compton Effekt

[→ IK4 Exp. II]

Welleneigenschaften der Materie

[→ IK4 Exp. II]

Doppelspaltexperiment mit Elektronen

[→ IK4 Exp. II]

- (§2) □ Lies im Skript der *Experimentalphysik II* die Inhalte der Überschriften nach.
- (§2.1) → Was ist die Wellenfunktion beim Doppelspaltexperiment? Wie erklärt man, daß ein Elektron durch beide Spalten gehen kann? Was passiert mit einem einzeln eingestrahnten Elektron?
- (§2.2) → Wie lautet die *de Broglie Relation*?
- (§2.3) → Kann man das Doppelspaltexperiment auch mit massiveren Teilchen oder Molekülen durchführen? Gibt es hierbei eine Grenze? Recherchiere den Beitrag zur Doppelspaltuntersuchung der *Universität Konstanz*.

Welle-Teilchen-Dualismus

Wir haben beobachtet:

- elektromagnetische Wellen verhalten sich wie Teilchen
- materielle Teilchen verhalten sich wie Wellen

Als Ziel unserer folgenden Untersuchungen setzen wir eine *einheitliche Theorie*, welche sowohl die Wellen- als auch die Teilcheneigenschaften beschreibt.

Wellenfunktion und Wahrscheinlichkeitsinterpretation

Wir wollen den folgenden Zusammenhang herstellen:

freies Teilchen	ebene Welle
Impuls $p \in \mathbb{R}^3$	Wellenvektor $k \in \mathbb{R}^3$
Energie $E(p) = p^2/2m$	Kreisfrequenz $\omega(k) = \hbar k^2/2m = c_0 \cdot \ k\ _2$
	Amplitude am Ort $r(t)$ mit $\psi(t, r(t)) = C \cdot \exp(i(\langle r(t), k \rangle - \omega \cdot t)) \rightarrow$ Wellenfunktion

Tabelle 1: Gegenüberstellung der Teilchen- und Welleneigenschaften.

Es kommen nun die folgenden Fragen auf:

→ Wie hängen p und k zusammen?

→ Was ist die physikalische Bedeutung von $\psi \in C^1(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^3, \mathbb{R})$?

Es stellt sich heraus, daß wir die erste Frage bereits mit der *de Broglie Relation* [→ IK4 Exp II] beantworten können: $p(k) = \hbar \cdot k$, wobei $\hbar := h/(2\pi)$ mit $h = 6.6 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$. Für die Energie finden wir aus der Schwarzkörperstrahlung den Zusammenhang $E(\omega) = \hbar \cdot \omega$ (Einstein/Planck) mit $\omega = 2\pi \cdot \nu$. In die Funktion ψ eingesetzt folgt

$$\psi(t, r(t)) = C \cdot \exp\left(\frac{i \cdot (\langle p, r(t), - \rangle E(p) \cdot t)}{\hbar}\right).$$

Für die Dispersion der Welle gilt

$$E(\omega) = \hbar \cdot \omega = \begin{cases} \frac{\hbar^2 \cdot k^2}{2 \cdot m} & m > 0 \\ \hbar \cdot c_0 \cdot \|k\|_2 & \text{sonst} \end{cases} = \begin{cases} \frac{\langle p, p \rangle}{2 \cdot m} & m > 0 \\ c_0 \cdot \|p\|_2 & \text{sonst} \end{cases}$$

Für die physikalische Interpretation müssen wir uns der Wahrscheinlichkeitsinterpretation widmen:

Teilchen	Welle
Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens (pro Volumen) am Ort $r(t)$ zur Zeit $t \in \mathbb{R}$	Intensität der Welle $ \psi(t, r(t)) ^2$

Prinzipiell ist es möglich, den *Ort* zum *Zeitpunkt* eines Teilchens zu kennen; anders ist es bei quantenmechanischen Wellen. Wir bemerken:

→ ψ bezeichnet man auch als *Wahrscheinlichkeitsamplitude*.

→

→ Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des durch r beschriebenen Teilchens ist gegeben als Integral

$$P(\psi, V) := \int |\psi(x)|^2 \lambda_V(dx) =: \mu(V)$$

mit Wahrscheinlichkeitsmaß $P(\psi, \cdot) =: \mu$ auf $(\mathbb{R}^3, \sigma(\mathbb{R}^3))$.

→ Bei einer ebenen Welle ψ_{eben} stellen wir sofort $P(\psi_{\text{eben}}, \mathbb{R}) = \infty$ fest. Dies zeigt uns, daß ψ_{eben} nur auf einem beschränkten Teilvolumen $V \subseteq \mathbb{R}^3$ normierbar ist:

$$P(\psi_{\text{eben}}, V) = |C|^2 \cdot \int_V 1 \lambda(dx) = |C|^2 \cdot \lambda(V) \iff C = \frac{1}{\sqrt{\lambda(V)}}.$$

→ Aus der Wahrscheinlichkeitsmaß-Eigenschaft $\mu(\mathbb{R}^3) = 1$ folgt

$$P(t, \mathbb{R}^3) = \int |\psi(t, x)|^2 \lambda_V(dx) = 1.$$

→ In einem Volumen $W \subseteq V \subseteq \mathbb{R}^3$ gilt $\mu|_V(W) = \lambda(V) \cdot |C|^2$ und für $W = V$ folgt $|C|^2 = 1/\lambda(V)$.

Ebene Wellen beschreiben also Teilchen mit wohldefiniertem Impuls $p = \hbar \cdot k$, aber vollständig unbestimmtem Ort.

.....
 (§3) □ Überlege dir den Spezialfall eines Punktes $\{x\} \subseteq \mathbb{R}^3$ als Testvolumen. Wie sieht die Aufenthaltswahrscheinlichkeit aus?

Wellenpakete

Als nächstes beschäftigen wir uns mit der Frage, wie wir Teilchen mit genau definiertem Aufenthaltsort beschreiben. Wir wenden uns hierbei an das Prinzip der *Superposition*, konkreter der *Fourier-Summation*, bei der wir eine Funktion $f \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ zerlegen in Funktionen des Typus der ebenen Welle:

$$\psi(t, r(t)) = \frac{1}{(2 \cdot \pi)^3} \int_{x \in \mathbb{R}^3} \left(\exp \left(i \cdot (\langle x, r(t) \rangle - \frac{\hbar \cdot x^2}{2 \cdot m} \cdot t) \right) \right) \left(\mathbb{1}_V \cdot \tilde{\psi} \right) \quad V \subseteq \mathbb{R}^3,$$

wobei $(\mathbb{R}^3, \sigma(\mathbb{R}^3), \tilde{\psi})$ ein Maßraum ist. Wir haben dabei den Zusammenhang

$$E = \hbar \cdot \omega(k) = \frac{\hbar \cdot k^2}{2 \cdot m}.$$

.....
 (§4) □ Warum wird bei der Fourier-Summation keine Wurzel im Vorfaktor gezogen? Recherchiere verschiedene Konventionen. [Tipp: Bedenke $\hbar = h/(2 \cdot \pi)$ und die Definition des Impulses über k .]

VL 2

27.04.2023,

10:00

Gaußsches Wellenpaket

Als fundamentale Funktion eines Wellenpaketes zählt das sogenannte *Gaußsche Wellenpaket*. Es wird beschrieben durch die Funktion

$$\psi(k) = A \cdot \exp \left(\frac{-(k - k_0)^2}{4 \cdot \pi^2} \right), \quad \psi \in \text{Abb}(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3),$$

wobei $4\pi^2$ mit der „Breite“ korreliert und k_0 der *mittlere Wellenvektor* ist. Die Funktion hat die Form

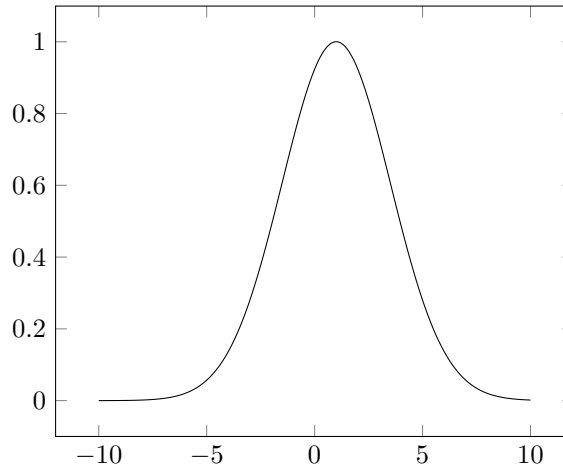


Abbildung 1: Die Gaußkurve für $A = 1$, $k_0 = 1$ in \mathbb{R} .

Das Ergebnis der Fourier-Summation angewendet auf die Gaußfunktion ergibt

$$|\psi(t, r(t))|^2 = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi \cdot w(t)}}^{\frac{3}{2}} \cdot \exp\left(-\frac{(r(t) - v \cdot t)^2}{2 \cdot w(t)^2}\right)$$

mit der Definition $v := \hbar \cdot k/m = \frac{d}{dt} [\omega(k_0 + t \cdot h)]|_{t=0} = d\omega(k_0)(h)$ und $w(t) := \sqrt{w(0)^2 + ((\hbar \cdot t)/(2 \cdot w(0) \cdot m))}$ mit dem Startwert $w(0) = 1/(2 \cdot \sigma)$.

.....

□ Man spricht bei Fourier-Summationen vom *Raumwechsel*. Was ist damit gemeint? Welche Räume haben wir hier verwendet? (§5)

□ Zeichne das Ergebnis einmal graphisch für dieselben Parameter wie oben. Was fällt dir auf? (§6)

□ Welches $h \in \mathbb{R}^3$ ist bei der Ableitung $d\omega(k_0)(h)$ gemeint? (§7)

.....

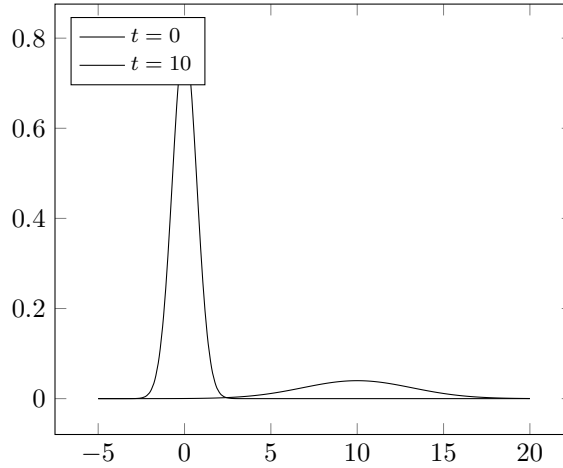


Abbildung 2: Die Fourier-Summierte Gaußkurve für $A = 1$, $k_0 = 1$ in \mathbb{R} zum Zeitpunkt $t = 0$ und $t = 10$

Zusammenfassung

→ Das Wellenpaket bewegt sich mit der Aufenthaltserwartung

$$\langle r(t) \rangle = \int (r \cdot |\psi(t, r)|)_{r \in \mathbb{R}^3} \lambda(dr).$$

→ Das Wellenpaket im Ortsraum ist ebenfalls eine Gaußfunktion mit Peakbreite $w(t)$ und Startwert $w(0) = 1/(2 \cdot \sigma)$.

→ Das Wellenpaket erfährt Dispersion für $t > 0$ durch die Funktionsdefinition w :

→ Für $t \gg w(0)^2 \cdot m/\hbar$ ist $w(t) \approx \hbar \cdot t / (2 \cdot w(0) \cdot m)$ linear von t abhängig. Für lange t ist die Dispersion also linear (und nicht proportional zu \sqrt{t}).

→ Für die Mittelung $\langle r(t) \rangle$ folgt

$$\Delta r^2 := \langle r(t_1) - \langle r(t_0) \rangle \rangle = \int ((r - \langle r \rangle) \cdot |\psi(t, r)|)_{r \in \mathbb{R}^3} \lambda(dr) = w(t)^2.$$

.....
 (§8) □1 Berechne die Integrale $\int x \cdot \exp(-x^2) \lambda(dx)$, $\int x \cdot \exp(-(x - x_0)^2) \lambda(dx)$ und $\int (x - x_0) \cdot \exp(-(x - x_0)^2) \lambda(dx)$ für $x_0 \in \mathbb{R}$ auf $(\mathbb{R}, \sigma(\mathbb{R}), \lambda)$. Wie ist die Struktur?

(§9) □ Rechne die Dispersion des Wellenpaketes für $t > 0$ gemäß w nach und zeige $w(t)^2 > w(0)$.

1.1 Die Heisenbergsche Unschärferelation (I)

Zunächst bemerken wir die Eigenschaft der *Normerhaltung* gemäß des *Satzes von Parseval* der Fourier-Summation. Es gilt

$$\int |\psi(t, r)|^2 \lambda(dr) = \int \frac{|\tilde{\psi}(k)|^2}{(2 \cdot \pi)^3} \lambda(dk) = \int \frac{|\tilde{\psi}(p)|^2}{(2 \cdot \pi \cdot \hbar)^3} \lambda(dp)$$

und für die Mittelung

$$\langle p \rangle = \int \frac{p \cdot |\tilde{\psi}(p)|^2}{(2 \cdot \pi \cdot \hbar)^3} \lambda(dp) := \int \frac{p \cdot \exp\left(-\frac{(p-p_0)^2}{4 \cdot \hbar^2 \cdot \sigma^2}\right)}{(2 \cdot \pi \cdot \hbar)^3} \lambda(dp) \stackrel{(\cdot??)}{=} p_0 = \hbar \cdot k_0.$$

Die mittlere Schwankung, also physikalisch die Genauigkeit des Impulses im Impulsraum, ergibt sich zu

$$\Delta p^2 = \langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle = \hbar^2 \cdot \sigma^2,$$

wobei unter Verwendung von $\Delta r^2 = w(t)^2$ folgt

$$\Delta r^2 = w(t)^2 \geq \left(\frac{1}{2 \cdot \sigma}\right)^2 = \frac{1}{4 \cdot \sigma^2},$$

sodaß mit beiden Gleichungen unter Produktbildung und Wurzelzug eine Ausdrucksweise der Unschärferelation, konkret jene von Heisenberg, folgt:

$$\Delta r \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}.$$

.....
 □ Lässt sich die Wellenfunktion direkt experimentell bestimmen? Recherchiere die *Quanten-* (S.10)
Zustands-Tomographie.

Physikalische Bedeutung

Aus der Unschärferelation folgen folgende physikalische Konsequenzen:

- Unmittelbar ist ablesbar, daß bei genauerer Ortsbestimmung die Impulsgenauigkeit abnimmt.
- Für $\Delta p \rightarrow 0$ (Fall ebene Welle) ist $\Delta r \rightarrow \infty$.
- Der Phasenraum ist infolge der Unschärferelation quantisiert in Einheiten von \hbar .

1.2 Die Schrödingergleichung für freie Teilchen

Als Ziel der Untersuchungen ist eine Wellengleichung für die Wahrscheinlichkeitsamplitude Ψ zu finden. Wir lassen hierbei den mathematischen Beweis fallen und versuchen, die Gleichung zu „erraten“. Mit unserem Ausdruck der Fouriertransformation \mathcal{F} und dem Diffeomorphismus $p(t) := \hbar \cdot k(t)$ auf $\hat{\psi} := \mathcal{F}\psi$ erhalten wir

$$\psi(t, r(t)) = \int \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \cdot \tilde{\psi}(p) \cdot f(t, r(t)) \lambda(dp) = (\mathcal{F}\hat{\psi})(t, r(t)).$$

Die Funktion f war dabei eine Abkürzung einer exp Verkettung, welche wir in zwei Kinderfunktionen aufteilen können:

$$f := \left(\exp\left(\frac{i \cdot (\langle p, r(t) \rangle - p^2 \cdot t/2m)/\hbar}{\hbar}\right) \right)_{(t,r) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^d} = f_1(t, r(t)) \cdot f_2(t, r(t)).$$

Für die Ableitung gilt dann

$$\frac{d}{ds} [\psi(s, r(s))] \Big|_{s=t} = \frac{d}{ds} \left[\mathcal{F} \hat{\psi}(s, r(s)) \right] \Big|_{s=t} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \left(\frac{-i}{2m\hbar} \right) \cdot p^2 \cdot f(t, r(t)) \lambda(dp).$$

.....
 (S.11) □ Rechne nach, daß es sich bei p um einen Diffeomorphismus zwischen $(\mathbb{R}, \tau_{\mathbb{R}})$ und $(\mathbb{R}^3, \tau_{\mathbb{R}^3})$ handelt und der Transformationssatz greifen kann. Welche Annahme musst du dabei machen?

(S.12) □ Wie lautet die Ableitungen $df_1(t, r)(0, h)$ und $df_2(t, r)(0, h)$? Notiere den Ausdruck in verschiedenen Ableitungsdarstellungen. Ersetze $p^2 \cdot f_1(t, r(t))$ durch den entsprechenden Ableitungsausdruck.

Mit der Aufgabe folgt dann

$$\frac{d}{ds} [\psi(s, r(s))] \Big|_{s=t} = \frac{i \cdot \hbar}{2 \cdot m} d(\mathcal{F} \tilde{\psi})(t, r(t))(\hbar)(\hbar)$$

mit der Definition

$$\mathbb{D}_{(\hbar, \hbar)}(\mathcal{F} \hat{\psi})(t, r(t)) = \int \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \cdot \hat{\psi}(p) \cdot f(t, r(t)) \lambda(dp).$$

Wir erhalten also die *zeitabhängige Schrödingergleichung für freie Teilchen* der Form

$$\frac{d}{ds} [\psi(s, r(s))] \Big|_{s=t} = \frac{i \cdot \hbar}{2 \cdot m} \cdot \mathbb{D}_{(\hbar, \hbar)}(\mathcal{F} \hat{\psi})(t, r(t)) = \frac{i \cdot \hbar}{2 \cdot m} \cdot \mathbb{D}_{(\hbar, \hbar)} \psi(t, r(t)).$$

.....
 (S.13) □ Berechne die Ableitung $df(t, r(t))(0, h)$. Berechne weiter $d\psi(t, r(t))(1, 0)$ und verifiziere dadurch den oberen Funktionsausdruck.

(S.14) □ Klassifiziere die Schrödingergleichung. Welche Ordnung hat sie? Schreibe sie in eine Form, bei welcher die rechte Seite reell ist.

(S.15) □ Benenne drei Beispiele $(s, S) \in \text{Anfangswert}(\psi)$.

(S.16) □ Wie steht die erhaltene Schrödingergleichung mit der Diffusionsgleichung $\frac{d}{ds} [\phi(s, x(s))] \Big|_{s=t} = D \cdot \mathbb{D}_{(h, h)} \psi(t, s(t))$ im Zusammenhang? Stelle Ähnlichkeiten und Unterschiede heraus.

(S.17) □ Betrachte die Dispersionsreihe

$$E(p) = \sum_{n(x)=0}^{\infty} \sum_{n(y)=0}^{\infty} \sum_{n(z)=0}^{\infty} c(n(x), n(y), n(z)) \cdot p(1)^{n(x)} \cdot p(2)^{n(y)} \cdot p(3)^{n(z)}.$$

Wie kann man die Reihe umdefinieren für Operatoren? In welchem Raum liegt $\mathcal{E}_E := E(\mathbf{p})$, wenn $\mathbf{p} = -i \hbar \cdot \mathbb{D}_{(\hbar, \hbar)}$?

(S.18) □ Verallgemeinere mit dem Operator \mathcal{E}_E die Gleichung auf beliebige Dispersionen.

VL 4 Um eine Lösung dieser partiellen Differentialgleichung zu erhalten, müssen wir mit dem Separationsansatz beginnen.

03.05.2023,
08:15

Zeitunabhängige Schrödingergleichung

Wir spalten unser ϕ in die Funktionen ϕ und χ auf nach der Form $\psi(t, r(t)) = \phi(r(t)) \cdot \chi(t)$. Wir nehmen hierbei an, daß dies problemlos möglich ist; typische Tücken des Separationsansatz. Wir fordern sogar weiter, daß $\int |\psi(t, r(t))| \lambda(dt) = 1$, sodaß die implizite Bedingung $\chi(t) \neq 0$ für alle $t \in \mathbb{R}$ folgt. Setzen wir diesen Ansatz in die Schrödingergleichung ein, so erhalten wir

$$\phi(r(t)) \cdot i \hbar \cdot \frac{d}{ds} [\chi(s)]|_{s=t} = \chi \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \right) \cdot D_{(\hbar, \hbar)} \phi(t).$$

□ Rechne nach, daß $\int |\psi(t, r(t))| \lambda(dt) = 1$ zu $\chi(t) \neq 0$ für alle $t \in \mathbb{R}$ führt. (S.19)

Nun ist der weitere Ansatz das Dividieren durch $\phi(r(t))$ und $\chi(t)$, um gemäß der Separationschablone zeit- und ortsabhängige Funktionen voneinander zu trennen. Für $\chi(t)$ wissen wir durch unsere Annahme, daß sie ungleich Null sein wird; Für $\phi(r(t))$ müssen wir eine Fallunterscheidung machen. Schematisch erhalten wir zunächst

$$i \hbar \cdot \frac{d}{ds} [\chi(s)]|_{s=t} \cdot \frac{1}{\chi(t)} = -\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot D_{(\hbar, \hbar)} \chi(t) \cdot \frac{1}{\phi(r(t))} = \text{const.} =: E.$$

Mit dem Analyseblick erkennen wir $(\frac{d}{dt} \chi(t))/\chi(t) = \frac{d}{dt} \ln(t)$, sodaß

$$\frac{d}{ds} [\chi(s)]|_{s=t} = -\frac{i \cdot E}{\hbar} \Leftrightarrow \chi(t) = C_1 \cdot \exp\left(-\frac{i \cdot E \cdot t}{\hbar}\right),$$

Wobei die Konstante C_1 Resultat der Integration $\int f dt$ ist. Für die rechte Seite gilt zunächst

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot D_{(\hbar, \hbar)} \phi(r(t)) = E \cdot \phi(r(t)),$$

schematisch nahe der *Laplace-Gleichung*. Wir haben es hierbei konkret mit einem *verallgemeinerten Eigenwertproblem* zutun, welche wir spezieller in [→ math. Grund. der Quant.] behandeln werden. In diesem Kontext reicht uns der Name *zeitunabhängige Schrödingergleichung*. Der ausstehenden Fallunterscheidung kommen wir nun nach: Für $\phi(r(t)) = 0$ erhalten wir $D_{(\hbar, \hbar)} \phi(r(t)) = 0$, wodurch die Schrödingergleichung ebenfalls gilt; Wir hatten also bei unserem zunächst frei angenommenen Separationsansatz Glück.

□ Begründe, warum die Annahme der Konstante E im Separationsansatz gerechtfertigt ist. (S.20)

□ Zeige, daß aus $\phi(r(t)) = 0$ folgt, daß $D_{(\hbar, \hbar)} \phi(r(t)) = 0$. (S.21)

Als *Lösungen* der zeitunabhängigen Schrödingergleichung erhalten wir $\phi(r(t)) = C_2 \cdot \exp(i \cdot \langle k, r(t) \rangle)$, welche der Form einer implizit zeitunabhängigen *ebenen Welle* entspricht. Zusammengesetzt gilt für ψ demnach

$$\psi(t, r(t)) = C \cdot \exp\left(i \cdot \left(\langle k, r(t) \rangle - \frac{\hbar \cdot k^2}{2m} \cdot t\right)\right),$$

wobei wir $E = \hbar^2 \cdot k^2 / (2m)$ setzen.

1.3 Allgemeine Form der Schrödingergleichung

Bisherig nahmen wir an, daß unsere betrachteten Teilchen *kräftefrei* sind. Erweitern wir unseren Blick auf *konservativ kräftebefallene* Teilchen, existiert ein Kraftpotential V sodaß $F(t, r(t)) = -dV(t, r(t))(h)$ gilt. Im klassischen Betrachtungsfall haben wir bereits die *Hamiltonfunktion* kennengelernt:

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

Wir wollen nun die Schrödingergleichung erraten: angenommen, wir haben ein sehr schmales Wellenpaket relativ zur Änderung von V , sodaß wir eine gute Approximation von V am Ort $(t, r(t))$ durch $V(t_0, r(t_0))$ erhalten. Für die Funktion $p \mapsto H(t, (r, p))$ mit der Dispersionsreihe \mathcal{E} erhalten wir

$$i\hbar \cdot \frac{d}{ds} [\psi(s, r(s))] |_{s=t} = \mathcal{E}_H(\psi(t, r(t))) \quad (= H(t, (r(t), -i\hbar\nabla))),$$

wobei der geklammerte Term eine *Schreibweise* zur Erinnerung an die klassische Hamiltonfunktion ist. Damit folgt die *allgemeinste* Version der zeitunabhängigen Schrödingergleichung für einzelne Teilchen als fundamentalen quantenmechanischen Zusammenhang:

$$i\hbar \cdot \frac{d}{ds} [\psi(s, r(s))] |_{s=t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \mathbb{D}_{(\hbar, \hbar)} + V(t, r(t)) \right) (\psi(t, r(t))).$$

Es handelt sich hier wieder um ein AWP: Die Gleichung löst sich also eindeutig für einen Anfangswert $(s, S) \in \text{AW}(\psi)$.

-
- (S22) □ Wie muss man $t_0 \in \mathbb{R}$ wählen, sodaß die Approximation von V ausreichend gut ist? Was bedeutet „schmal relativ zur Änderung von V “?
- (S23) □ Wie sieht die suggerierte Auswertung des Ausdrucks $(\cdot + \cdot)(\psi(\cdot))$ aus? Was bedeutet die Schreibweise?
- (S24) □ Kläre den Zusammenhang der Schrödingergleichung mit der Newtongleichung $F = ma$. Recherchiere dazu im Nolting und beachte die folgende Optikanalogie:

Mechanik	Optik
Schrödingergleichung	Wellenoptik
↓	↓
klassische Mechanik	geometrische Optik

- (S25) □ Schlage alternative Formulierungen der Schrödingergleichung nach. Beachte als Beispiel die *Feynmanschen Pfadintegrale* ausgehend von Langrangian.

.....

In dem Ausdruck kann man schon den *Hamilton-Operator* identifizieren: $H := -(\hbar^2)/(2m) \cdot \mathbb{D}_{(\hbar, \hbar)} + V(t, r(t))$, welchen wir näher in [→ math. Grund. der Quant.] betrachten. Sogar in diesem verschachtelt sehen wir den Impulsoperator $P := -i\hbar \cdot \mathbb{D}_{\hbar}$, auch näher in [→ math. Grund. der Quant.] (*dringend empfohlen*).

.....

- (S26) □ Meditiere eine halbe Stunde über den letzten Sätzen. Lege dir das Skript der Funktionalanalysis

und der mathematischen Grundlagen der Quantenmechanik bei.

.....
 Eine wichtige Neuheit der Quantenmechanik lässt sich hier bereit feststellen: Die *Observablen* werden durch *Operatoren* dargestellt. Diese sind *linear* und (meist) *selbstadjungiert* auf einem geeigneten Hilbertraum. Wir sprechen hierbei von dem *Korrespondenzprinzip*. Wir werden später noch sehen, daß unsere Operatoren die Eigenschaft *hermitesch*, im Sinne von *wesentlich selbstadjungiert*, erfüllen.

Explizit zeitunabhängiger Fall

Einzig im explizit zeitunabhängigen Fall $\frac{d}{dt}\hat{H} = 0$ funktioniert der oben beschriebene Separationsansatz $\psi = \phi \cdot \chi$. In diesem Fall erhalten wir wieder ein verallgemeinertes Eigenwertproblem.

VL 5
 May the forth
 be with you!

.....
 □ Was bedeutet der Ausdruck $\frac{d}{dt}\hat{H}$? Entpacke ihn, indem du die Operatordefinitionen verwendest. (S.27)

Lösungen

Liegen uns Lösungen $(\psi_n)_{n \in I}$ der Schrödingergleichung vor, so können wir diese als *Orthonormalbasis* für den Hilbertraum verwenden. Es gilt demnach

$$\int \varphi_n(x) \cdot \overline{\varphi_m(x)} \lambda(dx) = \begin{cases} 1 & n = m \\ 0 & n \neq m \end{cases} \quad [\text{siehe Skalarprodukt } \mathbb{L}^2(\mathbb{R}^3)].$$

Damit ist auch eine Linearkombination $\Phi = \sum_{i \in I} c_i \cdot \phi_i$ mit $c \in \text{Abb}(I, C^1(\mathbb{R}, \mathbb{C}))$ von Lösungen ϕ_i eine Lösung der Schrödingergleichung.

.....
 □ Diese Aussage beruht auf dem folgenden Satz: *Ist T ein selbstadjungierter Operator mit $\sigma_c(T) = \emptyset$, dann ist $\sigma_P(T)$ höchstens abzählbar und es existiert eine ONB von \mathcal{H} aus Eigenfunktionen von T . Zeige diesen Satz aus der Operatortheorie.* (S.28)

.....
 Setzt man eine solche Lösung in die Schrödingergleichung ein, so erhält man

$$H \left(\sum_{i \in I} c_i \cdot \phi \right) (r(t)) = \sum_{i \in I} c_i(t) \cdot H(\phi_i)(r(t)) = \sum_{i \in I} c_i(t) \cdot E_i(t) \cdot \phi_i(r(t)),$$

und mit ϕ Orthonormalbasis

$$i \hbar \cdot c'_i(t) = E_i c_i(t) \iff c_i(t) = c_i(0) \cdot \exp(-i E_i t / \hbar),$$

wobei die $c_i(0)$ aus den Anfangsbedingungen folgen:

$$c_i(0) = \int \overline{\phi_i(x)} \cdot \psi(0, x) \lambda(dx).$$

Damit können wir im letzten Schritt durch Zusammenfassung eine allgemeine Lösung der zeitabhängigen AWP konstruieren:

$$\Phi(t, r(t)) = \sum_{i \in I} c_i(0) \cdot \exp(-i Et/\hbar) \cdot \phi_i(r(t)).$$

Stationäre Zustände

Im letzten Abschnitt haben wir eine Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung konstruiert. Ist Φ nun eine solche konstruierte Lösung, dann ist für ein spezielles $c \in \text{Abb}(I, C^1(\mathbb{R}, \mathbb{C}))$ mit $c_n(t) \neq 0$ für ein singuläres $n \in I$ für Φ der Ausdruck

$$\Phi(t, r(t)) = c_n(t) \cdot \phi_n(r(t)) \cdot \exp(-i Et/\hbar) = c_n(t) \cdot \Phi(0, r(t)) \cdot \exp(-i Et/\hbar),$$

wobei in dem Absolutbetrag $|\psi(t, r(t))| = |\psi(0, r(t))|$ gilt. Man spricht hier von einem *stationären Zustand*.

1.4 Normierung und Erwartungswert

Wir wollen nun den Wahrscheinlichkeitsaspekt von $|\psi(t, r(t))|^2$ näher betrachten. Wir definieren zunächst das *Maß mit Dichte* $\mu_\psi := \left(\int |\psi(t, x)|^2 \lambda_A(dx) \right)_{A \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^3)}$. Nun ist die

Forderung von $\Gamma := (|\psi(t, r(t))|^2)_{(t, r(t)) \in \text{Def } \psi}$ als Gewichtungsfunktion die Eigenschaft $P_{\mu_\psi}(\mathbb{R}^3) = 1$ unseres gewünschten *Wahrscheinlichkeitsmaßes* P_{μ_ψ}

-
- (S29) □ Zeige für $\psi = c_1 \cdot \psi_1 + c_2 \cdot \psi_2$ mit geeigneten Gewichtungsfunktionen c_1, c_2 die Eigenschaft $\mu_\psi(\mathbb{R}^3) \neq 1$. Ist dies ein Widerspruch zwischen dem Superpositionsprinzip und der Normierung?
-

Nach der Aufgabe folgern wir also, daß es nur bestimmte ψ Funktionen gibt, welche unseren Wunsch erfüllen. Solche genannten *normierbaren* ψ charakterisieren wir also zunächst durch die Existenz des Integralwertes: Solche Funktionen finden wir in der Menge $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$. Weiter wollen wir den μ_ψ Wert in \mathbb{R}^\times vorfinden, damit eine Normierung durch Multiplikation möglich wird. Aus diesen beiden Ideen folgen die Eigenschaften (i) $\psi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ und (ii) $\mu_\psi(\mathbb{R}^3) \neq 0 \Leftrightarrow \psi \neq 0$. Dann ergibt sich eine Normierung durch

$$P_\psi(t, r(t)) := \frac{|\psi(t, r(t))|^2}{\mu_\psi(\mathbb{R}^3)},$$

wobei P_ψ unser gewünschtes *Wahrscheinlichkeitsmaße* ist.

.....

- (S30) □ Zeige, daß alle ψ , welche die Normierungsbedingungen erfüllen, zusammen mit dem Nullvektor $0_{\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)}$ einen Vektorraum bilden. Welcher Raum ist es dann?
- (S31) □ Zeige, daß die ψ zwar einen physikalischen Zustand beschreiben, jedoch selbst als Funktionen nicht eindeutig wählbar sind. Wohin verschiebt sich die Eindeutigkeit?
-

Zeitabhängigkeit der Normierung

Betrachten wir die Zeitableitung unseres auf ψ konstruierten Maßes P_ψ auf einer Menge $A \subseteq \mathbb{R}^3$, müssen wir zunächst sicherstellen, daß $\mu_\psi(\mathbb{R}^3)$ zeitunabhängig ist:

$$\frac{d}{dt}\mu_\psi(\mathbb{R}^3) = \frac{d}{dt} \int |\psi(t, x)|^2 \lambda_{\mathbb{R}^3}(dx) = \int \frac{d}{dt} \overline{\psi(t, x)} \lambda_{\mathbb{R}^3}(dx) + \int \frac{d}{dt} \psi(t, x) \lambda_{\mathbb{R}^3}(dx).$$

Schreibt man die Definitionen sauber aus, dann bleibt nach Kürzung lediglich

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\mu_\psi(\mathbb{R}^3) &= \frac{-i\hbar}{2m} \cdot \int \overline{\psi(t, x)} \cdot D_h^2 \psi(t, x) - \psi(t, x) \cdot D_h^2 \overline{\psi}(t, x) \lambda_{\mathbb{R}^3}(dx) \\ &= - \int D_h \left(\frac{-i\hbar}{2m} \cdot [\overline{\psi} \cdot D_h \psi - \psi \cdot D_h \overline{\psi}] \right) (t, x) \lambda_{\mathbb{R}^3}(dx). \end{aligned}$$

.....
☐ Rechne alle Schritte gründlich nach, um den letzten Ausdruck zu erhalten. [*In der Vorlesung war der Vorgang zu schnell.*] (S.32)

☐ Wende nun den Satz von Gauß auf den letzten Ausdruck an. Wie muss man korrekt Umgehen mit der Hilfsidee „Rand von \mathbb{R}^3 “? Erhalte im letzten Schritt $\frac{d}{dt}\mu_\psi(\mathbb{R}^3) = 0$. (S.33)

☐ Berechne nun die Ableitung $\frac{d}{dt}\mu_\psi(A)$. (S.34)

.....
 Definiere nun den *Wahrscheinlichkeitsstrom*

$$j(t, r(t)) := \frac{-i\hbar}{2m} \cdot [\overline{\psi} \cdot D_h \psi - \psi \cdot D_h \overline{\psi}].$$

Dann kann man die *Kontinuitätsgleichung* wiederfinden:

$$\frac{d}{dt}\Gamma(t, r(t)) + D_h j(t, r(t)) = 0.$$

Erwartungswerte

Als Mittelung über die Wahrscheinlichkeitsverteilung P_ψ definieren wir den *Erwartungswert* als

$$E_{P,r}(t) := \left(\int r \cdot P_\psi(t, r) \lambda_A(dx) \right)_{A \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^3)},$$

und für allgemeinere Funktionen des Ortes $f \in \text{Abb}(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3)$

$$E_{P,r,f}(t) := \left(\int f(r) \cdot P_\psi(t, r) \lambda_A(dx) \right)_{A \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^3)}.$$

Wellenfunktion im Impulsraum

Wir hatten bereits gesehen, daß wir ein Wellenpaket mit $\psi(0, r(t)) = \mathcal{F}\psi(0, (p \circ r)(t))$ konstruieren können. Für ein allgemeineres $t \in \mathbb{R}$ haben wir

$$\psi(t, r(t)) = \int \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \cdot \mathcal{F}\psi(t, p) \cdot \exp\left(-\frac{i p \cdot r(t)}{\hbar}\right) \lambda(dp)$$

und

$$\mathcal{F}\psi(t, (p \circ r)(t)) = \int \psi(t, x) \cdot \exp\left(\frac{i \langle (p \circ r)(t), x \rangle}{\hbar}\right) \lambda(dx).$$

Die Auswirkungen auf die Wahrscheinlichkeitsverteilung sind

$$P_{\mathcal{F}\psi}(t, (p \circ r)(t)) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \cdot P_{\psi}(t, (p \circ r)(t)).$$

.....
 (35) □ Weise die letzte Gleichung nach. Verwende hierzu die Definition von P und nutze Linearität.

(36) □ Berechne nun die Erwartungswerte $E_{P,p}(t)$ und $E_{P,p,f}(t)$.

VL 6

05.05.2023,

11:45

1.5 Operatoren

Zunächst sei ein dringender Verweis zur *Funktionalanalysis I II* und *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik* gegeben.

Wir stellen uns die Frage, ob $\langle p \rangle$ oder $\langle g(p) \rangle$ direkt aus $\psi(t, r(t))$ bei fixiertem $t_0 \in \mathbb{R}$ berechnet werden kann, ohne die *Fouriertransformation* zu verwenden. Zunächst gilt

$$\langle p \rangle_{\psi} := E_{P(\mathcal{F}\psi),p}(t_0) = \frac{1}{(2\pi)^3} \cdot \int p \cdot |\mathcal{F}\psi(t_0, p)|^2 \lambda_{\mathbb{R}^3}(dp),$$

wobei wir den *komplexen Betrag* der Fouriertransformierten von ψ verwenden. Es gilt weiter nach Definition

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \cdot \int p \cdot \int \int \overline{\psi(R)} \cdot \psi(r) \cdot \exp\left(-\frac{i \cdot p \cdot (r - R)}{\hbar}\right) \lambda_{\mathbb{R}^3}(dR) \lambda_{\mathbb{R}^3}(dr) \lambda_{\mathbb{R}^3}(dp),$$

wobei wir durch Umsortieren der Integrale

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \cdot \int \left(\int \left[\overline{\psi(R)} \cdot \psi(r) \cdot i \hbar \cdot D_h(\exp \circ g_R)(r) \lambda_{\mathbb{R}^3}(dR) \right] \lambda_{\mathbb{R}^3}(dr) \right) \lambda_{\mathbb{R}^3}(dp)$$

mit $g_R := (-i \cdot p \cdot (r - R))_{r \in \mathbb{R}^3}$ und $h \in \mathbb{R}^3$. Mit partieller Integration $\int f'(x) \cdot g(x) (\mathbb{1}_{[a,b]} \cdot \mu(dx)) = [f(x) \cdot g(x)]_a^b - \int f(x) \cdot g'(x) (\mathbb{1}_{[a,b]} \cdot \mu(dx))$ folgt

$$- \int \int \overline{\psi(R)} \cdot i \hbar \cdot D_h \psi(r) \lambda_{\mathbb{R}^3}(dR) \lambda_{\mathbb{R}^3}(dr) \cdot \underbrace{\int \frac{1}{(2\pi)^3} \cdot \exp\left(\frac{-i \cdot p \cdot (r - R)}{\hbar}\right) \lambda_{\mathbb{R}^3}(dp)}_{= \int R (\mathbb{1}_{\mathbb{R}^3} \cdot \delta_r)}$$

Mit $\int R (\mathbb{1}_{\mathbb{R}^3} \cdot \delta_r) = 1$ für $r = R$ folgt

$$\int \overline{\psi(r)} \cdot (-i \hbar D_h) \psi(r) \lambda_{\mathbb{R}^3}(dr) =: \langle P \rangle,$$

wobei $\langle \cdot \rangle$ den Erwartungswert des Punktes ist, welcher in diesem Fall der *Operator* P ist.

□ Verifiziere $\mathcal{F}(1)_{x \in \mathbb{R}^3} = \int x \left(\mathbb{1}_{\mathbb{R}^3} \cdot \delta_{\mathbb{R}^3} \right)$. Schreibe hierzu die Fouriertransformation $\mathcal{F}(1)_{x \in \mathbb{R}^3}$ aus. Was ergibt $\int f(x) \cdot \mathcal{F}(1)(x) \lambda_{\mathbb{R}^3}(dx)$? (S.37)

□ Recherchiere das Skalarprodukt auf $L^2(\mathbb{R}, \mathcal{B}(\mathbb{R}), \lambda)$ Räumen. Findest du eine Verbindung zu den betrachteten Integralen? (S.38)

.....

Zusammenfassen

Für einen linearen stetigen Operator $T \in L_S(\mathcal{H})$ auf dem Hilbertraum \mathcal{H} gilt für den Erwartungswert

$$\langle T \rangle_\psi := \int \overline{\psi(r)} \cdot (T \circ \psi)(r) \lambda_{\mathcal{H}}(dr).$$

.....

□ Zeige der vorigen Rechnung folgend die Aussage $\langle g(p) \rangle = \langle g(P) \rangle_\psi$ für $p \in \mathbb{R}^3$ und $P \in L_S(\mathbb{R}^3)$, indem man für analytische g eine Potenzreihenentwicklung durchführt. (S.39)

.....

Wenn $x \in \mathbb{R}^3$ ein Vektor der Form $[3] \rightarrow \mathbb{R}$ ist, dann ist der zugehörige Operator X eine Abbildung aus dem Definitionsbereich von x in den Raum $L_S(\mathbb{R})$ der stetigen linearen Operatoren auf R gemäß $X : [3] \rightarrow L_S(\mathbb{R})$.

Operatoren der Quantenphysik

In der Quantenmechanik beschreiben wir Observable nun durch Identifikation mit Operatoren:

Messgröße	Operator
Energie	„ $\hat{H} = H(t, (r(t), \hat{p}(t)))$ “
Impuls	„ $\hat{p} = -i \hbar D_h$ “
Ort	„ $\hat{r} = (r(x) \cdot x)_{x \in \mathcal{H}}$ “

Wie in der Physik üblich handelt es sich hier allerdings nur um *Sprechweisen*, welche an die mathematischen Hintergründe im physikalisch ausreichenden Sinne *erinnern*.

Die sogenannten *Eigenzustände* sind Lösungen des verallgemeinerten Eigenwertproblems $T(\psi) = \lambda \cdot \psi$ zu dem verallgemeinerten Eigenwert $\lambda \in \mathbb{C}$ und einem Operator $T \in L_S(\mathcal{H})$ über dem komplexen Hilbertraum \mathcal{H} . Ist ψ ein solcher Eigenzustand von T , so ist der Erwartungswert

$$\begin{aligned} E_{T(\psi)}(t_0) &= \int \overline{\psi(t_0, r)} \cdot (T \circ \psi)(t_0, r) \lambda_{\mathbb{R}^3}(dr) \\ &= \int \overline{\psi(t, r)} \cdot \lambda \cdot \psi(t_0, r) \lambda_{\mathbb{R}^3}(dr) = \lambda \cdot E_{P(\psi), r}(t_0)(\mathbb{R}^3) = \lambda. \end{aligned}$$

.....

□ Zeige die Aussage $E_{T(\psi), x}(t)(\mathbb{R}^3) = \lambda^2$. (S.40)

- (S41) □ Zeige die Varianz des Operators $T \in L_S(\mathbb{H})$ mit $\psi \in \mathbb{H}$ als Eigenzustand zu $\lambda \in \mathbb{C}$. Erhalte $\text{var}_\psi T^2 = \lambda^2 - \lambda^2 = 0$. Benutze hierzu das Ergebnis $E_{T^2(\psi),x}(t) = \lambda^2$.

Wir können folgern $\text{var}_\psi(T) = 0$ genau dann, wenn λ ein verallgemeinerter Eigenwert von T bezüglich $T\psi = \lambda \cdot \psi$. Wir nennen den Operator T in diesem Zusammenhang *scharf im Zustand ψ* . Die Hinrichtung dieser Behauptung ist mit der obigen Aufgabe gelöst, für die Rückrichtung betrachten wir ψ als Linearkombination von Eigenzuständen $(\phi_i)_{i \in I}$ des Operators T , dann gibt es $c \in \mathbb{C}^{\text{card}(I)}$ mit $\psi = \sum_{i \in I} c_i \cdot \phi_i$. Das Integral $\int \psi$ ist demzufolge

$$\int \psi = \langle \psi_i, \psi_j \rangle_{\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)} = \delta_n(m),$$

also die gewählte Folge $(\phi_i)_{i \in I}$ stellt eine ONB. Wir können den Erwartungswert von T ausschreiben zu

$$\langle T \rangle_\psi := \int \overline{\psi(\tau)} \cdot \tau \cdot \psi(\tau) \lambda_{\mathbb{R}^3}(d\tau) = \sum_{(i,j) \in I^2} c_i \cdot c_j \cdot \int \overline{\phi_i(\tau)} \cdot \tau \cdot \phi_j(\tau) \lambda_{\mathbb{R}^3}(d\tau).$$

- (S42) □ Fülle die Beweislücke, indem du $\sum_{(i,j) \in I^2} c_i c_j \cdot \int \overline{\phi_i(\tau)} \cdot \tau \cdot \phi_j(\tau) \lambda_{\mathbb{R}^3}(d\tau) = \sum_{n \in I} \lambda_n \cdot |c_n|^2$ für $\lambda \in \mathbb{C}^{\text{card}(I)}$ Eigenwerte zu T und $|c_n|^2 \in [0, 1]$ zeigst.

Mit dem Ergebnis der Aufgabe folgt dann weiter

$$\text{var}_\psi(T) = \sum_{n \in I} \lambda_n^2 \cdot |c_n|^2 - \sum_{(m,n) \in I^2} \lambda_n \cdot \lambda_m \cdot |c_n|^2 \cdot |c_m|^2.$$

Nach Voraussetzung haben wir die Gleichheit $\text{var}_\psi(T) = 0$. Nun wollen wir noch folgern, daß ϕ_n für ein $n \in I$ gleich unserem ursprünglichen ψ sein muss, sodaß ψ als Eigenzustand von T identifizierbar ist.

- (S43) □ Zeige dieses nötige Hilfsergebnis. Zeige hierzu konkret, daß für ein $n \in I$ der Faktor $|c_n|^2$ ungleich Null bleibt, jedoch für alle übrigen $m \in I \setminus \{n\}$ verschwindet. Nutze hierzu $\text{var}_\psi(T) = \langle \psi, (T - \text{id}_{\mathcal{H}}(\langle T \rangle_\psi)^2(\psi)) \rangle_{\mathcal{H}} = 0$ und die Übertragbarkeit der Eigenwerte von T auf $\text{var}_\psi(T)$. Erhalte damit die oder Aussage $|c_i|^2 = 0$ oder $\mu_i = 0$ genau dann, wenn $\langle T \rangle_\psi = \lambda_i$. Führe noch eine Fallunterscheidung für $n, m \in I$ bezüglich der Eigenwerte λ_n, λ_m durch. Folgere mit dieser Aussage den Abschluss der Rückrichtung des Beweises.

Anwendungsbeispiele

Für den Hamiltonoperator H sind alle Eigenwerte $E \in \mathbb{C}$ feste Energien, sodaß $H(\psi) = E \cdot \psi$ für Eigenzustände ψ gilt.

Der Impulsoperator ist ein weiteres anschauliches Paradebeispiel für Eigenzustände. Ist $P(\psi) = -\hbar D_h \psi(x)$ für eine Funktion ψ und ein $h \in \mathbb{R}^3$ gegeben, so ist $P(\psi) = p \cdot \psi$ für $p \in \mathbb{R}^3$ genau dann, wenn ψ eine ebene Welle ist, also $\psi(x) = e^{i \cdot p \cdot x} \cdot \exp(i \cdot \langle p, x \rangle)$ gilt.

.....
 □ Betrachte einmal selbst das Beispiel des Ortsoperators $R \in L_S(\mathbb{L}^2(\mathbb{R}))$ mit $R(f) := (x \cdot f(x))_{x \in \mathcal{H}}$. (S.44)

1.6 Der Kommutator

Die klassische Physik zeichnet sich gegenüber der Quantenmechanik dadurch aus, daß die Messung von zwei Observablen A, B unabhängig voneinander ist und dadurch insbesondere *scharf* messbar sind. In der Quantenmechanik ist dies nicht der Fall, da die Messung von A den Zustand des Systems verändert und dadurch die Messung von B beeinflusst. Wir wollen nun die Unschärfe von zwei Observablen A, B durch den *Kommutator* $[A, B]$ definieren. Dieser wird sich als Antwort auf die bisher ungeklärten Fragen

- (i) Wann können zwei Observablen A, B gleichzeitig scharf gemessen werden?
- (ii) Falls A, B nicht gleichzeitig scharf messbar sind, wie groß ist die Unschärfe?

erweisen. Für die zweite Frage haben wir sogar schon das Anwendungsbeispiel der Unschärfere relation von Heisenberg kennengelernt. Den Kommutator definieren wir hierbei derart, daß bei Kommutativität von $A \circ B$ in \circ der Wert $0_{L_S(\mathcal{H})}$ für alle im Definitionsbereich liegenden Zustände ψ zugewiesen wird. Dies führt uns zu

$$[A, B] := (A \circ B - B \circ A)_{f \in D},$$

wobei $D := \{f \in \text{Def } B : B(x) \in \text{Def } A\} \cap \{f \in \text{Def } A : A(f) \in \text{Def } B\}$ gilt. Mit unserer Terminologie sagen wir nun

A und B gleichzeitig scharf genau dann, wenn $[A, B] = 0$ gilt.

Beweis. Nach Definition sind A, B in ψ an Stelle $n \in I$ aus einer Eigenbasis $(\phi_n)_{n \in I}$ des betrachteten Hilbertraumes \mathcal{H} genau dann scharf, wenn $\lambda_A, \lambda_B \in \mathbb{C}$ existieren, sodaß $A(\psi) = \lambda_A \cdot \psi$ und $B(\psi) = \lambda_B \cdot \psi$ gilt. Dann folgt die Gleichungskette

$$(B \circ A)(\psi) = \lambda_A \cdot B(\psi) = \lambda_A \cdot \lambda_B \cdot \psi = \lambda_B \cdot A(\psi) = (A \circ B)(\psi),$$

woraus die Hinrichtung folgt.

Wenn andersherum $[A, B] = 0$, dann wissen wir $A \circ B - B \circ A = 0$ und

$$(A \circ B)(\psi) = (B \circ A)(\psi) \stackrel{(i)}{=} \lambda_A \cdot B(\psi).$$

Daraus können wir ablesen $B(\psi) \in \text{EV}(A)$ zu λ_A als Eigenwert von $A(\psi) = \lambda_A \cdot \psi$

(i). Damit stimmen die normierten Eigenvektoren von A und B überein, was die Rückrichtung beweist. q.e.d.

Anwendungsbeispiele

In den Ortsoperator $R(f) := (x \cdot f(x))_{x \in \mathcal{H}}$ und $P_h(f) := (-i \cdot D_h f(x))_{x \in \mathcal{H}}$ können wir zunächst in rechter Verkettung $(P \circ R)$ auswerten zu

$$(P \circ R)(f)(x) = (-i D_h f(x))_{x \in \mathcal{H}} (x \cdot f(x)) = -i \frac{d}{dt} t \cdot f(t)|_{t=x},$$

woraus durch Anwendung der Produktregel der Ausdruck $-i \hbar \cdot x \cdot \mathcal{H} (f(x) + f'(x))$ folgt. Insgesamt folgt dann

$$[P, R] = i \hbar \cdot \text{id}_{\mathcal{H}}.$$

.....
 (S45) □ Wir bewiesen einmal, daß $[A, B] \neq -i \hbar \cdot \text{id}_{\mathcal{H}}$ für $A, B \in L_S(\mathcal{H})$, wobei A, B beschränkt und selbstadjungiert sind. Warum gilt hier doch Gleichheit?

(S46) □ Rechne komponentenweise den Abstand $[R_i, P_j]$ nach. Folgere $[R_i, P_j] = i \hbar \cdot \delta_i(j) \cdot \text{id}_{\mathbb{H}}$.

Anschaulich können wir mit diesen Ergebnissen folgern, daß die *Messung in unterschiedliche Richtungen scharf möglich ist*.

Betrachten wir den Hamiltonoperator H im Kommutator mit dem Ortsoperator R , dann gilt stets $[H, R] \neq 0$ genau dann, wenn es keine stationären Zustände mit scharfem Ort gibt (bedenke das *Zerfließen* eines Wellenpaketes). Ist die potentielle Energie $V = 0$, dann gilt andersherum für den Impulsoperator P und den Hamiltonoperator $[H, P] = 0$. Dies ist beispielsweise bei freien Teilchen und ebenen Wellen der Fall.

Hermitsche Operatoren

Eine besondere Operatoreigenschaft für in der Quantenmechanik auftretende *lineare, dicht definierte* Operatoren $T \in L_S(\mathcal{H})$ ist *hermitsch* (auch *selbstadjungiert*), wenn:

VL 8
 10.05.2023,
 08:15

$$\langle \psi_1, T(\psi_2) \rangle_{\mathcal{H}} = \langle T(\psi_1), \psi_2 \rangle_{\mathcal{H}}$$

Beispiele für selbstadjungierte Operatoren sind der Orts- und Impulsoperator.

(S47) □ Zeige die Symmetrie des Orts- und Impulsoperators. Für welche Funktionen $f \in \text{Abb}(\mathbb{R}^3, \mathbb{R})$ gilt ebenfalls Symmetrie?

(S48) □ Zeige die Aussage *Ein linearer stetiger Operator ist genau dann selbstadjungiert, wenn er symmetrisch ist*. Nutze hierzu die Symmetrieeigenschaft $T \subseteq T^{ad}$.

Eigenschaften selbstadjungierter Quantenoperatoren

Als *Quantenoperator* bezeichnen wir meist stetige, lineare, dicht definierte Operatoren. Ist T ein solcher und zusätzlich selbstadjungiert, so können wir einige nützliche Eigenschaften feststellen. Betrachtet man zuerst einmal die Erwartungswerte von T , so finden wir

$$\langle T \rangle_{\psi}^* = \langle \psi, T(\psi) \rangle_{\mathcal{H}}^* = \langle T(\psi), \psi \rangle_{\mathcal{H}} = \langle T \rangle_{\psi}.$$

Damit sind die Erwartungswerte von T reell. Selbiges gilt für die Eigenwerte von T , wodurch das *Punktspektrum* $\sigma_P(T) \subseteq \mathbb{R}$ ist. Dies begründet die physikalisch notwendige *Messbarkeit* von T .

Der zweiten Frage, deren Antwort wir noch schuldig sind, wollen wir im folgenden Kapitel begegnen.

1.7 Die Heisenbergsche Unschärferelation (II)

Die Heisenbergsche Unschärferelation haben wir bereits kennengelernt. Ihren Zusammenhang zur *Operatorunschärfe* wollen wir nun jedoch genauer beleuchten: seien hierzu $\psi \in \mathcal{L}^2(\mathcal{H})$ quadratintegrierbar mit der speziellen Eigenschaft $\int |\psi|^2 = 1$. Seien $A, B \in L_S(\mathcal{H})$ weiter zwei selbstadjungierte Observablen und \mathcal{H} ein Hilbertraum. Mit dem Kommutator können wir die Fragestellung nun neu ausdrücken:

Wenn $[A, B] \neq 0$, wie „klein“ können $\text{var}_\psi(A)$, $\text{var}_\psi(B)$ werden?

Rufe die Definition $\langle T \rangle_\psi := \langle \psi, T(\psi) \rangle_{\mathcal{H}} = \int \text{id}_{\mathcal{H}} E_\psi$. Definiere auch $\Delta T := T - \text{id}_{\mathcal{H}}(\langle T \rangle_\psi)$. Dann definiere

$$\tilde{\psi}_A := \Delta A(\psi), \quad \tilde{\psi}_B := \Delta B(\psi).$$

Damit ist dann die Quadratintegralauswertung

$$\begin{aligned} \int |\tilde{\psi}_A|^2 &:= \int \tilde{\psi}_A^* \cdot \tilde{\psi}_A := \int (\Delta A(\psi))^* \cdot \Delta A(\psi) \\ &\stackrel{\text{sym.}}{=} \int \psi^* \cdot (\Delta A)^2(\psi) = \langle \psi, (\Delta A)^2(\psi) \rangle_{\mathcal{H}} =: \langle \Delta A^2 \rangle = \Delta A^2 \end{aligned}$$

und analog für ΔB . Wir definieren nun $\psi_{A,B} := \tilde{\psi}_{A,B} / \sqrt{\int |\tilde{\psi}_{A,B}|^2}$ mit $\tilde{\psi}_{A,B} := \tilde{\psi}_A$ oder $\tilde{\psi}_B$. Wir sortieren ψ_A, ψ_B nun einer komplexen Zahl $z \in \mathbb{C}$ zu. Hierfür nutzen wir die Form $z_\pm := \psi_A \pm i \cdot \psi_B$. Für die Quadratintegralauswertung folgt damit im komplexen Betrag

$$0 \leq \int |z_\pm|_{\mathbb{C}}^2 = \int |\psi_A|_{\mathbb{R}}^2 + \int |\psi_B|_{\mathbb{R}}^2 \pm i \cdot \left(\int \psi_A^* \cdot \psi_B \mp \int \psi_B^* \cdot \psi_A \right),$$

wobei wir die komplexe Betragsdefinition $|z| = z^* \cdot z$ ausgenutzt haben. Mit $\int |\psi_A|^2 = 1 = \int |\psi_B|^2$ folgt zusammengefasst

$$1 \geq \mp i \cdot \int (\psi_A^* \cdot \psi_B - \psi_B^* \cdot \psi_A).$$

Multiplizieren unter Ausnutzung der Definitionen $\tilde{\psi}_A$ und $\tilde{\psi}_B$ mitsamt der Symmetrie von A, B folgt weiter

$$\Delta A \circ \Delta B \geq \mp i \cdot \int (\tilde{\psi}_A^* \cdot \tilde{\psi}_B - \tilde{\psi}_A \cdot \tilde{\psi}_B^*) = \langle \psi, (\Delta A \circ \Delta B - \Delta B \circ \Delta A)(\psi) \rangle_{\mathcal{H}}.$$

Wir erkennen hier sofort den Kommutator $\Delta A \circ \Delta B - \Delta B \circ \Delta A = [A, B]$. Hier lässt sich nun eine Fallunterscheidung durchführen; wir fahren mit A, B nicht scharf fort. Mit Erwartungswerten umgeschrieben folgt

$$\Delta A \circ \Delta B \geq \mp \frac{i}{2} \cdot \langle [A, B] \rangle_\psi.$$

Die rechte Seite bleibt dabei immer reell, trotz des anmultiplizierten i s. In Betragsschreibweise folgt damit $\Delta A \circ \Delta B \geq 1/2 \cdot |\langle [A, B] \rangle_\psi|$. Daraus ergibt sich eine Optimierungsaufgabe der Funktion $f := (|\langle [A, B] \rangle_\psi|)_{\psi \in \mathcal{H}}$.

-
- (S49) \square Betrachte die Heisenbergsche Unschärferelation in dieser Form für den Ort- und Impulsoperator X, P . Folgere unsere oben zuerst kennengelernte Form der Heisenbergschen Unschärferelation.
- (S50) \square Mit $E : \mathcal{B}(\sigma(T)) \rightarrow L_S(\mathcal{H})$ ist ein *Spektralmaß* gemeint. Überlege dir ein Beispiel für ein solches. Ist $E := ((F_f^* \circ \lambda)(A))_{A \in \mathcal{B}(\mathbb{R})}$ mit $F := ((x^* \cdot f(x))_{f \in L_S(\mathbb{R})})_{x \in \mathbb{R}}$ für $f \in L_S(\mathbb{R})$ ein Spektralmaß?
-

2 Lösen von Bewegungsgleichungen der Schrödingergleichung

VL 9 Die Idee der Betrachtung eines *eindimensionalen Problems* ist zur Übung der Lösung bereits kennengelernter Schrödingergleichungen. Diese Problemstellung eignet sich hierbei besonders aufgrund des relativ geringen Rechenaufwandes und liefert gleichzeitig die Grundlagen allgemeiner quantenmechanischer Probleme. Daß die Problemstellung also nicht vollkommen aus der Luft gegriffen ist, kann man auch an sogenannten *Karbon Nanoröhren* oder *Halbleiter Nanodrähten* erkennen; Hier gelten die Lösungen real in guter Näherung. weiter motiviert die eindimensionale Problemstellung komplexere, separierbare Probleme. Setzt man also die eindimensionale Wellenfunktion $t \mapsto \psi_t \in \mathcal{H}^2(\mathbb{R})$ für $t \in \mathbb{R}$ in die zeitabhängige Schrödingergleichung ein, so erhält man

$$i \hbar \cdot \frac{d}{dt} \psi_t(x) = H(\psi_t)(x) := -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left(\frac{d}{dx} \right)^2 \psi_t(x) + V(Q)(\psi)(x),$$

mit eine DGL mit rechter Seite $F := (-i/\hbar \cdot H(x))_{x \in H^2(\mathbb{R})}$. Für den zeitunabhängigen Fall ergibt sich mit Abkürzung des Hamilton Operators H die Gleichung

$$H(\psi_t)(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left(\frac{d}{dx} \right)^2 \psi_t(x) + V(Q)(\psi_t)(x) = \lambda \cdot \psi_t(x).$$

.....
 (S51) □ Welche Form des Problems suggeriert hier λ ?

Das Lösungsvorgehen stellt sich nun wie folgt dar: Löse die zeitunabhängige Schrödingergleichung $H(\psi) = \lambda \cdot \psi$. Dabei ist der einfachste Fall zunächst $V \in \text{konstant}_{\mathbb{R} \times \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}}$, sodaß man mit *freien Teilchen* zutun hat und *ebene Wellenfunktionen* verwenden kann. Der nächste Fall wäre $V \in \text{stückweisekonstant}_{\mathbb{R} \times \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}}$. Hier werden wir es optisch mit Funktionen der folgenden Form zutun bekommen:

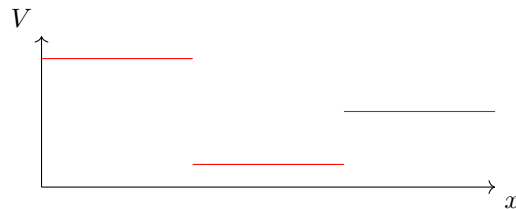


Abbildung 3: Beispiel für stückweise konstante Funktion $V \in \text{Abb}([0, 6], \mathbb{R})$.

.....
 (S52) □ Definiere die Mengen $\text{konstant}_{V \rightarrow W}$ und $\text{stückweisekonstant}_{V \rightarrow W}$ zunächst für beliebige endlichdimensionale Vektorräume V, W und speziell für unsere Lösungskandidaten aus $\mathcal{L}^2(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^3)$.

2.1 Arbeitspunkt 1: Fundamentalsystem und Bedingungsgleichung

Ist $V = 0_{\mathbb{R} \times \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}}$, so fällt der zweite Summand des Hamilton Operators weg und es ergibt sich die Form

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left(\frac{d}{dx} \right)^2 \psi_t(x) = \lambda \cdot \psi_t(x),$$

für eine zeitlich konstante Funktion $t \mapsto \psi_t \in H^2(\mathbb{R})$. Wir können an dieser Stelle die Konstanten der Gleichung zusammenfassen: Durch rüberdividieren des Terms $-\hbar^2/2m$ und Wurzelzug ergibt sich die Form

$$\left(\frac{d}{dx} \right)^2 \psi_t(x) = k_{\lambda,0}^2 \cdot \psi_t(x), \quad k_{\lambda,0} := \frac{i}{\hbar} \cdot \sqrt{2m(\lambda - 0)},$$

wobei wir die Definition des Ortsoperators als $V(Q)(\psi)(x) := \psi(x) \cdot V(x)$ verwendet und in $\lambda \mapsto k_{\lambda,0} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ die Vorfaktoren zusammengefasst haben. Dabei ist die Null im Index ein Indiz für das im Problem verwendete Potential $V = 0 : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$. Wir vereinbaren hier die Schreibweise einer konstanten Zahl $z \in \mathbb{R}$ im Index als Identifikation mit einem konstanten Wert $k_{\lambda,z} \in \mathbb{C}$ als Auswertung der eigentlichen Funktion $k_{\lambda,(z)_{x \in \mathbb{R}}}(0) =: k_{\lambda,z}$.

Zur Konstruktion der Lösung benötigen wir nun Kenntnisse aus der Analysis 3. Wir konstruieren die rechte Seite als autonome lineare Funktion $F := (k_{\lambda,0}^2 \cdot x)_{(t,x) \in \mathbb{R}^2}$. Damit können wir durch Ordnungsreduktion die Hilfslösung $u := ((\psi_t(x), \psi'_t(x)))_{x \in \mathbb{R}}$ konstruieren und das DGL $u'(x) = (u(x)_2, F(x, u(x)_1))$ in die Matrixdarstellung

$$u'(x) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ k_{\lambda,0}^2 & 0 \end{pmatrix} \cdot u(x)$$

bringen. Berechnen wir das charakteristische Polynom $\chi_A(X) = X^2 - k_{\lambda,0}^2$ der Matrix, so finden sich die Eigenwerte $\tau \in \{\pm k_{\lambda,0}\}$ und damit durch $\exp(\tau \cdot x)$ das zugehörige Fundamentalsystem. Damit hat die Lösung der DGL zu F in Linearkombination mit $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$ die Form

$$\psi(x) = c_1 \cdot \exp(\tau_1 \cdot x) + c_2 \cdot \exp(\tau_2 \cdot x).$$

Für spätere Zwecke definieren wir an dieser Stelle $\tau_{\lambda,V,+} := +k_{\lambda,V}$ und $\tau_{\lambda,V,-} := -k_{\lambda,V}$, wobei wir die Indizes $+$ und $-$ als Indikator für die Wahl des Vorzeichens verwenden.

.....

□ Rechne die Definition von k einmal nach, indem du die zeitunabhängige Schrödingergleichung (S.53) in skizzierter Weise umstellst. Mache dir dabei besonders klar, woher das i stammt und was passiert, wenn $\lambda < 0$ gilt. Zeichne dazu einmal den Verlauf der Lösung $\exp(\tau_{\lambda,V,+} \cdot x)$ für $\lambda > 0$ und $\lambda < 0$.

□ Nutze das Ergebnis der Herleitung und stelle nun die Bedingungsgleichung $k_\lambda = L$ nach λ_L (S.54) um, sprich bilde die *Inverse* von k_λ . Wann ist dies möglich? Wir nennen den Wert λ_L den *zu L gehörige Energieeigenwert der Lösung u* . Was fällt dir an dieser Stelle physikalisch auf?

.....

Für allgemeinere $V \in \text{konstant}_{\mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}}$ müssen wir einen Schritt zurücktreten und die um V erweiterte Form der Schrödingergleichung notieren:

$$\begin{aligned} H(\psi_t)(x) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left(\frac{d}{dx} \right)^2 \psi_t(x) + V(Q)(\psi_t)(x). \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left(\frac{d}{dx} \right)^2 \psi_t(x) + V(x) \cdot \psi_t(x) = \lambda \cdot \psi_t(x). \end{aligned}$$

Damit haben wir in dem neuen Setting $k_{\lambda,V}$ als Funktion der Form

$$k_{\lambda,V} := \left(\frac{i}{\hbar} \cdot \sqrt{2m \cdot (\lambda - V(x))} \right)_{x \in \mathbb{R}},$$

wobei wir uns an das Umstellungsschema von oben halten. Nach unserer eingeführten Schreibweise für konstante Funktionen können wir hier schnell schreiben $k_{\lambda,V(0)}$ und durch Definition $V_0 := \text{Eintrag}(\text{Bild}(V)) = V(0)$ für die Schrödingerdifferentialgleichung zum Eigenwert λ

$$\left(\frac{d}{dx} \right)^2 \psi_t(x) = k_{\lambda,V_0}^2 \cdot \psi_t(x).$$

-
- (§55) □ Rechne nach, daß die Exponentiallösung $\psi_t(x) = C_0 \cdot \exp(\tau_{\lambda,V_0,+} \cdot x)$ die Differentialgleichung löst. Finde eine Bedingungsgleichung für C_0 .
-

2.2 Arbeitspunkt 2: Normierbarkeit

Da unser Wurzelbegriff auf dem reellen Zahlenstrahl nicht für alle Potential-Energie Paare greift, müssen wir hier jedoch eine Fallunterscheidung einführen. Ist $V_0 \geq \lambda$, so wird die Differenz $\lambda - V_0$ im negativen reellen Zahlenbereich liegen. Hier nutzen wir Fall (i). Ist $V_0 < \lambda$, so wird das Ergebnis durch den üblichen Wurzelbegriff ohne weitere Betrachtungen abgedeckt; Wir entscheiden uns für Fall (ii).

- (i) In diesem Fall bildet k_{λ,V_0} mit erweitertem komplexen Wurzelbegriff auf eine insgesamt reelle Zahl $z \in \mathbb{R}$ ab, sodaß sich in der Exponentialfunktion mit $\tau_{\lambda,V_0,\pm}$ eine insgesamt reelle Zahl ergibt: Wir erhalten also *reelle* Fundamentallösungen der Form $\psi_t(x) = C_{\pm} \cdot \exp(\tau_{\lambda,V_0,\pm} \cdot x)$.
- (ii) Es ist dann k_{λ,V_0} eine Zahl in \mathbb{R} , sodaß für die Normierung über eine beschränkte Teilmenge $V \subset \mathbb{R}$ im Quadratintegral unter der Identifikation $\tau_1 := \tau_{\lambda,V_0,+}$ und $\tau_2 := \tau_{\lambda,V_0,-}$ in (\star) die Form

$$\begin{aligned} 1 &\stackrel{!}{=} \int_V |\psi(x)| \, \lambda(dx) \stackrel{(\star)}{=} \int_V |c_1 \cdot \exp(\tau_1 \cdot x) + c_2 \cdot \exp(\tau_2 \cdot x)| \, \lambda(dx) \\ &\leq |c_1|^2 \cdot \int |\exp(\tau_1 \cdot x)| \, \lambda_V(dx) + |c_2|^2 \cdot \int |\exp(\tau_2 \cdot x)| \, \lambda_V(dx) \\ &= (|c_1|^2 + |c_2|^2) \cdot \lambda(V), \end{aligned}$$

resultiert, also $(c_1^2 + c_2^2) = 1/\lambda(V)$. Für $\lambda(V) \rightarrow \infty$ folgt also $(c_1^2 + c_2^2) \rightarrow 0$, der Erwartungswert bleibt jedoch nach Konstruktion bei 1 erhalten.

2.3 Arbeitspunkt 3: Stetigkeitsbedingungen an kritischen Stellen

Um konkrete Aussagen über die Verknüpfung der Lösungen an kritischen Stellen $x_0 \in \mathbb{R}$ zu machen, an welchen sich der Funktionswert von $k_{\lambda,V}$ durch eine Wertänderung in V für $x < x_0$ bzw $x > x_0$ selbst ändert und somit die Argumente der Fundamentallösungen

$\exp(\tau_{\lambda,V,\pm} \cdot x)$ sich ändern, müssen wir eine Stetigkeitsbetrachtung an ψ bezüglich x_0 durchführen. Wir fordern für eine Folge $a : \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{R}$, $\lim a = x_0$ die definierende Bedingung

$$\lim \psi(a) = \psi(\lim a) = \psi(x_0).$$

Ferner sogar, um gleich ein Stammfunktionsargument liefern zu können, benötigen wir die *gleichmäßige Stetigkeit* von ψ , also die Existenz eines $\delta \in \mathbb{R}_{>0}$ für jedes $\varepsilon \in \mathbb{R}_{>0}$, sodaß für alle $x, y \in \mathbb{R}$ mit $|x - y| < \delta$ die Abschätzung $|\psi(x) - \psi(y)| < \varepsilon$ folgt. Nun betrachten wir die Ableitung von ψ an der Stelle x_0 . Hierzu verwenden wir die ursprünglich ψ bestimmende Differentialgleichung $H(\psi) = \lambda \cdot \psi$ für ein gegebenes $\lambda \in \sigma_P(H)$. Wir finden in einer Umgebung $r \in \mathbb{R}_{>0}$ die Beziehung

$$\int_{B_r(x_0)} \psi'' = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left(\lambda \cdot \int_{B_r(x_0)} \psi - \int_{B_r(x_0)} V \cdot \psi \right)$$

Mit der gleichmäßigen Stetigkeit von ψ können wir die Existenz einer Stammfunktion Ψ speziell auf $B_r(x_0)$ voraussetzen, sodaß wir in der linken Auswertung $\int_{B_r(x_0)} \psi(x) dx = \Psi(r) - \Psi(-r)$ vorfinden. Als nächstes spalten wir das rechte Integral auf zu

$$\int_{B_r(x_0)} V \cdot \psi = \int_{(-r,x_0)} V \cdot \psi + \int_{(x_0,r)} V \cdot \psi.$$

Da wir $V \cdot \psi$ als konstante Multiplikation mit $V_{<x_0}$ betrachten können, können wir umformulieren zu

$$\int_{(-r,x_0)} V \cdot \psi = V_{<x_0} \cdot \int_{(-r,x_0)} \psi = V_{<x_0} \cdot (\Psi(x_0) - \Psi(-r))$$

und analog $\int_{(x_0,r)} V \cdot \psi = V_{>x_0} \cdot (\Psi(r) - \Psi(x_0))$. Zuletzt erkennen wir noch nach Hauptsatz $\int_{B_r(x_0)} \psi'' = \Psi'(r) - \Psi'(-r)$ und erhalten die Form

$$\begin{aligned} \psi'(x_0 + r) - \psi'(x_0 - r) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \lambda \cdot (\Psi(x_0 + r) - \Psi(x_0 - r)) \\ &\quad - \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left(V_{<x_0} \cdot (\Psi(x_0) - \Psi(x_0 - r)) + V_{>x_0} \cdot (\Psi(x_0 + r) - \Psi(x_0)) \right). \end{aligned}$$

Wir können nun die Stetigkeit der Stammfunktion Ψ in einem Grenzwertprozess $\lim_{r \rightarrow 0}$ ausnutzen, indem wir zunächst $\lim_{r \rightarrow 0} \Psi'(x_0 + r) - \Psi'(x_0 - r) = 0$ erkennen. Weiter gilt $\lim_{r \rightarrow 0} \Psi(x_0) - \Psi(x_0 - r) = 0$ und $\lim_{r \rightarrow 0} \Psi(x_0 + r) - \Psi(x_0) = 0$. Setzen wir dies oben ein, folgt

$$\lim_{r \rightarrow 0} \psi'(x_0 + r) - \psi'(x_0 - r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot (\lambda \cdot 0 + V_{>x_0} \cdot 0 - V_{<x_0} \cdot 0) = 0.$$

Damit ist die Ableitung von ψ an der Stelle x_0 stetig.

Definition 2.1. Stetigkeitsbedingungen

Ist $V : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ ein Einstufenpotential mit kritischer Stelle $x_0 \in \mathbb{R}$, dann wird gleichmäßige Stetigkeit an ψ und Stetigkeit an ψ' als Lösung der Schrödingergleichung $H(\psi) = \lambda \cdot \psi$ zum Eigenwert $\lambda \in \mathbb{R}$ an der Stelle x_0 gefordert. Ferner ist ψ eine Verklebung von Linearkombinationen der Fundamentallösungen $\exp(\tau_{\lambda,V,+} \cdot x)$ und $\exp(\tau_{\lambda,V,-} \cdot x)$.

-
- (S56) □ In der Vorlesung wurde eine Fallunterscheidung über die (Un-)Stetigkeit von ψ bei x_0 durchgeführt, indem die (zweite) „Ableitung“ berechnet wurde. Es wurde gefolgert „ ψ ist stetig“. Recherchiere nach einer Begründung für diese Aussage. Beachte die *schwache Ableitung*.
-

Zusammenfassen

Falls $|V(x)| < 0$ für alle Argumente x , dann folgt die Stetigkeit der Lösung $u = \psi$ auf dem ganzen Lösungsintervall. Ist V eine Verklebung von δ Integralen, so folgt die Stetigkeit von $\frac{d}{dx}\psi(t, x)$ jedoch nicht.

2.4 Potentialbarrieren

Beachte hierzu als Beispiel das Potential

$$V := \left(\begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & x \geq 0 \end{cases} \right)_{(t,x) \in \mathbb{R}^2}, \quad V_0 \in \mathbb{R} \setminus \{0\}.$$

Dann gibt es nach unserer obigen Diskussion die beiden Fälle (i) $\lambda > V_0$ und (ii) $\lambda < V_0$ für eine Lösung der Schrödingereigenwertgleichung $H(\psi) = \lambda \cdot \psi$. In klassischer Betrachtung fällt zunächst auf, daß der Bereich $x \geq 0$ *nicht* erreichbar sein. Wir können unsere Baukastenfunktion $k_{\lambda,V}$ verwenden und nach Definition unseres V auf die beiden Strahlen $\mathbb{R}_{<0}$ und $\mathbb{R}_{\geq 0}$ zerlegen. Damit erhalten wir durch die Fälle oben zwei Betrachtungen:

- (i) Wir haben den Fall $\lambda > V_0$. Damit ergibt sich für k_{λ,V_0} die Form $k_{\lambda,V_0}(x) = i \cdot \sqrt{2m \cdot (\lambda(x) - V_0(Q)(x))}$.
- (ii) Wir haben nun den Fall $\lambda < V_0$. Damit ergibt sich durch $\sqrt{2m \cdot (\lambda(x) - V_0(Q)(x))} =$ die Form $k_{\lambda,V_0}(x) = i \cdot \sqrt{2m \cdot i \cdot (|\lambda(x) - V_0(Q)(x)|)}$.
- (iii) Für einen Energieeigenwert $\lambda < 0$ findet sich keine normierbare Lösung.

Damit erhalten wir die Verklebung

$$\psi(t, x) := \left(C_0 \cdot \begin{cases} \exp(i \cdot k(t, x) \cdot x) + \rho \cdot \exp(-i \cdot k(t, x) \cdot x) & x < 0 \\ \tau \cdot \exp(i \cdot \bar{k}(t, x) \cdot x) & x \geq 0 \end{cases} \right)_{(t,x) \in \mathbb{R}^2}$$

mit *Transmissionskoeffizient* $\kappa \in \mathbb{R}$ und *Reflexionskoeffizient* $\rho \in \mathbb{R}$. Beachten wir nun die kritische Stelle $x = 0$, dann ergeben sich durch die Stetigkeitsbedingung an ψ, ψ' die Bedingungen

$$1 + \rho = \tau \quad i \cdot (k - \bar{k} \cdot \rho) = i \cdot \bar{k} \cdot \tau.$$

Durch Auflösen ergibt sich

$$k, \bar{k} = \frac{k - \bar{k}}{k + \bar{k}} \in \mathbb{C} \quad \tau_{k, \bar{k}} = \frac{2 \cdot k}{k + \bar{k}} \in \mathbb{C}.$$

Die Funktionsverklebung ψ stellt mit diesen Koeffizienten also eine Lösung der Schrödingergleichung.

.....
☐ Überlege dir, an welcher Stelle die Eindimensionalität von x gebraucht wurde. Lässt sich die Lösung auf $x \in \mathbb{R}^d$ erweitern? (§57)

☐ Schreibe in einer Tabelle auf, wie k, \bar{k} in welchem Fall definiert ist. (§58)

☐ Setze das Ergebnis ψ in den Wahrscheinlichkeitsstrom $j := \frac{i}{\hbar} \hbar / (2m) \cdot (\psi^* \cdot \psi' - \psi \cdot (\psi')^*)$ ein. Wofür steht der Ausdruck $\hbar \cdot k / m$? (§59)

.....
Mit der Aufgabe erhalten wir den Wahrscheinlichkeitsstrom

$$j(t, x) = |C_0|^2 \cdot \frac{p(t, x)}{m} \cdot \begin{cases} 1 - |\rho|_{\mathbb{C}}^2 & x \leq 0 \\ \left| \tau \cdot \sqrt{\bar{k}/k} \right|_{\mathbb{C}}^2 & x > 0 \end{cases}.$$

Für die Ebene Welle $C_0 \cdot \exp(i \cdot \langle k, x \rangle)$ folgt analog $j(t, x) = |C_0|^2 \cdot \hbar \cdot k / m$.

VL 10
16.05.2023,
11:45

.....
☐ Verifiziere $|\rho|_{\mathbb{C}}^2 + |\tau|_{\mathbb{C}}^2 = 1$. Was ist die physikalisch anschauliche Begründung? (§60)

.....
In der Fourierform haben wir den Identitätszusammenhang

$$\psi(t, x) = (\mathcal{F}^{-1} \circ \mathcal{F})\psi(t, x).$$

.....
☐ Berechne für die obige eindimensionale zeitunabhängige Lösung $\psi(t, x)$ die Fouriertransformierte $\mathcal{F}\psi(t, x) =: \hat{\psi}(p)$. (§61)

.....
Mit der obigen Aufgabe folgt dann, daß der Impuls p über die Zeit nicht erhalten ist; also $\bar{p} \neq p$ und in der Sprache des Kommutators $[p, H] \neq 0$. Optisch erhalten wir für die Wahrscheinlichkeitsverteilung eine *Aufspaltung* in zwei Peaks; Das Teilchen selbst ist allerdings nicht aufgespalten - die Implikation an dieser Stelle gilt also nicht.

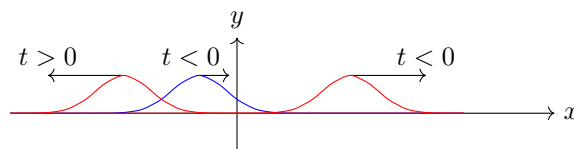


Abbildung 4: Wahrscheinlichkeitsverteilung zu $t < 0$ (blau) und $t > 0$ (rot).

Wir führen nun eine Abkürzung für die allgemeine Lösung des zeitunabhängigen eindimensionalen Problems ein:

$$u_{f, x_0}(t, x) := \begin{cases} f_+(t, x) + \rho \cdot f_-(t, x) & x \leq x_0 \\ \tau \cdot f_{\kappa}(t, x) & x > x_0 \end{cases},$$

wobei der Buchstabe f eine Erinnerung an entsprechende Funktionen f_-, f_+, f_{κ} ist.

.....

Ort	$u_{f,a}$	$\frac{d}{dx}u_{f,a}(t,x)$
$x = a$	$1 + \rho = C + D$	$i \cdot k(t,x) \cdot (1 - \rho) = \kappa(t,x) \cdot (D - C)$
$x = b$	$C \cdot f_{\kappa,-}(t,x) + D \cdot f_{\kappa,+}(t,x)$	$\kappa(t,x) \cdot (D \cdot f_{\kappa,+}(t,x) - C \cdot f_{\kappa,-}(t,x)) = i \cdot k(t,x) \cdot \tau$

(§62) □ Überlege dir die Übersetzungsfunktionen f_+, f_-, f_κ für die oben erhaltene explizite Lösung.

.....
 Beachtlich ist nun, daß das quantenmechanische Teilchen mit einer Wahrscheinlichkeit > 0 auf der rechten Seite der Potentialbarriere vorfindbar ist; dies ist Resultat der Heisenbergschen Unschärferelation:

$$(\Delta x)_{u_{\text{exp},0}} \circ (\Delta H)_{u_{\text{exp},0}} \geq \frac{1}{2} |\langle [H, x] \rangle_{u_{\text{exp},0}}| = \frac{\hbar \cdot \langle p \rangle_{u_{\text{exp},0}}}{2 \cdot m} \neq 0.$$

Daraus folgt für eine Unschärfe $(\Delta x)_{u_{\text{exp},0}} > 0$ eine Unschärfe $(\Delta H)_{u_{\text{exp},0}} \approx p^2/(2m)$, sodaß $\hbar/\bar{p} = 1/\kappa$.

VL 11 15.05.2023, 11:45 Als nächstes Beispiel wollen wir uns ein Potential von der Form einer Indikatorfunktion auf $[a, b] \subseteq \mathbb{R}$. Dann sei $V := (\mathbb{1}_{[a,b]}(x) \cdot V_0)_{x \in \mathbb{R}}$. Für unsere Zusammengeklebte Lösung ergibt sich nun ein weiterer Fall: $x \in \mathbb{R}_{>b}$. Dieser war bisher nicht existent, führt jedoch zu dem berühmten Ereignis des *Quanten-Tunneling*. Unsere Verklebung von $u_{f,a}$ ist demnach

$$u_{f,a} = \begin{cases} f_+(t,x) - \rho \cdot f_-(t,x) & x \in \mathbb{R}_{<a} \\ C \cdot f_{\kappa,-}(t,x) + D \cdot f_{\kappa,+}(t,x) & x \in [a, b] \\ \tau \cdot f_+(t,x-a) & x \in \mathbb{R}_{>b} \end{cases}.$$

Beachte, daß f eine Funktionserinnerung an die bekannte exp Lösung ist, wobei $k(t,x) = p/\hbar \cdot (\sqrt{2m \cdot (E - V(t,x))})$ und $\kappa(t,x) = 1/\hbar \cdot \sqrt{2m \cdot (V(t,x) - E)}$.

(§63) □ Setze die konkreten Funktionen für f ein. Halte dich dabei an die am Anfang des Kapitels gefundene Lösung. Warum steht im dritten Funktionsteil $x - a$?

.....
 Wir beachten nun speziell die Stetigkeitsbedingungen am Rand von $[a, b]$. Diese sind Diese vier Bedingungen führen uns nun auf ein lineares Gleichungssystem mit den Unbekannten C, D, ρ, τ .

(§64) □ Löse das Gleichungssystem. Verifiziere $\tau(t,x) = 1/(\cosh(\kappa(t,x) \cdot a) + i \varepsilon(t,x) \cdot \sinh(\kappa(t,x) \cdot a)/2)$, wobei $\varepsilon(t,x) := (\kappa(t,x)^2 - k(t,x)^2)/(\kappa(t,x) \cdot k(t,x))$.

.....
 Mit der Aufgabe lässt sich nun das Wahrscheinlichkeitsquadrat $|\tau(t,x)|^2$ bestimmen:

$$|\tau(t,x)|^2 = \frac{1}{1 + (\varepsilon(t,x)/4 + 1) \cdot \sinh(\kappa(t,x) \cdot a)^2},$$

wobei $\cosh(x)^2 = 1 + \sinh(x)^2$ verwendet wurde.

(§65) □ Setze einmal die Funktionsdefinitionen in den Ausdruck ein. Quadriere zunächst ε , wobei du die κ und k Ausdrücke einsetzt und eine zusammengesetzte Funktion mit E und V erhältst.

.....

Für große Argumente χ nähert sich die Exponentialfunktionsauswertung $\exp(-\chi)$ der Null, sodaß nach Definition des \sinh gerade

$$\sin(\chi) := \frac{1}{2} \cdot (\exp(\chi) - \exp(-\chi)) \approx \frac{\exp(\chi)}{2},$$

sodaß für die Abschätzung $1 + \hbar \cdot \sinh(\chi)^2 \approx 1 + \hbar \cdot (1/2 \cdot \exp(\chi))^2 \approx \hbar \cdot (1/2 \cdot \exp(\chi))^2$ der Ausdruck $|\tau(t, x)|^2$ durch Inversbildung ausgeschrieben werden kann als

$$|\tau(t, x)|^2 \approx \frac{b \cdot E \cdot (V(t, x) - E)}{V(t, x)^2} \cdot \exp(-2 \cdot \kappa(t, x) \cdot a) \approx \exp\left(-2 \cdot \sqrt{\frac{2m \cdot a \cdot (V(t, x) - E)}{\hbar}}\right).$$

Anwendungsbeispiele

In der Festkörperphysik trifft man auf dieses Phänomen an vielen Stellen, wie beispielsweise dem *Tunnelstrom* oder im Bereich der Supraleiter unter dem Namen *Josephson Effekt*. Ein weiteres Beispiel ist die *kalte Emission*, oder auch bekannt als *Feldemission*.

2.5 Potentialtopf und gebundene Zustände

Unser nächstes Thema beschäftigt sich mit dem Potentialtopf, bei welchem im Unterschied zu den bisherigen Betrachtungen das Potential gegen $x \rightarrow \pm\infty$ nicht gegen 0 geht. Hier sind auch nicht mehr alle Energiewerte $E \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ Eigenwerte des Hamiltonoperators H , was uns auf die *Diskretisierung* durch Punktspektren führen wird. Dieses diskrete Spektrum werden wir antreffen an Potentialorten $V(t, x) < V_\infty$, wobei V_∞ die Fälle $x \rightarrow \pm\infty$ bei konstanter Zeit t beschreibt. Unser Modell basiert auf einem Potential der Form

$$V_{V_0} := (\mathbb{1}_{\mathbb{R} \setminus [a, b]})(x) \cdot V_0)_{(t, x) \in \mathbb{R}^2},$$

wobei $V_0 \in \mathbb{R}_{>0}$ eine Konstante ist. Eine Grenzfallbetrachtung ist zusätzlich für $\lim_{V_0 \rightarrow \infty} V_{V_0}$ interessant: Für einen Abfall der Form $\exp(-\kappa(t, x) \cdot x)$ folgt für den symmetrischen Fall $a = -b$ im Betrag

$$\lim_{V_0 \rightarrow \infty} \exp\left(-\sqrt{2m \cdot (V_{V_0}(t, x))} \cdot |x| / \hbar\right) = 0$$

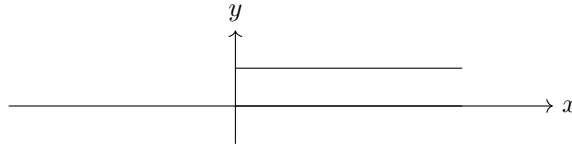
für $x \in \mathbb{R} \setminus [-b, b]$. Zu Lösen ist nun die Schrödingergleichung im Bereich $[-b, b]$. Erinnern wir uns an unsere zusammengeklebte Lösung $u_{f, -b}(t, x)$, so muss an den Rändern die Bedingung

$$u_{f, a}(t, \pm b) = C \cdot f_{\kappa, \pm}(t, x) + D \cdot f_{\kappa, \mp}(t, x) = 0,$$

wobei wir hier auf die Matrixschreibweise wechseln können:

$$\begin{pmatrix} f_{\kappa, +}(t, b) & f_{\kappa, -}(t, b) \\ f_{\kappa, +}(t, -b) & f_{\kappa, -}(t, -b) \end{pmatrix} \circledast \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = 0_{\mathbb{R}^2}.$$

-
- Löse das Gleichungssystem für k und E und f im Exponentialansatz. Finde die Diskretisierung durch die Periodizität von $\exp(i \cdot \phi)$. (S.66)
- Betrachte die Fälle $n \in \text{gerade}$ und $n \in \text{ungerade}$. Erhalte $u_{\text{exp}, a}(t, x) = \sqrt{2/a} \cdot \cos(\pi \cdot n \cdot x/2)$ und $u_{\text{exp}, a}(t, x) = \sqrt{2/a} \cdot \sin(\pi \cdot n \cdot x/2)$. Trage die Lösungen in verschiedenen n graphisch auf. (S.67)
-



Interessant ist dabei, daß das Energieminimum nicht bei 0 liegt:

$$E_1 = \frac{\pi^2 \cdot \hbar^2}{2ma} > 0.$$

Dies ist begründet durch die *Unschärferelation*, denn durch niedrigere Unschärfe des Ortsoperators folgt eine größere Unschärfe des Impulsoperators, was zu einer größeren kinetischen Energie führt. Eine weitere Beobachtung ist der Knotenzusammenhang $\mathcal{K}_{u,n} = n - 1$. Die Grenzwertbetrachtung $V_0 \rightarrow \infty$ führt ebenfalls zu einem Knick in der Funktion $u_{\text{exp},a}(t, x)$ an den Rändern von $[-b, b]$.

Potentialtopf mit endlich hohen Wänden

Betrachte als nächstes Beispiel das Potential

$$V_{V_0} := \mathbb{1}_{[a,b]}(x) \cdot -V_0, \quad V_0 \in \mathbb{R}_{>0}.$$

VL 12,
 22.05.2023,
 11:45

Das Verhalten von $t \mapsto |\tau(t, x)|^2$ ist durch

2.6 Der harmonische Oszillator I

Der harmonische Oszillator ist ein Mechanik gut bekanntes schwingendes System, an-treffbar beispielsweise in Form einer schwingenden Masse. Ihn zeichnet dabei durch die *harmonisch* angedeutete lineare Rückstellkraft $F = -k \cdot x$ aus, welche Resultat des Kraft-potentials $V = 1/2 \cdot k \cdot x^2$ ist. Ein quantenmechanisches Pendant wären zwei gekoppelte, schwingende Moleküle, welche in der Festkörperphysik noch auf sogenannte *Gitterschwin-dungen* bezüglich der Anzahl schwingender Moleküle verallgemeinert werden. Wir werden uns nun dem quantenmechanischen harmonischen Oszillator mithilfe der *analytischen Methode* nach Sommerfeld nähern. Zu einem späteren Zeitpunkt werden wir uns ebenfalls mit dem *algebraischen Ansatz* nach Dirac beschäftigen. Ausgangspunkt ist wieder die Eigenwertgleichung $H(\psi) = \lambda \cdot \psi$ mit dem Hamiltonoperator $H := p^2/(2m) + k/2 \cdot x^2$ mit $k \in \mathbb{R}$ als Kopplungskonstante. Daraus ergibt sich nach Definition wieder

$$\left(\frac{d}{dx}\right)^2 \psi(t, x) + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot \left(\lambda - \frac{k}{2} \cdot x^2\right) \psi(t, x) = 0.$$

Wir werden nun zur Lösung der Gleichung einen Exponentialansatz $\psi := (\exp(p(x)))_{x \in \mathbb{R}}$, wobei wir stillschweigend $t \in \mathbb{R}$ konstant wählen. Um die physikalischen Dimensionen abzulegen, wählen wir die Transformationen

$$u(x) := \sqrt{\frac{k}{\hbar}} \cdot x \quad \eta(E) := \frac{2 \cdot E}{\hbar \cdot k/m}, \quad k = \omega \cdot m.$$

Setzt man die Inversen von u, η ein, so erhält man

$$\left(\frac{d}{dx}\right)(\psi \circ u^{-1})(x) + (\eta^{-1}(x) - u^{-1}(x)^2) \cdot (\psi \circ u^{-1})(x) = 0.$$

Für genügend große Ergebnisse $u(x) \gg 1$ folgt $\left(\frac{d}{dx}\right)(\psi \circ u^{-1})(x) \approx u^{-1}(x)^2 \cdot (\psi \circ u^{-1})(x)$ und als Lösung $(\psi \circ u^{-1})(x) \propto \exp(\pm u^{-1}(x)^2/2)$. Mittels Aufspaltung

$$(\psi \circ u^{-1})(x) = \exp(-u^{-1}(x)^2/2) \cdot (\nu \circ u)(x)$$

erhalten wir eine transformierte Form der Differentialgleichung

$$\left(\left(\left(\frac{d}{dx} \right)^2 - 2 \cdot u^{-1}(x) \cdot \frac{d}{dx} + (\eta^{-1} - 1) \right) \circ \nu^{-1} \right)(x) = 0.$$

.....

□ Unter welchen Voraussetzung gilt die Aufspaltung von $\psi \circ u^{-1}$? (S.68)

.....

Lösen wir die Differentialgleichung mit dem Potenzreihenansatz $\nu := \lim \sum_{i=0}^{\infty} a_i \cdot (u^{-1})^i$, so erhalten wir

$$\begin{aligned} \lim \sum_{n=2}^{\infty} a_n \cdot (n \cdot (n-1)) \cdot u^{-1}(x)^{n-2} \\ - 2 \cdot \lim \sum_{n=1}^{\infty} u(x) \cdot a_n \cdot n \cdot u^{-1}(x)^{n-1} + \eta^{-1} \left(\lim \sum_{n=0}^{\infty} a_n \cdot u^{-1}(x)^n \right) + 1 = 0. \end{aligned}$$

.....

□ Bestimme die Rekursionsgleichung $a_{n+1} = h \cdot a_n$. (S.69)

□ Rechne nach, daß es ein $N \in \mathbb{N}$ gibt, sodaß alle Folgenglieder der gesuchten Reihe gleich Null sind. (S.70)

.....

Im Falle $a_{n+1}/a_n \rightarrow 2/\mu$ für ein $\mu \in \mathbb{R}_{>0}$ ist der Reihengrenzwert nicht mehr normierbar, sodaß das Ergebnis als physikalische Lösung nicht infrage kommt. Also nehmen wir an, daß es nach der Aufgabe ein $N \in \mathbb{N}$ gibt, sodaß die Reihe abbricht. Dann gilt für die Eigenwertfolge des Hamiltonoperators

$$\lambda = \left(\hbar \cdot \omega \cdot \left(n + \frac{1}{2} \right) \right)_{n \in \mathbb{N}_0}.$$

Es handelt sich dabei um die Quantisierungsbedingung des harmonischen Oszillators.

.....

□ Rechne die Eigenwertfolge nach, indem du die Abbruchbedingung der Reihe ausnutzt. Nutze dann die Definition von η und finde einen Ausdruck für λ . (S.71)

.....

In der Lösung ψ finden wir nun für jeden Schritt $n \in \mathbb{N}$ Lösungspolynome, welche wir als die sogenannten *Hermitepolynome* H_n identifizieren. Sie haben für die ersten fünf Fälle die folgende Form.

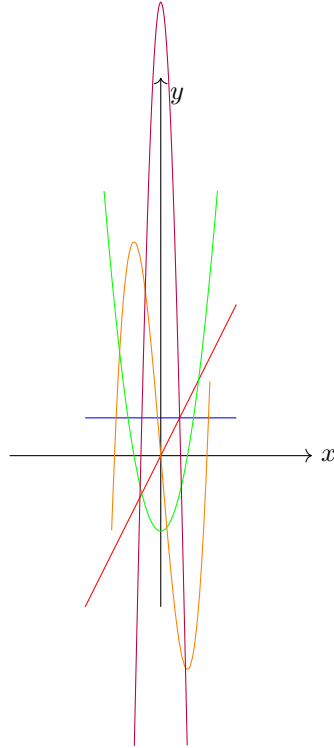


Abbildung 5: Die ersten fünf Hermitepolynome: H_0 in blau, H_1 in rot, H_2 in grün, H_3 in orange und H_4 in lila.

Diese Polynome bilden selbst eine Orthonormalbasis des Hilbertraums $L^2(\mathbb{R})$, sodaß wir jede gegebene Wellenfunktion zerlegen können in die gefundenen Lösungen.

3 Drehimpuls und Bewegung im Zentralfeld

VL 13, Gleich zu Beginn betonen wir, daß wir im Folgenden die Absicht haben, in *drei Dimensionen*
 24.05.2023, zu arbeiten. Wir betrachten also nun $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ und entsprechende Operatoren. Die optische
 08:15 Form der Eigenwertgleichung bleibt jedoch erhalten: $H(\psi) = \lambda \cdot \psi$. Für ein Elektron-Proton
 Paar betrachten wir das Coulombpotential mit

$$V := \left(-\frac{e^2}{4\pi \cdot \varepsilon_0} \cdot \frac{1}{\|x\|_3} \right)_{x \in \mathbb{R}^3}.$$

3.1 Orientierungs- und Drehimpulsalgebra

Wir betrachten hier die Drehgruppe SO_3 . Diese besteht dabei aus allen invertierbaren Funktionen f aus \mathbb{R}^3 nach \mathbb{R}^3 , welche in der Verkettung mit der transponierten die Identität ergeben, also in Formeln

$$SO_d := \{A \in \mathbb{R}^{d \times d} : A \otimes A^T = A^T \otimes A = I_n, \det(A) = 1\}.$$

Für eine bessere Ordnung beschreiben wir die Matrix A , welche einen Vektor $x \in \mathbb{R}^3$ um die Achse $a \in \mathbb{R}^3$ genau um den Winkel $\varphi \in \mathbb{R}$ dreht, als

$$\mathcal{D}_{\varphi,a} := \text{Eintrag} \left\{ A \in SO_3 : \frac{\langle x, Ax \rangle}{\|x\|_2 \cdot \|Ax\|_2} = \cos(\varphi), \text{ rotiert um } a \right\}.$$

Dies ist äquivalent zu der Schreibweise

$$\mathcal{D}_{\varphi,a}x = x + \frac{a}{\|a\|_2} \times x.$$

.....
 (S72) □ Formuliere zunächst die Definition von $\mathcal{D}_{\varphi,a}$ aus. Zeige dann, dass $\mathcal{D}_{\varphi,a}$ eine Drehmatrix ist.
 Betrachte dann die alternative Schreibweise und verifiziere, dass diese äquivalent ist.

Der Drehimpulsoperator

Um die Drehung in der Anwendung zu sehen, betrachten wir den Drehimpulsoperator $L \in L_S(\mathbb{R}^3)$. Diesen definieren wir durch $L := r \times p$, wobei wir mit r und p den Orts- und Impulsoperator bezeichnen. Wendet man die Drehung auf ein $\psi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ an, gilt

$$\mathcal{D}_{\varphi,a}\psi(x) = \psi(x) - \frac{a}{\|a\|_2} \times x \cdot D_{1^3_{\mathbb{R}}}\psi(x) = \psi(x) - \frac{\overset{\circ}{i}}{\hbar} \cdot \frac{a}{\hbar}$$

$\cdot (x \times p)\psi(x)$, wodurch wir einen neuen Zusammenhang

$$\mathcal{D}_{\varphi,a} = I_3 - \frac{\overset{\circ}{i}}{\hbar} \cdot a \cdot L$$

mit unserem definierten Drehimpuls L vorfinden.

.....

□ Zeige, daß L ein selbstadjungierter Operator ist. (S.73)

□ Zeige durch die Symmetrie des Zentralpotentials $V : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ die Kommutatoreigenschaft $[\mathcal{D}_{\varphi,a}, H] = 0$, wobei H der Hamiltonoperator ist. (S.74)

.....
 Aus der Aufgabe und der Schreibweise für $\mathcal{D}_{\varphi,a}$ folgern wir weiter $[L, H] = 0$.

□ Beschäftige dich mit der Komponentenschreibweise der Operatoren H und L . Zeige $[L_i, L_j] \neq 0$ für $i \neq j$. Was bedeutet hier die Notation? (S.75)

.....
 Mit der Aufgabe folgern wir nun eine allgemeinere: Für $(i, j) \in [3]^2$ gilt

$$[L_i, L_j] = i\hbar \cdot \sum_{k=1}^3 \varepsilon_{ijk} \cdot L_k \iff L \times L = i\hbar \cdot L,$$

wobei ε als Rechenhilfe unter dem Namen *Levi-Civita-Symbol* bekannt ist.

□ Folgere nun als letzte Eigenschaft aus den bisherigen $[L^2, H] = 0$ und $[L^2, L] = 0$. (S.76)

.....
 Betrachten wir den Erwartungswert $\langle L^2 \rangle_\psi$, so finden wir nach Definition

$$\int_{\mathbb{R}} \bar{\psi} \cdot L^2(\psi) = \sum_{i \in [3]} \int_{\mathbb{R}} \overline{L_i(\psi)} \cdot L_i(\psi) \geq 0.$$

Somit sind durch Selbstadjungiertheit und positiv definit die Eigenwerte von L^2 im reellen und größer Null: $L^2\psi = \hbar^2\lambda\psi$. Definiere $L_{\pm} := L_x \pm i \cdot L_y$. Weitere Eigenschaften sind dann

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}} \bar{\psi} \cdot L_{\pm}(\psi) &= \int_{\mathbb{R}} (L_{\mp}(\psi)) \cdot \psi & [L_z, L_{\pm}] &= \pm\hbar \cdot L_z \\ [L_+, L_-] &= 2\hbar \cdot L_z & [L^2, L_{\pm}] &= 0 \\ L_+ \circ L_- &= L_x^2 + L_y^2 + \hbar & L_z L^2 &= L_- \circ L_+ + \hbar L_z + L_z^2. \end{aligned}$$

.....
 □ Zeige die Eigenschaften. (S.77)

.....
 Um den Zusammenhang zwischen L und L_{\pm} zu erkennen, behaupten wir nun $L_{\pm}(\psi)$ ist Eigenvektor von L_z mit Eigenwert \hbar . Wir finden

$$(L_z \circ L_{\pm})(\psi) = (L_{\pm} \circ L_z)(\psi) \pm \hbar L_{\pm}(\psi) = \hbar \cdot (m \pm 1) \cdot L_{\pm}(\psi),$$

wobei $L_z(\psi) = \hbar \cdot m \cdot \psi$ gelte.

□ Zeige ψ ist Eigenvektor von L^2 mit Eigenwert $\hbar^2 \cdot \lambda$. Zeige dann auch $L_{\pm}(\psi)$ ist Eigenvektor mit selbem Eigenwert. (S.78)

.....

Ist ψ ein normierbarer Eigenvektor zu L^2 , dann ist $L_{\pm}(\psi)$ ebenfalls normierbar:

$$\int_{\mathbb{R}^3} |L_z(\psi)|^2 = \int_{\mathbb{R}^3} \bar{\psi} \cdot (L_{\mp} \circ L_{\pm})(\psi) = \hbar^2 \cdot (\lambda - m^2 \mp m) \cdot \int_{\mathbb{R}^3} |\psi|^2 \geq 0.$$

Wir können also sehen, daß nicht unbedingt jeder Eigenvektor von L^2 sich zur Normierbarkeit eignet.

.....
 (§79) □ Betrachte die Eigenwertgleichungen (i) $L^2\psi_{l,m} = \hbar^2 \cdot l \cdot (l+1) \cdot \psi_{l,m}$, (ii) $L_z(\psi_{l,m}) = \hbar \cdot m \cdot \psi_{l,m}$ und (iii) $L_{\pm}(\psi_{l,m}) = \hbar \cdot \sqrt{l \cdot (l+1) - m \cdot (m \pm 1)} \cdot \psi_{l,m}$. Was sagen die Zahlen $l, m \in \mathbb{N}$ aus?

3.2 Ortsdarstellung und Kugelflächenfunktionen

Wir suchen nun einen konkreten Ausdruck für die Eigenvektoren $\psi_{l,m} \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ der Eigenwertgleichung $L^2(f) = \lambda \cdot f$. Nach der Definition von L steht in ausgeschriebener Form zunächst ein monströs aussehender Ausdruck:

$$\begin{aligned} L^2(f(x)) &= -\hbar \cdot (x \times D_h)^2(f(x)) = \hbar^2 \cdot l \cdot (l+1) \cdot f(x) \\ L_3(f(x)) &= -i \hbar \cdot (x \times D_h)_3^2(f(x)) = \hbar \cdot m \cdot f(x), \end{aligned}$$

mit Identifikation L_z und L_3 . Unter der Transformation in Kugelkoordinaten f_K und *Trennung der Variablen* der Form $f(x) = R(\|r\|_2) \cdot Y(\vartheta, \varphi)$ und $Y(\vartheta, \varphi) = \Phi(\varphi) \cdot \Theta(\vartheta)$ kann man zunächst $\Phi(\varphi) = \exp(i \cdot m \cdot \varphi)$ setzen. Es ist dann zu Lösen eine Gleichung der Form

$$\left(\frac{d}{dz} (1-z^2) \cdot \frac{d}{dz} + \left(l \cdot (l+1) - \frac{m^2}{1-z^2} \right) \right) (\Theta(\vartheta)) = 0.$$

Wir nennen die Gleichung auch *verallgemeinerte Legendre Gleichung*, deren Lösung die *verallgemeinerten Legendre Polynome* sind. Diese sind von der Form

$$\Theta(\vartheta) = \sum_{k=0}^l a_k \cdot P_k^m(\cos(\vartheta)),$$

wobei P_k^m die *asoziierten Legendre Polynome* sind. Diese sind wiederum von der Form

$$P_k^m(z) = (-1)^m \cdot (1-z^2)^{\frac{m}{2}} \cdot \frac{d^m}{dz^m} \cdot P_k(z).$$

Für Y finden wir eine Gleichung der Form

$$Y(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \cdot \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \cdot P_e(\cos(\vartheta)) \cdot \exp(-i m \cdot \varphi),$$

die sogenannte *Kugelflächenfunktion*.

Jetzt sind zwei Wochen Ferien.

Bloch Theorem

Das Bloch Theorem entspringt der Physik kondensierter Materie und besagt, daß bei angenommenem *periodischen Potential* $V \in \text{periodisch}_{\mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}}$ die Lösungen der Schrödingergleichung die Form einer *ebenen Welle* haben, welche in eine weitere periodische Funktion $p \in \text{periodisch}_{\mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}}$ eingehüllt ist. Ist a die Periode von V , dann müssen wir an die Lösung der Schrödingergleichung die Forderung

$$||\psi(x)||^2 = ||\psi(x+a)||^2$$

stellen. Damit haben wir allerdings bereits manifestiert, daß $\psi(x+a)$ nur eine *gedrehte* Version von $\psi(x)$ sein kann, da Streckung durch die Norm beschränkt wird. Wir finden also eine Zahl $\zeta_a \in (-\pi, \pi)$, sodaß die Bedingung

$$\psi(x) = \exp(i \cdot \zeta_a) \cdot \psi(x)$$

erfüllt ist.

Definition 3.1. Bloch Funktion

Sei $\psi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^d)$ eine Lösung der Schrödingergleichung mit periodischem Potential V . Dann heißt ψ *Bloch Funktion*, falls es eine weitere periodische Funktion u gibt, so daß $\psi = (\exp(i \cdot \langle k, x \rangle_{\mathcal{H}}) \cdot u(x))_{x \in \text{Def } \psi}$ gilt.

4 Mathematische Grundlagen

4.1 Zustände und Observablen

VL 16

4.2 Der Hilbertraum

14.06.2023,
08:15

Wir verstehen unter *Hilbertraum* einen Vektorraum \mathcal{H} mit Skalarkörper \mathbb{C} , welcher mit einem Skalarprodukt $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{H}}$ ausgestattet ist. Ist \mathcal{H} vollständig, so fällt er in die Kategorie der *Hilberträume*. Ist \mathcal{H} zusätzlich separabel, so besitzt er eine höchstens abzählbare Basis [\rightarrow LinA 1, mGdQM].

VL 17

15.06.2023,
10:00

4.3 Uneigentliche Dirac Vektoren

In vielen Fällen ist der betrachtete Hilbertraum \mathcal{H} von einer *nicht abzählbaren Dimension*. Ein Hilbertraumelement $|\psi\rangle$ lässt sich in der *Diracnotation* darstellen als Summation über eine linear unabhängiges orthogonales Vektortupel $(|\alpha_i\rangle)_{i \in \mathbb{N}}$, welches einen Kontinuumsübergang

$$|\psi\rangle = \sum_{i \in \mathbb{N}} \langle \alpha_i | \psi \rangle \cdot |\alpha_i\rangle \rightsquigarrow \int_{\mathbb{R}} \langle \alpha_t | \psi \rangle \cdot |\alpha_t\rangle dt$$

besitzt. In der Vollständigkeit ist die Verwendung einer Linearform aus dem Dualraum \mathcal{H}^* der Form $\langle \phi |$ dann gerade

$$\langle \phi | \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}} \langle \alpha_t | \psi \rangle \cdot \langle \phi | \alpha_t \rangle dt.$$

-
- ☐ Finde mathematische Analogien zu der präsentierten Diracnotation. (80)
 - ☐ Wodurch ist die Existenz des $\langle \phi |$ gesichert? Ist die Zuordnung eindeutig? Recherchiere hierzu (81)
- den *Satz von Riesz-Fréchet*.

Algebraische Dualräume

Als Dualraum eines Vektorraums V mit Grundkörper K verstehen wir die Menge aller *Homomorphismen* $\phi : V \rightarrow K$, bezeichnet als $V^* := \text{Hom}(V, K)$. Das *Skalarprodukt* auf V ist dabei definiert als

$$v \mapsto (w \mapsto \langle v, w \rangle_V) =: \Phi_v \in V^*.$$

Aus der vorigen Aufgabe und dieser Definition können wir nun bemerken, daß es eine Bijektion zwischen V und V^* gibt [\rightarrow 13.1.7]. Diese Abbildung Φ_v notieren wir als $\langle v |$ und schreiben als Auswertung $\Phi_v(w) =: \langle v | (w) =: \langle v | w \rangle = \langle v, w \rangle_V$.

-
- ☐ Definiere für $c \in K$ und $v, w \in V$ die Addition und Skalarmultiplikation in V^* . (82)
-

Adjungierter Operator

Den zu $T \in L_S(\mathcal{H})$ mit $\text{Def}(T) \subseteq \mathcal{H}$ *adjungierten Operator* T^* definieren wir über die Beziehung

$$\langle T(\psi)|\phi \rangle = \langle \psi|\varphi \rangle,$$

wobei $\psi, \phi \in \text{Def}(T)$. Dann ist T^* gerade die *eindeutige* Abbildung $T^* : \text{Def}(T) \rightarrow \mathcal{H}$, $\psi \mapsto \varphi$. Es gilt dann nach Definition $\langle T(\psi)|\phi \rangle = \langle \psi|T^*(\phi) \rangle$.

.....

(§83) □ Zeige die Eindeutigkeit von T^* zu T . Beachte hierzu [→ 15.1.1].

(§84) □ Rechne die Eigenschaften (i) $(f^*)^* = f$, (ii) $(f + g)^* = f^* + g^*$, (iii) $(\lambda f)^* = \bar{\lambda} f^*$ für $f, g \in V^*$ und $\lambda \in K$ nach.

.....

Nach den Eigenschaften der adjungierten Abbildung gilt dann im oft betrachteten Spezialfall $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^d)$ gerade

$$\int_{\mathbb{R}^d} \psi_1(x)^* \cdot T(\psi_2)(x) \, dx = \int_{\mathbb{R}^d} T^*(\psi_1)(x) \cdot \psi_2(x) \, dx.$$

Selbstadjungierter Operator

Im Falle $T = T^* \in L_S(\mathcal{H})$ spricht man von einem *selbstadjungierten Operator*. Es gilt dann $\langle T(\psi)|\phi \rangle = \langle \psi|T(\phi) \rangle$ für alle $\psi, \phi \in \text{Def}(T)$.

Beschränkter Operator

Lässt sich die Norm $\|T(x)\|_{\mathcal{H}}$ unter eine lineare Skalierung $C \cdot \|x\|$ mit *festem* $C \in \mathbb{R}$ quetschen, so nennen wir T *beschränkt*. Dies ist in endlichdimensionalen Räumen immer der Fall, jedoch nicht im unendlichdimensionalen Fall. Wir unterscheiden in letzterem Fall zwischen *selbstadjungierten* und *symmetrischen* Operatoren. Hierzu brauchen wir noch eine Definition:

$$T \in \text{dichtdefiniert}_{\mathcal{H}} : \Longleftrightarrow \overline{\text{Def}(T)} = \mathcal{H}.$$

Damit ist T genau dann *symmetrisch*, wenn $\text{Def}(T) \subseteq \text{Def}(T^*)$ und $T = T^*|_{\text{Def}(T)}$. Im Fall der Gleichheit definieren wir T als *selbstadjungiert*.

.....

(§85) □ Zeige den endlichdimensionalen Fall. Finde ein Gegenbeispiel im unendlichdimensionalen Fall.

.....

VL 18 Der Umgang mit einem Hilbertraumelement und einer linearen Abbildung aus \mathcal{H}^*
 16.06.2023, von der Form $\lambda \in \mathcal{H}$, $l \in \mathcal{H}^*$ ist durch punktweise Multiplikation in der Auswertung in
 11:45 $x \in \mathcal{H}$ gegeben:

$$(\lambda \cdot f)(x) := \lambda \cdot f(x).$$

Dies wollen wir einmal festhalten.

Dyadisches Produkt

Definition 4.1. Dyadisches Produkt

Für Vektoren $x, y \in \mathcal{H}$ ist das *dyadische Produkt* mit der zugeordneten Linearform $\Phi_y \in \mathcal{H}^*$ definiert als

$$(\lambda \cdot \Phi_y) := (\lambda \cdot \Phi_y(x))_{x \in \mathcal{H}}.$$

Wir schreiben in Diracscher Notation auch

$$(|\alpha\rangle \langle \beta|)(|\psi\rangle) := |\alpha\rangle \cdot \langle \beta|\psi\rangle.$$

Setzt man in die Operatorauswertung $A(x)$ für $x \in \mathcal{H}$, $A \in L_S(\mathcal{H})$ die Basisdarstellung bezüglich \underline{v} als Basisvektortupel von \mathcal{H} ein, so gilt

$$A(x) = A\left(\sum_{i \in I} \langle \underline{v}_i, x \rangle \cdot \underline{v}_i\right) = \sum_{i \in I} \langle \underline{v}_i, x \rangle \cdot A(\underline{v}_i).$$

.....

□ Unter welchen Voraussetzungen existiert eine solche Basis? (S.86)

□ An der Tafel haben wir die Dirac Notation für obige Basisdarstellung verwendet. Kläre die (S.87)

Bedeutung von

$$A(x) := \sum_{i \in I} r_i \cdot |\alpha_i\rangle = \sum_{(i,j) \in I^2} q_i \cdot \langle \alpha_i | A(\alpha_i) \rangle |\alpha_j\rangle = \sum_{(i,j) \in I^2} |\alpha_j\rangle \cdot \langle \alpha_j | A(\alpha_i) \rangle \cdot \langle \alpha_i | \psi \rangle,$$

wobei α eine Basis von \mathcal{H} sei. r_j sei weiter definiert als $r_j := \sum_{i \in I} \langle \alpha_j | A(\alpha_i) \rangle q_i = \langle \alpha_j | A(x) \rangle$.

.....

Unitärer Operator

Optisch leisten unitäre Operatoren die *Winkel- und Längentreue* von Vektoren, also insbesondere die *Erhaltung des Skalarproduktes*. Mathematisch können wir sie durch folgende Definition greifbar machen.

Definition 4.2. Unitärer Operator

Ein Operator $U \in L_S(\mathcal{H})$ heißt *unitär*, wenn $U^* = U^{-1}$ oder äquivalent $U \circ U^* = \text{id}_{\mathcal{H}}$ gilt.

VL 19
03.07.2023,
11:45

4.4 Das Eigenwertproblem

Bei der Schrödingergleichung handelt es sich um ein Eigenwertproblem der Form $H(\psi) = \lambda \cdot \psi$ mit $H \in L_S(\mathcal{H})$, $\psi \in \mathcal{H}$ und $\lambda \in \mathbb{C}$ für ein komplexen Hilbertraum \mathcal{H} . Es heißt

dann λ Eigenwert und ψ Eigenvektor zum Eigenwert λ . Gibt es mehrere Eigenvektoren zu einem Eigenwert, so bilden diese einen Unterraum, den Eigenraum zum Eigenwert λ . Wir bezeichnen dann λ als *n-fach entartet*, falls $\dim E_\lambda = n$. Die Sammlung aller Eigenwerte ist das sogenannte *Punktspektrum* $\sigma_P(H)$ von H .

-
- (88) □ Überlege dir jeweils Beispiele zu einem (i) diskreten Punktspektrum, (ii) kontinuierlichen Punktspektrum oder (iii) gemischten Punktspektrum.
- (89) □ Betrachte noch einmal den Spektralsatz selbstadjungierter linearer Operatoren. Formuliere ihn einmal für *normale* $H \in L_S(\mathcal{H})$ und notiere die Beziehung zur selbstadjungierten Formulierung.
- (90) □ Zeige die Existenz einer ONB aus Eigenvektoren für selbstadjungierte Operatoren mithilfe des Spektralsatzes der Funktionalanalysis.
- (91) □ Zeige für eine ONB $\varphi \in \mathcal{H}^I$ die Eigenwertgleichungsbeziehung $A(\varphi_i) = \lambda_i \cdot \varphi_i$ für $A \in L_S(\mathcal{H})$ und $\lambda_i \in \mathbb{C}$. Welche Forderung stellt sich an die Indexmenge I ?
- (92) □ Berechne $q_n(A)$ als Funktionsauswertung mit q als n -te Potenzfunktion.
- (93) □ Nutze den Einsetzungshomomorphismus um das Polynom $p(A)$ n -ten Grades zu beschreiben.
-

4.5 Messprozess in der Quantenmechanik

Wir wollen uns nun mit dem fundamentalen Standbein der Quantenmechanik beschäftigen. Für ein vorliegendes quantenmechanisches, also mikroskopisches System gilt die *Messung* als Zusammenhang zu dem makroskopischen, nicht quantenmechanischen Beobachter.

Im klassischen System ist die Auswirkung des Beobachters durch eine Messung, also eine Störung des Systemablaufes, im Prinzip beliebig klein. In der Quantenmechanik ist dies jedoch durch die Unschärferelation nach unten beschränkt. Eine weitere Besonderheit ist der Verlust von Informationen nach der Messung; Misst man beispielsweise den Ort, so kann man nicht erneut den Impuls messen, da die Wellenfunktion nach der Messung nicht mehr die ursprüngliche ist. Wir wollen uns nun mit dem Ablauf einer quantenmechanischen Messung beschäftigen.

VL 20 Mögliche Ergebnisse eines Messprozesses eines Operators T sind seine Eigenwerte
05.07.2023, $\lambda \in \sigma_P(T)$. Da T im physikalischen Sinne s.a. ist $\lambda \in \mathbb{R}$, denn nur reelle Ergebnisse sind
08:15 physikalisch sinnvoll. Die Wahrscheinlichkeit dafür, daß λ im Zustand ψ gemessen wird, ist

$$P(\lambda) = |\langle \lambda | \psi \rangle|^2,$$

wobei $|\lambda\rangle$ der Eigenvektor zu λ ist. Dieser Zusammenhang ist auch als *Born'sche Regel* bekannt. Wurde die Messung durchgeführt, so kollabiert die Wellenfunktion zu $|\lambda\rangle$, d.h. der Zustand ist nach der Messung $|\lambda\rangle$.

-
- (94) □ Betrachte als Beispiel $T = X$ als Ortsoperator in einer Dimension mit $P(x) = |\langle x | \psi \rangle|^2 = |\psi(x)|^2$ für $\psi \in L^2(\mathbb{R})$ und $x \in \mathbb{R}$. Wie sieht dann eine Gaußsche Wellenfunktion nach der Messung aus?
-

Konsequenzen

Durch eine Messung kann ein Zustand „präpariert“ werden in dem Sinne, daß bei einer erneuten Messung mit demselben Operator genau der erste gemessene Wert λ messbar sein wird.

.....

□ Betrachte das Operatortupel $T : n \mapsto T_n$ mit $T_n \in L_S(\mathbb{R})$ für $n \in \{1, 2, 3\}$. Notiere die Form der Eigenwerte $\lambda \in \sigma_P(T)$ und zugehörigen Eigenvektoren ψ_λ für T . Zeige weiter für beliebiges $\psi \in \text{Def}(T)$ die Eigenschaft $\langle r | \psi \rangle = \psi(r)$. Zeige für den Impuls den Zusammenhang $\langle P | \psi \rangle = (\mathcal{F}\psi)(p)$ in der Fouriertransformierten.

.....

Einen Zustand ψ können wir dann in einer gegebenen ONB $\underline{e} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^3$ ausdrücken durch

$$\psi = \int_{\mathbb{R}} |\underline{e}_x\rangle \langle \underline{e}_x | \psi \rangle dx = \int_{\mathbb{R}} \psi(\underline{e}_x) (|\underline{e}_x\rangle) dx.$$

.....

□ Wir wollen uns noch einmal dem Spektralsatz widmen. Wir wissen $T = \int_{\sigma(T)} \lambda E(d\lambda)$ für $T \in L_S(\mathcal{H})$ s.a. Nun wollen wir in Dirac Notation über denselben Zusammenhang sprechen.

- (i) Notiere das Integral als Summe. Wo findet sich der Projektor $P_\lambda := |\lambda\rangle \langle \lambda|$ wieder?
- (ii) Implementiere die Entartung, indem du zu einem Eigenwert g_n verschiedene Eigenvektoren zulässt. Erweitere den Ausdruck aus (i) durch $P_{\lambda, g_\lambda} := \sum_{i \in [g_\lambda]} |\lambda_i\rangle \langle \lambda_i|$ für g_λ als Entartungsgrad. Wir bezeichnen dabei P_λ als Projektor auf den Eigenraum E_λ .

.....

Mit der Aufgabe können wir nun den Bewertungsprozess neu definieren.

$$P(\lambda) = |\langle \lambda | \psi \rangle|^2 = \langle \lambda | \psi \rangle \cdot \langle \lambda | \psi \rangle^* = \langle \lambda | \psi \rangle \cdot \langle \psi | \lambda \rangle = \langle \psi | P_\lambda | \psi \rangle.$$

Beachten wir die Entartung, so folgt wieder mit der Aufgabe

$$\sum_{\lambda} P(\lambda \in \sigma_P(T)) = \sum_{\lambda \in \sigma_P(T)} \langle \psi | P_\lambda | \psi \rangle = \langle \psi | \left(\sum_{\lambda \in \sigma_P(T)} P_\lambda \right) | \psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle = 1.$$

Damit erhalten wir als Zustand nach der Messung den Zusammenhang

$$|\Psi\rangle = \frac{P_\lambda(\psi)}{\|P_\lambda(\psi)\|} = \frac{P_\lambda(\psi)}{\sqrt{\langle \psi | P_\lambda^* P_\lambda | \psi \rangle}} \stackrel{(*)}{=} \frac{P_\lambda(\psi)}{\sqrt{\langle \psi | P_n | \psi \rangle}},$$

wobei wir bei (*) die Eigenschaft der *orthogonalen Projektion* verwendet haben. Im Falle der Entartung gilt $P_\lambda(\psi) = |\lambda\rangle \langle \lambda | \psi \rangle = (\sqrt{P(\lambda)} \cdot \exp(i\varphi))(\psi)$.

.....

□ Wir identifizieren nun P_λ mit $E(\{\lambda\})$, wobei E das zu T gehörige *Spektralmaß* sei. Folgere durch die Eigenschaften des Spektralmaßes (i) $E(\{\lambda\})$ ist wieder Observable, (ii) $P_\lambda^2 = P_\lambda$ und (iii) $\sigma_P(P_\lambda) = (\sigma_P \circ E)(\{\lambda\}) = \{0, 1\}$. Was misst also E bzw P zusammenfassend?

.....

4.6 Postulate der Quantenmechanik

Wir können nun zusammenfassend die Postulate der Quantenmechanik mit den kennengelernten Mitteln formulieren.

- (i) Die Zustände eines Systems werden durch Vektoren $\psi \in \mathcal{H}$ mit \mathcal{H} als Hilbertraum beschrieben.
- (ii) Die Messung einer physikalischen Größe entspricht der Anwendung eines s.a. linearen Operators $T \in L_S(\mathcal{H})$.
- (iii) Die Zeitentwicklung ist beschrieben durch die zeitabhängige Schrödingergleichung $i \cdot \hbar \cdot \frac{d}{dt} \psi(t) = H(\psi(t))$ für $\psi : \mathbb{R}_{\geq 0} \rightarrow \mathcal{H}$.

4.7 Erweiterung: Gemischte Zustände

Für einen Zustand $\psi \in \mathcal{H}$ gibt es einen *Dichteoperator* $\rho \in L_S(\mathcal{H})$ als *statistischen Operator*. Misst man nun mit T den Eigenzustand $|\lambda\rangle$ mit Eigenwert λ und Wahrscheinlichkeit P_λ , so würde man für einen zweiten Operator A den Erwartungswert (im diskreten Fall)

$$\begin{aligned}
 \langle A \rangle_{|\lambda\rangle} &= \int_{\sigma(A)} \lambda E(d\lambda) = \sum_{\lambda \in \sigma(A)} P_\lambda \cdot \langle \lambda | A | \lambda \rangle \\
 &= \sum_{\lambda \in \sigma(A)} \sum_{(i,j) \in I^2} P_\lambda \cdot \langle \lambda | \varphi_i \rangle \langle \varphi_i | A | \varphi_j \rangle \langle \varphi_j | \lambda \rangle \\
 &= \sum_{(i,j) \in I^2} \underbrace{\langle \varphi_i | A | \varphi_j \rangle}_{\text{Messung von } A, =: A_{i,j}} \cdot \underbrace{\sum_{\lambda \in \sigma(A)} P_\lambda \cdot \langle \lambda | \varphi_i \rangle \langle \varphi_j | \lambda \rangle}_{\text{Präparation, } =: \rho_{i,j}} \\
 &= \sum_{(i,j) \in I^2} A_{i,j} \cdot \rho_{j,i} = \sum_{i \in I} (A \cdot \rho)_{i,i} = \text{Spur}(A \cdot \rho).
 \end{aligned}$$

Damit ist die Dichtematrix gegeben durch $\rho_A = \sum_{\lambda \in \sigma(A)} P_\lambda \cdot |\lambda\rangle \langle \lambda|$.

4.8 Harmonischer Oszillator (II)

Wir wollen nun ohne Basiswahl den harmonischen Oszillator mit Hamiltonoperator

$$H = \left(\frac{P^2(x)}{2m} + \frac{1}{2} \cdot m \cdot \omega^2 \cdot X^2(x) \right)_{x \in \mathcal{H}}$$

durch die Eigenwertgleichung $H(\psi) = \lambda \cdot \psi$ für $\psi \in \mathcal{H}$ beschreiben. Wir transformieren unter den Funktionen $\Phi := (x/x_0)_{x \in \mathcal{H}}$ und $\Psi := (p/p_0)_{p \in \mathcal{H}}$ mit $x_0 := \sqrt{\hbar/(m \cdot \omega)}$ und $p_0 := \hbar/x_0 = \sqrt{m \cdot \omega \cdot \hbar}$ und erhalten dann

$$\tilde{H} = \left(\frac{(\Psi(P)^2)(x)}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \cdot (\Phi(X)^2)(x) \right)_{x \in \mathcal{H}}.$$

-
- (98) □ Zeige, daß \tilde{H} beschrieben werden kann durch $\tilde{H} = \hbar \cdot \omega \cdot (\Phi(X)^2 + \Psi(P)^2)$. Wofür steht die Energie $\hbar \cdot \omega$?
-

Um weiter die Umformung von \tilde{H} voranzutreiben, definieren wir zur Hilfe die *Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren* a und a^* durch

$$a := \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (\Phi(X) + i \cdot \Psi(P)).$$

Nun benötigen wir noch einige Eigenschaften, deren Nachweis wir hier auslagern wollen.

-
☐ Berechne die Verkettung $a \circ a^*$ und $a^* \circ a$. Zeige damit dann $a^* \circ a + a \circ a^* = \Phi(X)^2 + \Psi(P)^2$. (S.99)

Mit den beiden Aufgaben können wir dann den Hamiltonoperator \tilde{H} schreiben als

$$\tilde{H} = \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega \cdot (a^* \circ a + a \circ a^*) = \hbar \cdot \omega \cdot \left(a^* \circ a + \frac{1}{2} \right).$$

Die letzte Gleichheit folgern wir durch den Kommutator $[a, a^*] = 1$. Damit können wir $a \circ a^* - a^* \circ a = 1$ umformen zu $a \circ a^* = a^* \circ a + 1$ und verwenden.

-
☐ Nehme die Definitionen von a und a^* herbei und berechne durch einsetzen die Kommutatorrelation $[a, a^*] = 1$. Verwende hierzu die Ortsoperatoreigenschaften $[\Phi(X), \Phi(X)] = 0$, $[\Psi(P), \Psi(P)] = 0$ und $[\Psi(P), \Phi(X)] = -[\Phi(X), \Psi(P)]$. (S.100)

Die Eigenwertsuche von \tilde{H} verlagert sich nun zu einer Eigenwertsuche des Operators $N := a^* \circ a \in L_S(\mathcal{H})$. Die wesentliche Selbstadjungiertheit überträgt sich dabei von a auf N durch die Beziehung $N^* = (a^* \circ a)^* = a^* \circ (a^*)^* = a^* \circ a = N$.

-
☐ Zeige für den Kommutator von N mit a die Beziehung $[N, a] = -a$. und für $[N, a^*] = a^*$ analog. Zeige dazu $[a, a] = 0$ und $[a^*, a] = -1$. (S.101)

- ☐ Zeige $\sigma_P(N) \subseteq \mathbb{R}_{>0}$. Betrachte dabei für $N(\psi) = \lambda \cdot \psi$ das Skalarprodukt $\langle \psi, N(\psi) \rangle$ für $\psi \in \text{Def}(N)$ und nutze die Definition $N = a^* \circ a$. (S.102)

VL 22
 12.07.2023,
 11:45

Eigenschaften des Zähloperators N

-
☐ Berechne $\|N\| = 0, \|a(x)\|^2 = \lambda$ und $\|a^*(x)\|^2 = \lambda$. (S.103)
☐ Berechne die Auswertung $a(|n\rangle)$ für $|n\rangle \in \text{Def}(a)$ und $a^*(|n\rangle)$ für $|n\rangle \in \text{Def}(a^*)$. Bestimme dadurch die Eigenwertfolgen. (S.104)

Mit der Aufgabe erkennen wir dann die Operatorauswertungsfolgen

$$(a(|n\rangle))_{n \in \mathbb{N}} = \left(\begin{cases} 0 & n = 0 \\ 1/\sqrt{n} \cdot |n-1\rangle & n \in \mathbb{N} \end{cases} \right)_{n \in \mathbb{N}_0},$$

$$(a^*(|n\rangle))_{n \in \mathbb{N}} = \left(\begin{cases} 1/\sqrt{n+1} \cdot |n+1\rangle & n \in \mathbb{N} \\ 0 & n = 0 \end{cases} \right)_{n \in \mathbb{N}_0}.$$

Der Vorteil der Wahl von N als Ausdruck in $H = \hbar\omega \cdot (N + 1/2)$ ist nun der optisch identische Ausdruck der zugehörigen Eigenwertfolge $E(n) = \hbar\omega \cdot (n + 1)$ für $n \in \mathbb{N}_0$.

5 Störungstheorie

Bisher haben wir uns ausschließlich der zeitunabhängigen Schrödingergleichung $H(\psi) = \lambda \cdot \psi$ gewidmet. Bisherige Beispiele waren dabei immer *analytisch lösbar* (z.B. harm. Osz., Wasserstoffatom, Potentialtöpfe). Dies ist für die meisten Potentiale V jedoch nicht mehr möglich (z.B. Wasserstoffmolekül, anharmonischer Oszillator, Wasserstoffatom im el. Feld). Hier verwendet man die *Störungstheorie* zur approximativen Lösung. Es gibt dabei verschiedene Kategorien der Lösung:

- *Variationsmethoden*. Prominente Beispiele sind hier die *Variationsmethode von Rayleigh* und die *Variationsmethode von Hylleraas*, bzw. das *Variational Quantum Eigensolver (VQE)*-Verfahren.
- *Quasiklassische Näherung*. Ein Beispiel wäre hier die *Wagner-Kramers-Brillouin-Näherung*.
- *Störungstheorie*. Hier werden wir im weiteren ansetzen.

.....
 (§105) □ Nähere $\sqrt{26}$ mithilfe von Taylorentwicklung an.

5.1 Stationäre Störungstheorie

VL 23 In diesem Subkapitel betrachten wir die *Rayleigh-Schrödinger* Störungstheorie in nicht-entarteter und entarteter Form.
 12.07.2023,
 08:15

Nicht entartete Störungstheorie

Wir nehmen an, wir können den Hamiltonoperator zerlegen in die Form $H = H_0 + H_s \in L_S(\mathcal{H})$, wobei H_0 ein exakt lösbares Eigenwertproblem beschreibt und H_s eine Störung (in Form eines Operators) darstellt. Angenommen $E_0(n)$ sei die Eigenwertfolge zu H_0 . Dann kann man nun unter der Annahme, daß H_s eine *kleine* Störung ist, eine Näherung durch variable Skalierung der Störung einführen. Dabei erzeugt man eine Störungsfunktion $\Phi_\lambda := H_0 + \lambda \cdot H_s$ für ein $\lambda \in [0, 1]$. Mit dieser Funktion ist für $\lambda \rightarrow 1$ eine gute Näherung der gestörten Eigenwerte möglich.

.....
 (§106) □ Stelle den Zusammenhang zwischen der Störungsfunktion Φ_λ und der Ableitung einer (endlich-dimensionalen) Funktion $df(x)(h) \approx f(x) + f(x+h)$ her. Ist hier ein sinnvoller Vergleich möglich?

Ist E_n die (noch unbekannte) Eigenwertfolge von H , so lassen könnte man versuchen, Eigenzustand und Eigenwert in Form einer Potenzreihe darzustellen als

$$\begin{aligned} |n\rangle &= |n_0\rangle + \lambda \cdot |n_1\rangle + \lambda^2 \cdot |n_2\rangle + \dots \\ E_n &= E_{0,n} + \lambda \cdot E_{1,n} + \lambda^2 \cdot E_{2,n} + \dots \end{aligned}$$

Die Konvergenz dieser Potenzreihen ist jedoch im Allgemeinen in der Physik nicht garantiert oder bewiesen. Nach Voraussetzung an H_0 sind zunächst die Eigenvektoren $|n_0\rangle$ orthogonal. Diese Forderung könnten wir ebenso für die entwickelten und gesuchten Eigenvektoren $|n\rangle$ erheben. Dies stellt sich jedoch nicht als geschickteste Wahl heraus, weshalb wir die Orthogonalitätsbedingung nach außen erweitern und fordern $\langle n_0|n\rangle = 1$. Daraus kann man nun die Beziehung

$$1 \stackrel{!}{=} \langle n_0|n\rangle = \left\langle n_0 \left| \lim_{i=0}^{\infty} \lambda^i \cdot |n_i\rangle \right. \right\rangle = \langle n_0|n_0\rangle + \left\langle n_0 \left| \lim_{i=1}^{\infty} \lambda^i \cdot |n_i\rangle \right. \right\rangle$$

folgern, wodurch mit $\langle n_0|n\rangle = 1$ das Verschwinden des zweiten Summanden gefordert wird. Daraus können wir wiederum folgern, daß alle Korrekturvektoren $|n_i\rangle$ für $i \in \mathbb{N}$ orthogonal zum eindeutig gelösten Grundvektor $|n_0\rangle$ sein müssen. Setzen wir nun den Restterm in Φ_λ ein, so erhalten wir

$$\Phi_\lambda \left(\lim_{i=1}^{\infty} \lambda^i \cdot |n_i\rangle \right) = \left(\lim_{i=1}^{\infty} \lambda^i \cdot E_{i,n} \right) \cdot \left(\lim_{i=1}^{\infty} \lambda^i \cdot |n_i\rangle \right).$$

Per Koeffizientenvergleich können wir nun unter Einbindung des ungestörten Problems ein nicht abbrechendes Gleichungssystem aufstellen. Wir sammeln dabei die Koeffizienten der λ :

$$\begin{aligned} H_0 |n_0\rangle &= E_{0,n} |n_0\rangle \\ H_0 |n_1\rangle + H_s |n_0\rangle &= E_{0,n} |n_1\rangle + E_{1,n} |n_0\rangle, \end{aligned}$$

wobei die unterstrichenen Terme die Unbekannten sind. Wir wenden nun auf die Seiten der Gleichung die duale Abbildung zu $|n_0\rangle$ an und erhalten dadurch

$$\langle n_0|H_0(|n_1\rangle)\rangle + \langle n_0|H_s(|n_0\rangle)\rangle = \langle n_0|E_{0,n} \cdot |n_1\rangle\rangle + \langle n_0|E_{1,n} \cdot |n_0\rangle\rangle.$$

Da H_0 selbstadjungiert, können wir $\langle n_0|H_0(|n_1\rangle)\rangle = \langle H_0(|n_0\rangle)|n_1\rangle = \langle E_{0,n} |n_0\rangle|n_1\rangle = E_{0,n} \cdot \langle n_0|n_1\rangle$ schreiben. nach Voraussetzung ist $\langle n_0|n_1\rangle = 0$, weshalb der erste Summand verschwindet. Mit $\langle n_0|n_0\rangle = 1$ und $\langle n_0|n_1\rangle = 0$ können wir die Gleichung nun umformen zu

$$E_{1,n} = \langle n_0|H_s(|n_0\rangle)\rangle.$$

Damit haben wir die erste Korrektur der Eigenwerte gefunden.

.....

□ Entwickle den Eigenvektor $|n_1\rangle$ in einer Basis \underline{v} des betrachteten Hilbertraumes \mathcal{H} . (S.107)

□ Wende analog die duale Abbildung zu einem verschiedenen Eigenvektor $|m_0\rangle$ mit $|m\rangle \neq |n\rangle$ auf dieselbe Gleichung an. Welche Skalarprodukte verschwinden? Stelle die Gleichung nach $\langle m_0|n_1\rangle$ um. (S.108)

.....

Mit den Aufgaben finden wir nun das Ergebnis

$$|n_1\rangle = \sum_{i \in \mathcal{B}} |m\rangle \cdot \frac{\langle m_0|H_s(|n_0\rangle)\rangle}{E_{0,n} - E_{0,m}}$$

für eine Vektorraumbasismenge \mathcal{B} . Diesen Koeffizientenvergleich können wir nun beliebig weiterführen.

-
- (§109) □ Was sagt diese Rechnung über die Entartung von $E_{0,n}$ aus?
- (§110) □ Fahre den Koeffizientenvergleich für die zweite Ordnung fort.
- (§111) □ Zeige den Rekursionszusammenhang $E_{k,n} = \langle n_0 | H_s(|n_{k-1}\rangle) \rangle$.
- (§112) □ Recherchiere zum *Stark-Effekt*.
-

VL 24

14.07.2023,

11:45

Beispiel: Wasserstoff im elektrischen Feld

Die folgende Situation ist auch als *Stark-Effekt* bekannt. Wir betrachten ein Wasserstoffatom im elektrischen Feld. Der Hamiltonoperator H_0 im idealen Fall ist gegeben durch

$$H_0 = \left(\frac{P^2(x)}{2 \cdot m} + \frac{e^2}{4 \cdot \pi \cdot ||x||} \right)_{x \in \mathcal{H}},$$

$$H_1 = (-e \cdot E \cdot Q_3)_{x \in \mathcal{H}}, \quad E \in \mathbb{R}.$$

Dabei ist $n \mapsto Q$ wie gewohnt das Ortsoperatortupel. Das Ziel ist nun, die Auswirkung von H_1 möglichst gering zu gestalten.

.....

- (§113) □ Schätze hierzu das elektrische Feld im Atom selbst ab. Nutze dazu den Quotienten $E_R/(e \cdot r_B)$ mit r_B als *Bohrschem Atomradius* und E_R als *Rydberg-Energie*.
-

Daraus können wir folgern, das künstlich erzeugte Magnetfelder sehr viel kleiner als das atomare Magnetfeld sind. Wir können also H_1 im Rahmen der sinnvollen Näherung als Störung betrachten. Die Skalarproduktauswertung bringt dann

$$\langle n, l, m | H_1 | \tilde{n}, \tilde{l}, \tilde{m} \rangle := -e \cdot E \cdot \langle n, l, m | Q_3 | \tilde{n}, \tilde{l}, \tilde{m} \rangle,$$

und unter Verwendung des Kommutators mit L_3 durch $[L_3, Q_3] = [[P_1 \circ Q_2 - P_2 \circ Q_1], Q_3] = 0$ folgt dann

$$0 = \langle n, l, m | [L_3, Q_3] | \tilde{n}, \tilde{l}, \tilde{m} \rangle = \hbar \cdot (m - \tilde{m}) \cdot \langle n, l, m | Q_3 | \tilde{n}, \tilde{l}, \tilde{m} \rangle.$$

Daraus erhalten wir für gleiche Magnetquantenzahlen m und \tilde{m} die Bedingung $\langle n, l, m | Q_3 | \tilde{n}, \tilde{l}, \tilde{m} \rangle = 0$. Daraus können wir zwei Auswahlregeln der Form $m = \tilde{m}$ und $\tilde{l} = l \pm 1$ formulieren, damit die Skalarproduktauswertung Null ergibt.

.....

- (§114) □ Betrachte den Zustand $|1, 0, 0\rangle$ für $n = 1$, $l = 0$ und $m = 0$. Wie kann man nun durch die Auswahlregeln das Ergebnis $\langle 1, 0, 0 | H_1 | 1, 0, 0 \rangle = 0$ erklären?
-

Betrachte nun die zweite Störungsordnung. Der zugehörige Term ist

$$E_{1,0,0}(2) = e^2 \cdot E^2 \cdot \lim_{\tilde{n}=1} \sum \frac{|\langle \tilde{n}, 1, 0 | Q_3 | 1, 0, 0 \rangle|^2}{E_{1,0,0}(0) - E_{\tilde{n},1,0}(0)},$$

wobei wir $E_{\tilde{n},1,0}(0) = E_{1,0,0}(0)/\tilde{n}^2$ verwenden können. Durch Ausklammern erhält man dann

$$\frac{e^2 \cdot E^2 \cdot a_B^2}{E_{1,0,0}(0)} \cdot \lim_{\tilde{n} \rightarrow \infty} \sum_{\tilde{n}=1}^{\infty} \frac{|\langle \tilde{n}, 1, 0 | Q_3 | 1, 0, 0 \rangle|^2}{1 - 1/\tilde{n}^2}.$$

Für den Reihengrenzwert findet man den Wert $9/8$, sodaß sich das Ergebnis vereinfacht zu $E_{1,0,0}(2) = -4\pi\epsilon_0 \cdot E^2 \cdot a_B^3 \cdot 9/4$.

.....

□ Recherchiere weiter zur Berechnung der zweiten Störungsordnung im Rahmen des Stark-Effekts. (§115)

.....

5.2 Entartete Störungstheorie

Wir betrachten das Wasserstoffatom für eine Quantenzahl $n > 1$ wegen n^2 facher Entartung. Wir haben zu lösen

$$\frac{\langle n_i^{(0)} | H_1 | n_j^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_n^{(0)}} \rightarrow \infty,$$

da $E_n^{(0)} - E_n^{(0)} \rightarrow 0$. Zur Lösung wollen wir H_1 diagonalisieren und auf den Eigenraum zu dem Eigenwert E_1 einschränken. Dann ist

$$H|_{\text{Eig}(E_n)} = E_n \cdot I_{\text{deg}(\text{Eig}(E_n))} + H_1|_{\text{Eig}(E_n)}.$$

Ist H_1 diagonalisierbar, so finden wir eine Basiswechselmatrix $U \in ?$ mit $H_1 = U^{-1} \cdot \bar{H}_1 \cdot U$.

Beispiel: Wasserstoffatom

Wir betrachten das Wasserstoffatom im Hauptquantenzahlzustand $n = 2$ und der Entartung $g := n^2 = 4$ unter Vernachlässigung des Spins. Dann sind die möglichen Eigenvektoren der Form $|n, l, m\rangle$ gerade

$$\{|2, 0, 0\rangle, |2, 1, 0\rangle, |2, 1, 1\rangle, |2, 1, -1\rangle\}.$$

Nach den Auswahlregeln $m' = m$ und $j' = j \pm 1$ fallen die Zustände $|2, 1, 1\rangle$ und $|2, 1, -1\rangle$ weg. Wir erhalten also als einzige nicht verschwindende Kombination

$$\langle 2, 0, 0 | H_1 | 2, 1, 0 \rangle = -e \cdot E_z \cdot \langle 2, 0, 0 | Q_3 | 2, 1, 0 \rangle = -3 \cdot e \cdot E_z \cdot a_B,$$

wobei a_B der Bohrsche Atomradius ist.

.....

□ Zeige diese Gleichungskette durch Anwendung der Operatordefinitionen und einem in z (§116)

Richtung anliegenden elektrischen Feld $E = (0, 0, E_z)$.

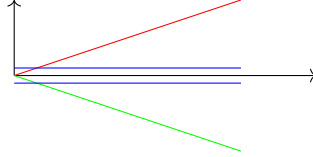
□ Definiere noch einmal den *linearen Stark Effekt* und den *quadratischen Stark Effekt*. (§117)

.....

Wir erhalten also die Matrixdarstellung

$$H_1|_{\text{Eig}(E_2)} = \begin{pmatrix} 0 & -3 \cdot e \cdot E_z \cdot a_B & 0 & 0 \\ -3 \cdot e \cdot E_z \cdot a_B & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Damit hat die Matrix $H_1|_{\text{Eig}(E_2)}$ und dessen charakteristisches Polynom $\chi_{H_1|_{\text{Eig}(E_2)}}$ die Eigenwerte $\lambda_1, \lambda_2 = 0$, $\lambda_3 = 3 \cdot e \cdot E_z \cdot a_B$ und $\lambda_4 = -3 \cdot e \cdot E_z \cdot a_B$. Optisch haben wir dann einen Verlauf der Form



5.3 Zeitabhängige Störungstheorie

Unsere störungstheoretische Betrachtung hat nun die Form $H(t) = H_0 + H_1(t)$. Unsere Fragestellung ist nun, ob sich die Wahrscheinlichkeit für einen Übergang aus dem Grundzustand mit der Zeit t ändert, wenn dieser bei $t = 0$ vorgelegen hat. Hierzu benötigen wir formale Werkzeuge.

Schrödinger-Bild

Für die zeitabhängige Schrödingergleichung gilt zunächst $H(t)(\psi(t)) = i \cdot \hbar \cdot \frac{d}{dt} \psi(t)$ mit einem Anfangswert $\psi(0) = \psi_0 \in H^2(\mathbb{R})$. Durch linearen Zusammenhang über die zeitabhängige Schrödingergleichung nehmen wir linearen Zusammenhang zwischen $\psi(t)$ und ψ_0 an. Damit konstruieren wir eine Transformationsfunktion $\Phi(t, t_0) : H^2(\mathbb{R}) \rightarrow H^2(\mathbb{R})$ mit $\psi(t) = \Phi(t, t_0)(\psi_0)$. Mit Normalisierungsbedingung $\|\psi(t)\| = 1$ für alle $t \in \mathbb{R}_{>0}$ folgern wir für die Darstellungsmatrix (Wronski Matrix) von $\Phi(t, t_0)$ mit Namen $W(t, t_0)$ eine unitäre Matrix. Damit ist $W(t, t_0)$ invertierbar und es gilt

$$i \hbar \frac{d}{dt} \Phi(t, t_0) = H(t) \circ \Phi(t, t_0).$$

Es löst dann nach Ana3 Theorie die Exponentialfunktion diese DGL, von der Form $W(t, t_0) = \exp(-i \cdot (t - t_0) \text{dm}(H)/\hbar)$, wobei (H) die Darstellungsmatrix zu H ist.

.....
 (S.118) □ Notiere einmal nach Definition den Erwartungswert einer Observablen T im Zustand $\psi(t)$.

Heisenberg-Bild

Aus der Aufgabe kennen wir nun die Beschreibung des zeitabhängigen Erwartungswertes von T in dem Zustand t . Diesen können wir durch die Matrizen $W(t, t_0)$ und $W(t, t_0)^{-1} = W(t_0, t)$ aufspalten zu

$$\langle T \rangle_{\psi(t_0)} = \langle \psi(t_0) | \underbrace{\Phi(t_0, t) \circ T \circ \Phi(t, t_0)}_{T_H(t)} | \psi(t_0) \rangle.$$

Wir nennen dann $\langle \psi_0 | T_H(t) | \psi_0 \rangle$ das *Heisenbergbild* von T zum Zeitpunkt t .

.....
 (S.119) □ Berechne die zeitliche Ableitung $\frac{d}{dt} T_H(t)$ und verwende $\frac{d}{dt} \Phi(t_0, t) \circ T \circ \Phi(t, t_0) = \text{id}_{\mathcal{H}} =$

$$\Phi(t_0, t) \circ T \circ \left(\frac{d}{dt} \Phi(t, t_0) \right).$$

.....
Mit der Aufgabe erhalten wir dann die *Heisenberggleichung*

$$\frac{d}{dt} T_H(t) = \frac{i}{\hbar} \cdot \left(H_H(t) \circ T_H(t) - T_H(t) \circ H_H(t) \right) + \Phi(t_0, t) \circ \frac{d}{d\tau} T(\tau) \circ \Phi(t, t_0),$$

wobei $H_H := \Phi(t_0, t) \circ H \circ \Phi(t, t_0)$.

Wechselwirkungs-Bild

Unser Ziel ist es nun, die zeitabhängige Schrödingergleichung mit Störung zu betrachten. Wir haben die Form $H = H_0 + H_1$, also $i\hbar \cdot \frac{d}{dt} \psi(t) = (H_0 + H_1)(\psi(t))$ mit einem Startwert $\psi(0) = \psi^{(0)}(0) = |n\rangle$ als Eigenzustand von H_0 . Wir verwenden dann damit den Ansatz

$$\psi(t) = \exp(-i \cdot t \cdot \text{dm}(H_0)/\hbar)(\psi_I(t)).$$

Damit ergibt sich für $\psi_I(t)$ nach Definition die Beziehung

$$i\hbar \cdot \frac{d}{dt} \psi_I(t) = H_{1,I}(t)(\psi_I(t)) := (\Phi(t_0, t) \circ H_1(t) \circ \Phi(t, t_0))(\psi_I(t)).$$

Wir nennen $H_{1,I}(t)$ die *Wechselwirkungs-Hamiltonfunktion*.

.....
□ Berechne nun die Änderung des zugehörigen Operators T_I .

(S.120)
.....

Fermis goldene Regel

Wir wollen nun die Gleichung $i\hbar \cdot \psi_I(t) = H_{1,I}(t)(\psi_I(t))$. Durch Integrationsansatz erhalten wir

$$\psi_I(t) = \psi_I(0) + \frac{1}{i\hbar} \cdot \int_0^t H_{1,I}(\tau)(\psi_I(\tau)) d\tau.$$

Unter der Approximation $\psi_I(\tau) \approx \psi_I(0)$ können wir das Integral noch leicht umformen. Aus dieser Idee können wir die *Fermis goldene Regel* herleiten.

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \cdot \rho_f(E_i) \cdot \langle f | H_1 | i \rangle^2,$$

wobei $\rho_f(E_i)$ die *Zustandsdichte* der Endzustände und $\Gamma_{i \rightarrow f}$ die *Übergangsrate* von i nach f ist.

6 Spin einhalb und Zweiniveausysteme

Wir nehmen in diesem Kapitel einen zweidimensionalen Hilbertraum \mathcal{H} an.

VL 26

20.07.2023,

10:00

last one's on

Regina

6.1 Spin einhalb Eigenzustände

6.2 Die zweidimensionalen Spinoperatoren

Durch die Zweidimensionalität können wir die linearen Spinoperatoren $n \mapsto S_n \in L_S(\mathcal{H})$ durch ihre Darstellungsmatrizen darstellen. Hierbei erhalten wir die sogenannten *Pauli Matrizen* der Form

$$\sigma_1 := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 := \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Die Spinoperatoren stehen dann in Verbindung durch Multiplikation mit $\hbar/2$. Diese können wir kombinieren durch $S_{\pm} := S_2 \pm i \cdot S_3$ und den Forderungen $S_+ |\downarrow\rangle = \hbar \cdot |\uparrow\rangle$ und $S_- |\uparrow\rangle = \hbar \cdot |\downarrow\rangle$ mit den Darstellungsmatrizen

$$\sigma_+ := \begin{pmatrix} 0 & \hbar \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_- := \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \hbar & 0 \end{pmatrix}.$$

Interessante Eigenschaften der σ Matrizen sind (i) $\text{Spur}(\sigma_i) = 0$, (ii) $\sigma_i^2 = I_2$ und (iii) $[\sigma_i, \sigma_{i+1}]_- = 2 \cdot \sigma_{i+2}$ bzw. (iv) $[\sigma_i, \sigma_{i+1}]_+ = 0$ zyklisch.

6.3 Die Blochkugel

Als Blochkugeldarstellung versteht man eine Kugelkoordinatendarstellung eines zweidimensionalen Zustandes $\psi = \mu \cdot \underline{v}_1 + \nu \cdot \underline{v}_2$ durch eine Transformation $\mu \mapsto \cos(\Theta_\mu/2) \in \mathbb{R}$ bzw. $\nu \mapsto \sin(\Theta_\nu/2) \cdot \exp(i \cdot \varphi_\nu) \in \mathbb{C}$, wobei Θ und φ gleichungserfüllende Abbildungen nach $[0, \pi]$ bzw. $[0, 2\pi)$ sind. Die daraus konstruierte Funktion B weist einem Zustand $\psi \in \mathcal{H}$ einen Punkt auf der Kugeloberfläche mit Radius 1 zu.

geometrische Darstellung der Drehimpulsalgebra $\mathfrak{su}(2)$, welche die Drehimpulsalgebra der Spinoperatoren ist. Die Blochkugel ist eine Kugel mit Radius 1 und Mittelpunkt im Ursprung des \mathbb{R}^3 . Die Kugeloberfläche ist mit einem Koordinatensystem versehen, welches die drei Achsen des \mathbb{R}^3 darstellt. Die Achsen sind dabei mit den drei Pauli-Matrizen $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ beschriftet. Die Pauli-Matrizen sind dabei definiert als

6.4 Zeitentwicklung mit konstanten Magnetfeld

Wir nehmen den Hamiltonoperator in der Form von $H = -g \cdot \mu_B \cdot \langle B, S \rangle$, also in Spezialfall $B = (0, 0, B_z)$ dann $H = -g \cdot \mu_B \cdot B_z \cdot S_3$ an. In Matrixdarstellung gilt dann

$$\text{dm}(H) = -g \cdot \mu_B \cdot B_z \cdot \frac{\hbar}{2} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Literatur