

# Integrierter Kurs IV

Theoretische Physik II  
Tom Folgmann

5. August 2023

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

## Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung und Wellenfunktion</b>	<b>4</b>
1.1	Wellenpakete . . . . .	7
1.2	Die Heisenbergsche Unschärferelation (I) . . . . .	9
1.3	Die Schrödingergleichung für freie Teilchen . . . . .	10
1.4	Allgemeine Form der Schrödingergleichung . . . . .	13
1.5	Normierung und Erwartungswert . . . . .	15
1.6	Operatoren . . . . .	17
1.7	Der Kommutator . . . . .	20
1.8	Die Heisenbergsche Unschärferelation (II) . . . . .	22
<b>2</b>	<b>Lösen von Bewegungsgleichungen der Schrödingergleichung</b>	<b>25</b>
2.1	Arbeitspunkt 1: Fundamentalsystem und Bedingungsgleichung . . . . .	26
2.2	Arbeitspunkt 2: Normierbarkeit . . . . .	27
2.3	Arbeitspunkt 3: Stetigkeitsbedingungen an kritischen Stellen . . . . .	28
2.4	Beispiel: Potentialbarriere . . . . .	30
2.5	Beispiel: Der Potentialblock . . . . .	32
2.6	Beispiel: Der Potentialpeak . . . . .	33
2.7	Potentialtopf und gebundene Zustände . . . . .	34
2.8	Der harmonische Oszillator I . . . . .	35
<b>3</b>	<b>Drehimpuls und Bewegung im Zentralfeld</b>	<b>40</b>
3.1	Orientierungs- und Drehimpulsalgebra . . . . .	40
3.2	Ortsdarstellung und Kugelflächenfunktionen . . . . .	42
3.3	Bewegung im Zentralkraftfeld . . . . .	44
3.4	Quantenmechanische Beschreibung des Wasserstoffatoms . . . . .	44
<b>4</b>	<b>Mathematische Grundlagen</b>	<b>48</b>
4.1	Zustände und Observablen . . . . .	48
4.2	Der Hilbertraum . . . . .	48
4.3	Uneigentliche Dirac Vektoren . . . . .	48
4.4	Das Eigenwertproblem . . . . .	50
4.5	Messprozess in der Quantenmechanik . . . . .	51

4.6	Postulate der Quantenmechanik . . . . .	53
4.7	Erweiterung: Gemischte Zustände . . . . .	53
4.8	Harmonischer Oszillator (II) . . . . .	53
<b>5</b>	<b>Störungstheorie</b>	<b>57</b>
5.1	Stationäre Störungstheorie . . . . .	57
5.2	Entartete Störungstheorie . . . . .	60
5.3	Zeitabhängige Störungstheorie . . . . .	61
<b>6</b>	<b>Spin einhalb und Zweiniveausysteme</b>	<b>65</b>
6.1	Spin einhalb Eigenzustände . . . . .	65
6.2	Die zweidimensionalen Spinoperatoren . . . . .	65
6.3	Die Blochkugel . . . . .	65
6.4	Zeitentwicklung mit konstanten Magnetfeld . . . . .	65



# 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  $\psi \in C^1(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^3, \mathbb{R})$ ?

### Die Impuls-Wellenvektor Beziehung

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  $h = 6.6 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$ . Für die Energie finden wir durch die Energie eines Photons den Zusammenhang  $E(\omega) = h \cdot \nu = \hbar \cdot \omega$  mit  $\omega = 2\pi \cdot \nu$ . Dann ist  $E$  mit  $\nu$  als Funktion von  $p$  durch die Relation  $\nu = c_0/\lambda$  und letztlich  $\lambda$  als Funktion von  $p$  durch die de Broglie Relation  $\lambda(p) = h/p$  insgesamt die Energie - Impuls Beziehung

$$(E \circ \nu \circ \lambda)(p) = h \cdot \frac{c_0}{h/p} = c_0 \cdot p =: E(p).$$

Wir wollen in der angenommenen Wellenfunktion

$$\psi_t(x) = C \cdot \exp(i \cdot (\langle k, x \rangle - \omega \cdot t))$$

Die Größen  $k$  und  $\omega$  durch  $p$  ausdrücken. Die Transformation für  $k$  ist dabei gegeben durch  $k(p) = p/\hbar$ , die Transformation für  $\omega$  müssen wir noch durch die oben definierten Funktionen  $\omega(\nu)$ ,  $\nu(\lambda)$  und  $\lambda(p) = h/p$  ausdrücken. Wir erhalten die Verkettung  $(\omega \circ \nu \circ \lambda)(p) = 2\pi \cdot p \cdot c_0/h$ . Nun verwenden wir die Definition von  $\hbar$  und  $E(p)$ , sodaß wir schreiben können  $(\omega \circ \nu \circ \lambda)(p) = E(p)/\hbar =: \omega(p)$ . Diese beiden Ausdrücke können wir nun in die Wellenfunktion einsetzen, sodaß wir erhalten

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

Vorbereitend für eine Fouriertransformation halten wir dieses Ergebnis fest.

**Korollar 1.1.** Die ebene Wellenfunktion mit Impulsargument.

Durch die Transformationen  $\Phi : (p/\hbar)_{p \in \mathbb{R}}$  und  $\Psi : (E(p)/\hbar)_{p \in \mathbb{R}}$  mit der Energiebeziehung  $E : (c_0 \cdot p)_{p \in \mathbb{R}}$  erhalten wir die ebene Wellenfunktion mit Impulsargumenten

$$\psi_t(x) = C \cdot \exp(i \cdot (\langle \Phi(p), x \rangle - \Psi(p) \cdot t)).$$

### Dispersion der ebenen Welle

Für die Dispersion der Welle gilt

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

### Genauigkeit der Messung

Prinzipiell ist es in der klassischen Physik möglich, den *Ort* zum *Zeitpunkt* eines Teilchens zu kennen; anders ist es bei quantenmechanischen Wellen.

**Definition 1.1.** Aufenthaltswahrscheinlichkeit.

Für eine quadratintegrierbare Wellenfunktion  $\psi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$  ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit definiert über das Wahrscheinlichkeitsmaß  $P(\cdot, \cdot)$  auf  $(\mathbb{R}^3, \sigma(\mathbb{R}^3))$  als

$$P(\psi, V) := |C| \cdot \int_V |\psi(x)|^2 \lambda(dx), \quad V \in \sigma(\mathbb{R}^3),$$

wobei  $C$  die Normierungskonstante  $C = 1/P(\psi, \mathbb{R})$  ist.

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

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

Hier kommen verschiedene Möglichkeiten der Normierung zum Einsatz. Prinzipiell versucht man, das betrachtete *Gesamtvolumen* einzuschränken. Diesen Prozess nennt man *Boxnormierung*.

**Definition 1.2.** Boxnormierung.

Für ein echtes beschränktes Teilvolumen  $V \in \sigma(\mathbb{R}^d)$  des  $\mathbb{R}^d$  fordert man  $P(\psi, V) = 1$  und berechnet für alle  $W \subseteq V$  mit  $W \in \sigma(\mathbb{R}^d)$  die boxnormierte Aufenthaltswahrscheinlichkeit  $P_V(\psi, W) := |C|^2 \cdot P(\psi, W)$ , wobei  $C$  die aus  $1/P(\psi, V)$  resultierende *Normierungskonstante* ist.

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

## 1.1 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  $\psi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$  zerlegen in Funktionen des Typus der ebenen Welle:

$$\psi_t(x) = \frac{1}{(2 \cdot \pi)^3} \cdot \int_{\mathbb{R}} (\mathcal{F} \psi_t)(k) \cdot \exp\left(i \cdot (\langle k, x \rangle - \frac{\hbar \cdot k^2}{2 \cdot m} \cdot x)\right) \lambda(dk).$$

Mit unseren Zusammenhängen oben erhalten wir für die Energie den Ausdruck  $E(k) = p(k)^2/(2 \cdot m) = (k \cdot \hbar)^2/(2 \cdot m)$ , sodaß wir in die ebene Wellengleichung einsetzen können und erhalten

$$\psi_t^{eben}(x) = \exp(i \cdot (\langle k, x \rangle - E(k)/\hbar \cdot t)) = \exp\left(i \cdot (\langle k, x \rangle - \frac{k^2 \cdot \hbar}{2 \cdot m} \cdot x)\right).$$

**Definition 1.3.** Wellenpaket unter Fourier.

Eine Funktion  $\psi \in L^2(\mathbb{R})$  können wir durch ebene Wellenfunktionen  $\psi_t^{eben}(x)$  zerlegen, wobei die Vorfaktorenfunktion  $C : k \mapsto (\mathcal{F} \psi_t)(k)$  im Wellenvektorraum gegeben ist. Damit gilt dann

$$\psi_t(x) = \frac{1}{(2 \cdot \pi)^3} \cdot \int_{\mathbb{R}} (\mathcal{F} \psi_t)(k) \cdot \psi_t^{eben}(x) \lambda(dk).$$

.....  
□ Warum wird bei der Fourier-Summation keine Wurzel im Vorfaktor gezogen? Recherchiere (S.4)  
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

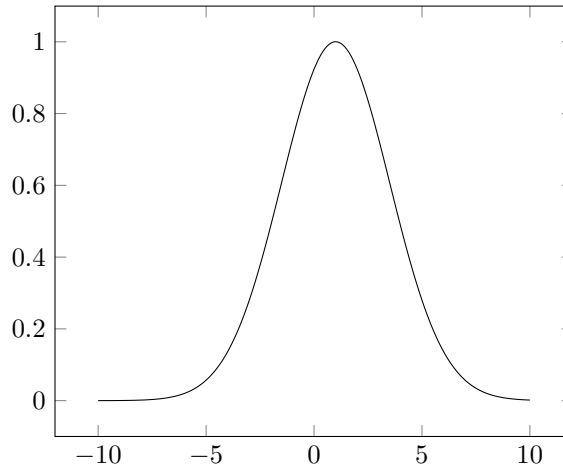


Abbildung 1: Die Gaußkurve für  $A = 1$ ,  $k_0 = 1$  in  $\mathbb{R}$ .

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  $w(0) = 1/(2 \cdot \sigma)$ .

**Korollar 1.2.** Fourier-Zerlegung in Gaußfunktionen.

Eine quadratintegrierbare Wellenfunktion  $\psi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$  lässt sich durch Fouriertransformation zerlegen in eine Summe von Gaußfunktionen.

- .....
- (5) ☐ Man spricht bei Fourier-Summationen vom *Raumwechsel*. Was ist damit gemeint? Welche Räume haben wir hier verwendet?
- (6) ☐ Zeichne das Ergebnis einmal graphisch für dieselben Parameter wie oben. Was fällt dir auf?
- (7) ☐ Welches  $h \in \mathbb{R}^3$  ist bei der Ableitung  $d\omega(k_0)(h)$  gemeint?
- .....



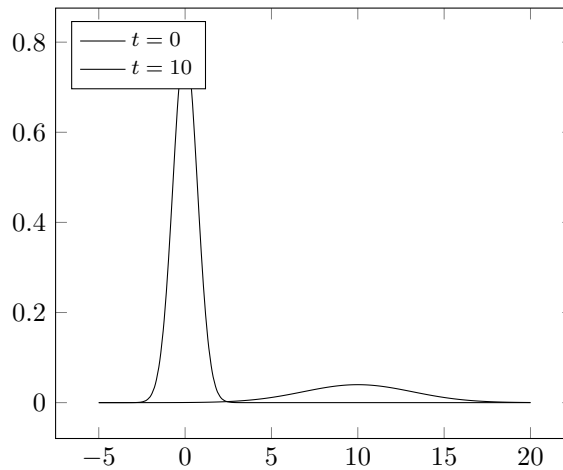


Abbildung 2: Die Fourier-Summierte Gaußkurve für  $A = 1$ ,  $k_0 = 1$  in  $\mathbb{R}$  zum Zeitpunkt  $t = 0$  und  $t = 10$

### 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

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

.....  
☐ 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? (8.8)

☐ Rechne die Dispersion des Wellenpaketes für  $t > 0$  gemäß  $w$  nach und zeige  $w(t)^2 > w(0)$ . (8.9)  
.....

## 1.2 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 Heisenbergschen Unschärferelation folgt.

**Korollar 1.3.** Unschärferelation nach Heisenberg.

Für zwei s.a. Operatoren  $T, S \in L_S(\mathbb{R})$  und einen Zustand  $\psi \in \mathcal{H}$  gilt die *Heisenbergsche Unschärferelation*  $\text{var}_\psi(T) \cdot \text{var}_\psi(S) \geq \frac{1}{2} |\langle [T, S] \rangle_\psi|$ .

(S10) □ Lässt sich die Wellenfunktion direkt experimentell bestimmen? Recherchiere die *Quanten-Zustands-Tomographie*.

### Physikalische Bedeutung

Aus der Unschärferelation folgen folgende physikalische Konsequenzen:

- Unmittelbar ist ablesbar, daß bei genauerer Ortsbestimmung die Impulsgenauigkeit abnimmt.
- Für  $\text{var}_\psi(P) \rightarrow 0$ , wie beispielsweise im Falle der ebenen Welle, ist  $\text{var}_\psi(Q) \rightarrow \infty$ .
- Der Phasenraum ist infolge der Unschärferelation quantisiert in Einheiten von  $\hbar$ .

### 1.3 Die Schrödingergleichung für freie Teilchen

Als Ziel der Untersuchungen ist eine Wellengleichung für die Wahrscheinlichkeitsamplitude  $\Psi$  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

$$\psi_t(x) = \int \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \cdot \tilde{\psi}_t(p) \cdot f(x, p) \lambda(dp).$$

**Skript**

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

$$f(x, p) = \exp(\overset{\circ}{i} \cdot (p \cdot x - p^2 \cdot t/2m)/\hbar) = f_1(x, p) \cdot f_2(x, p).$$

Für die Ableitung gilt dann

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

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

☐ 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. (S.12)

.....  
 Mit der Aufgabe folgt dann

$$\frac{d}{ds} [\psi(s, p)]|_{s=x} = \frac{\overset{\circ}{i} \cdot \hbar}{2 \cdot m} \cdot d(\mathcal{F}\tilde{\psi})(x, p)(1)(1)$$

mit der Definition

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

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

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

**Korollar 1.4.** Die zeitabhängige Schrödingergleichung.

Für einen Zustand  $\psi \in H^2(\mathbb{R})$  gilt die zeitabhängige Schrödingergleichung

$$\overset{\circ}{i} \cdot \hbar \psi'(t) = -H(\psi).$$

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

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

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

☐ Wie steht die erhaltene Schrödingergleichung mit der Diffusionsgleichung  $\frac{d}{ds} [\phi(s, x(s))]|_{s=t} =$  (S.16)  $D \cdot \mathbb{D}_{(h, h)}\psi(t, s(t))$  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  $\phi$  in die Funktionen  $\phi$  und  $\chi$  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

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

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

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

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

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

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

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  $\mathbb{D}_{(\hbar, \hbar)} \phi(r(t)) = 0$ , 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. (§20)

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

## 1.4 Allgemeine Form der Schrödingergleichung

Bisherig nahmen wir an, daß unsere betrachteten Teilchen *kräftefrei* sind. Erweitern wir unseren Blick auf *konservativ kräftebehaftete* 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  $(s, S) \in \text{AW}(\psi)$ .

.....  
 □ Wie muss man  $t_0 \in \mathbb{R}$  wählen, sodaß die Approximation von  $V$  ausreichend gut ist? Was bedeutet „schmal relativ zur Änderung von  $V$ “? (§22)

□ Wie sieht die suggerierte Auswertung des Ausdrucks  $(\cdot + \cdot)(\psi(\cdot))$  aus? Was bedeutet die Schreibweise? (§23)

□ Kläre den Zusammenhang der Schrödingergleichung mit der Newtonsgleichung  $F = ma$ . Recherchiere dazu im Nolting und beachte die folgende Optikanalogie: (§24)

Mechanik	Optik
Schrödingergleichung	Wellenoptik
$\updownarrow$	$\updownarrow$
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  $P := -i \cdot \hbar \cdot \mathbb{D}_{\hbar}$ , 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.

.....

- (S27) □ Was bedeutet der Ausdruck  $\frac{d}{dt} \hat{H}$ ? Entpacke ihn, indem du die Operatordefinitionen verwendest.
- .....

### 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  $\phi_i$  eine Lösung der Schrödingergleichung.

.....

- (S28) □ 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.
- .....

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

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

**VL 5**  
 May the forth  
 be with you!

und mit  $\phi$  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:

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

### Stationäre Zustände

Im letzten Abschnitt haben wir eine Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung konstruiert. Ist  $\Phi$  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  $\Phi$  der Ausdruck

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

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

## 1.5 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*  $P_{\mu_\psi}$

.....  
☐ Zeige für  $\psi = c_1 \cdot \psi_1 + c_2 \cdot \psi_2$  mit geeigneten Gewichtungsfunktionen  $c_1, c_2$  die Eigenschaft  $P_{\mu_\psi}(\mathbb{R}^3) \neq 1$ . Ist dies ein Widerspruch zwischen dem Superpositionsprinzip und der Normierung? (S.29)

Nach der Aufgabe folgern wir also, daß es nur bestimmte  $\psi$  Funktionen gibt, welche unseren Wunsch erfüllen. Solche genannten *normierbaren*  $\psi$  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  $\mu_\psi$  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)  $\mu_\psi(\mathbb{R}^3) \neq 0 \iff \psi \neq 0$ . Dann ergibt sich eine Normierung durch

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

wobei  $P_\psi$  unser gewünschtes *Wahrscheinlichkeitsmaße* ist.

.....  
☐ Zeige, daß alle  $\psi$ , welche die Normierungsbedingungen erfüllen, zusammen mit dem Nullvektor  $0_{\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)}$  einen Vektorraum bilden. Welcher Raum ist es dann? (S.30)

- (S31) □ Zeige, daß die  $\psi$  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  $\psi$  konstruierten Maßes  $P_\psi$  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

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

.....

- (S32) □ Rechne alle Schritte gründlich nach, um den letzten Ausdruck zu erhalten. [*In der Vorlesung war der Vorgang zu schnell.*]
- (S33) □ 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  $\frac{d}{dt} \mu_\psi(\mathbb{R}^3) = 0$ .
- (S34) □ Berechne nun die Ableitung  $\frac{d}{dt} \mu_\psi(A)$ .

.....

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  $P_\psi$  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

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

- .....
- Weise die letzte Gleichung nach. Verwende hierzu die Definition von  $P$  und nutze Linearität. (S.35)
- Berechne nun die Erwartungswerte  $E_{P,p}(t)$  und  $E_{P,p,f}(t)$ . (S.36)
- .....

**VL 6**  
05.05.2023,  
11:45

## 1.6 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  $\psi$  verwenden. Es gilt weiter nach Definition

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

wobei wir durch Umsortieren der Integrale

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

mit  $g_R := (-i p \cdot (r - R))_{r \in \mathbb{R}^3}$  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

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

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.

.....  
 (S.37) □ Verifiziere  $\mathcal{F}(1)_{x \in \mathbb{R}^3} = \int x (\mathbb{1}_{\mathbb{R}^3} \cdot \delta_{0_{\mathbb{R}^3}})$ . 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.38) □ Recherchiere das Skalarprodukt auf  $\mathbb{L}^2(\mathbb{R}, \mathcal{B}(\mathbb{R}), \lambda)$  Räumen. Findest du eine Verbindung zu den betrachteten Integralen?  
 .....

### Zusammenfassen

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

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

.....  
 (S.39) □ 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.  
 .....

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  $\psi$  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)

□ Zeige die *Varianz* des Operators  $T \in L_S(\mathbb{H})$  mit  $\psi \in \mathbb{H}$  als Eigenzustand zu  $\lambda \in \mathbb{C}$ . Erhalte (S.41)  
 $\text{var}_\psi T^2 = \lambda^2 - \lambda^2 = 0$ . Benutze hierzu das Ergebnis  $E_{T^2(\psi), x}(t) = \lambda^2$ .

.....  
 Wir können folgern  $\text{var}_\psi(T) = 0$  genau dann, wenn  $\lambda$  ein verallgemeinerter Eigenwert von  $T$  bezüglich  $T\psi = \lambda \cdot \psi$ . Wir nennen den Operator  $T$  in diesem Zusammenhang *scharf im Zustand  $\psi$* . Die Hinrichtung dieser Behauptung ist mit der obigen Aufgabe gelöst, für die Rückrichtung betrachten wir  $\psi$  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

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

.....  
 □ Fülle die Beweislücke, indem du  $\sum_{(i,j) \in I^2} c_i c_j \cdot \int \overline{\phi_i(\tau)} \cdot \tau \cdot \phi_j(\tau) \lambda_{\mathbb{R}^3}(d\tau) = \sum_{n \in I} \lambda_n \cdot |c_n|^2$  (S.42)  
 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  $\phi_n$  für ein  $n \in I$  gleich unserem ursprünglichen  $\psi$  sein muss, sodaß  $\psi$  als Eigenzustand von  $T$  identifizierbar ist.

.....  
 □ Zeige dieses nötige Hilfsergebnis. Zeige hierzu konkret, daß für ein  $n \in I$  der Faktor  $|c_n|^2$  (S.43)  
 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  $\lambda_n, \lambda_m$  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  $\psi$  gilt.

Der Impulsoperator ist ein weiteres anschauliches Paradebeispiel für Eigenzustände. Ist  $P(\psi) = -i \hbar D_h \psi(x)$  für eine Funktion  $\psi$  und ein  $h \in \mathbb{R}^3$  gegeben, so ist  $P(\psi) = p \cdot \psi$  für  $p \in \mathbb{R}^3$  genau dann, wenn  $\psi$  eine ebene Welle ist, also  $\psi(x) = i \hbar^{-3/2} \cdot \exp(i \cdot \langle p, x \rangle)$  gilt.

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

### 1.7 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 Unschärfereferelation 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  $\psi$  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  $\psi$  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  $\lambda_A$  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  $P_h(f) := (-i \hbar D_h f(x))_{x \in \mathcal{H}}$  können wir zunächst in rechter Verkettung  $(P \circ R)$  auswerten zu

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

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

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

.....  
 □ 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? (S45)

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

.....  
 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:

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

**VL 8**  
 10.05.2023,  
 08:15

Beispiele für selbstadjungierte Operatoren sind der Orts- und Impulsoperator.

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

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

.....

### 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.

### 1.8 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  $\Delta B$ . 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  $\psi_A, \psi_B$  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  $f := (|\langle [A, B] \rangle_{\psi}|)_{\psi \in \mathcal{H}}$ .

.....

□ Betrachte die Heisenbergsche Unschärferelation in dieser Form für den Ort- und Impulsoperator  $X, P$ . Folgere unsere oben zuerst kennengelernte Form der Heisenbergschen Unschärferelation. (S.49)

□ 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? (S.50)

.....





## 2 Lösen von Bewegungsgleichungen der Schrödingergleichung

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

**VL 9**  
 11.05.2023,  
 10:00

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

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

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

.....  
☐ Welche Form des Problems suggeriert hier  $\lambda$ ?

(§.51)

.....  
 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:

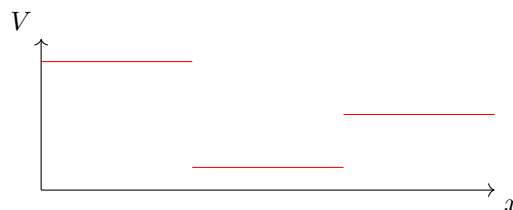


Abbildung 3: Beispiel für stückweise konstante Funktion  $V \in \text{Abb}([0, 6], \mathbb{R})$ .

.....  
☐ 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  $\mathcal{L}^2(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^3)$ .

(§.52)

## 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.

### Korollar 2.1. Fundamentalsystem des Hamilton DGPs.

Für die Hamilton Differentialgleichung zu einem Eigenwert  $\lambda \in \sigma_P(H)$  ist das Fundamentalsystem von der Form  $\{\exp(\tau_{\lambda,V,+}(x) \cdot x), \exp(\tau_{\lambda,V,-}(x) \cdot x)\}$ , wobei  $\tau_{\lambda,V,\pm} := \pm k_{\lambda,V}$  die Eigenwerte der Matrix  $A$  zum linearen autonomen DGP reduzierter Ordnung mit  $u'(t) = A \cdot u(t)$  sind.

- .....
- (S.53) □ Rechne die Definition von  $k$  einmal nach, indem du die zeitunabhängige Schrödingergleichung 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  $\lambda_L$  (S.54) um, sprich bilde die *Inverse* von  $k_\lambda$ . Wann ist dies möglich? Wir nennen den Wert  $\lambda_L$  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  $\lambda$

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

□ Rechne nach, daß die Exponentiallösung  $\psi_t(x) = C_0 \cdot \exp(\tau_{\lambda,V_0,+} \cdot x)$  die Differentialgleichung (S.55) 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  $k_{\lambda,V_0}$  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  $k_{\lambda,V_0}$  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.

**Korollar 2.2.** Normierbarkeit der Fundamentallösungen.

Ist der Energieeigenwert  $\lambda \in \sigma_P(H)$  größer als das Potential  $V$  an der Stelle  $x \in \mathbb{R}$ , so ist die Differenz  $\lambda - V(x) > 0$  und  $k_{\lambda,V}(x)$  rein komplex. Ist  $\lambda$  kleiner als  $V(x)$ , so wird die Differenz komplex und  $k_{\lambda,V}(x)$  insgesamt rein reell.

### 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  $\psi$  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  $\psi$ , 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  $\psi$  an der Stelle  $x_0$ . Hierzu verwenden wir die ursprünglich  $\psi$  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

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

Mit der gleichmäßigen Stetigkeit von  $\psi$  können wir die Existenz einer Stammfunktion  $\Psi$  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  $\int_{(x_0, r)} V \cdot \psi = V_{\geq x_0} \cdot (\Psi(r) - \Psi(x_0))$ . Zuletzt erkennen wir noch nach Hauptsatz  $\int_{B_r(x_0)} \psi'' = \Psi'(r) - \Psi'(-r)$  und erhalten die Form

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

Wir können nun die Stetigkeit der Stammfunktion  $\Psi$  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

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

Damit ist die Ableitung von  $\psi$  an der Stelle  $x_0$  stetig.

**Definition 2.1.** Stetigkeitsbedingungen an Stufen.

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

Für spezielle Potentiale, bei denen zwei *gegenläufige* Stufen an einem Punkt zusammenlaufen, also der Abstand der beiden kritischen Stellen  $x_1$  und  $x_2$  verschwindet, münden in einer *Sprungstelle*  $x_0 = x_1 = x_2$ . Damit ist das Potential von der Form  $V = (V_0 \cdot \mathbb{1}_{\{x_0\}}(x))_{x \in \mathbb{R}}$ . Hier ist die Stetigkeitsbedingung an  $\psi'$  erneut zu diskutieren, da sich die Integralaufspaltung nun anders vollzieht. Wir benutzen  $\int_{B_r(x_0)} V_0 \cdot \mathbb{1}_{\{x_0\}}(x) \cdot \psi(x) dx = V_0 \cdot \psi(x_0)$ . Damit erhalten wir in der Schrödingergleichung die Form

$$\lim_{r \rightarrow 0} \psi'(x_0 + r) - \psi'(x_0 - r) = -\frac{2m}{\hbar^2} \cdot (\lambda \cdot 0 + V_0 \cdot \psi(x_0)) = -\frac{2m}{\hbar^2} \cdot V_0 \cdot \psi(x_0).$$

**Definition 2.2.** Unstetigkeitsbedingung an Peaks.

Hat  $V : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  einen Peak in  $x_0$  mit dem Wert  $V_0$  und ist sonst gleich Null, so wird gleichmäßige Stetigkeit an  $\psi$  und eine definierte Unstetigkeit an  $\psi'$  mit  $\lim_{x \nearrow x_0} \psi'(x) - \lim_{x \searrow x_0} \psi'(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} \cdot V_0 \cdot \psi(x_0)$ .

**Zusammenfassen**

Mithilfe des Fundamentalsystems  $\{\exp(\tau_{\lambda, V, +} \cdot x), \exp(\tau_{\lambda, V, -} \cdot x)\}$  können wir die Lösung der Schrödingergleichung  $H(\psi) = \lambda \cdot \psi$  für ein gegebenes  $\lambda \in \mathbb{R}$  und ein gegebenes Potential  $V : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  mit einer Stufe in  $x_0$  und den Bedingungen  $V_{< x_0} < \lambda$  und  $V_{\geq x_0} > \lambda$  konstruieren. Dabei erhielten wir die Verklebung

$$\psi(t, x) = C_0 \cdot \begin{cases} c_{1,1} \cdot \exp(\tau_{\lambda, V, +} \cdot x) + c_{1,2} \cdot \exp(\tau_{\lambda, V, -} \cdot x) & x < 0 \\ c_{2,1} \cdot \exp(\tau_{\lambda, V, +} \cdot x) + c_{2,2} \cdot \exp(\tau_{\lambda, V, -} \cdot x) & x \geq 0 \end{cases}.$$

## 2.4 Beispiel: Potentialbarriere

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  $\lambda > V(x)$  für  $x \in \mathbb{R}_{<0}$ . Damit ergibt sich für  $k_{\lambda,0}$  die Form  $k_{\lambda,0}(x) = i \cdot \sqrt{2m \cdot \lambda}$ .
- (ii) Wir haben nun den Fall  $\lambda < V(x)$  für  $x \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ . Damit ergibt sich durch die *rein imaginäre* Wurzel die Form  $k_{\lambda,V_0}(x) = \sqrt{2m \cdot (|\lambda - V_0|)} \in \mathbb{R}$ .

Zur Deutlichkeit des reellen bzw. imaginären Charakters der Exponentialargumente definieren wir  $\kappa_{\lambda,V_0} := \sqrt{2m \cdot (|\lambda - V_0|)} = i \cdot k_{\lambda,V_0}$  für den reellen Teil. Damit erhalten wir durch den Verklebungsansatz die Form

$$\psi(t, x) := \begin{cases} c_{1,1} \cdot \exp(k_{\lambda,0} \cdot x) + c_{1,2} \cdot \exp(-k_{\lambda,0} \cdot x) & x \in \mathbb{R}_{<0} \\ c_{2,1} \cdot \exp(\kappa_{\lambda,V_0}) + c_{2,2} \cdot \exp(-\kappa_{\lambda,V_0}) & x \in \mathbb{R}_{\geq 0} \end{cases}.$$

Wir führen an dieser Stelle nun ein *physikalisches Plausibilitätsargument* an. Eine von rechts einfallende Welle, ohne die Bedeutung des „einfallens“ an dieser Stelle zu diskutieren, sollte an der entscheidenden kritischen Stelle  $x_0$  entweder *reflektiert* oder *transmittiert* werden. Dies lässt sich in den Lösungen widerspiegeln, indem wir die Koeffizienten  $c_{1,1} := 1$  und  $c_{2,2} := 0$  setzen. Damit sieht die physikalisch plausible Form der mathematischen Lösung wie folgt aus:

$$\psi(t, x) = \begin{cases} \exp(k_{\lambda,0} \cdot x) + \rho_{\lambda,0} \cdot \exp(-k_{\lambda,0} \cdot x) & x \in \mathbb{R}_{<0} \\ \tau_{\lambda,V_0} \cdot \exp(\kappa_{\lambda,V_0}) & x \in \mathbb{R}_{\geq 0} \end{cases}.$$

Wir haben hierbei einen weiteren Schritt vollzogen und die Koeffizienten  $c_{1,2}$  und  $c_{2,1}$  umbenannt: Nach der skizzierten Situation liegen die Namen *Reflexionskoeffizient*  $\rho_{\lambda,0} \in \mathbb{C}$  und *Transmissionskoeffizient*  $\tau_{\lambda,V_0} \in \mathbb{C}$  nahe.

**Definition 2.3.** Physikalische Lösung des Einstufenpotentials.

Sei  $V : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  ein Einstufenpotential mit kritischer Stelle  $x_0 \in \mathbb{R}$  und  $V_{<x_0} < V_{\geq x_0}$ . Dann ist die physikalische Lösung der Schrödingergleichung  $H(\psi) = \lambda \cdot \psi$  zum Eigenwert  $\lambda \in \mathbb{R}$  gegeben durch die Verklebung

$$\psi(t, x) = \begin{cases} \exp(k_{\lambda,V_{<x_0}} \cdot x) + \rho_{\lambda,V_{<x_0}} \cdot \exp(-k_{\lambda,V_0} \cdot x) & x \in \mathbb{R}_{<0} \\ \tau_{\lambda,V_{\geq x_0}} \cdot \exp(k_{\lambda,V_{\geq x_0}} \cdot x) & x \in \mathbb{R}_{\geq 0} \end{cases}.$$

Dabei sind die Koeffizienten  $\rho_{\lambda,V_{<x_0}}$  und  $\tau_{\lambda,V_{\geq x_0}}$  die Reflexions- und Transmissionskoeffizienten.

Mit unseren in Arbeitsschritt 3 aufgestellten Stetigkeitsbedingungen an  $\psi$  und  $\psi'$  können wir nun die Koeffizienten  $\rho_{\lambda, V_{<x_0}}$  und  $\tau_{\lambda, V_{\geq x_0}}$  miteinander in Verbindung bringen. Wir fordern zunächst die Stetigkeit von  $\psi$  an der kritischen Stelle  $x_0$ . Damit erhalten wir die Bedingung

$$\exp(k_{\lambda,0} \cdot x_0) + \rho_{\lambda,0} \cdot \exp(-k_{\lambda,0} \cdot x_0) = \tau_{\lambda,V_0} \cdot \exp(\kappa_{\lambda,V_0} \cdot x_0).$$

Als zweite Bedingungsgleichung bringen wir die Stetigkeit der Ableitung von  $\psi'$  ins Spiel. Wir erhalten durch Differenzierung der einzelnen Fundamentallösung auf ihren Lösungsintervallen die Gleichung

$$k_{\lambda,0} \cdot \exp(k_{\lambda,0} \cdot x_0) - \rho_{\lambda,0} \cdot k_{\lambda,0} \cdot \exp(-k_{\lambda,0} \cdot x_0) = \kappa_{\lambda,V_0} \cdot \tau_{\lambda,V_0} \cdot \exp(\kappa_{\lambda,V_0} \cdot x_0).$$

Nun zielen wir auf einen Nulltrick ab: Wir transliterieren die beiden Gleichungen mit  $\Phi := (x - x_0)_{x \in \mathbb{R}}$  auf den Nullpunkt und können dadurch alle Exponentialfunktionen als 1 auswerten. Damit erhalten wir die beiden Gleichungen

$$1 + \rho_{\lambda,0} = \tau_{\lambda,V_0}, \quad k_{\lambda,0} - \rho_{\lambda,0} \cdot k_{\lambda,0} = \kappa_{\lambda,V_0} \cdot \tau_{\lambda,V_0}.$$

Setzen wir nun die erste Gleichung für  $\tau_{\lambda,V_0}$  ein, so erhalten wir durch Termumformung unter der Annahme  $k_{\lambda,0} + \kappa_{\lambda,V_0} \neq 0$  einen Ausdruck für  $\rho_{\lambda,0}$ , bzw. durch Rückeinsetzen für  $\rho_{\lambda,0}$  und unter Erweiterung der 1 mit der Summe  $k_{\lambda,0} + \kappa_{\lambda,V_0}$  aus Gleichung eins einen Ausdruck für  $\tau_{\lambda,V_0}$ :

$$\rho_{\lambda,0} = \frac{k_{\lambda,0} - \kappa_{\lambda,V_0}}{k_{\lambda,0} + \kappa_{\lambda,V_0}}, \quad \tau_{\lambda,V_0} = \frac{2 \cdot k_{\lambda,0}}{k_{\lambda,0} + \kappa_{\lambda,V_0}}.$$

.....

□ Schreibe die aufgestellte Lösung für das Problem mit allen Definitionen einmal sauber aus und markiere die reellen und imaginären Exponentialargumente. (S.56)

□ Führe die Umformungen der aus den Stetigkeiten resultierenden Bedingungsgleichungen aus. (S.57)

.....

Als letzten Schritt definieren wir noch die Koeffizienten für Reflexion und Transmission als Betragsquadrate der zugehörigen Koeffizienten  $\rho_{\lambda,0}$  und  $\tau_{\lambda,V_0}$ :

$$R := |\rho_{\lambda,0}|^2, \quad T := |\tau_{\lambda,V_0}|^2.$$

### Wahrscheinlichkeitsstrom

Die *Kontinuitätsgleichung*  $\rho'(t)(x) = -(j(t))'(x)$  für die Dichte  $t \mapsto (x \mapsto \rho(t)(x))$  und eine Stromdichte  $t \mapsto (x \mapsto j(t)(x))$  erlaubt die Definition einer *Wahrscheinlichkeitsstromdichte*

$$j(t)(x) := \frac{\hbar}{2 \cdot m \cdot i} \cdot (\psi_t^*(x) \cdot \psi_t'(x) - \psi_t(x) \cdot \psi_t'(x)).$$

Mit der Aufgabe erhalten wir den Wahrscheinlichkeitsstrom

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

## Das Fourierbild

### Ergebnis

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.

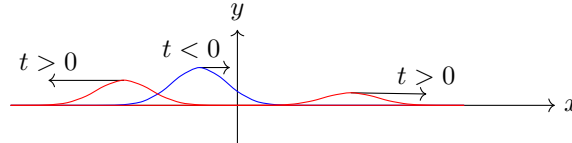


Abbildung 4: Wahrscheinlichkeitsverteilung zu  $t < 0$  (blau) und  $t > 0$  (rot).

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:

$$\text{var}_\psi(Q) \cdot \text{var}_\psi(H) \geq \frac{1}{2} |\langle [H, x] \rangle_\psi| \quad \left( = \frac{\hbar \cdot \langle p \rangle_{u_{\text{exp},0}}}{2 \cdot m} \neq 0 \right).$$

Daraus folgt für eine Varianz  $\text{var}_\psi(Q) > 0$  eine Varianz  $\text{var}_\psi(H) \approx p^2/(2m)$ , sodaß  $\hbar/\bar{p} = 1/\kappa$ .

## 2.5 Beispiel: Der Potentialblock

**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:  $x \in (a, b)$ . Dieser war bisher nicht existent, führt jedoch zu dem berühmten Ereignis des *Quanten-Tunnelings*. Unsere Verklebungsschablone müssen wir also zunächst erweitern. Wir führen die allgemeine abschnittsweise Definierte Linearkombination der Lösungen mit weiteren Koeffizienten herbei:

$$\psi(x) = \begin{cases} c_{1,1} \cdot \exp(k_{\lambda,V_{<a}} \cdot x) + c_{1,2} \cdot \exp(-k_{\lambda,V_{<a}} \cdot x) & x \in \mathbb{R}_{<a} \\ c_{2,1} \cdot \exp(k_{\lambda,V_{(a,b)}} \cdot x) + c_{2,2} \cdot \exp(-k_{\lambda,V_{(a,b)}} \cdot x) & x \in (a, b) \\ c_{3,1} \cdot \exp(k_{\lambda,V_{>b}} \cdot x) + c_{3,2} \cdot \exp(-k_{\lambda,V_{>b}} \cdot x) & x \in \mathbb{R}_{>b} \end{cases}$$

An dieser Stelle müssen wir erneut ein physikalisches Plausibilitätsargument liefern. Dieses Mal betrifft es jedoch nur die äußeren Gebiete, das innere wird in ihren Unbekannten erhalten, da hier durch mögliche erneute Reflexion an  $b$  für eine aus negativer reeller Richtung kommende Welle zwei gegenläufige Wellen in  $(a, b)$  denkbar sind. Dies führt uns auf die Form

$$\psi(x) = \begin{cases} \exp(k_{\lambda,V_{<a}} \cdot x) + \rho_{\lambda,V_{<a}} \cdot \exp(-k_{\lambda,V_{<a}} \cdot x) & x \in \mathbb{R}_{<a} \\ c_{2,1} \cdot \exp(k_{\lambda,V_{(a,b)}} \cdot x) + c_{2,2} \cdot \exp(-k_{\lambda,V_{(a,b)}} \cdot x) & x \in (a, b) \\ \tau_{\lambda,V_{>b}} \cdot \exp(k_{\lambda,V_{>b}} \cdot (x - a)) & x \in \mathbb{R}_{>b} \end{cases}$$

Da wir nun zwei kritische Stellen  $a, b \in \mathbb{R}$  haben, müssen wir die Stetigkeitsbedingungen an beiden Stellen erfüllen.



- .....
- Warum steht im dritten Funktionsteil  $x - a$ ? (S.58)
- Stelle die Stetigkeitsbedingungen auf und erhalte vier Bedingungsgleichungen. Dividiere nun die zu  $\psi'(a)$  bzw.  $\psi'(b)$  gehörige Gleichung durch  $k_{\lambda, V < a}$  und addiere die zu  $\psi(a)$  gehörige Gleichung zu dem Ergebnis von  $\psi'(a)$  bzw. subtrahiere die zu  $\psi(b)$  gehörige Gleichung von dem Ergebnis von  $\psi'(b)$ . (S.59)
- .....

Dies führt uns auf ein lineares Gleichungssystem der Form

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

Diese vier Bedingungen führen uns nun auf ein lineares Gleichungssystem mit den Unbekannten  $C, D, \rho, \tau$ .

- .....
- Löse das Gleichungssystem. Verifiziere  $\tau(t, x) = 1/(\cosh(\kappa(t, x) \cdot a) + \overset{\circ}{i} \varepsilon(t, x) \cdot \sinh(\kappa(t, x) \cdot a)/2)$ , wobei  $\varepsilon(t, x) := (\kappa(t, x)^2 - k(t, x)^2)/(\kappa(t, x) \cdot k(t, x))$ . (S.60)
- .....

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.

- .....
- Setze einmal die Funktionsdefinitionen in den Ausdruck ein. Quadriere zunächst  $\varepsilon$ , wobei du die  $\kappa$  und  $k$  Ausdrücke einsetzt und eine zusammengesetzte Funktion mit  $E$  und  $V$  erhältst. (S.61)
- .....

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

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

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

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

## 2.6 Beispiel: Der Potentialpeak

Wir definieren nun ein abstraktes Potential, welches lediglich an einer Stelle ungleich Null ist. Dieses Potential ist gegeben durch  $V := (V_0 \cdot \mathbb{1}_{\{x_0\}}(x))_{x \in \mathbb{R}}$ . Wir arbeiten unsere

Arbeitspunkte ab: zunächst klären wir  $\lambda < V_0$  bzw.  $\lambda > 0$ . Wir wählen nun unsere Lösungsschablone unter einem physikalischen Plausibilitätsargument: Eine von links ( $x < x_0$ ) einfallende Welle  $\psi$  wird an der Stelle  $x_0$  reflektiert oder transmittiert, im Bereich  $x > x_0$  findet sich eine einzige transmittierte Welle. Damit wählen wir für die Verklebung der Fundamentallösungen die Form

$$\psi(x) = \begin{cases} \exp(k_{\lambda, V_{< x_0}} \cdot x) + \rho_{\lambda, V_{< x_0}} \cdot \exp(-k_{\lambda, V_{< x_0}} \cdot x) & x \in \mathbb{R}_{< x_0} \\ \tau_{\lambda, V_{> x_0}} \cdot \exp(k_{\lambda, V_{> x_0}} \cdot x) & x \in \mathbb{R}_{> x_0} \end{cases}.$$

Für  $\lambda > 0$  ist im Bereich  $x \in \mathbb{R} \setminus \{x_0\}$  der Wert für  $k_{\lambda, V}(x)$  rein komplex, also die Lösung eine ebene Welle. Im Punkt  $x_0$  ist für  $\lambda < V_0$  ein reeller Wert und damit exponentieller Abfall bzw. für  $\lambda > V_0$  ein reiner Imaginärteil und damit eine Schwingung zu erwarten. Aus der Stetigkeitsbedingung an  $\psi$  an der Stelle  $x_0$  erhalten wir die Gleichung  $1 + \rho_{\lambda, V_{< x_0}} = \tau_{\lambda, V_{> x_0}}$  und aus der definierten Unstetigkeitsbedingung an  $\psi'$  den Grenzwertprozess

$$\lim_{x \nearrow x_0} \psi'(x) - \lim_{x \searrow x_0} \psi'(x) = V_0 \cdot \psi(x_0).$$

Hier werten wir die Definition von  $\psi$  im Interval  $\mathbb{R}_{< x_0}$  an der Stelle  $x_0$  und die Definition von  $\psi$  im Interval  $\mathbb{R}_{> x_0}$  an der Stelle  $x_0$  aus. Dies führt uns auf die Gleichung

$$k_{\lambda, V_{< x_0}} \cdot \exp(k_{\lambda, V_{< x_0}} \cdot x_0) \cdot (1 + \rho_{\lambda, V_{< x_0}}) = \tau_{\lambda, V_{> x_0}} \cdot k_{\lambda, V_{> x_0}} \cdot \exp(k_{\lambda, V_{> x_0}} \cdot x_0) + V_0 \cdot \psi(x_0),$$

Daraus folgt

$$k_{\lambda, V_{< x_0}} \cdot (1 + \rho_{\lambda, V_{< x_0}}) = \tau_{\lambda, V_{> x_0}} \cdot k_{\lambda, V_{> x_0}} + V_0.$$

### 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*.

## 2.7 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  $V_\infty$  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 Grenzfallebetrachtung 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:

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

.....  
□ Löse das Gleichungssystem für  $k$  und  $E$  und  $f$  im Exponentialansatz. Finde die Diskretisierung durch die Periodizität von  $\exp(i \cdot \phi)$ . (S.62)

□ 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.63)

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

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

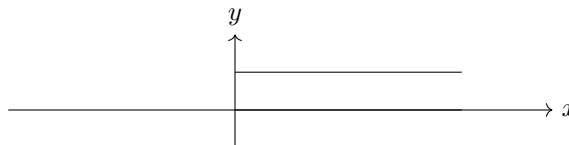
Dies ist begründet durch die *Unschärferelation*, denn durch niedrigere Unschärfe des Ortsoperators folgt eine größere Unschärfe des Impulsoperators, was zu einer größeren kinetischen Energie führt. Eine weitere Beobachtung ist der Knotenzusammenhang  $\mathcal{K}_{u,n} = n - 1$ . Die Grenzwertbetrachtung  $V_0 \rightarrow \infty$  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

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

Das Verhalten von  $t \mapsto |\tau(t, x)|^2$  ist durch die folgende Grafik gezeigt.



**VL 12,**  
22.05.2023,  
11:45

## 2.8 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 das Vorverb *harmonisch* angedeutete lineare Rückstellkraft  $F = -k \cdot x$  aus, welche Resultat des Kraftpotentials  $V = 1/2 \cdot k \cdot x^2$  ist. Ein quantenmechanisches Pendant wären zwei gekoppelte, schwingende Moleküle, welche in der Festkörperphysik noch auf sogenannte *Gitterschwindungen* 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  $H := P^2/(2m) + V(Q)$  mit  $V : (k \cdot x^2/2)$  und  $k \in \mathbb{R}$  als Kopplungskonstante. Daraus ergibt sich für einen Eigenwert  $\lambda \in \sigma_P(H)$  wieder

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

Im nächsten Schritt wollen wir die Lösung  $\psi(x)$  transformieren zu einer einheitenlosen Funktion  $u(x)$ . Hierzu wählen wir die Transformation  $\Phi := (\sqrt{\omega \cdot m/\hbar} \cdot x)$ , sodaß  $\psi(x) = (u \circ \Phi)(x)$  gilt. Damit können wir die Differentialgleichung umformen zu

$$\left(\frac{d}{dx}\right)^2 (u \circ \Phi)(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} \cdot \left(\lambda - \frac{k}{2} \cdot x^2\right) \cdot \psi(x)$$

Mithilfe der Kettenregel folgern wir  $d(u \circ \Phi)(x)(1) = du(\Phi(x))(1) \cdot d\Phi(x)(1)$ , sodaß mit den Definitionen und zweifacher Ausführung gilt

$$\left(\frac{d}{dx}\right)^2 (u \circ \Phi)(x) = \frac{\omega \cdot m}{\hbar} \cdot \left(\frac{d}{dx}\right)^2 (u \circ \Phi)(x).$$

Damit können wir weiter ausformulieren:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\omega \cdot m}{\hbar} \cdot \left(\frac{d}{dx}\right)^2 (u \circ \Phi)(x) = \lambda \cdot (u \circ \Phi)(x) - \frac{k}{2} \cdot x^2 \cdot (u \circ \Phi)(x).$$

Mit der Definition  $\eta := 2 \cdot \lambda/(\hbar \cdot \omega)$  können wir die Energie  $\lambda = \eta \cdot \hbar \cdot \omega/2$  ausdrücken und erhalten

$$-\frac{\hbar \cdot \omega}{2} \cdot \left(\frac{d}{dx}\right)^2 (u \circ \Phi)(x) = \frac{\hbar \cdot \omega}{2} \cdot \eta \cdot (u \circ \Phi)(x) - \frac{k}{2} \cdot x^2 \cdot (u \circ \Phi)(x).$$

$$\left(\frac{d}{dx}\right)^2 (u \circ \Phi)(x) = (\eta - (u \circ \Phi)(x)^2)$$

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

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

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

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

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

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

.....  
☐ Bestimme die Rekursionsgleichung  $a_{n+1} = h \cdot a_n$ . (S.65)

☐ Rechne nach, daß es ein  $N \in \mathbb{N}$  gibt, sodaß alle Folgenglieder der gesuchten Reihe gleich Null sind. (S.66)

.....  
 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  $\eta$  und finde einen Ausdruck für  $\lambda$ . (S.67)

.....  
 In der Lösung  $\psi$  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.

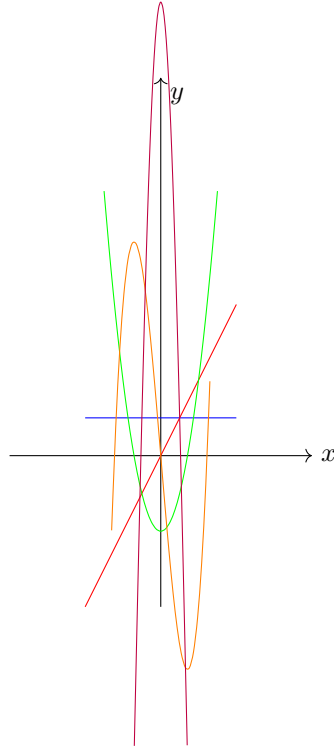


Abbildung 5: Die ersten fünf Hermitepolynome:  $H_0$  in blau,  $H_1$  in rot,  $H_2$  in grün,  $H_3$  in orange und  $H_4$  in lila.

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  $\text{SO}_3$ . 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

$$\text{SO}_d := \{A \in \mathbb{R}^{d \times d} : A \cdot A^T = A^T \cdot A = I_n, \det(A) = 1\}.$$

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

$$\mathcal{D}_{\varphi,a} := \text{Eintrag} \left\{ A \in \text{SO}_3 : \frac{\langle x, Ax \rangle}{\|x\|_2 \cdot \|Ax\|_2} = \cos(\varphi), \text{ rotiert um } a \right\}.$$

Dies ist äquivalent zu der Schreibweise

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

.....  
 (S68) □ 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 fortschreitend in mehreren Dimensionen über Operatoren sprechen zu können, benötigen wir zunächst die Definition des Operatortupels.

**Definition 3.1.** Das Operatortupel.

Als Operatortupel definieren wir eine Abbildung  $[N] \rightarrow (\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H})$ . Die Verkettung zweier Operatortupel ist dabei definiert als punktweise Verkettung  $T^2 = (T_i \circ T_i)_{i \in \text{Def}(T)}$  und die Auswertung in  $x \in \mathcal{H}$  als  $T(x) := \sum_{i \in \text{Def}(T)} T_i(x)$ .

Um die Drehung in der Anwendung zu sehen, betrachten wir den Drehimpulsoperator  $n \mapsto L_n \in L_S(\mathbb{R})$ . Diesen definieren wir durch  $L := Q \times P$ , wobei wir mit  $Q$  und  $P$  Orts-



und Impulsoperatortupel meinen und das Kreuzprodukt wie in  $\mathbb{R}^3$  definieren. Wendet man die Drehung auf ein  $\psi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$  an, gilt

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

wodurch wir einen neuen Zusammenhang

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

mit unserem definierten Drehimpuls  $L$  vorfinden.

**Definition 3.2.** Der Drehimpulsoperator.

Ein Operatortupel  $n \mapsto J_n \in L_S(\mathbb{R})$  nennen wir *Drehimpulsoperator(tupel)*, wenn  $[L_i, L_j] = i\hbar \cdot \sum_{k \in [3]} \varepsilon_{ijk} \cdot L_k$  für  $i \neq j \in \text{Def}(J)$  gilt. Speziell im physikalischen Sinne ist  $L := Q \times P$  in drei Dimensionen mit dem Erwartungswert  $\sum_{i \in [3]} \langle L \rangle_\psi$  und den der Hamilton-Kommutatoreigenschaft  $[L, H] = 0$ . In der Verkettung mit sich selbst gilt die Eigenwertgleichung  $L^2(\psi) = \hbar^2 \lambda \cdot \psi$ .

- .....
- Zeige, daß  $L$  ein selbstadjungierter Operator ist. (S.69)
  - 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.70)
  - 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.71)
- .....

Aus der Aufgabe und der Schreibweise für  $\mathcal{D}_{\varphi,a}$  folgern wir weiter  $[L, H] = 0$ . Mit der Aufgabe folgern wir nun eine allgemeinere: Für  $(i, j) \in [3]^2$  gilt

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

wobei  $\varepsilon$  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.72)
- .....

Betrachten wir den Erwartungswert  $\langle L^2 \rangle_\psi$ , so finden wir nach Definition  $\langle T \rangle_\psi := \sum_{i \in \text{Def}(T)} \langle T \rangle_\psi$  für ein Operatortupel den Wert

$$\|L^2(\psi)\| = \langle L(\psi), L(\psi) \rangle = \langle \psi, L^2(\psi) \rangle = \sum_{i \in [3]} \langle L_i(\psi), L_i(\psi) \rangle \geq 0.$$

Somit sind durch Selbstadjungiertheit und positiv Definitheit des Skalarproduktes die Eigenwerte von  $L^2$  im reellen und größer Null:  $L^2\psi = \hbar^2 \lambda \psi$ .

**Definition 3.3.** Der Leiteroperator.

Als Leiteroperator  $L_{\pm}$  bezeichnen wir die Operatoren  $L_{\pm} := L_1 \pm i \cdot L_2$ . Zur Adjunktion gilt  $L_{\pm}^* = L_{\mp}$ .

Für die Leiteroperatoren gelten eine Reihe von Eigenschaften:

$$\begin{aligned} \langle \psi, L_{pm}(\psi) \rangle &= \langle L_{\mp}(\psi), \psi \rangle & [L_3, L_{\pm}] &= \pm \hbar \cdot L_{\pm} \\ [L_+, L_-] &= 2\hbar \cdot L_3 & [L^2, L_{\pm}] &= 0 \\ L_+ \circ L_- &= L_1^2 + L_2^2 + \hbar \cdot L_3 & L^2 &= L_- \circ L_+ + \hbar L_3 + L_3^2. \end{aligned}$$

- (S73) □ Zeige diese Kommutatoreigenschaften des Leiteroperators  $L_{\pm}$  in Verbindung mit  $L^2$  und  $L_3$ .  
 Zeige hierfür auch  $L_{\pm}^* = L_{\mp}$ .

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.

- (S74) □ Zeige  $\psi$  ist Eigenvektor von  $L^2$  mit Eigenwert  $\hbar^2 \cdot \lambda$ . Zeige dann auch  $L_{\pm}(\psi)$  ist Eigenvektor mit selbem Eigenwert.

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

$$\|L_z(\psi)\|^2 = \langle \psi, (L_{\mp} \circ L_{\pm})(\psi) \rangle = \hbar^2 \cdot (\lambda - m^2 \mp m) \cdot \langle \psi, \psi \rangle \geq 0.$$

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

- (S75) □ 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  $L^2(\psi_{l,m}) = \lambda \cdot \psi_{l,m}$  mit Drehimpulsquantenzahl  $l \in [n-1]$  und  $m_l \in D_l \cap [-l, l]$ , wobei  $D_f := \{-l+n : n \in \mathbb{N}_0\}$ . Nach der Definition von  $L$  steht in ausgeschriebener Form zunächst mit  $\nabla$  als Differentialoperator folgender Ausdruck:

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

Unter der Transformation in Kugelkoordinaten  $f_K : x \mapsto (r(x), \vartheta(x), \varphi(x))$  mit  $x \in \mathbb{R}$  und  $\vartheta : \mathbb{R} \rightarrow (0, \pi)$  und  $\varphi : \mathbb{R} \rightarrow (-\pi, \pi)$  als Winkelzuordnungen und *Trennung der Variablen* der Form

$$\psi_{l,m}(x) = (R_{l,m} \circ (f_K)_1^*)(x) \cdot (Y_{l,m} \circ ((f_K)_2^*, (f_K)_3^*))(x)$$

und  $Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) = \Phi_{l,m}(\varphi) \cdot \Theta_{l,m}(\vartheta)$  kann man zunächst  $\Phi_{l,m}(\varphi) = \exp(i \cdot m \cdot \varphi)$  setzen. Es ist dann zu Lösen eine Gleichung der Form

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

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

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

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

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

die sogenannte *Kugelflächenfunktion*.

**Korollar 3.1.** Satz von Kugelflächenfunktionen in Polardarstellung des Drehoperators.

Die Polarttransformation der Drehimpulsoperatorverkettung  $L^2$  mittels  $f_K$  liefert für eine Wellenfunktion  $\psi_{l,m} \in H^2(\mathbb{R})$  aus der Eigenwertgleichung  $L^2(\psi_{l,m}) = \lambda \cdot \psi_{l,m}$  die Zerlegungsmöglichkeit  $\psi_{l,m} = R_{l,m} \circ (f_K)_1^* \cdot Y_{l,m} \circ ((f_K)_2^*, (f_K)_3^*)$  in die sogenannte *Kugelflächenfunktion*  $Y_{l,m}$  und die *Radialfunktion*  $R_{l,m}$ .

Die Kugelflächenfunktionen  $Y_{l,m}$  sind dabei für erlaubte  $l, m$  *orthonormal* und *vollständig*, sowie erfüllen die *Parität*  $Y_{l,m}(-x) = (-1)^l \cdot Y_{l,m}(x)$  und die *komplexe Konjugation*  $\overline{Y_{l,m}(x)} = (-1)^m \cdot Y_{l,-m}(x)$ .

□ Zeige die Orthogonalität  $Y_{l,m}$  mit  $Y_{l',m'}$  für erlaubte  $l, m$  und  $l', m'$ .

(S.76)

□ Zeige die Vollständigkeit der Kugelflächenfunktionen nach Definition

(S.77)

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_{l,m}(x) \cdot \overline{Y_{l,m}(x')} = \delta(x - x').$$

□ Zeige die Paritätseigenschaft  $Y_{l,m}(-x) = (-1)^l \cdot Y_{l,m}(x)$ .

(S.78)

(S79) □ Zeige die Eigenschaft der komplexen Konjugation  $\overline{Y_{l,m}(x)} = (-1)^m \cdot Y_{l,-m}(x)$ .

.....

## Bloch Theorem

VL 14  
 (01.06.2023)  
 @home

### 3.3 Bewegung im Zentralkraftfeld

### 3.4 Quantenmechanische Beschreibung des Wasserstoffatoms

Wir gehen von dem Coulomb Potential  $V$  aus. Wir sind auf der Suche nach den gebundenen Zuständen.

**Definition 3.4.** Gebundener Zustand.

Einen Eigenzustand  $\psi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$  des Hamiltonoperators  $H$  nennen wir *gebunden*, falls der Eigenwert  $\lambda$  kleiner als das Potential  $V$  des Hamiltonoperators ist.

Unser Potential hat also die Form  $V := (-Z \cdot e^2 / (4\pi\epsilon_0 \cdot x))_{x \in \mathbb{R}}$ . Anschaulich wären wir bei  $Z = 1$  beim Wasserstoffatom, für  $Z = 2$  bei  $\text{He}^+$ . Ist  $Z = 1$ , so nehmen ferner an, der Kern mit der Masse  $m_p$  sei durch  $m_p \gg m_e$  in Ruhe. Unsere Wellenfunktion  $\psi_{l,m}$  können wir nun aufgrund der Symmetrieeigenschaft des Zentralpotentials in die Kugelkoordinaten mittels  $f_K$  überführen und durch die Kugelflächenfunktion  $Y_{l,m}$  und Radialfunktion  $R_{n,l}$  darstellen:

$$\psi_{l,m}(x) = (R_{l,m} \circ (f_K)_1^*)(x) \cdot \left( Y_{l,m} \circ ((f_K)_2^*, (f_K)_3^*) \right)(x).$$

In den Kugelkoordinaten Hamiltonoperator  $H_K$  eingesetzt folgt für den Radialteil  $R_{n,l}(x) = u_{n,l}(x)/(f_K)_1^*(x)$  die Differentialgleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left( \frac{d}{dx} \right)^2 \cdot u_{n,l}(x) - \frac{Z \cdot e^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot x} \cdot u_{n,l}(x) + \frac{\hbar^2 \cdot l \cdot (l+1)}{2m \cdot x^2} \cdot u_{n,l}(x) = E_{n,l} \cdot u_{n,l}(x).$$

Ohne diese Gleichung hier konkret zu lösen, wollen wir die Phänomenologie einmal diskutieren. Wir führen zunächst die Abkürzungen des Bohrradius  $a_B := 4\pi\epsilon_0 \cdot \hbar^2 / (m \cdot e^2)$  und der Rydbergkonstante  $R_y := \hbar^2 / (2 \cdot m \cdot a_B)$  ein. Mithilfe der dimensionslosen Länge  $\rho = Z \cdot (f_K)_1^*(x) / a_B$  und der dimensionslosen Energie  $\eta = \sqrt{-E_{n,l} / R_y} / Z$  können wir unter Multiplikation mit  $1/(Z^2 \cdot R_y)$  die Differentialgleichung umformen zu

$$\left( \frac{d}{d\rho} \right)^2 u(\rho) + \frac{2}{\rho} \cdot u(\rho) - \frac{l \cdot (l+1)}{\rho^2} \cdot u(\rho) = \eta \cdot u(\rho).$$

Wir betrachten nun zwei Grenzwertprozesse für die Größe  $\eta$ :

- Wird  $\rho \rightarrow \infty$ , so resultiert asymptotisches Verhalten gegen Null durch Wegfall der Brüche und  $u''(\rho) = \eta^2 \cdot u(\rho)$ , sodaß wir  $u(\rho)$  durch die Exponentialfunktion  $u(\rho) = \exp(-\eta \cdot \rho)$  approximieren können.
- Für  $\rho \rightarrow 0$  erhalten wir eine grobe Approximation durch  $u''(\rho) \approx l \cdot (l+1) / \rho^2 \cdot u(\rho)$  und schätzen ab durch  $u(\rho) \approx \rho^{l+1}$ .

Diese Abschätzungsfaktoren spalten wir von der gesuchten Funktion  $u(\rho)$  ab und erhalten

$$u(\rho) = \rho^{l+1} \cdot \exp(-\eta \cdot \rho) \cdot p(\rho).$$

Setzen wir dies in die Differentialgleichung ein, so folgt

$$p''(\rho) + 2 \cdot p'(\rho) \cdot \left( \frac{l+1}{\rho} - \eta \right) + \frac{2}{\rho} \cdot (1 - \eta \cdot (l+1)) = 0.$$

Diese verbleibende Differentialgleichung wollen wir per Potenzreihenansatz der Form  $p(\rho) = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n \cdot \rho^n$  lösen; Wir erhalten nach einer Rechnung die Rekursionsformel

$$\alpha_{n+1} = \frac{\eta \cdot (l + n + 1) - 1}{(n+1) \cdot (n+2 \cdot l + 2)} \cdot \alpha_n.$$

Hier finden sich nun zwei Fälle: Den Fall der Konvergenz oder der Divergenz. Tritt letzterer auf, so approximieren wir  $p(\eta) \approx \exp(2 \cdot \eta \cdot \rho)$  und erhalten für  $u$  die Form  $u(\rho) \approx \exp(\eta \cdot \rho)$ , was für  $\eta \rightarrow \infty$  nicht mehr normierbar ist. Damit greift ein physikalisches Argumentationskonzept und wir gehen von Konvergenz aus. Für  $\eta$  erhalten wir mit  $n_0$  als letzten Reihenterm ungleich Null den Ausdruck

$$\eta = \frac{1}{n_0 + l + 1} =: \frac{1}{m}$$

und für die erlaubten Energien schließlich durch  $E = -Z^2 \cdot R_y \cdot n^2$  das Ergebnis  $E_n = -Z^2 \cdot R_y / n^2$ . Die möglichen  $l$  sind damit  $l \in [n-1]$  durch  $l = n - n_0$ .

**Korollar 3.2.** Das Wasserstoffatom.

Die Spektrallinien des Wasserstoffatoms finden wir für einen Übergang  $n \rightarrow m$  durch  $-R_y \cdot (1/n^2 - 1/m^2)$ . Die Hauptquantenzahlen beschränken die Drehimpulsquantenzahlen auf die Menge  $\{1, \dots, n-1\}$ , wodurch  $m_l \in \{-l+n : n \in \mathbb{N}_0\} \cap [-l, l] =: D_l \cap [-l, l]$  gefolgert werden kann. Der Entartungsgrad eines Eigenwertes zu  $n$  ist damit unter Vernachlässigung des Spins gegeben durch die Folge

$$g := \left( \sum_{l \in [n-1]} (2 \cdot l + 1) \right)_{n \in \mathbb{N}} = (n^2)_{n \in \mathbb{N}},$$

wobei  $\text{card}(D_l \cap [-l, l]) = 2 \cdot l + 1$  gilt. Durch den Spin erhöht sich der Entartungsgrad zu  $g_n = 2n^2$ .

Für die ersten drei Zustände erhält man mithilfe der Kugelflächendarstellung diese Funktionen.

**Optional: Ausführung des Wasserstoffatoms in Kugelkoordinaten**

Wir wollen uns in diesem optionalen Unterkapitel einmal den unschönen Teil der Rechnung anschauen, der sich aus der Umrechnung in Kugelkoordinaten ergibt. Hierzu gehen wir von der zeitunabhängigen Schrödingereigenwertgleichung  $H(\Psi) = \lambda \cdot \Psi$  für ein Coulombpotential  $V := (-Z \cdot e^2 / (4\pi\epsilon_0 \cdot r))_{r \in \mathbb{R}}$  aus (durch den Platzhalternamen  $r$  suggerieren

wir bereits ein Teilziel der Reise). Wir wollen nun die Gleichung in Kugelkoordinaten umformen. Hierzu definieren wir die Kugelkoordinatenabbildung  $f_K : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$  durch

$$f_K(x) := \left( \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}, \cos^{-1} \left( \frac{x_3}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}} \right), \tan^{-1} \left( \frac{x_2}{x_1} \right) \right).$$

Als nächstes betrachten wir eine Lösung  $\psi \in H^2(\mathbb{R})$  des Problems: Sie ist von der allgemeinen Form  $\mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ , jedoch ist unser Problem ein physikalisch dreidimensionales; Wir greifen also auf die Operatortupeldefinition  $n \mapsto H_n$  für  $n \in \{1, 2, 3\}$  zurück und schreiben  $\Psi$  als Zusammenfassung  $(\psi_1, \psi_2, \psi_3)$  auf. Mit der geklärten Dimensionalität verketteten wir nun Punktweise mit der Kugelkoordinatenabbildung  $f_K$ , sodaß

## 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 3.5. Bloch Funktion.

Sei  $\psi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^d)$  eine Lösung der Schrödingergleichung mit periodischem Potential  $V$ . Dann heißt  $\psi$  *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

- VL 16** 4.1 Zustände und Observablen  
 14.06.2023,  
 08:15 4.2 Der Hilbertraum

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  $[\rightarrow \text{LinA 1, mGdQM}]$ .

- VL 17** 4.3 Uneigentliche Dirac Vektoren  
 15.06.2023,  
 10:00

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

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

- .....  
 (80) □ Finde mathematische Analogien zu der präsentierten Diracnotation.  
 (81) □ Wodurch ist die Existenz des  $\langle \phi |$  gesichert? Ist die Zuordnung eindeutig? Recherchiere hierzu 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  $\Phi_v$  notieren wir als  $\langle v |$  und schreiben als Auswertung  $\Phi_v(w) =: \langle v | (w) =: \langle v | w \rangle = \langle v, w \rangle_V$ .

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



## 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  $\langle T(\psi) | \phi \rangle = \langle \psi | T^*(\phi) \rangle$ .

.....

□ Zeige die Eindeutigkeit von  $T^*$  zu  $T$ . Beachte hierzu [→ 15.1.1]. (S83)

□ Rechne die Eigenschaften (i)  $(f^*)^* = f$ , (ii)  $(f + g)^* = f^* + g^*$ , (iii)  $(\lambda f)^* = \bar{\lambda} f^*$  für  $f, g \in V^*$  (S84)

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*.

.....

□ Zeige den endlichdimensionalen Fall. Finde ein Gegenbeispiel im unendlichdimensionalen Fall. (S85)

.....

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

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

Dies wollen wir einmal festhalten.

## Dyadisches Produkt

**VL 18**  
16.06.2023,  
11:45

**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

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

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

(87) ☐ An der Tafel haben wir die Dirac Notation für obige Basisdarstellung verwendet. Kläre die 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  $\alpha$  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  $\lambda$  Eigenwert und  $\psi$  Eigenvektor zum Eigenwert  $\lambda$ . Gibt es mehrere Eigenvektoren zu einem Eigenwert, so bilden diese einen Unterraum, den Eigenraum zum Eigenwert  $\lambda$ . Wir bezeichnen dann  $\lambda$  als *n-fach entartet*, falls  $\dim E_\lambda = n$ . Die Sammlung aller Eigenwerte ist das sogenannte *Punktspektrum*  $\sigma_P(H)$  von  $H$ .

- .....
- Überlege dir jeweils Beispiele zu einem (i) diskreten Punktspektrum, (ii) kontinuierlichen Punktspektrum oder (iii) gemischten Punktspektrum. (S.88)
  - 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. (S.89)
  - Zeige die Existenz einer ONB aus Eigenvektoren für selbstadjungierte Operatoren mithilfe des Spektralsatzes der Funktionalanalysis. (S.90)
  - 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  $I$ ? (S.91)
  - Berechne  $q_n(A)$  als Funktionsauswertung mit  $q$  als  $n$ -te Potenzfunktion. (S.92)
  - Nutze den Einsetzungshomomorphismus um das Polynom  $p(A)$   $n$ -ten Grades zu beschreiben. (S.93)
- .....

## 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.

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

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

wobei  $|\lambda\rangle$  der Eigenvektor zu  $\lambda$  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  $|\lambda\rangle$ .

- .....
- 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? (S.94)
- .....

### 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  $\lambda$  messbar sein wird.

- (§95) □ 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  $\psi_\lambda$  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  $\psi$  können wir dann in einer gegebenen ONB  $\underline{e} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^3$  ausdrücken durch

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

- (§96) □ 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  $g_\lambda$  als *Entartungsgrad*. Wir bezeichnen dabei  $P_\lambda$  als *Projektor auf den Eigenraum*  $E_\lambda$ .

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

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

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

- (§97) □ Wir identifizieren nun  $P_\lambda$  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  $\lambda$  und Wahrscheinlichkeit  $P_\lambda$ , 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

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

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

**VL 21**  
07.07.2023,  
11:45  
cu@Cro's! 真

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.

- (S99) □ Berechne die Verkettung  $a \circ a^*$  und  $a^* \circ a$ . Zeige damit dann  $a^* \circ a + a \circ a^* = \Phi(X)^2 + \Psi(P)^2$ .

Mit der Aufgabe 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. 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  $N^* = (a^* \circ a)^* = a^* \circ (a^*)^* = a^* \circ a = N$ .

- (S100) □ 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  $[\Psi(P), \Phi(X)] = -[\Phi(X), \Psi(P)]$ .

- (S101) □ 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  $[a^*, a] = -1$ .

- (S102) □ 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  $N = a^* \circ a$ .

- (S103) □ Berechne  $\|N\| = 0$ ,  $\|a(x)\|^2 = \lambda$  und  $\|a^*(x)\|^2 = \lambda$ .

- (S104) □ 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.

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  $n \in \mathbb{N}_0$ .

**VL 22**  
12.07.2023,  
11:45

**Definition 4.3.** Erzeugungs-, Vernichtungs- und Besetzungszahloperator.

Unter den Transformationen  $\Phi := (Q(x)/x_0)_{x \in \mathcal{H}}$  und  $\Psi := (P(x)/p_0)_{x \in \mathcal{H}}$  mit  $x_0 := \sqrt{\hbar/(m \cdot \omega)}$  und  $p_0 := \hbar/x_0$  können wir den Hamiltonoperator des harmonischen Oszillators  $H^{harm}$  mithilfe des Vernichtungsoperators

$$a := \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \left( \frac{Q}{x_0} + \frac{i \cdot P}{p_0} \right)$$

und dem adjungierten Erzeugungsoperator  $a^*$  in kompakter Form  $H^{harm} = \hbar \cdot \omega \cdot (a^* \circ a + 1/2)$  notieren.

Der s.a. Besetzungszahloperator  $N := a^* \circ a$  verkürzt mit der Eigenwertfolge  $E_n = \hbar \cdot \omega \cdot (n + 1)$  den Ausdruck weiter.





## 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.

.....  
□ Nähere  $\sqrt{26}$  mithilfe von Taylorentwicklung an.  
.....

(§105)

### 5.1 Stationäre Störungstheorie

In diesem Subkapitel betrachten wir die *Rayleigh-Schrödinger* Störungstheorie in nicht-entarteter und entarteter Form.

**VL 23**  
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.

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

(§106)

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

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

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  $\Phi_\lambda$  ein, so erhalten wir

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

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

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

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.

.....  
 (S107) □ Entwickle den Eigenvektor  $|n_1\rangle$  in einer Basis  $\underline{v}$  des betrachteten Hilbertraumes  $\mathcal{H}$ .

(S108) □ 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.

.....  
 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.

**Korollar 5.1.** Nichtentartete Störung erster Ordnung.

Für eine Störfunktion  $\Phi_\lambda := H_0 + \lambda \cdot H_s$  lässt sich durch Reihenansatz des gestörten Zustandes  $|N\rangle := \lim_{\lambda \rightarrow 0} \sum_{n=0}^{\infty} \lambda_i \cdot |n_i\rangle$  zum gestörten Eigenwert  $:= \lim_{\lambda \rightarrow 0} \sum_{n=0}^{\infty} \lambda_i \cdot E_{i,n}$  die Eigenwertgleichung  $\Phi_\lambda |N\rangle = \Lambda \cdot |N\rangle$  aufstellen und für die erste Ordnung Korrekturterme von  $|N\rangle, \Lambda$  mit den Bestimmungsgleichungen berechnen:

$$|n_1\rangle = \sum_{m \in \mathbb{N} \setminus \{n\}} |m_0\rangle \cdot \frac{\langle m_0 | H_s(|n_0\rangle) \rangle}{E_{0,n} - E_{0,m}}, \quad E_{1,n} = \langle n_0 | H_s(|n_0\rangle) \rangle.$$

Die Energie für höhere Terme ist ferner durch die Rekursion  $E_{k,n} = \langle n_0 | H_s(|n_{k-1}\rangle) \rangle$  gegeben, die Korrekturterme zu  $|N\rangle$  höherer Ordnung sind im Allgemeinen komplizierter zu bestimmen.

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

**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.

- .....
- ☐ Schätze hierzu das elektrische Feld im Atom selbst ab. Nutze dazu den Quotienten  $E_R/(e \cdot r_B)$  (S.113)
- 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.

.....  
 (S114) □ 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

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

Für den Reihengrenzwert findet man den Wert  $9/8$ , sodaß sich das Ergebnis vereinfacht zu  $E_{1,0,0}(2) = -4\pi\varepsilon_0 \cdot E^2 \cdot a_B^3 \cdot 9/4$ .

.....  
 (S115) □ Recherchiere weiter zur Berechnung der zweiten Störungsordnung im Rahmen des Stark-Effekts.

## 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  $H_1 = U^{-1} \cdot \overline{H}_1 \cdot U$ .

### 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  $z$  Richtung anliegenden elektrischen Feld  $E = (0, 0, E_z)$ . (S.116)

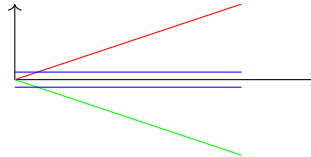
□ Definiere noch einmal den *linearen Stark Effekt* und den *quadratischen Stark Effekt*. (S.117)

.....

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  $\psi_0$  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.

.....  
 (§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  $t$ .

.....  
 (§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*.

.....  
 (§120) □ Berechne nun die Änderung des zugehörigen Operators  $T_I$ .  
 .....

### 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  $\sigma$  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  $\psi = \mu \cdot v_1 + \nu \cdot v_2$  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  $\Theta$  und  $\varphi$  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