

Skript zur Vorlesung :

Theoretische Physik III: Quantenmechanik

Vorlesung SS 25

Prof. Dr. Jens Timmer

24. Juli 2025

0 Einleitung

Technicalities:

- Skript ist dünn, ersetzt nicht das Studium von Lehrbüchern !
Hierarchie
 - Vorlesung: Konzepte
 - Bücher: Konzepte und Details
 - Übungen: Rechnen & Verständnis
Viele Stunden darauf verwenden. Nicht versuchen es, mit Google, ChatGPT o.ä. zu lösen. Wird zu Katastrophe führen.
Abgeben in 2er-Gruppen.
Fragen zu den Übungen an Simon Beyer.
- Scheinkriterium, 50 % der Übungspunkte, Bestehen der Klausur
- Bemerkung Vektorpfeile und Nomenklatur
- Wenn etwas unklar: Fragen ! In der Vorlesung, bitte keine mails.
- Münsterführung

Literatur:

- Schwabl. Quantenmechanik
- Grawert. Quantenmechanik
- Greiner ...
- Cohen-Tannoudji ...

Unterschiede der Bücher:

- Verhältnis Text zu Gleichungen
- Der Einstieg, Beispiel Griffiths

Inhaltsverzeichnis

0	Einleitung	2
1	Die Schrödinger-Gleichung	5
1.1	Die Ausgangslage	5
1.2	Schrödinger's geniale Spekulation	9
1.3	Motivation über Dispersionsrelation	21
2	Formalisierung	26
2.1	Physikalische Formalisierung	26
2.2	Mathematische Formalisierung	32
2.3	Zurück zur Physik	49
3	Unschärferelationen	59
4	Erste Anwendungen	65
4.1	Freies Teilchen	66
4.2	Potentialbarriere und Tunneleffekt	71
4.3	Potentialtopf	78
4.4	Harmonischer Oszillator	81
4.5	Periodische Potentiale	98
5	Drehimpuls	104
5.1	Der quantenmechanische Drehimpuls	104
5.2	Eigenfunktionen von \hat{L}_z	109
5.3	Eigenfunktionen von \hat{L}^2	111
5.4	Eigenwerte von Drehimpulsoperatoren	115
6	Wasserstoffatom	119
6.1	Hamiltonian	119
6.2	Lösung der Schrödinger-Gleichung	121
7	Bewegung im magnetischen Feld	128
7.1	Magnetismus, Zeeman-Effekt & Landau-Niveaus	128
7.2	U(1) Eichsymmetrie & minimale Kopplung	132
7.3	Aharonov-Bohm Effekt	134
8	Spin	137

9	Näherungsmethoden für stationäre Zustände	141
9.1	Störungstheorie	142
9.2	Störungstheorie für entartete Zustände	145
9.3	Ritz'sches Variationsprinzip	149
9.4	WKB-Näherung	151
10	Vielteilchen Systeme	154
10.1	Symmetrie der Vielteilchenwellenfunktionen	154
10.2	Hartree-Fock Verfahren	157
10.3	Dichtematrix	159
10.4	Verschränkte Zustände	163
11	Einstein-Podolsky-Rosen – Paradoxon	174
11.1	Theorien verborgener Parameter	174
11.2	Bell'sche Ungleichungen	176

1 Die Schrödinger-Gleichung

Zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{x}, t) \right) \psi(\vec{x}, t), \quad \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} \quad (1)$$

Eigenschaften:

- Partielle Differentialgleichung
- Linear
- Keine konstanten Koeffizienten
- Wesentlich komplex, Kap. 1.3
Keine andere fundamentale Gleichung der Physik ist komplex
- Wellenfunktion ψ , Bedeutung von ψ vor der Hand unklar

Zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung, siehe Original-paper auf ILIAS

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{x}) \right) \psi(\vec{x}) = E \psi(\vec{x}) \quad (2)$$

- Eigenwert-Gleichung
- Energie E lässt sich berechnen, ohne dass man wissen muss, was $\psi(\vec{x})$ bedeutet
- Beachte: Wo vorher Zeit war ist jetzt Energie, erinnere Noether-Theorem

1.1 Die Ausgangslage

- Stabilität von Atomen

Klassisches Bild

- Elektron rotiert um Atomkern
- Beschleunigte Bewegung
- Elektrodynamik: Energie wird abgestrahlt
- Klassische Mechanik: Elektron spiralisiert in Kern
- (Deutlicher) Widerspruch zur Erfahrung

- Ultraviolett-Katastrophe, Planck 14.12.1900
- Klassisches Licht: Elektromagnetische Welle
 - Charakteristische Welleneigenschaft: Interferenz
 - Doppelspalt-Experiment, Young, 1801

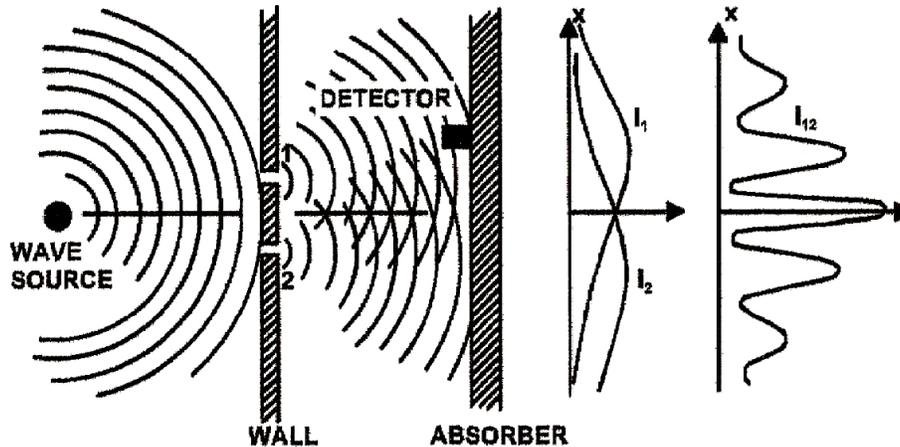


Abbildung 1.1

Aber auch Teilcheneigenschaften: Photonen

- Einstein, 1905: Photo-Effekt (Nobelpreis):
Elektromagnetische Wellen verhalten sich wie Teilchen mit Energie $E = \hbar\omega$
Energie E des herausgeschlagenen Elektrons:

$$E = \hbar\omega - A, \quad A : \text{Ablösearbeit} \quad (3)$$

Energie E nicht abhängig von Intensität des Lichtes

- Compton-Effekt, 1922
Stoß von Photonen auf freie Elektronen führt zur Abnahme der Energie, $E = \hbar\omega$, d.h. Zunahme der Wellenlänge

$$\Delta\lambda = \frac{h}{mc}(1 - \cos\phi), \quad \text{Compton-Wellenlänge } \lambda_C = \frac{h}{mc} \quad (4)$$

Für $\lambda \gg \lambda_C$ gilt klassisches Streuverhalten

- Klassische Teilchen: Punktförmig mit (x, p)
 - Charakteristische Teilcheneigenschaft: Energieübertrag bei Stoß
 - Doppelspaltexperiment Billiard-Kugeln

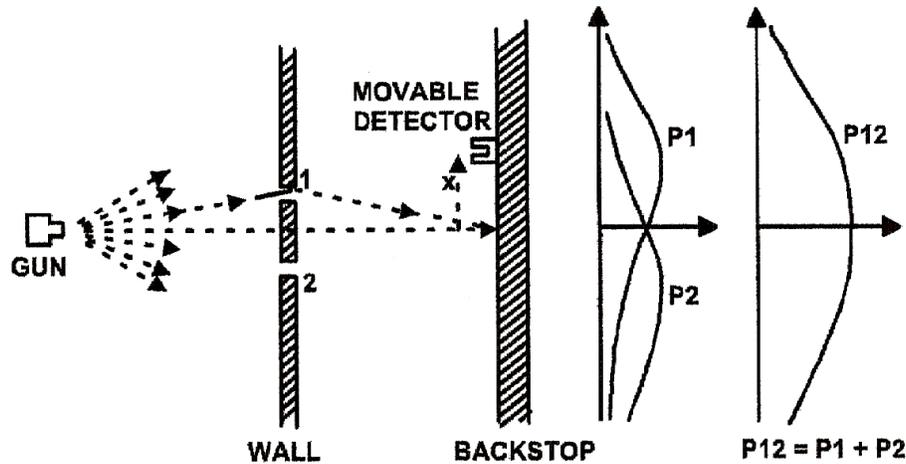


Abbildung 1.2

Aber auch Welleneigenschaften

- de Broglie, 1924: Impuls $\vec{p} = \hbar\vec{k}$, Wellenzahl $|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$, $\lambda = \frac{h}{p}$
- Doppelspaltexperiment Elektronen: Jönsson, 1961, Atome: Mlynek, 1990, Moleküle: Nairz, 2003

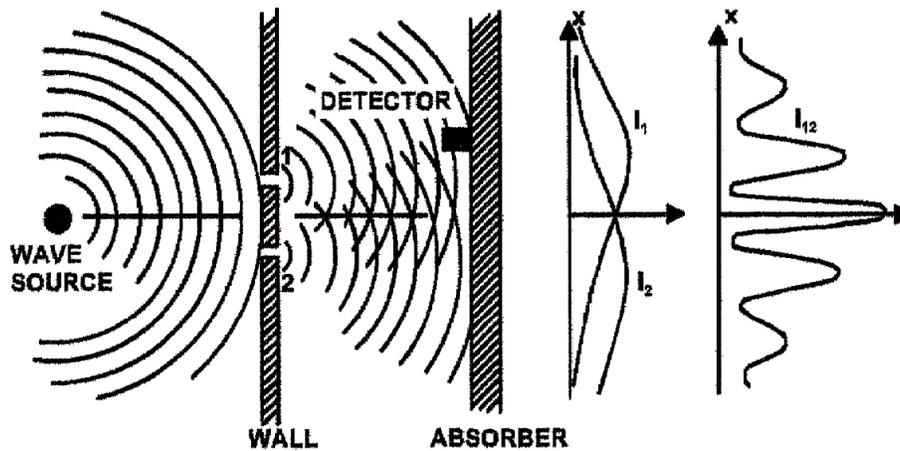


Abbildung 1.3

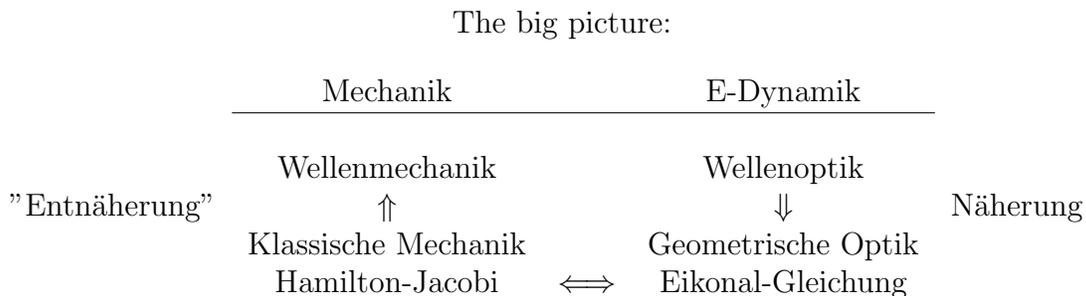
- Kein Interferenzmuster, wenn man annimmt, dass Elektron entweder durch Spalt 1 oder Spalt 2 geht
- Auf dem Schirm werden immer nur "ganze" Elektronen beobachtet, Elektron "teilt" sich nicht
- Interferenzmuster verschwindet, wenn durch zusätzliche Messung bestimmt wird, durch welchen Spalt das Elektron geflogen ist
- Quanteneffekte für mikroskopische Systeme
 - * kleine Massen
 - * niedrige Temperaturen
 - * kleine Längen
- Quanteneffekte für makroskopische Systeme, siehe Vorlesung Statistische Physik
 - * Supraleitung
 - * Magnetismus
 - * Spezifische Wärme
 - * Schwarz-Körper Strahlung, Planck 14.12.1900, Geburtsstunde QM
 - * Verschränkte Zustände, km-Skala, Kap. 10.4
- Welle-Teilchen Dualismus
 - Sowohl Licht als auch Teilchen zeigen sowohl Wellen- als auch Teilcheneigenschaften

- Ungewohnt, weil um 1800
 - * "klassisches Licht" im wesentlichen Welleneigenschaften zeigte
 - * "klassische Teilchen" im wesentlichen Teilcheneigenschaften zeigten
- Welleneigenschaften, wenn es um Ausbreitung geht
- Teilcheneigenschaften, wenn es um Wechselwirkung geht
- Dualismus, kein Widerspruch, da nicht in der selben Hinsicht
- Elektrisches Feld \vec{E}
 - Quadrierte Größe $|\vec{E}|^2 \propto$ Anzahl der Photonen
 - Nicht-quadrierte Größe \vec{E} ist physikalisch: Kraft
 - Erwähne dies für die Interpretation der Wellenfunktion ψ
- Quantenmechanik
 - In Einklang mit allen experimentellen Fakten, teilweise mit Genauigkeit 10^{-10} , gyromagnetischer Faktor
 - Grundlage für ca. 40% unseres Bruttozonalproduktes
 - In gewisser Weise bis heute nicht verstanden, Kap. 11
 - Alle Gründerväter der Quantenmechanik haben sie am Ende ihres Lebens gehasst

1 25

1.2 Schrödinger's geniale Spekulation

E. Schrödinger. Quantisierung als Eigenwertproblem. Annalen der Physik 79, 1926, 490-527



Schritt für Schritt ...

- Erinnere Hamilton'sche Bewegungsgleichungen:

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (5)$$

- Kanonische Transformation:

Koordinatentransformation $(q, p) \rightarrow (Q(q, p, t), P(q, p, t))$ und $H(q, p, t) \rightarrow K(Q, P, t)$, so dass die Hamilton'schen Gleichungen invariant bleiben:

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial K}{\partial P_i}, \quad \dot{P}_i = -\frac{\partial K}{\partial Q_i} \quad (6)$$

- Erinnere Hamilton'sches Prinzip, Variationsproblem, mit Lagrange-Funktion $L(q, \dot{q}, t)$. Bahnkurve so, dass :

$$\delta \int L(q, \dot{q}, t) dt = 0 \quad (7)$$

Inverse Legendre-Transformation

$$\delta \int \left(\sum_i p_i \dot{q}_i - H(q, p, t) \right) dt = 0, \text{ resp. } \delta \int \left(\sum_i P_i \dot{Q}_i - K(Q, P, t) \right) dt = 0 \quad (8)$$

Lagrange-Funktion hat eine Eichfreiheit¹: Addition von $\frac{d}{dt}\Phi$ zum Integranden ändert Variationsproblem nicht, da

$$\delta \int \frac{d}{dt}\Phi dt = 0 \quad (9)$$

Wähle hier $\Phi(q, Q, t)$

- Hinreichende Bedingung für Lösung des Variationsproblems

$$\sum_i p_i \dot{q}_i - H(q, p, t) = \sum_i P_i \dot{Q}_i - K(Q, P, t) + \frac{d}{dt}\Phi(q, Q, t) \quad (10)$$

¹Erinnere Potentiale in der E-Dynamik

- Zeitableitung

$$\frac{d}{dt}\Phi(q, Q, t) = \sum_i \frac{\partial\Phi}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial\Phi}{\partial Q_i} \dot{Q}_i + \frac{\partial\Phi}{\partial t} \quad (11)$$

eingesetzt, Argumente unterdrückt:

$$\sum_i \left(p_i - \frac{\partial\Phi}{\partial q_i} \right) \dot{q}_i = \sum_i \left(P_i + \frac{\partial\Phi}{\partial Q_i} \right) \dot{Q}_i + H - K + \frac{\partial\Phi}{\partial t} \quad (12)$$

Gleichung erfüllt, wenn

$$p_i = \frac{\partial\Phi(q, Q, t)}{\partial q_i} \quad (13)$$

$$P_i = -\frac{\partial\Phi(q, Q, t)}{\partial Q_i}$$

$$K = H + \frac{\partial\Phi(q, Q, t)}{\partial t} \quad (14)$$

Gleichungen aufgelöst ergibt:

$$Q_i = Q_i(q, p, t)$$

$$P_i = P_i(q, p, t)$$

$$H(q, p, t) \rightarrow K(Q, P, t)$$

Φ heißt Erzeugende der kanonischen Transformation

- Übung: Harmonischer Oszillator
- Ein Ziel: Finde Transformation, so dass möglichst viele Koordinaten zyklisch sind
- Hängt von Wahl der Koordinaten ab. Erinnere Pendel, keine zyklischen Koordinaten bei $q = (x, y, z)$, aber zyklische Koordinate bei $q = (r, \varphi, \theta)$
- Der einfachste Hamiltonian ist der, der identisch verschwindet:
"Münchhausen-Transformation"

Die Erzeugende der kanonische Transformation, die dies leistet, sei $W(q, Q, t)$

- Mit Gl. (14) gilt

$$\frac{\partial W(q, Q, t)}{\partial t} + H(q, p, t) = 0 \quad (15)$$

Mit $Q_i = \text{const}$, folgt für $W(q, Q, t) = W(q, t) =: W$ und Gl. (13)

Hamilton-Jacobische partielle Differentialgleichung für W :

$$\frac{\partial W}{\partial t} + H\left(q_1, \dots, q_f, \frac{\partial W}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial W}{\partial q_f}, t\right) = 0 \quad (16)$$

- Betrachte zeitunabhängigen Hamiltonian: $H = E$

Folge: W linear in t :

$$W(q, t) = S(q) - Et, \quad W \text{ wie Wirkung} \quad (17)$$

Verkürzte Hamilton-Jacobi-Gleichung:

$$H\left(q_1, \dots, q_f, \frac{\partial S}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial S}{\partial q_f}\right) = E \quad (18)$$

- Geometrische Interpretation in kartesischen Koordinaten (x, y, z)

$$W(x, y, z, t) = S(x, y, z) - Et \quad (19)$$

- $S = \text{const}$. bedeutet feste Fläche im Raum, verschiedene Konstanten geben verschiedene Flächen

$W = \text{const}$. bedeutet bewegte Fläche im Raum

Fläche $W = \text{const}$. wandert über Flächen $S = -E, S = 0, S = E, 2E, \dots$

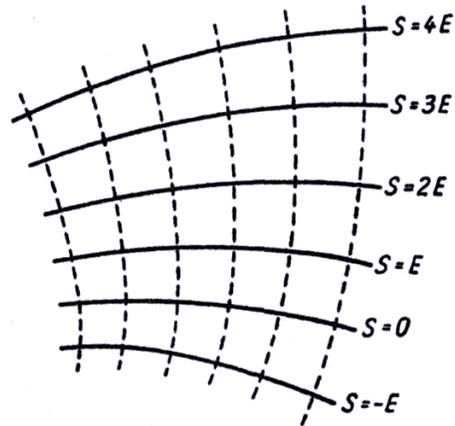


Abbildung 1.4: mit $S = -E, 0, E, 2E, \dots$

Analogie zu Welle Y mit

$$Y(x, t) = Y(z), \quad \text{mit } z = x - vt \quad (20)$$

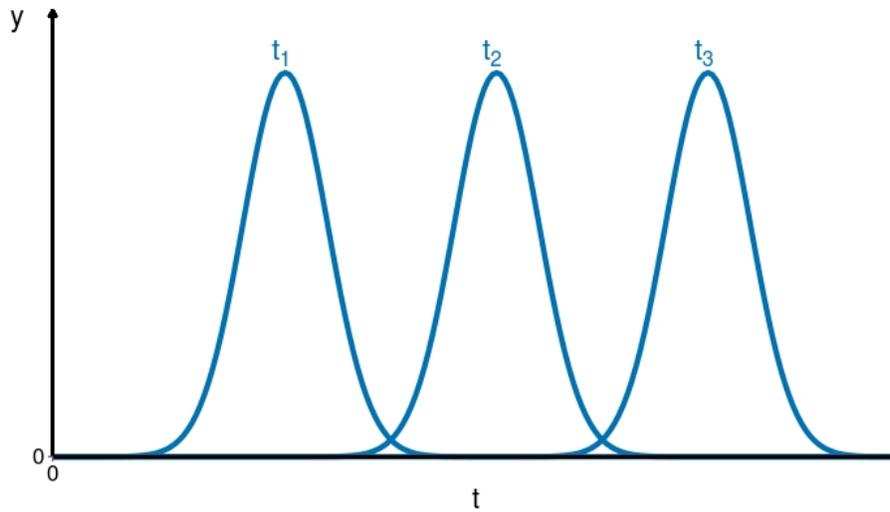


Abbildung 1.5

- Wellenphänomen: Die Flächen $W = \text{const.} = C$ beschreiben Ausbreitung von Wirkungswellen

- Impuls und Geschwindigkeit des Massenpunktes mit Gln. (13, 19)

$$p_i = \frac{\partial W}{\partial x_i} = \frac{\partial S}{\partial x_i}, \quad v_i = \frac{1}{m} \frac{\partial S}{\partial x_i} \quad (21)$$

In Vektorform

$$\vec{p} = \vec{\nabla} W = \vec{\nabla} S \quad (22)$$

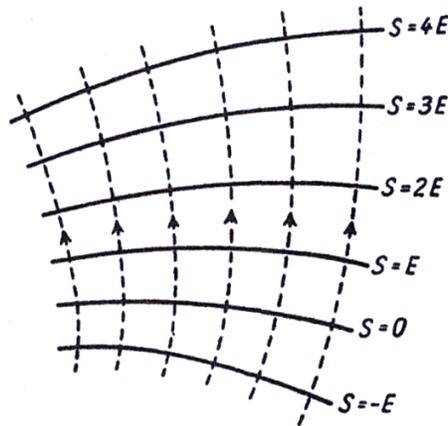


Abbildung 1.6

- Bahnkurven sind die orthogonale Trajektorien der Wellenflächen $W = \text{const}$, bzw. $S = \text{const}$.
- Analog zu Lichtstrahlen als orthogonale Trajektorien der optischen Wellenflächen

Geschwindigkeit u der Wirkungswellen:

- Zeitpunkt t_0 : Fläche $W = C$ fällt mit Fläche $S = C + Et_0$ zusammen
Zeitpunkt $t_0 + dt$: $S + dS = C + E(t_0 + dt)$
- Zunahme von S :
 - Einerseits: $dS = E dt$

– Andererseits: $dS = |\nabla S|ds$, ds : senkrechter Abstand der benachbarten S -Flächen

– Zusammen

$$u = \frac{ds}{dt} = \frac{E}{|\nabla S|} \quad (23)$$

- Mit verkürzter Hamilton-Jacobi-Gleichung

$$\frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial z} \right)^2 \right] + V = E \quad (24)$$

oder

$$\left(\vec{\nabla} S \right)^2 = 2m(E - V(x)) \quad (25)$$

MERKEN !

Fortpflanzungsgeschwindigkeit u der Wirkungswellen

$$u = \frac{E}{\sqrt{2m(E - V)}} \quad (26)$$

auch merken !

$$u = \frac{E}{mv} \quad (27)$$

Geschwindigkeit der Wirkungswellen u ist umgekehrt proportional zur Teilchengeschwindigkeit v

Erinnere Elektrodynamik

- Elektromagnetische Wellen, $\Phi = \vec{E}$ oder \vec{B} ²

1/2
1. Wo-
che

$$\Delta \Phi = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Phi = \frac{n(x)^2}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Phi \quad (28)$$

²Slight abuse of notation: Φ hat natürlich nichts mit Erzeugender der kanonischen Trafo zu tun

Ist Brechungsindex n konstant, löst

$$\Phi = \Phi_0 \exp(i(n\vec{k}\vec{x} - \omega t)) \quad (29)$$

die Gleichung

- Mit Phase Θ

$$\Theta = n\vec{k}\vec{x} - \omega t \quad (30)$$

sind Flächen gleicher Phase die optischen Wellenflächen.

In exakter Analogie zu Hamilton-Jacobi: Ausbreitungsrichtung der Welle senkrecht dazu

- Der Fall $n \neq \text{const.}$, i.e. inhomogene Medien, Beispiel Fata Morgana
 - Gl. (28) schwer zu lösen
 - Ausweg: Geometrische Optik oder Strahlenoptik
 - Lichtstrahl: Orthogonale Trajektorie auf Flächen konstanter Phase
 - Funktioniert, wenn Wellenlänge klein gegen Skala der räumlichen Änderungen von $n(x)$ und damit allem ist

Ansatz, Verallgemeinerung von Gl. (29)

$$\Phi = A(x) \exp(i(kL(\vec{x}) - \omega t)), \quad \text{Phase } \Theta : kL(\vec{x}) - \omega t \quad (31)$$

mit Eikonal $L(\vec{x})$

- Berechne Ableitungen, das ist jetzt technisch

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Phi}{\partial x} &= \left(\frac{\partial A}{\partial x} + ikA \frac{\partial L}{\partial x} \right) e^{i\Theta} \\ \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} &= \left(\frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + 2ik \frac{\partial A}{\partial x} \frac{\partial L}{\partial x} + ikA \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} - k^2 A \left(\frac{\partial L}{\partial x} \right)^2 \right) e^{i\Theta} \\ \frac{n^2}{c^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} &= -\frac{\omega^2 n^2}{c^2} A e^{i\Theta} = -k^2 n^2 A e^{i\Theta}, \quad k^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \end{aligned}$$

Mit entsprechenden Termen für $\frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2}$ und $\frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2}$ in Wellengleichung, Gl. (28), eingesetzt:

$$\Delta A + ik(2\vec{\nabla} A \vec{\nabla} L + A \Delta L) - k^2 A \left((\vec{\nabla} L)^2 - n^2 \right) = 0 \quad (32)$$

Teile durch

$$k^2 A = \frac{4\pi^2}{n^2 \lambda^2} A \quad (33)$$

Trenne Real- und Imaginärteil:

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{n^2 \lambda^2}{4\pi^2} \frac{\Delta A}{A} - ((\nabla L)^2 - n^2) \\ 0 &= 2 \frac{\nabla A \nabla L}{A} + \Delta L \end{aligned} \quad (34)$$

- Geometrische Optik: Wellenlänge klein gegen räumliche Änderungen, $\lambda \rightarrow 0$
 \implies Vernachlässige 1. Term in Gl. (34)
- Dies ist die Näherung von der Wellenoptik zur geometrischen Optik
- Ergibt

<u>Differentialgleichung des Eikonals</u> $(\vec{\nabla} L(x))^2 = n(x)^2 \quad (35)$
--

- Für geometrische Optik gilt Fermat'sches Prinzip, 1679, Prinzip des kürzesten Lichtweges von Punkt P_0 nach Punkt P_1 , Weg parametrisiert mit s

$$\int_{P_0}^{P_1} n(s) ds = \text{extremal} \quad (36)$$

Man kann zeigen:

- (i) Extremalwert ist das Eikonal, in Abhängigkeit von P_1, P_0 festgehalten

$$L(P_0, P_1) = \int_{P_0}^{P_1} n(s) ds \quad (37)$$

und L genügt Gl. (35).

- (ii) Gl. (35) und Gl. (36) sind äquivalent
- (iii) Eikonal-Gleichung und Fermat'sches Prinzip beinhalten die gesamte geometrische Optik

Wir kamen zu Gl. (35) ausgehend von der Wellenoptik

Ergo: Die geometrische Optik ist der Grenzfall der Wellenoptik für $\lambda \rightarrow 0$

- Beachte: Eikonalgleichung, Gl. (35), hat die selbe Form wie Hamilton-Jacobi-Gleichung, Gl. (25)

$$\begin{aligned}\left(\vec{\nabla}L(x)\right)^2 &= n(x)^2 \\ \left(\vec{\nabla}S(x)\right)^2 &= 2m(E - V(x))\end{aligned}$$

Flächen konstanter Wirkung $W = const.$ fallen mit Eikonalfächen $L = const.$ zusammen, wenn

$$2m(E - V) \propto n^2, \quad \text{oder } n \propto \sqrt{E - V} \quad (38)$$

- Kein Wunder: Analog zum Fermat'schen Prinzip in der Optik gilt in der Mechanik das Jacobi'sche Prinzip

$$\int_{P_1}^{P_2} \sqrt{E - V} ds = \text{extremal} \quad (39)$$

Bahnkurven und Lichtstrahlen sind orthogonale Trajektorien der entsprechenden Flächen

- Zusammenfassung:
 - Die klassische Mechanik entspricht der geometrischen Optik, d.h. der für verschwindende Wellenlängen gültigen Näherung der Wellenoptik.
 - In geometrischer Optik ein Hauch von Wellen³: Wellenflächen, die die Strahlen ergeben

³Wie das Grinsen der Katze in Alice im Wunderland

- In klassischer Mechanik ein Hauch von Wellen⁴: Wirkungswellen, die die Bahnkurven ergeben
- Geometrische Optik und klassische Mechanik können keine eigentlichen Wellenphänomene beschreiben: Beugung, Interferenz

	$\lambda, \hbar \rightarrow 0$	allgemein
E-Dynamik	geometrische Optik	Wellenoptik
Mechanik	klassische Mechanik	??

- Schrödingers geniale Spekulation: Treibe Analogie zwischen Eikonal- und Hamilton-Jacobi-Gleichung auf die Spitze

$$\begin{aligned}
 W &= S(x) - Et, & |\nabla W| &= |\nabla S| = \sqrt{2m(E - V)} = mv \\
 \Theta &= kL(x) - \omega t, & |\nabla \Theta| &= \frac{2\pi}{\lambda}
 \end{aligned}$$

- $W \propto \Theta$, Dimension des Proportionalitätsfaktors: Eine Wirkung, nur eine natürliche Wahl :-)

$$W = \hbar \Theta \tag{40}$$

- Damit:

$$E = \hbar\omega, \quad \lambda = \frac{h}{mv} = \frac{h}{\sqrt{2m(E - V)}} \tag{41}$$

2 25

Frage:
 Was für eine Mechanik wäre es, die nicht dem Grenzfall $\lambda \rightarrow 0$ der geometrischen Optik, sondern der Wellenoptik selbst entspräche ? Stichwort: "Entnäherung"

- In dieser Mechanik müßte eine Größe $\Psi(x, t)$, die die dem Massenpunkt zugeordnete Welle beschreibt, die zu Wellengleichung Gl. (28) analoge Wellengleichung mit Geschwindigkeit der Welle nach Gl. (26) erfüllen:

$$\Delta \Psi = \frac{1}{u^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2}, \quad u^2 = \frac{E^2}{2m(E - V)} \tag{42}$$

⁴Dito

Ansatz⁵:

$$\Psi(x, t) = B(x) \exp\left(i \frac{S'(x) - Et}{\hbar}\right) \quad (43)$$

Unbekanntes $S'(x)$ statt $S(x)$, weil es grade nicht die Näherung $\lambda \rightarrow 0$ sein soll.

- Eingesetzt in Wellengleichung Gl. (42), ergibt sich für Grenzfall $\lambda \rightarrow 0$, d.h. $\hbar \rightarrow 0$, die Hamilton-Jacobi Gleichung mit $S' = S$

- Kein Grenzfall:

Fasse unbekannte Funktionen $S'(x)$ und $B(x)$ in Amplitudenfunktion $\psi(x)$ zusammen.

$$\Psi(x, t) = \psi(x) \exp\left(-i \frac{Et}{\hbar}\right) \quad (44)$$

Eingesetzt in Wellengleichung Gl. (42) folgt für $\psi(x)$ der Welle die Differentialgleichung:

$$\Delta\psi(x) \exp\left(-i \frac{Et}{\hbar}\right) = \frac{2m(E - V)}{E^2} \psi(x) \left(-\frac{E^2}{\hbar^2}\right) \exp\left(-i \frac{Et}{\hbar}\right) \quad (45)$$

$$\Delta\psi = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V) \psi \quad (46)$$

oder umsortiert - et voilà - die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x)\right) \psi(x) = E \psi(x) \quad (47)$$

- Drei wichtige Eigenschaften:
 - Eigenwertproblem
 - Bestimmungsgleichung für $\psi(x)$
 - Energien E lassen sich berechnen, ohne dass man wissen muss, was $\psi(x)$ bedeutet

Diskussion: Schrödinger und Platon vs. Heisenberg und Aristoteles

1. Woche

⁵Diesen Ansatz werden wir in Kap. 9.4 Störungstheorie wieder sehen

1.3 Motivation über Dispersionsrelation

Zeitabhängige Schrödinger-Gleichung soll folgende Eigenschaften haben

- linear, damit Superpositionsprinzip gilt
- Wellenlösungen, damit Interferenz möglich ist
- Dispersionsrelation für Materie erfüllen⁶

Dispersionsrelationen

- Erinnerung

$$E = \hbar\omega, \quad \vec{p} = \hbar\vec{k} \quad (48)$$

In $\omega = \frac{2\pi}{T}$ steckt die Zeit, in Wellenvektor $|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$ steckt der Raum

- Dispersionsrelationen beschreiben Beziehung zwischen Impuls und Energie oder entsprechend Wellenlänge und Frequenz
- Allgemein: Beschreiben Zusammenhang zwischen räumlichem und zeitlichen Verhalten
- Beispiele
 - Elektromagnetische Wellen, Photonen

$$E = cp, \quad \text{lineare Abhängigkeit} \quad (49)$$

- Nicht-relativistische Materie

$$E = \frac{1}{2m} p^2, \quad \text{quadratische Abhängigkeit} \quad (50)$$

- Relativistische Materie, Ruhemasse m_0

$$E^2 = (m_0c^2)^2 + c^2p^2, \quad \text{oder } E = \sqrt{(m_0c^2)^2 + c^2p^2} \quad (51)$$

Übung

⁶In vielen Büchern steht auch noch, dass die Gleichung erster Ordnung Zeitableitung haben soll, damit durch den Anfangszustand die Zeitentwicklung festgelegt ist. Das ist Quatsch, wie man an der elektromagnetischen Wellengleichung sieht.

- Phononen im Festkörper
Übung

Erinnere Elektrodynamik

- Aus Maxwell-Gleichungen folgte Wellengleichung für's elektromagnetische Feld im Vakuum, hier mal B , weil E grade benutzt :-)

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} B = \frac{\partial^2}{\partial x^2} B \quad (52)$$

Lösung

$$B(x, t) = B_0 e^{-i(\omega t - kx)} \quad (53)$$

- Intuition:

- In ω steckt Energie E , in k Impuls p
- Ableiten nach der Zeit holt ω und damit E aus dem Exponenten
Ableiten nach dem Ort holt k und damit p aus dem Exponenten
- Dispersionsrelation: $E = cp$

\implies

Es muss gleich häufig nach t und nach x abgeleitet werden

- Einfachste Möglichkeit:

$$\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} B = -\frac{\partial}{\partial x} B \quad (54)$$

Beweis durch Einsetzen

$$\frac{i\omega}{c} B_0 e^{-i(\omega t - kx)} = ik B_0 e^{-i(\omega t - kx)}, \quad \omega = ck \quad E = cp \quad (55)$$

- Dass in der elektromagnetischen Wellengleichung zweimal und nicht nur einmal abgeleitet wird, sagen die Maxwell'schen Gleichungen

Betrachte nun nicht-relativistische Materie, freies Teilchen:

$$E = \frac{1}{2m} p^2 \quad (56)$$

- Ansatz, slight abuse of notation, statt $\Psi(\vec{x}, t)$ nun $\psi(x, t)$ und $\psi(x)$

$$\psi(x, t) = A \exp(-i(\omega t - kx)) = A \exp\left(\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right) + \left(i\frac{p}{\hbar}x\right)\right) \quad (57)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}\psi &= \frac{-iE}{\hbar}A \exp\left(\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right) + \left(i\frac{p}{\hbar}x\right)\right) \implies \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi = E\psi \\ \frac{\partial}{\partial x}\psi &= \frac{ip}{\hbar}A \exp\left(\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right) + \left(i\frac{p}{\hbar}x\right)\right) \implies \left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi = p\psi \end{aligned}$$

Der Energie E wird der Energie-Operator \hat{E}

$$E \rightsquigarrow \hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \quad (58)$$

dem Impuls p der Impuls-Operator \hat{p}

$$p \rightsquigarrow \hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} \quad (59)$$

zugeordnet:

Korrespondenz-Prinzip: Den klassischen physikalischen Größen werden in der Quantenmechanik Operatoren zugeordnet

- Da die Dispersionsrelation quadratisch ist, muss Energie-Operator einmal, der Impuls-Operator zweimal angewendet werden, ergänze noch $\frac{1}{2m}$

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\psi \quad (60)$$

die freie zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

- Merke

i unumgänglich auf Grund der Dispersionsrelation für nicht-relativistische Materie

Aber: Dies ist nur die einfachste Möglichkeit. Erwähne elektromagnetische Wellengleichung: Dort wurde die einfachste Möglichkeit nicht genutzt.

Übung: Wie sieht das im relativistischen Falle aus ?

- Hamiltonfunktion allgemein

$$H(x, p, t) = \frac{1}{2m} p^2 + V(x, t) \quad (61)$$

Potential V taucht in Argument der Wellenfunktion nicht auf, ergibt einfach additiven Beitrag

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \psi(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) \right) \psi(x, t) \quad (62)$$

die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

- Mit Hamilton-Operator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) \quad (63)$$

- Hängt Potential $V(x)$ nicht von der Zeit ab, wähle Separationsansatz

$$\psi(x, t) = \psi_u(x) \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right) \quad (64)$$

Eingesetzt:

$$E\psi_u(x) \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right) = \hat{H}\psi_u(x) \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right) \quad (65)$$

Teile durch $\exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)$, ergibt zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H}\psi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) \right) \psi(x) = E\psi(x) \quad (66)$$

eine gewöhnliche Differentialgleichung

Lösungen sind die stationären Zustände des Systems

Beachte:

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x) \quad (67)$$

ist die natürliche Formulierung, nicht

$$E\psi(x) = \hat{H}\psi(x) \quad (68)$$

Interpretation von ψ

- $|\psi(x, t)|^2 dx = \psi^*(x, t)\psi(x, t)dx$ ist die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen zum Zeitpunkt t am Orte $(x, x + dx)$ zu detektieren

- Es gilt

$$\int dx |\psi(x, t)|^2 = 1 \quad (69)$$

- Beachte: Die Wellenfunktion fasst Welleneigenschaften (bei Ausbreitung) und Teilcheneigenschaften (bei Detektion) von Quantenobjekten zusammen.

Vergleich klassischer Physik und Quantenmechanik für Punktteilchen

	klassisch	quantenmechanisch
Beschreibung des Zustands durch (Kinematik)	(\vec{x}, \vec{p}) , Element eines 6-dimensionalen Raumes	Wellenfunktion $\psi(\vec{x}, t)$, Element eines unendlich-dimensionalen Vektorraums über \mathbb{C}
Zeitentwicklung (Dynamik)	Bewegungsgleichung, gewöhnliche, i.a. nicht-lineare Differentialgleichung	Schrödinger-Gleichung, lineare partielle Differentialgleichung
Ergebnis einer Messung bei bekanntem Zustand	völlig bestimmt	nur Wahrscheinlichkeitsaussagen

Lessons learned:

- Schrödinger: Verhältnis von Wellenoptik zu geometrischer Optik auf die Mechanik übertragen. Geometrische Optik entspricht Klassischer Mechanik.
- Geniale physikalische Spekulation, keine streng mathematische Herleitung
- Korrespondenz-Prinzip: Klassischen Größen werden (Differential-)Operatoren zugeordnet
- i in zeitabhängiger Schrödinger-Gleichung "folgt" aus (nicht-relativistischer) Dispersionsrelation für Materie

2 Formalisierung

Wir werden uns der Sache spiralisierend nähern

2.1 Physikalische Formalisierung

- Keine physikalische Theorie ist beweisbar, am Ende entscheidet das Experiment
- Physikalische Theorien sind motivierbar⁷
- Formuliere sie durch Axiome, um sie auf den Punkt zu bringen

Die Axiome der klassischen Mechanik

1. Der Zustand ist durch einen Punkt (x, p) im Phasenraum P gegeben
2. Eine Observable ist eine reellwertige Funktion $f : P \rightarrow \mathbb{R}$ auf dem Phasenraum
3. Die Zeitentwicklung im Phasenraum ist durch die Hamilton'schen Gleichungen gegeben

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} \quad (70)$$

Daraus folgt Zeitentwicklung der Observable

$$\dot{f}(x, p) = \{f(x, p), H(x, p)\} \quad (71)$$

mit Poisson-Klammer

$$\{a, b\} = \sum_i \left(\frac{\partial a}{\partial q_i} \frac{\partial b}{\partial p_i} - \frac{\partial a}{\partial p_i} \frac{\partial b}{\partial q_i} \right) \quad (72)$$

Die Axiome der Quantenmechanik⁸

1. Der Zustand ist durch einen Vektor $|\psi\rangle$ in einem (unendlich-dimensionalen) Hilbertraum \mathcal{H} gegeben.
2. Eine Observable A entspricht einem hermiteschen/selbstadjungierten linearen Operator $\hat{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ mit Eigenfunktionen $|n\rangle$ und Eigenwerten a_n .

⁷Für Genießer: Maxwell-Gleichungen durch Newton'sches Argumentieren motiviert, aber am Ende Lorentz- nicht Galilei-invariant.

⁸Unterstrichen ist, was wir im Folgenden lernen werden

3. Sei $|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$. Die Wahrscheinlichkeit P der Messung von a_n ist

$$P(\text{Messung von } \hat{A} \text{ an } |\psi\rangle \text{ ergibt } a_n) = |c_n|^2 = \langle \psi | \hat{P}_{|n\rangle} | \psi \rangle \quad (73)$$

mit $\hat{P}_{|n\rangle} = |n\rangle\langle n|$ dem Projektor auf $|n\rangle$

Daraus folgt: Der Erwartungswert von A ist

$$\langle A \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \quad (74)$$

4. Die Messung von a_n führt zu einem Kollaps der Wellenfunktion $|\psi\rangle \rightarrow |n\rangle$

5. Zeitentwicklung von $|\psi\rangle$ für geschlossene Systeme ist gegeben durch Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle \quad (75)$$

6. Heisenberg-Bild, Zustände zeitlich konstant, Operatoren zeitabhängig

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_H(t) = [\hat{A}_H(t), \hat{H}] \quad (76)$$

mit Kommutator

$$[\hat{C}, \hat{D}] = \hat{C}\hat{D} - \hat{D}\hat{C}$$

Zentral:

- Zufall des Messausgangs liegt nicht an Unkenntnis des Zustands
- Im Unterschied zur Statistischen Physik
- Der Kollaps der Wellenfunktion kann nicht durch eine Schrödinger-Gleichung beschrieben werden. Schon allein deshalb, weil er zufällig ist, nicht wie Schrödinger-Gleichung deterministisch

Betrachte zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x) \quad (77)$$

Zwei Aufbaustücke:

- Operator \hat{H}

- "Frißt" $\psi(x)$ und gibt $E\psi(x)$ aus
- Eigenwert-Problem, der Eigenwert E muss reell sein
- Frage: Welche Eigenschaften müssen Operatoren in der Quantenmechanik erfüllen ?
- Wie wird eine Messung mathematisch abgebildet ?
- Wellenfunktion $\psi(x)$
 - In welchen Raum leben die Wellenfunktionen $\psi(x)$?

2.1.1 Zustände

- Schrödinger-Gleichung ist linear \implies Wellenfunktionen bilden Vektorraum
- Für Wellenfunktion $\psi(x)$ muss gelten

$$\int dx |\psi(x)|^2 = 1 \quad (78)$$

D.h., sie liegen im Raum der quadratintegrablen Funktionen L_2

- $\int dx |\psi(x)|^2$ stellt ein Skalarprodukt dar
- Wir brauchen Vektorraum mit Skalarprodukt: Einen Hilbertraum

2.1.2 Operatoren

Zeit-abhängige Schrödinger-Gleichung

$$\begin{aligned} \hat{E}\psi(x, t) &= \hat{H}\psi(x, t) \\ \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\right) \psi(x, t) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t)\right) \psi(x, t) \end{aligned}$$

- Verallgemeinertes Eigenwert-Problem

$$\text{Operator}_1 \psi = \text{Operator}_2 \psi \quad (79)$$

- Beispiel: Harmonischer Oszillator:

$$\begin{aligned} \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi(x,t) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2\right)\psi(x,t) \\ \hat{E}\psi(x,t) &= \hat{H}_{kin}\psi(x,t) + \hat{H}_{pot}\psi(x,t) \end{aligned}$$

mit

- Energie-Operator \hat{E}

$$\psi(x,t) \text{ nach } \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi(x,t) \quad (80)$$

Zeitableitung

- Kinetischer Energie Operator \hat{H}_{kin}

$$\psi(x,t) \text{ nach } -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t) \quad (81)$$

Ortsableitung

- Potentieller⁹ Energie Operator \hat{H}_{pot}

$$\psi(x,t) \text{ nach const. } x^2\psi(x,t) \quad (82)$$

Multiplikation mit x^2

- Alle diese Operatoren O sind linear im Sinne von:

$$O(\alpha\psi_1 + \beta\psi_2) = \alpha O(\psi_1) + \beta O(\psi_2) \quad (83)$$

- Wir müssen über lineare Operatoren mit reellen Eigenwerten nachdenken, die in Hilberträumen wirken

1/2
2. Wo-
che

2.1.3 Observable

Ausflug: Klassische Statistik

- Definition Zufallsvariable X

⁹::-)

- Etwas, das eine Wahrscheinlichkeitsdichte $p_X(x)$ hat
- Wahrscheinlichkeit, eine Realisierung x in $(x, x + dx)$ zu beobachten, ist $p_X(x)dx$
- $p_X(x) \geq 0$, $\int p_X(x) dx = 1$

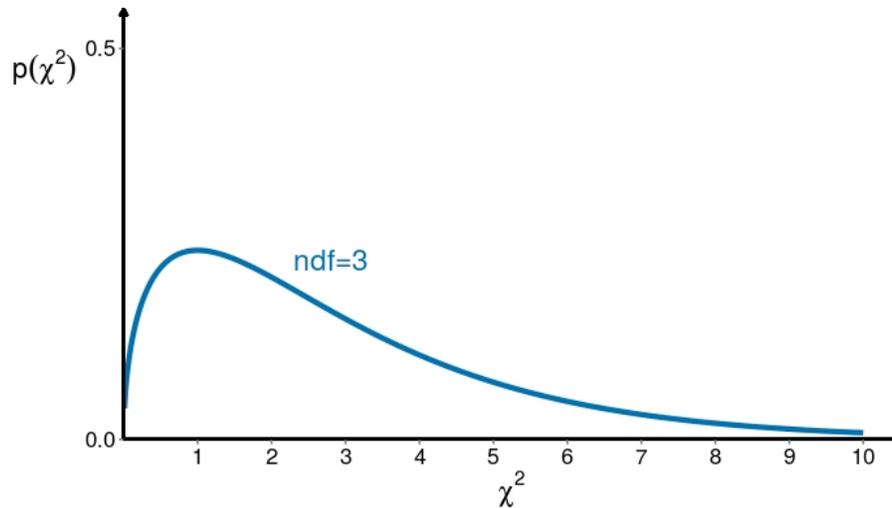


Abbildung 2.1

- Prominentes Beispiel:
Gaußverteilung oder Normalverteilung:

$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} \quad (84)$$

Bezeichnung: $N(\mu, \sigma^2)$

- Physikalisch entsteht Zufall entweder durch
 - Chaos, bei Würfel und in der Statistischen Physik realisiert
 - viele Einflüsse á la Brownian Motion
 - Quantenmechanik

- Erwartungswert $\langle f(x) \rangle$, bitte für unten merken

$$\langle f(x) \rangle = \int dx f(x) p(x) \quad (85)$$

Beachte: Erwartungswert ist eine Zahl

- Beispiele: Momente

$$\mu_k = \langle x^k \rangle = \int x^k p(x) dx \quad (86)$$

1. Moment: Mittelwert

$$\mu_1 = \bar{x} = \mu = \langle x \rangle = \int x p(x) dx \quad (87)$$

2. Moment

$$\mu_2 = \langle x^2 \rangle = \int x^2 p(x) dx \quad (88)$$

Varianz σ^2

$$\sigma^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \mu_2 - \mu_1^2 \quad (89)$$

4 25

- Wie Erwartungswert in der Quantenmechanik definieren ?

Wir haben:

- Wellenfunktion $\psi(x)$
- Wahrscheinlichkeit Teilchen in $(x, x+dx)$ zu finden: $p(x)dx = |\psi(x)|^2 dx = \psi(x)^* \psi(x) dx$
- Zu Observablen A gehören Operatoren \hat{A} , die Wellenfunktionen fressen wollen
- Naive Analogie zu Gl. (85):

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \hat{A} |\psi(x)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \hat{A} (\psi(x)^* \psi(x)) \quad (90)$$

geht nicht

- Einzige vernünftige Möglichkeit

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x) \hat{A} \psi(x) \quad (91)$$

Da $\langle A \rangle$ reell sein muss, müssen Eigenwerte von \hat{A} reell sein.

- Wir müssen über hermitesche/selbstadjungierte Operatoren nachdenken

2.1.4 Messungen

- $\psi(x)$ ist "irgendwie"
- Messung gibt zufälligen Wert für Observable
- "Sofortige" zweite Messung ergibt denselben Wert
- Messung muss $\psi(x)$ verändert haben
- Wir müssen über die mathematische Formulierung einer Messung nachdenken

Quantenmechanik hat die Mathematik sehr befruchtet, Funktionalanalysis.

- δ -Distribution
- 1930 von Physiker Dirac lax eingeführt
- 1945 von Mathematiker Schwartz rigoros behandelt, Übung

2.2 Mathematische Formalisierung

2.2.1 Hilbert-Raum

Wellenfunktionen leben im Hilbert-Raum \mathcal{H}

1. \mathcal{H} ist ein Vektorraum über \mathbb{C}
 - Kommutativ-Gesetz
 - Assoziativ-Gesetz
 - Existenz des Null-Vektors
 - Die üblichen Vektor-Gesetze

2. Es existiert ein Skalarprodukt: $\langle a|b\rangle$

- Bra- und Ket-Vektoren, von bra-ket: Klammer, © Dirac

- Ket-Vektoren: "normale" Vektoren

Im endlich-dimensionalen:

$$|b\rangle := \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} \quad (92)$$

- Bra-Vektoren leben im Dualraum: Operatoren, lineare Funktionale: Werfen Ket-Vektoren auf Zahlen

Im endlich-dimensionalen:

$$\langle a| := (a_1^*, \dots, a_n^*) \quad (93)$$

Bilden auch einen Vektorraum, aber einen ganz anderen

- Es gelten die üblichen Gesetze für das Skalarprodukt

- Die Norm ist durch

$$||a\rangle| := \sqrt{\langle a|a\rangle} \quad (94)$$

gegeben.

Es gilt die Cauchy-Schwarze Ungleichung

$$|\langle a|b\rangle| \leq ||a\rangle| \cdot ||b\rangle| \quad \text{oder} \quad |\langle a|b\rangle|^2 \leq \langle a|a\rangle \langle b|b\rangle \quad (95)$$

- Hier besonders wichtig: Der abzählbar unendlich-dimensionale L_2 -Raum der quadratintegriblen Funktionen

$$\langle \psi|\psi\rangle = \int dx \psi^*(x)\psi(x) \quad (96)$$

Bra-Vektoren:

$$\int dx \psi^*(x) \quad (97)$$

warten auf ein $\psi(x)$, fressen es und geben eine Zahl aus

$$\int dx \psi^*(x) : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{R} \quad (98)$$

3. Es gibt eine abzählbare Menge von paarweise orthogonalen Vektoren, deren lineare Hülle dicht in \mathcal{H} ist. Diese bilden eine Basis
4. Hilbert-Raum ist vollständig: Zu jeder Cauchy-Folge in \mathcal{H} existiert ein Grenzelement in \mathcal{H}

Bemerkungen

- Für endlich-dimensionale Hilbert-Räume folgen 3. und 4. aus 1. und 2. Für Quantenmechanik aber (abzählbar-)unendlich dimensionale Vektorräume von besonderem Interesse

Wichtige Definitionen:

- Orthogonalität von Vektoren

Zwei Vektoren $|a\rangle$ und $|b\rangle$ heißen orthogonal, wenn gilt:

$$\langle a|b\rangle = 0 \quad (99)$$

- Orthonormalsystem

Menge $\{|a_n\rangle\}$ von Vektoren heißt Orthonormalsystem, wenn gilt

$$\langle a_n|a_m\rangle = \delta_{nm} \quad (100)$$

- Vollständiges Orthonormalsystem

Orthonormalsystem $\{|a_n\rangle\}$ heißt vollständig, wenn jeder Vektor $|b\rangle$ darin ausgedrückt werden kann:

$$|b\rangle = \sum_n c_n |a_n\rangle \quad (101)$$

mit

$$c_m = \langle a_m|b\rangle = \langle a_m|\sum_n c_n |a_n\rangle \quad (102)$$

Vollständiges System von Basisvektoren kann stets in ein orthonormiertes System überführt werden

Bras und Kets revisited, Nomenklatur flexibel halten

- Mit $\{|\psi_i\rangle\}$ ein VOS (ab jetzt immer), eine Basis

$$|\phi\rangle = \sum_i c_i |\psi_i\rangle \quad (103)$$

folgt für normierte Zustände

$$1 = \langle\phi|\phi\rangle = \sum_{ij} \langle\psi_j|c_j^*c_i|\psi_i\rangle = \sum_i |c_i|^2 \quad (104)$$

also

$$\sum_i |c_i|^2 = 1 \quad (105)$$

Für später: Interpretation: $|c_i|^2$ ist Wahrscheinlichkeit, dass bei einer Messung von $|\phi\rangle$ der Basiszustand $|\psi_i\rangle$ gemessen wird

- Vollständigkeitsrelation und Projektoren

Betrachte

$$\begin{aligned} |\phi\rangle &= \sum_i \langle\psi_i|\phi\rangle |\psi_i\rangle \\ &= \sum_i |\psi_i\rangle \langle\psi_i|\phi\rangle \\ &= \left(\sum_i |\psi_i\rangle \langle\psi_i| \right) |\phi\rangle \\ &\rightarrow \sum_i |\psi_i\rangle \langle\psi_i| = \mathbb{1} \quad \text{Vollständigkeitsrelation} \end{aligned}$$

Einschieben der Eins oft sehr nützlich

Betrachte einen Summanden ergibt Projektionsoperator P_j

$$P_j = |\psi_j\rangle \langle\psi_j| \quad (106)$$

Warum ?

$$P_j |\phi\rangle = \sum_i |\psi_j\rangle \langle\psi_j|\langle\psi_i|\phi\rangle|\psi_i\rangle = \langle\psi_j|\phi\rangle |\psi_j\rangle = c_j |\psi_j\rangle \quad (107)$$

Das j -te Element wird herausprojiziert

Allgemein: $|a\rangle\langle b|$ ist aus der linearen Algebra als dyadisches Produkt bekannt.
Im endlich-dimensionalen:

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \cdot (b_1^*, \dots, b_n^*) = \begin{pmatrix} a_1 b_1^* & \dots & a_1 b_n^* \\ \vdots & & \vdots \\ a_n b_1^* & \dots & a_n b_n^* \end{pmatrix} \quad (108)$$

Es gilt

$$P_j^2 = |\psi_j\rangle\langle\psi_j|\psi_j\rangle\langle\psi_j| = P_j \quad (109)$$

Projektionsoperator ist idempotent

Eigenwerte des Projektionsoperators sind 0 und 1

Sei

$$P_j \psi = \lambda \psi \quad (110)$$

dann

$$P_j^2 \psi = \lambda^2 \psi = P_j \psi = \lambda \psi, \quad \lambda^2 = \lambda \quad \lambda = 0, 1 \quad (111)$$

Interpretation:

- $\lambda = 0$: ψ im Kern von P_j
- $\lambda = 1$: ψ im Bild von P_j

Summen von Projektionsoperatoren projizieren auf Teilräume

- Basistransformationen

Zustand $|\phi\rangle$ sei in Basis $\{|\psi_i\rangle\}$ gegeben

$$|\phi\rangle = \sum_i c_i |\psi_i\rangle, \quad \text{mit } c_i = \langle\psi_i|\phi\rangle \quad (112)$$

Um in eine andere Basis $\{|a_n\rangle\}$ zu gelangen, Eins einschieben

$$\begin{aligned} |\phi\rangle &= \sum_i \langle\psi_i|\phi\rangle \sum_n |a_n\rangle \langle a_n|\psi_i\rangle \\ &= \sum_n \underbrace{\sum_i \langle\psi_i|\phi\rangle \langle a_n|\psi_i\rangle}_{=k_n} |a_n\rangle = \sum_n k_n |a_n\rangle \end{aligned}$$

- Kontinuierliche Basen

Bisher: Diskrete Basiszustände $|\psi_i\rangle$ mit (un-) endlicher abzählbarer Dimension

Betrachte freie zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E \psi(x) \quad (113)$$

Lösung:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} =: |p\rangle, \quad p \in \mathbb{R} \quad (114)$$

Sicher nicht normierbar, uneigentlicher Zustandsvektor

Gesamtheit der ebenen Wellen definieren auch eine Basis:

$$|\phi\rangle = \int dp \, c(p) |p\rangle \quad (115)$$

Basis ist überabzählbar unendlich dimensional

Normierung

$$\langle p|p'\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp \, e^{i(p-p')x/\hbar} = \delta(p - p') \quad (116)$$

Von diskreter Basis zu kontinuierlicher Basis:

$$\begin{aligned} i &\rightarrow p \\ \sum_i &\rightarrow \int dp \\ \delta_{ij} &\rightarrow \delta(p - p') \end{aligned}$$

2. Woche

2.2.2 Lineare Operatoren im Hilbert-Raum

Definition

- Ein Operator \hat{f} bildet einen Zustand $|\psi\rangle$ auf einen Zustand $|\phi\rangle$ ab:

$$|\phi\rangle = \hat{f}(|\psi\rangle) \quad (117)$$

In der Quantenmechanik sind lineare Operatoren A von Interesse.

- Definition:

Für lineare Operatoren \hat{A} gilt:

$$\hat{A}(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) = c_1\hat{A}|\psi_1\rangle + c_2\hat{A}|\psi_2\rangle \quad (118)$$

Beispiel: Der Impuls-Operator $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ ist linear

Darstellung von Operatoren

- Endlich-dimensionaler Fall

Stellen wir Bras $\langle\psi|$ und Kets $|\psi\rangle$ in einer Basis $|i\rangle$ dar

$$\begin{aligned} \langle\psi| &= (\psi_1^*, \dots, \psi_n^*) = \sum_i \psi_i^* \langle i| \\ |\psi\rangle &= \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix} = \sum_i \psi_i |i\rangle \end{aligned}$$

so ist Operator A eine Matrix mit Elementen

$$A_{ij} = \langle i|\hat{A}|j\rangle \quad (119)$$

Es folgt

$$\hat{A} = \sum_{ij} A_{ij} |i\rangle \langle j| \quad (120)$$

- Ist $|i\rangle$ Eigenbasis von A

$$\hat{A}|i\rangle = \lambda_i |i\rangle \quad (121)$$

so folgt der Spektralsatz

$$\hat{A} = \sum_i \lambda_i |i\rangle \langle i| \quad (122)$$

Sehr wichtig:

- \hat{A} hat Diagonalgestalt

- In Eigenbasis zerfällt das i.A. hoch-dimensionale Problem in viele ein-dimensionale Probleme
- Spektralsatz auch im unendlich-dimensionalen formulierbar, siehe Übung.

5 25

Hermitesche/selbstadjungierte Operatoren

- Der zu Operator A^{10} adjungierte Operator A^\dagger ist definiert durch

$$\langle A^\dagger \phi | \psi \rangle = \langle \phi | A \psi \rangle \quad (123)$$

Adjungierter Operator A^\dagger wälzt Wirkung von A auf Ket-Vektor auf Bra-Vektor um

- Wegen $\langle \phi | \psi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle^*$ gilt

$$\langle \phi | A \psi \rangle = \langle A^\dagger \phi | \psi \rangle = \langle \psi | A^\dagger \phi \rangle^* \quad (124)$$

In Dirac-Notation

$$\langle \phi | A | \psi \rangle = \langle \psi | A^\dagger | \phi \rangle^* \quad (125)$$

- Endlich dimensionaler Vektorraum

Sei A eine $n \times n$ Matrix, dargestellt in einer Basis, so gilt:

Adjungierte Matrix ergibt sich durch Transposition und komplexe Konjugation

- Definition:

Ein Operator ist hermitesch, wenn gilt

$$A = A^\dagger \quad (126)$$

- Haben ferner Definitionsbereiche von A und A^\dagger gleiche Dimension, heißt A selbstadjungiert¹¹.

- Beispiele:

- Endlich dimensionaler Vektorraum

Eine $n \times n$ Matrix ist selbstadjungiert, wenn sie reell und symmetrisch ist

¹⁰Das "Dach" ist ab jetzt mitunter unterdrückt

¹¹Nur im unendlich-dimensionalen relevant. Wir werden die Begriffe synonym verwenden

- Der Ortsoperator ist (trivial) hermitesch

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x\psi) = \int_{-\infty}^{\infty} dx (x\psi)^*\psi \quad (127)$$

- Der Impulsoperator $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ ist hermitesch

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right) \psi &= \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^* \frac{d\psi}{dx} \\ &= \frac{\hbar}{i} \psi^* \psi \Big|_{-\infty}^{\infty} - \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{d\psi^*}{dx} \psi \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi \right)^* \psi \end{aligned}$$

- Damit folgt: Hamilton-Operator

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \quad (128)$$

ist auch hermitesch

- Es gilt

$$\begin{aligned} (A^\dagger)^\dagger &= A \\ (\lambda A)^\dagger &= \lambda^* A^\dagger \\ (A + B)^\dagger &= A^\dagger + B^\dagger \\ (AB)^\dagger &= B^\dagger A^\dagger \end{aligned}$$

Übersetzung in die Physik

- (Fast) alle Operatoren der Quantenmechanik sind hermitesch, wichtige Ausnahme siehe Kap. 4.4
- Schrödinger-Gleichung ist Eigenwert-Problem, betrachte zeitunabhängigen Fall

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (129)$$

Im endlich-dimensionalen Falle führt dies auf den bekannten Fall aus der linearen Algebra

$$\begin{pmatrix} h_{11} & \dots & h_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ h_{n1} & \dots & h_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix} \quad (130)$$

Im allgemeinen hat Gl. (129) unendlich viele Lösungen $n = 1, 2, \dots$

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n \quad (131)$$

- Wir müssen über Eigenwerte und Eigenfunktionen hermitescher Operatoren nachdenken

Wichtige Eigenschaften hermitescher Operatoren

- (i) Die Eigenwerte hermitescher Operatoren sind reell

Beweis:

- Sei a Eigenwert von \hat{A}

$$\hat{A}\psi = a\psi \quad (132)$$

- Dann gilt

$$a = \frac{\langle \psi | A\psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\langle A\psi | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = a^* \quad (133)$$

- (ii) Die Eigenfunktionen hermitescher Operatoren sind orthogonal

Beweis:

- Multipliziere

$$\hat{A}\psi_n = a_n\psi_n \quad (134)$$

mit ψ_m^* , ergibt

$$\psi_m^* \hat{A}\psi_n = a_n \psi_m^* \psi_n \quad (135)$$

Entsprechend

$$\hat{A}\psi_m = a_m \psi_m \quad (136)$$

mit ψ_n^* , ergibt

$$\psi_n^* \hat{A}\psi_m = a_m \psi_n^* \psi_m \quad (137)$$

- Subtrahiere Gl. (137) komplex konjugiert von Gl. (135) und integriere

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\psi_m^* \hat{A} \psi_n - (\hat{A}^\dagger \psi_m)^* \psi_n \right) = \int_{-\infty}^{\infty} dx (a_n \psi_m^* \psi_n - a_m^* \psi_m^* \psi_n) \quad (138)$$

\hat{A} hermitesch \implies linke Seite = 0, damit

$$(a_n - a_m^*) \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_m^* \psi_n = 0 \quad (139)$$

- Drei Fälle :

1. $n = m$

- * Eigenwerte sind reell.
- * Gleichung trivial erfüllt

2. $n \neq m$, nicht entartete Eigenwerte $a_n \neq a_m$

- * Es folgt

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_m^* \psi_n = 0 \quad (140)$$

- * Mit der richtigen Normierung

$$\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_m^* \psi_n = \delta_{ij} \quad (141)$$

- * Eigenfunktionen eines hermiteschen Operators zu verschiedenen nicht-entarteten Eigenwerten sind orthonormal

3. Betrachte $n \neq m$, entartete Eigenwerte $a_n = a_m$

- * Zugehörige Eigenfunktionen nicht notwendiger Weise orthogonal
- * Orthogonalisierung durch Bildung von Linearkombinationen
- * Entartung physikalisch relevant, da mit Symmetrien des Problems verbunden

(iii) Die Eigenfunktionen hermitescher Operatoren sind vollständig

Beweis:

- Eigenfunktionen $\{\psi_n\}$ vollständig bedeutet für beliebige Wellenfunktion ϕ :

$$\phi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) \quad (142)$$

ϕ lässt sich nach ψ_n entwickeln

- Zur Berechnung der c_n , multipliziere mit ψ_m^* und integriere

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_m^* \phi = \sum_n c_n \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_m^* \psi_n}_{=\delta_{nm}} = c_m \quad (143)$$

ergo

$$c_m = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_m^*(x) \phi(x) \quad (144)$$

- ϕ sei normiert, so folgt

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \phi^* \phi = \int_{-\infty}^{\infty} dx \sum_{nm} c_n^* c_m \psi_n^* \psi_m = \sum_{nm} c_n^* c_m \delta_{nm} \quad (145)$$

und damit

$$1 = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 \quad (146)$$

$\{c_n\}$ ist unendlich-dimensionaler Vektor der Länge 1.

- Es besteht ein-eindeutiger Zusammenhang zwischen $\phi(x)$ und c_n

Berechnung von Erwartungswerten

- Betrachte beliebige Wellenfunktion $\phi(x)$ und Operator \hat{A} mit seinem orthogonalen, vollständigen und normierten System von Eigenfunktionen $\psi_n(x)$

$$\hat{A}\psi_n(x) = a_n\psi_n(x) \quad (147)$$

- Frage: Wie lautet Erwartungswert von A ?

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \phi^*(x) \hat{A}\phi(x) \quad (148)$$

Mit $\{\psi_n\}$ Eigenfunktionen von \hat{A}

$$\phi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x), \quad c_n = \langle \psi_n | \phi \rangle \quad (149)$$

folgt

$$\begin{aligned}
 \langle A \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \sum_{nm} c_m^* c_n \psi_m^* \underbrace{\hat{A} \psi_n}_{=a_n \psi_n} \\
 &= \sum_{nm} c_m^* c_n a_n \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_m^* \psi_n}_{=\delta_{nm}} \\
 &= \sum_n c_m^* c_n a_n
 \end{aligned}$$

Ergo

$$\langle A \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 a_n \tag{150}$$

- Interpretation

- Erwartungswert von A ist Summe über Eigenwerte von \hat{A} gewichtet mit $|c_n|^2$, dem quadrierten Überlapp $|\langle \psi_n | \phi \rangle|^2$ von ψ_n und ϕ
 - Ist ϕ Eigenfunktion von \hat{A} , d.h. $\phi = \psi_k$, so gilt $c_k = 1$ und $c_l = 0$ für $l \neq k$
- Dann

$$\langle \hat{A} \rangle = a_k \tag{151}$$

eine scharfe Messung

Korrespondenz-Prinzip revisited:

- Observablen werden hermitesche Operatoren zugeordnet

$$A(x, p) \rightsquigarrow \hat{A}(\hat{x}, \hat{p}) \tag{152}$$

Das ist nicht eindeutig:

- Trivial nicht eindeutig:

$$p^2 x^2 \rightsquigarrow \begin{cases} \hat{p}^2 \hat{x}^2 & \text{nicht hermitesch, Unschärfe-Relation, s.u.} \\ \frac{1}{2}(\hat{p}^2 \hat{x}^2 + \hat{x}^2 \hat{p}^2) & \text{hermitesch} \\ \frac{1}{4}(\hat{p}\hat{x} + \hat{x}\hat{p})^2 & \text{hermitesch} \end{cases} \tag{153}$$

- Tiefsinnig nicht eindeutig
Groenewald-van-Hove Theorem, 1946, 1951
Quantisierung ist nicht konsistent für Potenzen > 2 bei gemischten Termen

- FAPP (For all practical purposes), Ort, Impuls, Energie, Drehimpuls, geht alles gut.

Inverser Operator

- Definition:
Wenn für $|\phi\rangle = A|\psi\rangle$ ein Operator A^{-1} mit $A^{-1}|\phi\rangle = |\psi\rangle$ existiert, so heißt dieser inverser Operator

- Es gilt

$$A^{-1}A = AA^{-1} = \mathbb{1} \quad (154)$$

Unitäre Operatoren

- Definition: Ein Operator U ist unitär, wenn gilt

$$U^\dagger = U^{-1} \quad (155)$$

und damit

$$U^\dagger U = UU^\dagger = \mathbb{1} \quad (156)$$

- Betrachte unitäre Transformation U eines

- Zustandes:

$$|\psi'\rangle = U|\psi\rangle \quad (157)$$

- Operators:

$$A' = UAU^\dagger \quad (158)$$

so bleiben experimentell messbare Größen invariant:

- Skalarprodukte

$$\langle\phi|\psi\rangle = \langle\phi|U^\dagger U|\psi\rangle = \langle\phi'|\psi'\rangle \quad (159)$$

- Erwartungswerte:

$$\langle\psi|A|\psi\rangle = \langle\psi|U^\dagger UAU^\dagger U|\psi\rangle = \langle\psi'|A'|\psi'\rangle \quad (160)$$

6 25
3. Halb-
woche
16
1/2
3. Wo-
che
21

– Eigenwerte:

Sei

$$U\psi = \lambda\psi \quad (161)$$

dann gilt

$$\langle\psi|\psi\rangle = \langle\psi|U^\dagger U\psi\rangle = \langle U\psi|U\psi\rangle = |\lambda|^2 \langle\psi|\psi\rangle \implies |\lambda|^2 = 1 \quad (162)$$

Alle Eigenwerte eines unitären Operators sind vom Betrage eins.

Beispiel: Zeitentwicklungsoperator

– Betrachte zeitabhängige Schrödinger-Gleichung, zeitunabhängiges Potential

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle \quad (163)$$

Formale Lösung:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= U(t-t_0) |\psi(t_0)\rangle \\ U(t, t_0) &= e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} \end{aligned}$$

$e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)}$ definiert über Potenzreihe¹²

$$e^{\hat{A}t} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^n t^n}{n!} = \mathbb{1} + \hat{A}t + \frac{1}{2} \hat{A}^2 t^2 + \dots \quad (164)$$

– Zeitentwicklungsoperator $U(t, t_0)$ ist unitär:

$$U^\dagger(t, t_0) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} = U(t_0, t) = U^{-1}(t, t_0) \quad (165)$$

und erhält somit die Norm der Wellenfunktion

$$\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \langle\psi(t_0)|U^\dagger(t, t_0)U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle = \langle\psi(t_0)|\psi(t_0)\rangle \quad (166)$$

¹²Wunderschöner Artikel: Moler & van Loan. Nineteen Dubious Ways to Compute the Exponential of a Matrix, Twenty-Five Years Later, SIAM Review, 2003, 45(1), 3-49.

2.2.3 Kommutatoren

- Betrachte zwei Operatoren A und B . Der Kommutator $[\cdot, \cdot]$ ist definiert als

$$[A, B] := AB - BA \quad (167)$$

Kommutator misst, ob zwei Operatoren vertauschen

- Erinnere endlich-dimensionalen Fall: Für Matrizen A und B gilt in der Regel:

$$[A, B] = AB - BA \neq 0 \quad (168)$$

- Betrachte Kommutator von Orts- und Impulsoperator

$$[\hat{x}, \hat{p}] = \left[x, \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right] = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{d}{dx} - \frac{d}{dx} x \right) \quad (169)$$

Beachte: Operatoren wollen auf Zustände angewandt werden

Daher

$$\frac{d}{dx} x \psi = 1 \psi + x \frac{d}{dx} \psi = \left(1 + x \frac{d}{dx} \right) \psi \quad (170)$$

Somit

$$[\hat{x}, \hat{p}] = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{d}{dx} - 1 - x \frac{d}{dx} \right) = -\frac{\hbar}{i} \quad (171)$$

oder

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \quad (172)$$

- Beachte: Orts- und Impulsoperator bezüglich verschiedener Komponenten vertauschen

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = \left[x_i, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} \right] = \frac{\hbar}{i} \left(x_i \frac{\partial}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} x_i \right), \quad i \neq j \quad (173)$$

Wegen:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} x_i \psi = x_i \frac{\partial}{\partial x_j} \psi \quad (174)$$

folgt

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = 0 \quad (175)$$

- Übung: Berechne diverse Kommutatoren
- Definition: Antikommutator

$$[A, B]_+ := AB + BA \quad (176)$$

- Frage: Wann ergibt das Produkt zweier hermitescher Operatoren wieder einen hermiteschen Operator ?

Übung:

Verschwindet der Kommutator, $[A, B] = 0$, ist das Produkt AB hermitesch

Wichtiger Satz:

- Zwei Operatoren \hat{A} und \hat{B} kommutieren genau dann, wenn ein Satz von gemeinsamen Eigenfunktionen beider Operatoren existiert.
- Gemeinsame Eigenfunktionen $\implies \hat{A}$ und \hat{B} kommutieren

Beweis:

Sei ψ_n gemeinsame Eigenfunktion von \hat{A} und \hat{B} , dann folgt:

$$AB\psi_n = Ab_n\psi_n = a_nb_n\psi_n = b_na_n\psi_n = Ba_n\psi_n = BA\psi_n, \quad \forall \psi_n \quad (177)$$

$$\implies [A, B] = 0 \quad (178)$$

- \hat{A} und \hat{B} kommutieren \implies Es existiert gemeinsames Eigensystem
Annahme: Eigenwerte seien nicht entartet, Satz gilt aber auch sonst.

Beweis:

Sei

$$\hat{A}\psi_n = a_n\psi_n \quad (179)$$

Dann gilt

$$\hat{B}\hat{A}\psi_n = a_n\hat{B}\psi_n \quad (180)$$

Mit Kommutativität:

$$\hat{B}\hat{A}\psi_n = \hat{A}\hat{B}\psi_n \quad (181)$$

Damit zusammen

$$\hat{A}(\hat{B}\psi_n) = a_n(\hat{B}\psi_n) \quad (182)$$

$\implies \phi_n = \hat{B}\psi_n$ ist auch Eigenfunktion von \hat{A} mit Eigenwert a_n

Da Eigenwerte nicht-entartet sind, sind Eigenfunktionen eindeutig $\implies \phi_n \propto \psi_n$

$$\hat{B}\psi_n = b_n\psi_n \quad (183)$$

ψ_n ist Eigenfunktion von \hat{B} zum Eigenwert b_n .

- Dieses wird später, Kap. 6, wichtig zur Definition von Quantenzahlen.

2.3 Zurück zur Physik

2.3.1 Die Messung

Der Ablauf, Axiome der Quantenmechanik revisited

- Zeitentwicklung von $\psi(x, t)$ durch Schrödinger-Gleichung gegeben
- Observable A durch hermiteschen Operator \hat{A} gegeben
- Bestimme Eigenfunktionen $|n\rangle$ mit Eigenwerten a_n von \hat{A}
- Messung zum Zeitpunkt t : Projiziere $\psi(x, t)$ auf $|n\rangle$

$$c_n = \langle n|\psi(x, t)\rangle \quad (184)$$

- $|c_n|^2$ gibt Wahrscheinlichkeit, dass a_n gemessen wird.

Beachte:

$$\begin{aligned} |c_n|^2 &= \langle n|\psi(x, t)\rangle^* \langle n|\psi(x, t)\rangle, \quad \text{mit } \langle n|\psi(x, t)\rangle^* = \langle \psi(x, t)|n\rangle \\ &= \langle \psi(x, t) | \underbrace{|n\rangle\langle n|}_{\text{Projektor}} | \psi(x, t)\rangle \end{aligned}$$

- Wird a_n gemessen, geht Zustand $|\psi(x, t)\rangle$ in Zustand $|n\rangle$ über.
Kollaps der Wellenfunktion.
Wird direkt danach noch mal gemessen, ist System immer noch in Zustand $|n\rangle$,
Messung ergibt wieder a_n
- Falls nicht, ist $|n\rangle$ Anfangswert für Schrödinger-Gleichung

- Wird mehrfach an identisch präpariertem Zustand $|\psi(x, t)\rangle$ gemessen, erinnere Gl. (150), so gilt:

$$\langle A \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 a_n \quad (185)$$

Interpretation

- Erwartungswert von A ist Summe über Eigenwerte von \hat{A} gewichtet mit $|c_n|^2$, der Wahrscheinlichkeit, dass a_n auftritt
- $|c_n|^2$ ergibt sich aus Überlapp von $|\psi(x, t)\rangle$ und $|n\rangle$
- Ist ψ Eigenfunktion von \hat{A} , d.h. $\psi = |k\rangle$, so gilt $c_k = 1$ und $c_l = 0$ für $l \neq k$

Dann

$$\langle \hat{A} \rangle = a_k \quad (186)$$

eine scharfe Messung

- Ist ψ nicht Eigenfunktion von \hat{A} , so wird eine einzelne Messung einen der Eigenwerte a_n liefern und zwar mit Wahrscheinlichkeit $|c_n|^2$.
- Ergebnis einer einzelnen Messung ist also unbestimmt¹³.
- Merke: Die Zeitentwicklung des Zustandes ist deterministisch. Zustand bestimmt aber nicht deterministisch Ergebnis einer Messung

Zentral:

- Zufall des Messausgangs liegt nicht an Unkenntnis des Zustands
- Im Unterschied zur Statistischen Physik
- Der Kollaps der Wellenfunktion kann nicht durch eine Schrödinger-Gleichung beschrieben werden.

¹³und zwar in einem sehr tiefen Sinne, siehe Kap. 11

2.3.2 Impulsdarstellung

- Klassische Mechanik: Phasenraum (x, p)
- Quantenmechanik: Unschärferelation: \hat{x} und \hat{p} "mögen" sich nicht
- Aber p hat auch sein Recht
- Bisher Ortsdarstellung: $\psi(x, t)$
- Jetzt Impulsdarstellung: $\phi(p, t)$

Fourier-Transformation

- Betrachte Fourier-Transformation

$$f(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx g(x) e^{-ixy} \quad (187)$$

Inverse Fourier-Transformation

$$g(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dy f(y) e^{ixy} \quad (188)$$

Informationserhaltende Transformation

Fourier-Transformation ist unitär, Beweis als Übung

- Motivation über Zeitraum und Frequenzraum
- Für Wellenfunktionen $\psi(x, t)$

$$\phi(p, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x, t) e^{-ixp/\hbar} \quad (189)$$

und

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp \phi(p, t) e^{ixp/\hbar} \quad (190)$$

$\phi(p, t)$: Impulsdarstellung

- Betrachte ebene Welle mit Impuls p_0 im Ortsraum:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip_0x/\hbar} \quad (191)$$

Im Impulsraum:

$$\phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx \psi(x) e^{-ipx/\hbar} = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dx e^{-i(p-p_0)x/\hbar} = \delta(p - p_0) \quad (192)$$

Beweis als Übung

Wie transformieren sich die Operatoren ? $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ Vorfaktoren unterdrückt¹⁴

- Ortsoperator in Ortsdarstellung $\hat{x}_x\psi(x) = x\psi(x)$:

$$\begin{aligned} x\psi(x) &= x \int dp \phi(p) e^{ixp/\hbar} \\ \text{P.I.: } \int dp uv' &= uv|_{-\infty}^{\infty} - \int dp u'v \\ x\psi(x) &= -x \int dp \frac{\partial}{\partial p} \phi(p) \frac{\hbar}{ix} e^{ixp/\hbar} \\ x\psi(x) &= -\frac{\hbar}{i} \int dp \frac{\partial}{\partial p} \phi(p) e^{ixp/\hbar} \end{aligned}$$

Fourier-Transformation mit $\int dx e^{-ixp'/\hbar}$

$$\int dx x\psi(x) e^{-ixp'/\hbar} = -\frac{\hbar}{i} \int dp \frac{\partial}{\partial p} \phi(p) \int dx e^{ix(p-p')/\hbar} \quad (193)$$

Ausnutzen von $\int dx e^{ix(p-p')/\hbar} = \delta(p - p')$ ergibt:

$$\int dx x\psi(x) e^{-ixp'/\hbar} = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p'} \phi(p') \quad (194)$$

Damit Ortsoperator in Impulsdarstellung

$$\hat{x}_p\phi(p) = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} \phi(p) \quad (195)$$

¹⁴Normalerweise setzt man noch $\hbar = 1$ und macht es am Ende der Rechnung wieder richtig

- Impulsoperator, analoge Rechnung als Übung

$$\hat{p}_p \phi(p) = p \phi(p) \quad (196)$$

Orts- und Impulsoperator tauschen ihre Erscheinungsweise.

- Hamiltonoperator in Impulsdarstellung

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + V \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} \right) \quad (197)$$

- Kommutator $[\hat{x}_p, \hat{p}_p]$ in Impulsdarstellung

$$[\hat{x}_p, \hat{p}_p] = \left[-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p}, p \right] = -\frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial p} p - p \frac{\partial}{\partial p} \right) \quad (198)$$

Analog zu oben: Operatoren wollen auf Zustände wirken

$$\frac{\partial}{\partial p} p \phi(p) = 1 \phi(p) + p \frac{\partial}{\partial p} \phi(p) = \left(1 + p \frac{\partial}{\partial p} \right) \phi(p) \quad (199)$$

Damit

$$[\hat{x}_p, \hat{p}_p] = -\frac{\hbar}{i} = i\hbar \quad (200)$$

Es gilt allgemein: Kommutatoren sind darstellungsunabhängig

- Erwartungswerte von Observablen sind darstellungsunabhängig

$$\langle A \rangle = \langle \psi(x) | \hat{A}_x | \psi(x) \rangle = \langle \phi(p) | \hat{A}_p | \phi(p) \rangle \quad (201)$$

Beweis als Übung

2.3.3 Ehrenfest Theorem

Die klassische Mechanik muß als Grenzfall in der Quantenmechanik enthalten sein.

- Betrachte Schrödinger-Gleichung und die komplex konjugierte, adjungierte

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t) &= -\frac{i}{\hbar}H\psi(x, t) \\ \frac{\partial}{\partial t}\psi^*(x, t) &= \frac{i}{\hbar}H^*\psi^*(x, t) = \frac{i}{\hbar}H\psi^*(x, t)\end{aligned}$$

Für Observable A ist der Erwartungswert

$$\langle A \rangle(t) = \int d^3x \psi^*(x, t)A(t)\psi(x, t) \quad (202)$$

- Zeitliche Ableitung, alle Argumente unterdrückt

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle A \rangle &= \int dx \left(\underbrace{\frac{\partial \psi^*}{\partial t}}_{=\frac{i}{\hbar}H\psi^*} A\psi + \psi^* \frac{\partial A}{\partial t} \psi + \psi^* A \underbrace{\frac{\partial \psi}{\partial t}}_{=-\frac{i}{\hbar}H\psi} \right) \\ &= \int dx \left(\frac{i}{\hbar} (H\psi^* A\psi - \psi^* AH\psi) + \psi^* \frac{\partial A}{\partial t} \psi \right) \\ &= \int dx \left(\frac{i}{\hbar} (\psi^* HA\psi - \psi^* AH\psi) + \psi^* \frac{\partial A}{\partial t} \psi \right) \\ &= \int dx \left(\frac{i}{\hbar} (\psi^* (HA - AH)\psi) + \psi^* \frac{\partial A}{\partial t} \psi \right)\end{aligned}$$

Ergibt

$$\frac{d}{dt}\langle A \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H, A] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle \quad (203)$$

- Vergleich mit klassischer Mechanik

$$\frac{d}{dt}f = \{H, f\} + \frac{\partial f}{\partial t} \quad (204)$$

mit Poisson-Klammer

$$\{f, g\} = \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial g}{\partial q} - \frac{\partial g}{\partial p} \frac{\partial f}{\partial q} \quad (205)$$

Andere Formulierung des Korrespondenz-Prinzips:

Klassische Poisson-Klammer entspricht quantenmechanischem Kommutator multipliziert mit $\frac{i}{\hbar}$

- Zwei wichtige Kommutatoren, Beweise als Übung

$$[H, x_i] = \left[\sum_j \frac{p_j^2}{2m}, x_i \right] = -i\hbar \frac{p_i}{m} \quad (206)$$

$$[H, p_i] = \left[V(x), \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_i} \right] = i\hbar \frac{\partial V}{\partial x_i} \quad (207)$$

- Anwendung von Gl. (203) auf x und p , mit Kraft: $F(x) = -\nabla V(x)$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle x \rangle &= \frac{1}{m} \langle p \rangle \\ \frac{d}{dt} \langle p \rangle &= -\langle \nabla V(x) \rangle = \langle F(x) \rangle \end{aligned}$$

Fasse zusammen:

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle = \langle F(x) \rangle \quad \text{erscheint bekannt} \quad (208)$$

- Ehrenfest Theorem: Die klassischen Gleichungen gelten für die Mittelwerte
- ABER: Das bedeutet nicht, dass die Mittelwerte $\langle x \rangle$ und $\langle p \rangle$ den klassischen Bewegungsgleichungen

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle = F(x)$$

genügen.

- Dazu muss man Mittelwert der Kraft

$$\langle F(x) \rangle = \int dx \psi^*(x, t) F(x) \psi(x, t) \quad (209)$$

durch ihren Wert $F(\langle x \rangle)$ an der Stelle $\langle x \rangle$ ersetzen dürfen

- Wann gilt dies ? Betrachte Taylor-Entwicklung

$$F(x) = F(\langle x \rangle) + F'(\langle x \rangle)(x - \langle x \rangle) + \frac{1}{2}F''(\langle x \rangle)(x - \langle x \rangle)^2 + \dots \quad (210)$$

Wegen $\langle (x - \langle x \rangle) \rangle = 0$ entfällt 2. Term

$$F(x) = F(\langle x \rangle) + \frac{1}{2}F''(\langle x \rangle) \underbrace{(x - \langle x \rangle)^2}_{=\Delta x^2} + \dots \quad (211)$$

Ersetzen von $\langle F(x) \rangle$ durch $F(\langle x \rangle)$ ist exakt, wenn zweite und höhere Ableitungen verschwinden. Näherungsweise gut, wenn Wellenfunktion so gut lokalisiert ist, dass sich $F(x)$ im Bereich ihrer Ausdehnung nur wenig ändert

$$\frac{(\Delta x)^2 F''(\langle x \rangle)}{F(\langle x \rangle)} \ll 1 \quad (212)$$

- Erinnere Schrödinger-Kapitel, Ableitung der Eikonal-Gleichung, Gl. (34) :

$$0 = \frac{n^2 \lambda^2}{4\pi^2} \frac{\Delta A}{A} - ((\nabla L)^2 - n^2)$$

Gleichungen haben die selbe Struktur.

2.3.4 Heisenberg- & Wechselwirkungsbild

- Bisher Schrödinger-Bild: Operatoren zeitunabhängig, Zustand zeitabhängig

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= U(t_0, t)|\psi(t_0)\rangle \\ U(t_0, t) &= e^{-iH(t-t_0)/\hbar} \end{aligned}$$

- Heisenberg-Bild: Operatoren zeitabhängig, Zustand zeitunabhängig, $t_0 = 0$

$$\langle A(t) \rangle = \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle = \langle U(t)\psi(0) | A | U(t)\psi(0) \rangle \quad (213)$$

Wälze $U(t)$ auf A um

$$\langle A(t) \rangle = \langle \psi(0) | U^\dagger(t) A U(t) | \psi(0) \rangle \quad (214)$$

Ergibt zeitabhängigen Heisenberg-Operator

$$A_H(t) = U^\dagger(t)AU(t) \quad (215)$$

Bewegungsgleichung für Heisenberg-Operatoren A_H

$$\dot{A}_H = \frac{i}{\hbar}[H, A_H] + \frac{\partial A_H}{\partial t} \quad (216)$$

- Wechselwirkungsbild

- Betrachte Hamilton-Operator mit zeitunabhängigem Teil H_0 und eventuell zeitabhängiger Störung $H_1 = V(t)$

$$H = H_0 + H_1 = H_0 + V(t) \quad (217)$$

- Wechselwirkungsbild liegt zwischen Schrödinger- und Heisenberg-Bild: Zustände und Operatoren sind zeitabhängig
- Geeignet, wenn man H_0 nach Eigenenergien und Eigenzuständen "gut kennt"
- Man interessiert sich für Modifikationen durch $V(t)$

- Idee:
 - * Beschreibe H_0 -Dynamik mit zeitabhängige Operatoren
 - * Beschreibe H_1 -Dynamik mit zeitabhängigen Zuständen

Lessons learned

- Die Axiome der Quantenmechanik:
 - Zustände leben im Hilbertraum
 - Observable durch selbstadjungierte Operatoren repräsentiert
 - Messung: Projektion der Wellenfunktion auf Eigenzustände des selbstadjungierten Operators
 - Eigenwert als zufälliges Messergebnis
 - Wahrscheinlichkeit durch Überlapp von Wellenfunktion mit Eigenzuständen gegeben
 - Kollaps der Wellenfunktion auf zugehörigen Eigenzustand
- Drei wichtige Eigenschaften selbstadjungierter Operatoren:
 - Eigenwerte sind reell
 - Eigenzustände sind orthogonal
 - Eigenzustände sind vollständig
- Groenewald-van-Hove Theorem: Korrespondenz-Prinzip nicht konsistent
- Kommutatoren messen Vertauschbarkeit von Operatoren
- Impulsdarstellung
- Ehrenfest-Theorem: Klassische Mechanik als Grenzfall der Quantenmechanik
- Heisenberg- und Wechselwirkungsbild

3 Unschärferelationen

- Erinnere Cauchy-Schwarz'sche Ungleichung:

$$\langle \phi | \phi \rangle \langle \psi | \psi \rangle \geq |\langle \phi | \psi \rangle|^2 \quad (218)$$

- Betrachte zwei hermitesche Operatoren \hat{A} und \hat{B} und Zustand ψ
Definiere Operatoren A und B durch Abziehen des Mittelwertes im Zustand ψ

$$A = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle = \hat{A} - \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \quad (219)$$

B entsprechend

- Setze $A\psi$ und $B\psi$ in Cauchy-Schwarz'sche Ungleichung ein

$$\langle A\psi | A\psi \rangle \langle B\psi | B\psi \rangle \geq |\langle A\psi | B\psi \rangle|^2 \quad (220)$$

Hermitezität ausnutzen

$$\langle \psi | A^2 | \psi \rangle \langle \psi | B^2 | \psi \rangle \geq |\langle \psi | AB | \psi \rangle|^2 \quad (221)$$

- Mit Antikommutator

$$[A, B]_+ = AB + BA \quad (222)$$

zerlege AB in hermiteschen und einen anti-hermiteschen Anteil

$$AB = \frac{1}{2}[A, B]_+ + \frac{1}{2}[A, B] \quad (223)$$

mit

$$\begin{aligned} [A, B]_+^\dagger &= [A, B]_+ \quad \text{hermitesch} \\ \langle \psi | [A, B]_+ | \psi \rangle &\in \mathbb{R} \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} [A, B]^\dagger &= -[A, B] \quad \text{anti-hermitesch} \\ \text{Kommutator von } A \text{ und } B &= iC, \quad A, B, C \text{ hermitesch} \\ \langle \psi | [A, B] | \psi \rangle &\quad \text{rein imaginär} \end{aligned}$$

- Zerlegung eines Operators in einen hermiteschen und einen antihermiteschen bedeutet für Erwartungswert Zerlegung in Real- und Imaginärteil
Damit gilt für Betragsquadrat:

$$|\langle \psi | AB | \psi \rangle|^2 = \frac{1}{4} \langle \psi | [A, B]_+ | \psi \rangle^2 + \frac{1}{4} |\langle \psi | [A, B] | \psi \rangle|^2 \quad (224)$$

- Die Mittelwerte $\langle \hat{A} \rangle$ und $\langle \hat{B} \rangle$ sind Zahlen, kommutieren mit allem.
Daher gilt

$$[\hat{A}, \hat{B}] = [A, B] \quad (225)$$

Damit folgt bei Vernachlässigung des ersten Terms in Gl. (224)

$$|\langle \psi | AB | \psi \rangle|^2 \geq \frac{1}{4} |\langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle|^2 \quad (226)$$

8 25

Warum nicht den zweiten statt des ersten Terms vernachlässigen? Über kommutierende Operatoren wissen wir was :-)

- Die Unschärfe ΔA ist die Standardabweichung von \hat{A} , Wurzel aus der Varianz

$$(\Delta A)^2 = \langle \psi | (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 | \psi \rangle \quad (227)$$

ΔB entsprechend

- Somit folgt für das Produkt der Unschärfen mit Gl. (221)

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle| \quad (228)$$

die allgemeine Unschärfe-Relation:

Observablen von nicht-kommutierenden Operatoren sind nicht simultan scharf messbar

- Betrachte : $\hat{A} = \hat{x}_i$ und $\hat{B} = \hat{p}_j$

Erinnere:

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij} \quad (229)$$

Es folgt der wichtige Spezialfall der Orts-Impulsunschärfe:

$$\Delta x_i \Delta p_j \geq \frac{\hbar}{2} \delta_{ij} , \quad (230)$$

die Heisenberg'sche Unschärfe-Relation.

Physikalisch/mathematische Interpretation

- Kommutierende Operatoren
 - Erinnere: Kommutieren zwei Operatoren A und B , so haben sie die gleichen Eigenfunktionen $|n\rangle$
 - Messung von A überführt Wellenfunktion $|\psi\rangle$ in Eigenfunktion $|n\rangle$ und ergibt Eigenwert a_n als Messwert
 - Unmittelbar anschließende Messung von B lässt Eigenfunktion $|n\rangle$ unverändert und ergibt b_n als Messwert
 - Erneute Messung von A ergibt wieder $|n\rangle$ and a_n
 - Dieses lässt beliebig häufig wiederholen
 - $\Delta t \rightarrow 0$
 - Ergo: Man kann von simultanen scharfen Messwerten sprechen
- Nicht-kommutierende Operatoren
 - Messung von A überführt Wellenfunktion $|\psi\rangle$ in Eigenfunktion $|n\rangle$ ergibt Eigenwert a_n
 - $|n\rangle$ ist nicht Eigenfunktion von B
 - Messung von B lässt $|n\rangle$ in Eigenfunktion $|m\rangle$ von B kollabieren und ergibt b_m
 - $|m\rangle$ ist keine Eigenfunktion von A
 - Erneute Messung von A ergibt Kollaps in Eigenfunktion $|n'\rangle$ und Eigenwert $a_{n'}$
 - Diese wechselseitigen Zerstörung der Eigenfunktionen iteriert
 - Die Messwerte ändern sich ständig
 - Ergo: Man kann nicht von scharfen Messwerten sprechen
- Gilt alles im zeit-abhängigen wie im zeit-unabhängigen Falle

Unschärferelation ist eine Ungleichung

Unter welchen Bedingungen an die Wellenfunktion wird das Gleichheitszeichen angenommen ?

- Gleichheitszeichen bei Cauchy-Schwarz'scher Ungleichung

$$\langle A\psi|A\psi\rangle\langle B\psi|B\psi\rangle \geq |\langle A\psi|B\psi\rangle|^2 \quad (231)$$

wird angenommen für

$$B\psi = zA\psi, \quad z \in \mathbb{C} \quad (232)$$

Gleichheitszeichen in Gl. (226)

$$|\langle \psi|AB|\psi\rangle|^2 \geq \frac{1}{4}|\langle \psi|[\hat{A}, \hat{B}]|\psi\rangle|^2 \quad (233)$$

wird angenommen, wenn Erwartungswert des Antikommutators verschwindet

$$\langle \psi|AB|\psi\rangle + \langle \psi|BA|\psi\rangle = \langle A\psi|B\psi\rangle + \langle B\psi|A\psi\rangle = 0 \quad (234)$$

Gl. (232) eingesetzt

$$0 = \langle A\psi|zA\psi\rangle + \langle zA\psi|A\psi\rangle = \langle A\psi|zA\psi\rangle + \langle A\psi|zA\psi\rangle^* = (z + z^*)\langle A\psi|A\psi\rangle \quad (235)$$

Ergo: z muss rein imaginär sein

- Eingesetzt in Gl. (232)

$$B\psi = i\lambda A\psi, \quad \lambda \text{ reell} \quad (236)$$

- Für $A = \hat{x}$ und $B = \hat{p}$ ergibt sich die Differentialgleichung

$$\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} - \langle p \rangle\right) \psi = i\lambda(x - \langle x \rangle)\psi \quad (237)$$

Lösung: Gauß'sches Wellenpaket, siehe Kap. 4.1. Beweis als Übung

Beweis der Orts-Impuls Unschärfe auf Grund der Fourier-Transformation

- Sei $\psi(x)$ eine quadrat-integrable Funktion
- Dann ist¹⁵

$$\tilde{\psi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x) e^{-ikx} \quad (238)$$

die Fourier-Transformierte von $\psi(x)$

¹⁵mal wieder nomenklatorisch flexibel bleiben :-)

- Sei ferner

$$\begin{aligned}
 (\Delta x)^2 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x)(x - \langle x \rangle)^2 \psi(x) \\
 (\Delta k)^2 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \tilde{\psi}^*(k)(k - \langle k \rangle)^2 \tilde{\psi}(k)
 \end{aligned}$$

dann gilt

$$\Delta x \Delta k \geq \frac{1}{2} \quad (239)$$

- Beweis als Übung
- Mit de Broglie-Beziehung $p = \hbar k$ folgt

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (240)$$

Energie-Zeit Unschärfe

- Betrachte $\psi(t)$ und Fourier-Transformierte

$$\tilde{\psi}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dt \psi(t) e^{-i\omega t} \quad (241)$$

und

$$\begin{aligned}
 (\Delta t)^2 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dt \psi^*(t)(t - \langle t \rangle)^2 \psi(t) \\
 (\Delta \omega)^2 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \tilde{\psi}^*(\omega)(\omega - \langle \omega \rangle)^2 \tilde{\psi}(\omega)
 \end{aligned}$$

Es folgt analog

$$\Delta \omega \Delta t \geq \frac{1}{2} \quad (242)$$

und mit $E = \hbar \omega$ folgt

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \quad (243)$$

- Aber: Die Zeit t ist in der Quantenmechanik keine Observable, nur ein Parameter. Es gibt keinen Zeit-Operator
- Daher lässt Zeit-Energie Unschärfe sich nicht aus Kommutator-Relation ableiten
- Bedeutung von Δt : Zeitdauer, keine Standardabweichung in obigem Sinne
- Anwendungsbeispiele

– Durchgangsdauer und Energieunschärfe

Etwas hand-waving :-)

Energieunschärfe eines freien Wellenpaketes mit p_0 und Δp

$$\Delta E \approx \frac{p_0 \Delta p}{m} \quad (244)$$

Zeitunschärfe Δt : Zeit, die das Teilchen an Stelle x gefunden werden kann, d.h. die Zeit, die das Wellenpaket mit Ausdehnung Δx für Durchgang durch Ort x benötigt

$$\Delta t \approx \frac{\Delta x}{v_0} = \frac{m \Delta x}{p_0} \quad (245)$$

Somit

$$\Delta E \Delta t \approx \Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (246)$$

- Energie-Zeit-Unschärfe hat praktische Konsequenzen in der Spektroskopie:
- * Hat ein angeregter Zustand die Lebensdauer Δt , dann ist die Frequenz nur bis auf $\Delta \omega$, resp. die Energie auf ΔE bestimmt.
 - * Endliche Lebensdauern führen zu verbreiterten Emissionslinien im Spektrum

Lessons learned

- Observable, die zu nicht kommutierenden Operatoren gehören, sind nicht simultan scharf messbar
- Die Zeit ist in der Quantenmechanik keine Observable, es gibt keinen "Zeit-Operator"
- Energie-Zeit Unschärfe in besonderem Sinne

4 Erste Anwendungen

"Shut up and calculate"

Überblick

5. Halb-
woche
16
1/2
5. Wo-
che
21

- Zentral ist der Hamilton-Operator, in Ortsdarstellung:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) \quad (247)$$

- Bewegungsgleichung: Zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) \right) \phi(x, t) \quad (248)$$

- Im zeitunabhängigen Falle: Separationsansatz:

$$\phi(x, t) = \psi(x) e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \quad (249)$$

- Ergibt zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi(x) = E\psi(x) \quad (250)$$

- Das heißt, die Fragestellungen klassifizieren sich nach dem Potential $V(x)$

– Freies Teilchen

- Potentialbarriere
 - Kastenpotential
 - Harmonischer Oszillator
 - Periodische Potentiale
 - Wasserstoffatom
- Bestimme Eigenfunktionen und Eigenwerte, das Energiespektrum, von \hat{H}

4.1 Freies Teilchen

- Mit $V(x) = 0$ folgt für zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E\psi(x) \quad (251)$$

Lösung: trigonometrische Funktionen

Ansatz: $\psi(x) = Ae^{\pm ikx}$

- Es folgt

$$-\frac{\hbar^2}{2m} A(-k^2)e^{\pm ikx} = EAe^{\pm ikx} \quad (252)$$

mit Energie E

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (253)$$

bzw.

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} \quad (254)$$

- Für jede Energie E existieren zwei Lösungen, jeder Eigenwerte ist zweifach entartet

$$\psi_{\pm}(x) = Ae^{\pm ikx} \quad (255)$$

Jeder Wert $E \geq 0$ ist Eigenwert, keine Quantisierung, sondern kontinuierliches Spektrum

- Energie kann scharf gemessen werden $\Delta E = 0$

- Zeitabhängige Lösung

$$\psi_{\pm}(x, t) = Ae^{\pm ikx} e^{-i/\hbar Et} \quad (256)$$

ergibt mit $\omega = E/\hbar$

$$\begin{aligned} \psi_+(x, t) &= Ae^{i(kx - \omega t)} && \text{rechtslaufende Welle} \\ \psi_-(x, t) &= Ae^{i(-kx - \omega t)} && \text{linkslaufende Welle} \end{aligned}$$

Allgemeine Lösung: Linearkombination

$$\psi(x, t) = (Ae^{ikx} + Be^{-ikx}) e^{-i\omega t} \quad (257)$$

- Quantenmechanische Wahrscheinlichkeitsamplitude für freies Teilchen ist eine Welle.

Dies erlaubt Effekte wie Interferenz, so war es konstruiert.

Betrachte Messung von Ort und Impuls

- Eigenwert-Gleichung für Impuls-Operator

$$\begin{aligned} \hat{p}\phi(x) &= \lambda\phi(x) \\ \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \phi(x) &= \lambda\phi(x) \end{aligned}$$

Ansatz:

$$\phi_{\pm}(x) = Ae^{\pm ikx} \quad (258)$$

$$\hat{p}Ae^{\pm ikx} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} Ae^{\pm ikx} = \frac{\hbar}{i} A(\pm ik)e^{\pm ikx} = \pm p\phi_{\pm}(x) \quad (259)$$

Ergo

$$\hat{p}\psi_{\pm}(x) = \pm p\psi_{\pm}(x) \quad (260)$$

$\psi_{\pm}(x)$ ist auch Eigenfunktion von Impuls-Operator und beschreibt damit Teilchen mit scharfem Impuls, $\Delta p = 0$

- Da sowohl $\Delta E = 0$ als auch $\Delta p = 0$ müssen die entsprechenden Operatoren kommutieren

$$[\hat{H}, \hat{p}] = 0 \quad (261)$$

was trivial richtig ist.

Beispiel für simultane Eigenfunktionen kommutierender Operatoren

- Unschärferelation fordert $\Delta x = \infty$

In der Tat:

$$|\psi_{\pm}(x)|^2 = |A|^2 |e^{\pm ikx}|^2 = |A|^2 = \text{const.} \quad (262)$$

- $\psi_{\pm}(x)$ ist nicht normierbar. Realistischerer Ansatz: lokalisierte Wellenpakete

Wellenpakete

- Konstruiere lokalisierte Lösung durch Superposition

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk a(k) e^{i(kx - \omega(k)t)} \quad (263)$$

Anfangsbedingung, $t = 0$

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk a(k) e^{ikx} \quad (264)$$

$a(k)$ ist Fouriertransformierte von $\psi(x, 0)$

- Gehe in Impulsdarstellung, immer im Hinterkopf: $p = \hbar k$

$$\phi(p, t) = \frac{1}{\sqrt{\hbar}} a(k) e^{-i\omega(k)t} \quad (265)$$

- Für geeignetes $a(k)$ sind alle Varianten normierbar

$$\int dp |\phi(p, t)|^2 = \int dk |a(k)|^2 = \int dx |\psi(x, t)|^2 = 1 \quad (266)$$

- Beachte: Wellenpaket ist keine Eigenfunktion von \hat{H}

Zerfließen von freien Wellenpaketen

- Quantenmechanische Dispersion
- Betrachte Gauß'sches Wellenpaket

$$a(k) = C e^{-\alpha(k-k_0)^2} \quad (267)$$

α legt Breite fest, C sorgt für Normierung

- Bisher ganz allgemein, gilt auch für elektromagnetische Wellen.
- Erinnere unterschiedliche Dispersionsrelationen

$$\begin{aligned} \omega &= \frac{\hbar k^2}{2m} && \text{Schrödinger-Gleichung} \\ \omega &= ck && \text{Maxwell-Gleichung} \end{aligned}$$

9 25

Entwickle $\omega(k)$ um k_0

$$\begin{aligned} \omega(k) &= \omega(k_0) + \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} (k - k_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2\omega}{dk^2} \right|_{k_0} (k - k_0)^2 + \dots \\ \omega(k) &= \omega_0 + v_G(k - k_0) + \beta(k - k_0)^2 + \dots \end{aligned}$$

v_G : Gruppengeschwindigkeit, β : Dispersionsparameter

- Hier: Entwicklung bricht (spätestens) nach quadratischem Term ab
Eingesetzt in Gl. (263)

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \frac{C}{\sqrt{2\pi}} \int dk e^{-\alpha(k-k_0)^2} e^{ikx} e^{-i(\omega_0 + v_G(k-k_0) + \beta(k-k_0)^2)t} \\ &= \frac{C}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{\alpha + i\beta t}} e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \exp\left(-\frac{(x - v_G t)^2}{4(\alpha + i\beta t)}\right) \end{aligned}$$

Beweis als Übung

Damit Wahrscheinlichkeitsdichte

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{|C|^2}{2\sqrt{\alpha^2 + \beta^2 t^2}} \exp\left(-\frac{\alpha(x - v_G t)^2}{2(\alpha^2 + \beta^2 t^2)}\right) \quad (268)$$

Erinnere Varianz von Gauß-Verteilung

$$p_G(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x - \langle x \rangle)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (269)$$

$$\sigma^2 = \frac{\alpha^2 + \beta^2 t^2}{\alpha} = (\Delta x)^2 \quad (270)$$

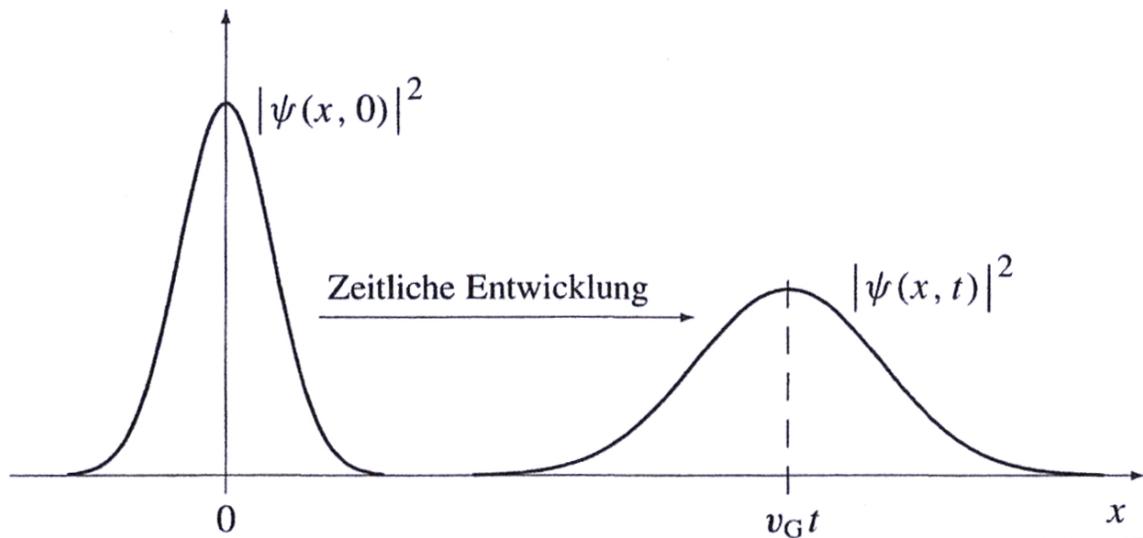


Abbildung 4.1

- Im Impulsraum folgt

$$|\phi(p, t)|^2 = \frac{|C|^2}{\hbar} e^{-2\alpha(k-k_0)^2} = |\phi(p)|^2, \quad \text{zeitunabhängig} \quad (271)$$

und damit

$$\Delta p = \frac{\hbar}{2\sqrt{\alpha}} \quad (272)$$

- Damit folgt für die Unschärferelation

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2} \sqrt{1 + \frac{\beta^2 t^2}{\alpha^2}} \geq \frac{\hbar}{2} \quad (273)$$

Beachte: Für $t = 0$ gilt minimale Unschärfe.

- Quantenmechanischer Fall:

$$v_G = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} = \frac{\hbar k_0}{m}, \quad \beta = \frac{\hbar}{2m} \quad (274)$$

Dispersion gilt für jede Art von freien Wellenpaketen.

- Elektrodynamischer Fall, im Vakuum

$$v_G = c, \quad \beta = 0 \quad (275)$$

Darum keine Dispersion im Vakuum, aber natürlich in Materie, wo $\omega = ck$ nicht gilt.

4.2 Potentialbarriere und Tunneleffekt

- Betrachte Teilchen mit Energie E und eine Potentialbarriere $V(x)$

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < -a \\ V_0 & \text{für } -a \leq x \leq a \quad 0 < E < V_0 \\ 0 & \text{für } x > a \end{cases} \quad (276)$$

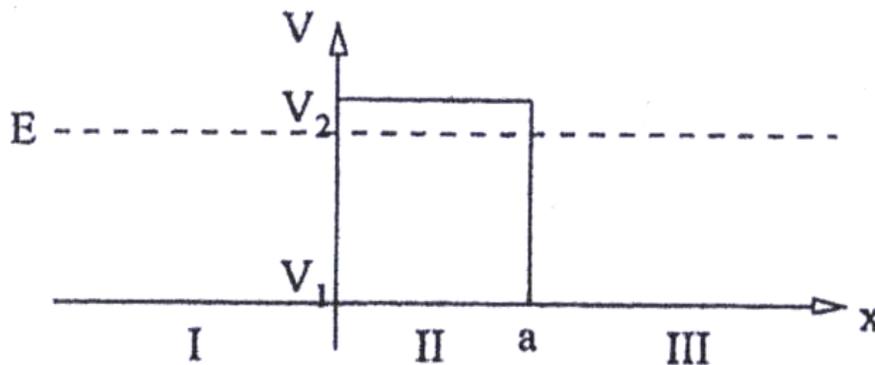


Abbildung 4.2

- Klassisch: Teilchen kann Barriere nicht überwinden
- Quantenmechanisch: Es gibt endliche Tunnelwahrscheinlichkeit $T(E)$, ein von links kommendes Teilchen rechts der Barriere zu finden

- Intuition, Faktor $e^{-i\omega t}$ im Folgenden unterdrückt:

- Rechts und links der Barriere: freies Teilchen

$$\psi(x) \propto e^{\pm ikx}, \quad k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} \quad (277)$$

- In der Barriere, Schrödinger-Gleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0 \right) \psi(x) = E\psi(x) \quad (278)$$

oder

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = \underbrace{(E - V_0)}_{<0} \psi(x) \quad (279)$$

Lösung: Exponentielles Verhalten

$$\psi(x) \propto e^{\pm gx}, \quad g = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} \quad (280)$$

Allgemeine Lösung

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & \text{für } x < -a \\ Ce^{-gx} + De^{gx} & \text{für } -a \leq x \leq a \\ Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} & \text{für } x > a \end{cases} \quad (281)$$

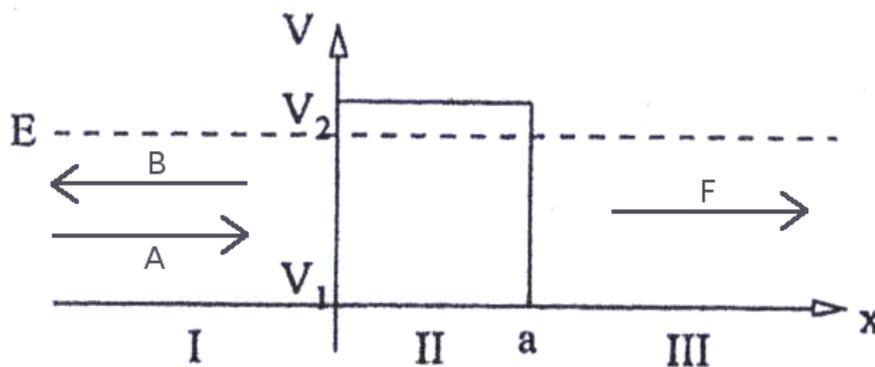


Abbildung 4.3: mit A , B und F

- Bei $x = -a$ und $x = a$ müssen die Wellenfunktionen für endliches Potential V_0 stetig und differenzierbar aneinander anschließen

Beweise:

– Intuitiv

- * Angenommen $\psi(x)$ oder $\psi'(x)$ wären unstetig, dann bewirkt

$$\begin{aligned}\psi(x) &\propto \Theta(x-a) \text{ für } \psi''(x) \propto \delta'(x-a) \\ \psi'(x) &\propto \Theta(x-a) \text{ für } \psi''(x) \propto \delta(x-a)\end{aligned}$$

- * $\psi''(\pm a)$ hat aber höchstens endliche Sprungstelle

* Widerspruch

- * Analoge Argumentation: Bei unendlichen Sprüngen von $V(x)$ bleibt $\psi(x)$ stetig, aber $\psi'(x)$ wird unstetig

– Physikalisch: $\psi'(x)$ entspricht Impuls, dieser kann nicht unendlich sein, daher muss $\psi(x)$ stetig sein.

– Mathematisch

- * Integriere Schrödinger-Gleichung über das Intervall $[a - \epsilon, a + \epsilon]$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} dx \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} dx E\psi(x) - \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} dx V(x)\psi(x) \quad (282)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\psi'(a+\epsilon) - \psi'(a-\epsilon)) = \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} dx E\psi(x) - \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} dx V(x)\psi(x) \quad (283)$$

- * Für $\epsilon \rightarrow 0$ folgt verschwindet 1. Integral auf jeden Fall, zweites, wenn Sprung in $V(x)$ endlich

- Anschlußbedingung bei $x = -a$

Stetigkeit

$$Ae^{-ika} + Be^{ika} = Ce^{ga} + De^{-ga} \quad (284)$$

Differenzierbarkeit

$$ik(Ae^{-ika} - Be^{ika}) = -g(Ce^{ga} - De^{-ga}) \quad (285)$$

In Matrixschreibweise

$$\begin{pmatrix} e^{-ika} & e^{ika} \\ e^{-ika} & -e^{ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ga} & e^{-ga} \\ \frac{ig}{k} e^{ga} & -\frac{ig}{k} e^{-ga} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad (286)$$

Umgestellt

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{ika} & e^{ika} \\ e^{-ika} & -e^{-ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ga} & e^{-ga} \\ \frac{ig}{k} e^{ga} & -\frac{ig}{k} e^{-ga} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad (287)$$

Ergibt

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = M(a) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad (288)$$

mit

$$M(a) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \left(1 + \frac{ig}{k}\right) e^{ga+ika} & \left(1 - \frac{ig}{k}\right) e^{-ga+ika} \\ \left(1 - \frac{ig}{k}\right) e^{ga-ika} & \left(1 + \frac{ig}{k}\right) e^{-ga-ika} \end{pmatrix} \quad (289)$$

- Anschlußbedingung bei $x = a$

Analoge Rechnung

$$\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = M(-a) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad (290)$$

- Zusammenhang $\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$ und $\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}$:

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = M(a)M(-a)^{-1} \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} \quad (291)$$

mit

$$M(-a)^{-1} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \left(1 - \frac{ik}{g}\right) e^{ga+ika} & \left(1 + \frac{ik}{g}\right) e^{ga-ika} \\ \left(1 + \frac{ik}{g}\right) e^{-ga-ika} & \left(1 + \frac{ik}{g}\right) e^{-ga-ika} \end{pmatrix} \quad (292)$$

Ergibt

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\cosh 2ga + \frac{i\epsilon}{2} \sinh 2ga) e^{2ika} & \frac{i\eta}{2} \sinh 2ga \\ -\frac{i\eta}{2} \sinh 2ga & (\cosh 2ga - \frac{i\epsilon}{2} \sinh 2ga) e^{-2ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} \quad (293)$$

mit

$$\epsilon = \frac{g}{k} - \frac{k}{g}$$

$$\eta = \frac{g}{k} + \frac{k}{g}$$

- Betrachte von links einlaufendes Teilchen, d.h. $G = 0$. Dann

$$A = F(\cosh 2ga + \frac{i\epsilon}{2} \sinh 2ga)e^{2ika}$$

$$B = -F\frac{i\eta}{2} \sinh 2ga$$

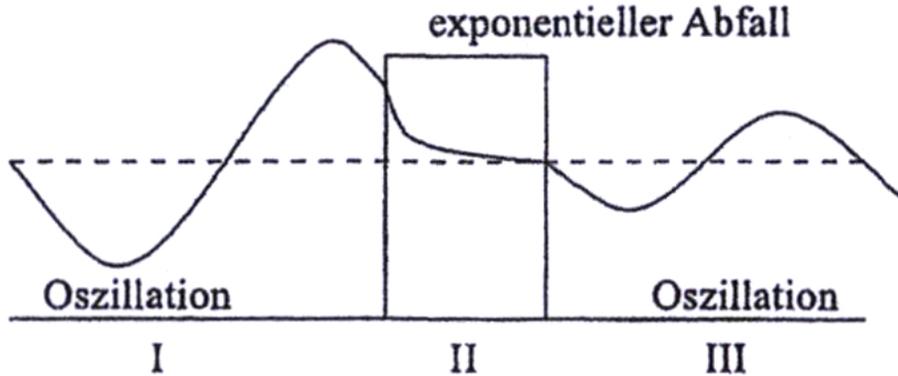


Abbildung 4.4: Wellenfunktion

- Definiere Transmissionsamplitude $S(E)$:

$$S(E) := \frac{F}{A} = \frac{e^{-2ika}}{\cosh 2ga + \frac{i\epsilon}{2} \sinh 2ga} \quad (294)$$

Definiere Tunnelwahrscheinlichkeit $T(E) = |S(E)|^2$, dass Teilchen, das auf Schwelle trifft, diese durchdringt:

$$T(E) := \frac{1}{1 + (1 + (\epsilon^2/4)) \sinh^2 2ga} \quad (295)$$

5. Wo-
che
21

- Betrachte Grenzfall einer sehr hohen und breiten Barriere: $ga \gg 1$

Dann gilt

$$\sinh 2ga = \frac{1}{2}(e^{2ga} - e^{-2ga}) \approx \frac{1}{2}e^{2ga} \gg 1 \quad (296)$$

Damit

$$T(E) \approx \left(1 + \frac{\epsilon^2}{4}\right)^{-1} 4e^{-4ga} = \frac{16(gk)^2}{(g^2 + k^2)^2} e^{-4ga} \quad (297)$$

Mit $k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}$ und $g = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)}$

$$T(E) \approx \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} \exp\left(-4\frac{a}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)}\right) \quad (298)$$

Ziehe Vorfaktor in den Exponenten

$$T(E) \approx \exp\left(-4\frac{a}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)} + \log\left(\frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2}\right)\right) \quad (299)$$

Logarithmus wächst viel langsamer als Wurzel, vernachlässige ihn

$$T(E) \approx \exp\left(-4\frac{a}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)}\right) \quad (300)$$

Ergebnis: Für sehr hohe und breite Barriere, $ga \gg 1$

$$\begin{aligned} T(E) &\approx e^{-\beta} \\ \beta &= \frac{4a}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)} \end{aligned}$$

Tunnelwahrscheinlichkeit nimmt exponentiell ab mit der

- Breite der Barriere
 - Wurzel der Masse
 - Wurzel aus der Energiedifferenz
- Tunneleffekt ist ein Wellenphänomen. Geht auch mit elektromagnetischen Wellen: Evaneszente Wellen, lateinisch: evanescere: verschwinden. Z.B. bei Totalreflexion

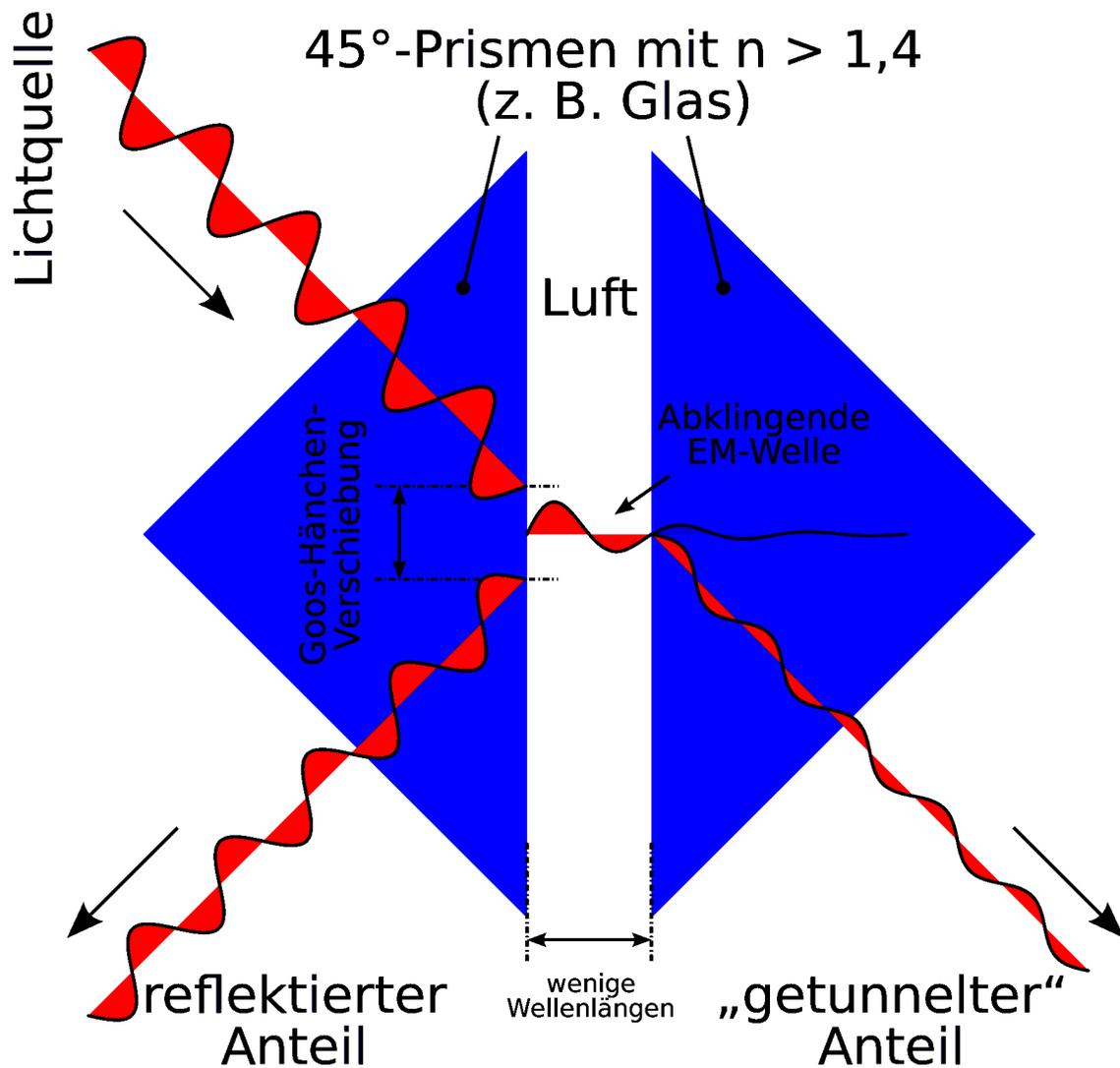


Abbildung 4.5

- Technisch: Grundlage des Rastertunnelmikroskopes, Nobelpreis 1986 für G. Binnig und H. Rohrer
 - Halte Metallspitze über abzutastender Oberfläche
 - Zwischenraum entspricht Potentialbarriere
 - Lege Spannung zwischen Metallspitze und Oberfläche an
 - Strom misst den Abstand

- Quantitative Beziehung zwischen Abstand und Strom schwierig
- Praxis: Halte Strom konstant und variiere Abstand durch Piezokristalle
- Abstand \propto Spannung an Piezokristall

10 25

Übung: α -Zerfall

4.3 Potentialtopf

Unendlich hoher Potentialtopf

- Sei

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } 0 < x < L \\ \infty & \text{sonst} \end{cases} \quad (301)$$

- Lösung muss im Außenbereich verschwinden, sonst wäre Erwartungswert der potentiellen Energie

$$\langle V \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx V(x) |\psi(x)|^2 \quad (302)$$

unendlich

- Schrödinger-Gleichung im Innenbereich

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E \psi(x) \quad (303)$$

Allgemeine Lösung

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad (304)$$

- Wellenfunktion muss stetig sein: $\psi(0) = \psi(L) = 0$

$$\psi_n(x) = A \sin(k_n x), \quad k_n = \frac{n\pi}{L}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (305)$$

Richtig normiert:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right) \quad (306)$$

- Wellenfunktion ist an $x = 0$ und $x = L$ nicht differenzierbar

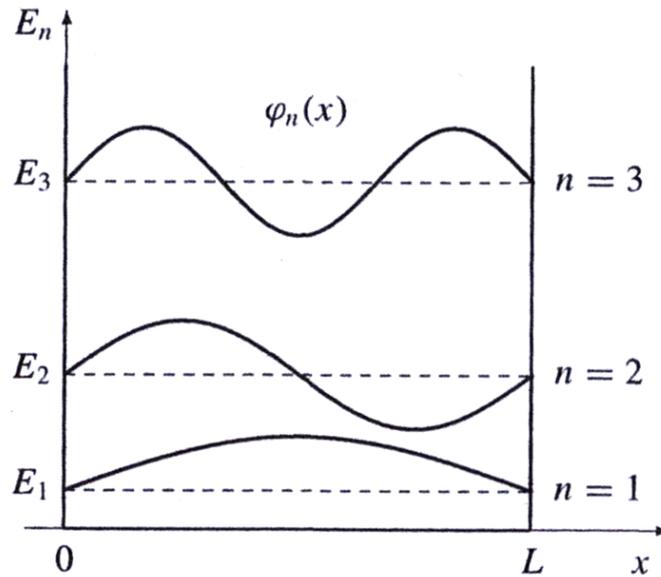


Abbildung 4.6

- Energiespektrum durch Einsetzen in Schrödinger-Gleichung

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2, \quad n = 1, 2, \dots \quad (307)$$

$E_n \propto n^2$ mag zunächst überraschen, da Energielücken zwischen benachbarten Energie-Eigenwerten damit auch groß werden.

Aber relativ werden Abstände kleiner

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{E_{n+1} - E_n}{E_n} = \frac{2n + 1}{n^2} \rightarrow \frac{2}{n} \quad (308)$$

- Fünf Beobachtungen
 - Tiefster Energiewert liegt nicht bei Null
 - Es gibt nur diskrete Energiewerte.
Es gilt allgemein: Lokalisierte Lösungen führen über Randbedingungen zu diskreten Energieeigenwerten
 - Für große Massen und breite Töpfe ergibt sich Quasi-Kontinuum, der klassische Grenzfall

- Für große n oszilliert $\psi_n(x)$ sehr schnell. Wahrscheinlichkeit $p_{\Delta x}(x)$ Teilchen in $[x, x + \Delta x]$ zu finden

$$p_{\Delta x}(x) = \frac{2}{L} \int_x^{x+\Delta x} dx \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \approx \frac{\Delta x}{L}, \quad \text{für } \frac{L}{n} \ll \Delta x \quad (309)$$

- Verringerung von L erhöht die Energie: Es gibt einen Druck
- $E_1 \neq 0$ ist in Übereinstimmung mit der Unschärferelation
 - Wäre $E_1 = 0$ wäre p scharf bestimmt. Dann müsste $\Delta x = \infty$ gelten. Geht aber bei beschränktem System nicht
 - Überschlagsrechnung
 $\Delta x \approx L$, damit $\Delta p \approx \hbar/L$
 Dazu gehört $E = \frac{\hbar^2}{2mL^2}$, bis auf Faktor π^2 die Grundzustandsenergie
- Beachte:
 - Durch Randbedingungen wird aus überabzählbar unendlich dimensionaler Schrödinger-Gleichung ein abzählbar unendlicher Lösungsraum
 - Die ganze Rechnung geht, ohne dass man über ψ nachdenken muss

Endlicher Potentialtopf als Übung

- Nicht-triviale Anschlussbedingungen analog zur Potential-Barriere
- $V(x)$ ist endlich, $\psi(x)$ verschwindet außerhalb des Potentialtopfes nicht
- $V(x)$ macht bei $x = \pm a$ einen Sprung, also auch $V(x)\psi(x)$
- Also macht $\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)$ einen endlichen Sprung
- Damit hat erste Ableitung einen Knick.
- $\psi(x)$ einmal stetig differenzierbar

4.4 Harmonischer Oszillator

- Hamilton-Funktion des klassischen harmonischen Oszillators:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \quad (310)$$

- Zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right) \psi(x) = E\psi(x) \quad (311)$$

mit charakteristischer Länge

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{\omega m}} \quad (312)$$

4.4.1 "Klassische" Lösung

- Führe dimensionslose Größen ϵ und y ein

$$\epsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}, \quad y = \frac{x}{x_0}, \quad u(y) = \psi(x(y)) \quad (313)$$

ergibt:

$$\frac{d^2 u(y)}{dy^2} + (\epsilon - y^2) u(y) = 0 \quad (314)$$

- Betrachte $u(y)$ für $y \rightarrow \pm\infty$

$$u'' \approx y^2 u, \quad \text{für } y^2 \gg \epsilon \quad (315)$$

Lösung:

$$u(y) \propto e^{\pm y^2/2}, \quad \text{für } y \rightarrow \pm\infty \quad (316)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dy} e^{\pm y^2/2} &= \pm y e^{\pm y^2/2} \\ \frac{d^2}{dy^2} e^{\pm y^2/2} &= \pm e^{\pm y^2/2} + y^2 e^{\pm y^2/2} \approx y^2 e^{\pm y^2/2}, \quad \text{für } y \rightarrow \pm\infty \end{aligned}$$

Normierbarkeit: Explodierende Lösung ist raus

$$u(y) \propto e^{-y^2/2}, \quad \text{für } y \rightarrow \pm\infty \quad (317)$$

- Ansatz:

$$u(y) = v(y) e^{-y^2/2} \quad (318)$$

Mit

$$u'' = (v'' - 2yv' - v + vy^2) e^{-y^2/2} \quad (319)$$

eingesetzt in Gl. (314) folgt Differentialgleichung für $v(y)$

$$v'' - 2yv' + (\epsilon - 1)v = 0 \quad (320)$$

- Polynomansatz für $v(y)$

$$v(y) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m y^m \quad (321)$$

Damit diese Potenzreihe Gl. (320) erfüllen kann, muss der Koeffizient jeder Potenz y^k verschwinden und es muss gelten:

$$(k+2)(k+1)a_{k+2} - 2ka_k + (\epsilon - 1)a_k = 0 \quad (322)$$

oder die Rekursionsgleichung

$$a_{k+2} = \frac{2k+1-\epsilon}{(k+2)(k+1)} a_k \quad (323)$$

Werden a_0 , a_1 und ϵ festgelegt, ergibt sich Gl. (321) und damit Lösung von Gl. (318)

- Betrachte a_k für große und gerade k : $k \gg 1$, $k \gg \epsilon$, $k = 2l$

$$a_{2l+2} \approx \frac{2}{k} a_{2l} = \frac{1}{l} a_{2l} \implies a_{2l} \propto \frac{1}{l!} \quad (324)$$

Damit folgt, für $y \rightarrow \pm\infty$ dominieren die hohen Potenzen:

$$v(y) \approx \sum_{l=0}^{\infty} a_{2l} y^{2l} \propto \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(y^2)^l}{l!} = e^{y^2} \quad (325)$$

Für ungrade Potenzen, $k = 2l + 1$ entsprechend

Damit wird Ansatz aus Gl. (318) nicht normierbar:

$$u(y) = v(y)e^{-y^2/2} \propto e^{y^2} e^{-y^2/2} = e^{y^2/2} \quad (326)$$

- Ansatz Gl. (321) gescheitert ?

6. Wo-

- Einzige Rettung: Rekursion in Gl. (323) muss abbrechen

che

16

Dies ist genau dann der Fall, wenn ϵ einen der diskreten Werte

$$\epsilon_n = 2n + 1, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (327)$$

annimmt.

Dann bricht je nachdem entweder die gerade oder die ungrade Folge ab.

Die jeweils andere wird durch $a_0 = 0$, resp. $a_1 = 0$ zum Schweigen gebracht.

- Als Lösung erhalten wir damit ein endliches Polynom $H_n(y)$, das entweder grade oder ungrade ist und insgesamt

$$u(y) = c_n H_n(y) e^{-y^2/2} \quad (328)$$

Explizite niedrigste Lösungen :

$$a_{k+2} = \frac{2k + 1 - \epsilon}{(k + 2)(k + 1)} a_k \quad (329)$$

- Für $n = 0$ ist $\epsilon_0 = 1$

Aus $a_1 = 0$ folgt $a_{2l+1} = 0$

Mit $a_0 \neq 0$ folgt $a_2 = \frac{0+1-1}{2 \cdot 1} a_0 = 0$, $a_4 = a_6 = \dots = 0$

Damit

$$v(y) = H_0(y) = a_0, \quad u(y) = c_0 a_0 e^{-y^2/2} \quad (330)$$

– Für $n = 1$ ist $\epsilon_1 = 3$

Mit $a_0 = 0$ folgt $a_{2l} = 0$

Aus $a_1 \neq 0$ folgt $a_3 = \frac{2+1-3}{3 \cdot 1} a_1 = 0$, $a_5 = a_7 = \dots = 0$

Damit

$$v(y) = H_1(y) = a_1 y, \quad u(y) = c_1 a_1 y e^{-y^2/2} \quad (331)$$

$$a_{k+2} = \frac{2k+1-\epsilon}{(k+2)(k+1)} a_k \quad (332)$$

– Für $n = 2$ ist $\epsilon_2 = 5$

Mit $a_1 = 0$ folgt $a_{2l+1} = 0$

Aus $a_0 \neq 0$ folgt $a_2 = \frac{0+1-5}{2 \cdot 1} a_0 = -2a_0$ und $a_4 = \frac{4+1-5}{4 \cdot 3} a_2 = 0$

$a_6 = a_8 = \dots = 0$

Damit

$$v(y) = H_2(y) = a_0(1 - 2y^2), \quad u(y) = c_2 a_0(1 - 2y^2) e^{-y^2/2} \quad (333)$$

- Diese endlichen Polynome, die Gl. (320) lösen, heissen Hermite-Polynome
Richtig normiert:

$$\begin{aligned} H_0(y) &= 1 \\ H_1(y) &= 2y \\ H_2(y) &= 4y^2 - 2 \\ H_3(y) &= 8y^3 - 12y \\ H_4(y) &= 16y^4 - 48y^2 + 12 \end{aligned}$$

Fingerübungen damit als Übung

- In aller Schönheit:

Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0}} \frac{\pi^{-1/4}}{\sqrt{2^n n!}} H_n \left(\frac{x}{x_0} \right) \exp \left(-\frac{x^2}{2x_0^2} \right) \quad (334)$$

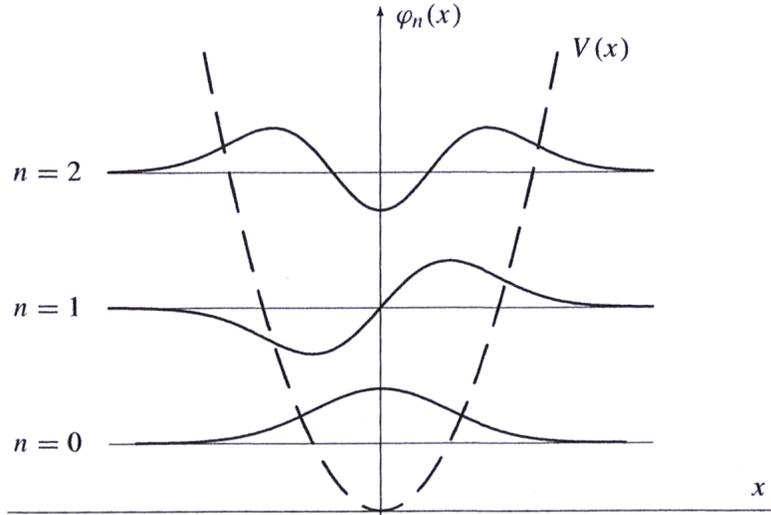


Abbildung 4.7

Energieeigenwerte mit Gln. (313, 327):

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad (335)$$

Zusammenfassung des Gangs der Handlung:

- Führe dimensionslose Größen ein
- Betrachte Lösungen für $y \rightarrow \pm\infty$: $u(y) \propto e^{-y^2/2}$
- Wähle Ansatz $u(y) = v(y) e^{-y^2/2}$
Ergibt Differentialgleichung für $v(y)$
- Wähle Polynomansatz für $v(y)$
- Führt auf Rekursionsgleichung für Polynomkoeffizienten
- Allgemeine Lösung divergiert
- Ansatz kann nur funktionieren, wenn Rekursion abbricht.
- Führt zu Energiequantisierung und Hermite-Polynomen

- Hätten andere Ansätze zu anderen Lösungen geführt ?
Nein, geht wg. Eindeutigkeit der Eigenfunktionen nicht.

6. Halb-
woche
21

4.4.2 Ableitung per Leiteroperatoren, algebraische Methode

Fast alle \hat{H} unterdrückt

- Definiere Leiter-Operatoren a und a^\dagger , seinen adjungierten Operator

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

$$a^\dagger = \frac{\omega m x - i p}{\sqrt{2\omega m \hbar}}$$

Beachte: a und a^\dagger sind nicht hermitesch, Beweis als Übung

- In Umkehrung

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega m}}(a + a^\dagger) \quad (336)$$

$$p = -i\sqrt{\frac{\hbar\omega m}{2}}(a - a^\dagger) \quad (337)$$

- Es gilt, Übung

$$[a, a^\dagger] = 1 \quad (338)$$

- Mit charakteristischer Länge $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{\omega m}}$

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{x_0} + x_0 \frac{d}{dx} \right)$$

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{x_0} - x_0 \frac{d}{dx} \right)$$

Mit Gln. (336, 337) ergibt sich Hamilton-Operator des harmonischen Oszillators, Übung :

$$H = \frac{1}{2}\hbar\omega(a^\dagger a + a a^\dagger) \quad (339)$$

- Addiere $a^\dagger a - a^\dagger a$, unter Benutzung des Kommutators, Gl. (338), folgt

$$H = \frac{1}{2} \hbar \omega (a^\dagger a + a^\dagger a + \underbrace{aa^\dagger - a^\dagger a}_{=1}) = \hbar \omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) = \hbar \omega \left(\hat{n} + \frac{1}{2} \right) \quad (340)$$

mit Besetzungszahloperator $\hat{n} := a^\dagger a$

- Aufgabe: Finde Eigenwerte und Eigenfunktionen, die sogenannten Fockzustände, des Besetzungszahloperators.
- Es sei ψ_ν Eigenfunktion zum Eigenwert ν von \hat{n}

$$\hat{n} \psi_\nu = \nu \psi_\nu \quad (341)$$

- Berechnung von ψ_0

Aus

$$\nu \langle \psi_\nu | \psi_\nu \rangle = \langle \psi_\nu | \hat{n} \psi_\nu \rangle = \langle \psi_\nu | a^\dagger a \psi_\nu \rangle = \langle a \psi_\nu | a \psi_\nu \rangle \geq 0 \quad (342)$$

folgt

$$\nu \geq 0 \quad (343)$$

Kleinstmöglicher Eigenwert: $\nu = 0$

Um zugehörige Eigenfunktion zu berechnen, beachte, dass Norm von $a\psi_0$ verschwinden muss:

$$a\psi_0 = 0 \quad (344)$$

d.h.

$$\left(\frac{x}{x_0} + x_0 \frac{d}{dx} \right) \psi_0 = 0 \quad (345)$$

Normierte Lösung dieser Differentialgleichung

$$\psi_0(x) = \left(\frac{1}{\sqrt{\pi} x_0} \right)^{-1/2} \exp \left(-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0} \right)^2 \right) \quad (346)$$

- Berechnung der übrigen Eigenfunktionen

Es gilt, Übung

$$[\hat{n}, a^\dagger] = a^\dagger \quad \text{und} \quad [\hat{n}, a] = -a \quad (347)$$

Behauptung: $a^\dagger \psi_\nu$ ist Eigenfunktion von \hat{n} zum Eigenwert $\nu + 1$

Beweis:

Addiere geschickt eine Null:

$$\hat{n} a^\dagger \psi_\nu = (a^\dagger \hat{n} + \underbrace{\hat{n} a^\dagger - a^\dagger \hat{n}}_{a^\dagger}) \psi_\nu = (a^\dagger \hat{n} + a^\dagger) \psi_\nu = (\nu + 1) a^\dagger \psi_\nu \quad (348)$$

Damit

$$a^\dagger \psi_\nu \propto \psi_{\nu+1} \quad (349)$$

Normierung, wieder geschickt Null addieren, erinnere $[a, a^\dagger] = 1$

$$\begin{aligned} \langle a^\dagger \psi_\nu | a^\dagger \psi_\nu \rangle &= \langle \psi_\nu | a a^\dagger \psi_\nu \rangle = \langle \psi_\nu | (a a^\dagger - a^\dagger a + a^\dagger a) \psi_\nu \rangle \\ &= \langle \psi_\nu | (a^\dagger a + 1) \psi_\nu \rangle = \langle \psi_\nu | (\hat{n} + 1) \psi_\nu \rangle = \\ &= (\nu + 1) \langle \psi_\nu | \psi_\nu \rangle > 0 \end{aligned}$$

Somit gilt für normierte ψ_ν und $\psi_{\nu+1}$

$$a^\dagger \psi_\nu = \sqrt{\nu + 1} \psi_{\nu+1} \quad (350)$$

Iteriere

$$\psi_\nu = \frac{1}{\sqrt{\nu}} a^\dagger \psi_{\nu-1} = \frac{1}{\sqrt{\nu!}} (a^\dagger)^\nu \psi_0 \quad (351)$$

Merke: Mit a^\dagger geht es die Leiter eins hoch

11 25

- Behauptung: $a \psi_\nu$ ist Eigenfunktion von \hat{n} zum Eigenwert $\nu - 1$

Beweis:

$$\hat{n} a \psi_\nu = (a \hat{n} + \underbrace{\hat{n} a - a \hat{n}}_{-a}) \psi_\nu = (a \hat{n} - a) \psi_\nu = (\nu - 1) a \psi_\nu \quad (352)$$

Damit

$$a \psi_\nu \propto \psi_{\nu-1} \quad (353)$$

Normierung:

$$\langle a\psi_\nu | a\psi_\nu \rangle = \langle \psi_\nu | a^\dagger a \psi_\nu \rangle = \nu \langle \psi_\nu | \psi_\nu \rangle = \nu \geq 0, \text{ für } \nu \geq 0 \quad (354)$$

$\nu = 0$ hatten wir schon oben, Gl. (344)

Für $\nu \geq 1$

$$a\psi_\nu = \sqrt{\nu}\psi_{\nu-1} \quad (355)$$

Merke: Mit a geht es die Leiter eins runter

- Behauptung: Mit ψ_ν , $\nu = 0, 1, 2, \dots$ sind alle Eigenfunktionen gefunden

Beweis durch Widerspruch:

Nehme an, es gäbe einen Eigenwert $\nu = n + \alpha$ mit $0 < \alpha < 1$ und $n \in \mathbb{N}$

$$\hat{n}\psi_\nu = (n + \alpha)\psi_\nu \quad (356)$$

Dann folgt mit Gl. (352)

$$\hat{n}(a^n\psi_\nu) = \alpha(a^n\psi_\nu) \quad (357)$$

und

$$\hat{n}(a^{n+1}\psi_\nu) = (\alpha - 1)(a^{n+1}\psi_\nu) \quad (358)$$

Norm von $a^{n+1}\psi_\nu$ existiert, aber $\alpha - 1$ ist negativ. Widerspruch zur Positivität der Eigenwerte

- Zusammengefasst:

Zustand	ν	E
Grundzustand ψ_0	0	$\hbar\omega/2$
1. angeregter Zustand $\psi_1 = a^\dagger\psi_0$	1	$3\hbar\omega/2$
2. angeregter Zustand $\psi_2 = (a^\dagger)^2\psi_0$	2	$5\hbar\omega/2$
\vdots	\vdots	\vdots

- a^\dagger erhöht Energieeigenwert um $\hbar\omega \implies$ Erzeugungsoperator eines Energiequantums

a erniedrigt Energieeigenwert um $\hbar\omega \implies$ Vernichtungsoperator eines Energiequantums

- a^\dagger und a zentral in der Quantenfeldtheorie
- Dort werden auch die Felder quantisiert
- Felder haben Moden, das sind im wesentlichen harmonische Oszillatoren
- Diese können angeregt, erzeugt, und abgeregt, vernichtet werden.
- Stichwort: Zweite Quantisierung
- Berechnung der Wellenfunktionen, Faktoren unterdrückt

$$\psi_\nu = \frac{1}{\sqrt{\nu!}} a^\dagger \psi_{\nu-1} = \frac{1}{\sqrt{\nu!}} (a^\dagger)^\nu \psi_0 \quad (359)$$

- Grundzustand: Von oben

$$\psi_0 \propto e^{-x^2/2} \quad (360)$$

- Erster angeregter Zustand

$$\psi_1 \propto a^\dagger \psi_0 \propto \left(x - \frac{d}{dx}\right) e^{-x^2/2} = x e^{-x^2/2} - (-x e^{-x^2/2}) = 2x e^{-x^2/2} \quad (361)$$

- Zweiter angeregter Zustand

$$\psi_2 \propto a^\dagger \psi_1 \propto \left(x - \frac{d}{dx}\right) 2x e^{-x^2/2} = (4x^2 - 2) e^{-x^2/2} \quad (362)$$

- Allgemein

$$\psi_n \propto H_n(x) e^{-x^2/2} \quad (363)$$

In Übereinstimmung mit Kap. 4.4

4.4.3 Nullpunktsenergie

- Analog zum Potentialtopf: Klassisch ist niedrigste Energie des harmonischen Oszillators: $E = 0$
Quantenmechanisch: $E = \frac{\hbar\omega}{2}$
- Berechnung des Unschärfeprodukts $\Delta x \Delta p$

- Mittelwert und Varianz des Ortes

$$\langle x \rangle = \langle \psi_n | x \psi_n \rangle \propto \langle \psi_n | (a + a^\dagger) \psi_n \rangle \propto \langle \psi_n | \psi_{n-1} \rangle + \langle \psi_n | \psi_{n+1} \rangle = 0 \quad (364)$$

und

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{2\omega m} \langle \psi_n | (a^2 + \underbrace{aa^\dagger + a^\dagger a}_{=2\hat{n}+1} + a^{\dagger 2}) \psi_n \rangle = x_0^2 (n + 1/2) \quad (365)$$

- Analog für den Impuls

$$\langle p \rangle \propto \langle \psi_n | (a - a^\dagger) \psi_n \rangle = 0, \quad (\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{x_0^2} (n + 1/2) \quad (366)$$

Aus

$$(\Delta x)^2 (\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle \langle x^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} \quad (367)$$

folgt Ungleichung für Energie

$$E = \langle H \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \langle x^2 \rangle \geq \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \frac{\hbar^2}{4} \frac{1}{\langle p^2 \rangle} \quad (368)$$

- Ableitung nach $\langle p^2 \rangle$ liefert Bedingung für Minimum

$$\frac{1}{2m} - \frac{m\omega^2 \hbar^2}{8} \frac{1}{\langle p^2 \rangle_{\min}^2} \stackrel{!}{=} 0 \quad (369)$$

Somit:

$$\langle p^2 \rangle_{\min} = \frac{m\hbar\omega}{2} \quad (370)$$

Für die Energie gilt

$$E \geq \frac{m\hbar\omega}{4m} + \frac{m\omega^2 \hbar^2}{8} \frac{2}{m\hbar\omega} = \frac{\hbar\omega}{2} \quad (371)$$

Ergo: Nullpunktsenergie ist der kleinste Energiewert, der mit der Unschärferelation vereinbar ist.

1/2
7. Wo-
che

4.4.4 Vergleich mit klassischem harmonischem Oszillator

- Für große Werte von n ist die Wellenfunktion $\psi_n(x)$ an den Rändern größer als in der Mitte
- Das entspricht klassischem Fall
- Berechnung der klassischen Aufenthaltswahrscheinlichkeit

$$x(t) = A \sin \omega t, \quad \frac{dx}{dt} = \omega A \cos \omega t \quad (372)$$

Mit $A^2 \cos^2 \omega t + A^2 \sin^2 \omega t = A^2$

$$dx = \omega A \cos \omega t dt = \omega \sqrt{A^2 - A^2 \sin^2 \omega t} dt = \omega \sqrt{A^2 - x(t)^2} dt \quad (373)$$

oder

$$dt = \frac{dx}{\omega \sqrt{A^2 - x(t)^2}} \quad (374)$$

- Mit Periode $T = \frac{2\pi}{\omega}$ folgt für relative Zeitspanne, die das Teilchen während einer Periode im Intervall dx ist, Faktor 2 für hin und zurück

$$\frac{dt}{T} = \frac{dx}{\pi \sqrt{A^2 - x(t)^2}} \quad (375)$$

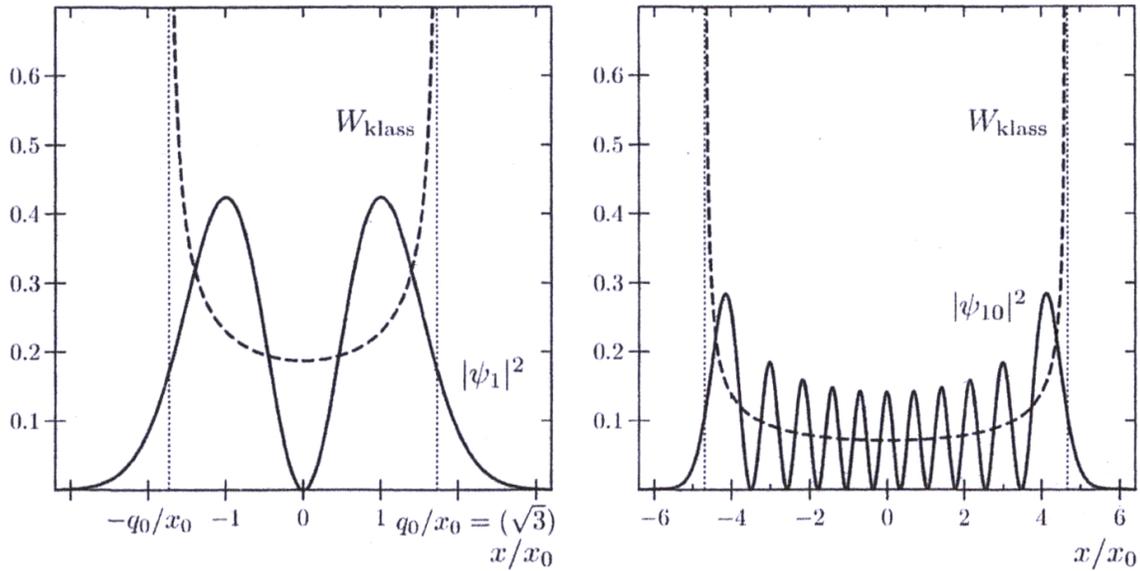


Abbildung 4.8

12 25

4.4.5 Kohärente Zustände Kapitel ausgelassen

- Für die stationären Zustände $\psi_n(x)$ gilt $\langle x \rangle = \langle p \rangle = 0$. Sie haben also nichts mit klassischer Oszillationsbewegung gemeinsam.

- Ziel:

Bestimme Lösungen der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung, die eine periodische Bewegung darstellen

Erinnere: Freie Wellenpakete zerfließen

- Betrachte normierte Eigenfunktionen ϕ_α des Vernichtungsoperators a

$$a\phi_\alpha = \alpha\phi_\alpha, \quad \alpha \in \mathbb{C}, \quad \text{da nicht hermitesch} \quad (376)$$

- Mit

$$\langle \psi_n | \phi_\alpha \rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle (a^\dagger)^n \psi_0 | \phi_\alpha \rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle \psi_0 | a^n \phi_\alpha \rangle = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \langle \psi_0 | \phi_\alpha \rangle \quad (377)$$

folgt die Entwicklung von ϕ_α nach ψ_n

$$\phi_\alpha = C \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \psi_n = C \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha\alpha^\dagger)^n}{n!} \psi_0 = C \exp(\alpha\alpha^\dagger) \psi_0 \quad (378)$$

Normierungskonstante $C = \langle \psi_0 | \phi_\alpha \rangle$ ergibt sich aus Orthonormalität der ψ_n

$$1 = \langle \phi_\alpha | \phi_\alpha \rangle = C^2 \sum_n \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = C^2 e^{|\alpha|^2} \quad (379)$$

zu

$$C = e^{-|\alpha|^2/2} \quad (380)$$

- Für die Zeitentwicklung kehre Separationsansatz

$$\psi_n(x, t) = \psi_n(x) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \quad (381)$$

um

Mit

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (382)$$

ergibt sich

$$\phi_\alpha(x, t) = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}} \psi_n(x) e^{-i\omega t/2} \quad (383)$$

oder

$$\phi_\alpha(x, t) = \phi_{\alpha(t)}(x) e^{-i\omega t/2}, \quad \text{mit } \alpha(t) = \alpha e^{-i\omega t} \quad (384)$$

$\phi_\alpha(x, t)$ ist Lösung der zeitabhängigen Schrödinger Gleichung und heißt kohärenter Zustand, Schrödinger 1926. Warum kohärent wird unten klar

- Der Erwartungswert des Ortes im Zustand $\phi_\alpha(x, t)$ ist zeitabhängig

$$\langle x \rangle = \langle \phi_{\alpha(t)} | x | \phi_{\alpha(t)} \rangle = \frac{x_0}{\sqrt{2}} \langle \phi_{\alpha(t)} | (a + a^\dagger) | \phi_{\alpha(t)} \rangle = \frac{x_0}{\sqrt{2}} (\alpha(t) + \alpha^*(t)) \quad (385)$$

- Mit $\alpha = |\alpha| e^{i\delta}$ folgt

$$\langle x(t) \rangle = \sqrt{2} x_0 |\alpha| \cos(\omega t - \delta) \quad (386)$$

Genau wie im klassischen Falle

- Analog für Impuls

$$\langle p(t) \rangle = \sqrt{2} \frac{\hbar}{x_0} |\alpha| \sin(\omega t - \delta) \quad (387)$$

- Merke: Kohärenter Zustand ist ein Wellenpaket, dessen mittlerer Ort durch den Realteil und dessen mittlerer Impuls durch den Imaginärteil von $\alpha(t)$ festgelegt ist.
- Kohärente Zustände zeigen minimale Unschärfe

- erinnere

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

- berechne

$$(\Delta x(t))^2 = \langle x(t)^2 \rangle - \langle x(t) \rangle^2 \quad (388)$$

$(\Delta p(t))^2$ entsprechend

- $\langle x(t) \rangle$ und $\langle p(t) \rangle$ haben wir schon
- $\langle x(t)^2 \rangle$ & $\langle p(t)^2 \rangle$ sind sehr einfach zu berechnen

Es tauchen Terme, Argumente und Faktoren unterdrückt, wie

$$\langle \phi | a^2 | \phi \rangle = \langle \phi | a a | \phi \rangle = \langle \phi | \alpha^2 | \phi \rangle = \alpha^2 \quad (389)$$

- Es ergibt sich

$$\Delta x = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega m}}, \quad \Delta p = \sqrt{\frac{\hbar\omega m}{2}} \quad (390)$$

und damit

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2} \quad (391)$$

- Minimale Unschärfe. Ergo: Kohärente Zustände sind Gauß'sche Wellenpakete
- Ausgehend von

$$\phi_\alpha = C e^{\alpha a^\dagger} \psi_0 \quad (392)$$

unter Verwendung eines Spezialfalles der Baker-Hausdorff Formel für Operatoren

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{-[A,B]/2} \quad (393)$$

läßt sich Wellenfunktion explizit berechnen.

- Für die Wahrscheinlichkeitsdichte folgt

$$|\phi_\alpha(x, t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}x_0} \exp\left(-\frac{(x - x_0\sqrt{2}|\alpha|\cos(\omega t - \delta))^2}{x_0^2}\right) \quad (394)$$

Merke: Kohärenter Zustand ist ein Gauß'sches Wellenpaket, das mit der Zeit nicht zerfließt. Dies liegt am fine-tuning der Phasen in Gl. (383):

$$\phi_\alpha(x, t) = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}} \psi_n(x) e^{-i\omega t/2} \quad (395)$$

- Klassischer Grenzfall:

- Für großes $|\alpha|$ folgt große Oszillationsamplitude, klassischer Fall ?
- Dann haben die Koeffizienten $\frac{\alpha^n}{n!}$ in Gl. (378) ein scharfes Maximum bei $n_0 = |\alpha|^2$
- Relative Breite der beitragenden n -Werte nimmt ab wie

$$\frac{n - n_0}{n_0} \propto \frac{1}{\sqrt{n_0}} \quad (396)$$

- Energie des kohärenten Zustands ist wegen $n_0 \approx |\alpha|^2$

$$\langle \phi_\alpha | H | \phi_\alpha \rangle = \hbar\omega |\alpha|^2 = \frac{m\omega^2 A^2}{2} \quad (397)$$

mit $A = \sqrt{2}x_0|\alpha|$ der Amplitude der klassischen Schwingung.

- Erinnere Ehrenfest Theorem

$$\frac{(\Delta x)^2 F''(\langle x \rangle)}{F(\langle x \rangle)} \ll 1 \quad (398)$$

Für harmonischen Oszillator gilt $F'' = 0$, daher funktioniert oszillatorisches Verhalten ohne jeden Limes

- Kohärente Zustände wichtig in der (Quanten-)Optik

4.4.6 Drei-dimensionaler Fall

- Hamiltonoperator des drei-dimensionalen harmonischen Oszillators

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{m\omega^2 r^2}{2} \quad (399)$$

zerfällt in drei unabhängige Operatoren für x -, y - und z -Bewegung

- Damit ergibt sich Wellenfunktion $\Psi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z)$ als Produkt der ein-dimensionalen Lösungen ψ_{n_x} , ψ_{n_y} und ψ_{n_z} .

$$\Psi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z) = \psi_{n_x}(x)\psi_{n_y}(y)\psi_{n_z}(z) \quad (400)$$

und die Energie zu

$$E_n = \left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega = \left(n + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega \quad (401)$$

mit Hauptquantenzahl $n = n_x + n_y + n_z$

- Außer Grundzustand sind alle Eigenwerte entartet

n	Anzahl Eigenfunktionen	Quantenzahlen
0	1	(0,0,0)
1	3	(1,0,0), (0,1,0), (0,0,1)
2	6	(2,0,0), (0,2,0), ..., (1,1,0) ...
3	10	(3,0,0), ..., (2,1,0) ... (1,1,1)

- Anwendung: Schalenmodell des Atomkerns

- Protonen Z und Neutronen N , Pauli-Prinzip
- Insgesamt vier Nukleonen pro Zustand
- 3-dimensionaler harmonischer Oszillator als einfachste Näherung
- Empirisch: Ist eine Schale abgeschlossen, ist sie besonders stabil
- Modell erklärt die magischen Zahlen

$$Z = N = 2, 8, 20, \dots \quad (402)$$

Atomkerne von ${}^4\text{He}$, ${}^{16}\text{O}$ und ${}^{40}\text{Ca}$ sind besonders stabil

- Analog zu abgeschlossenen Elektronenschale bei Edelgasen

7. Woche

4.5 Periodische Potentiale

Zentral für Festkörperphysik, Kristall mit Gitterkonstante a zwischen Atomen

- Sei $V(x)$ periodisches Potential mit $V(x + a) = V(x)$

$$H(x + a) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x + a) = H(x) \quad (403)$$

Definiere Verschiebungsopterator T_a

$$T_a \psi(x) := \psi(x + a) \quad (404)$$

- Berechne Kommutator von H und T_a

$$T_a H(x) \psi(x) = H(x + a) \psi(x + a) = H(x) T_a \psi(x) \quad (405)$$

Damit

$$[T_a, H] = 0 \quad (406)$$

- Explizite Darstellung des Verschiebungsopters

$$\begin{aligned} \psi(x + a) &= \sum_n \frac{1}{n!} \frac{d^n}{dx^n} \psi(x) a^n, \quad \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \\ &= \sum_n \frac{1}{n!} \left(\frac{ia\hat{p}}{\hbar} \right)^n \psi(x) \\ &=: T_a \psi(x) \\ T_a &= \exp \left(\frac{ia\hat{p}}{\hbar} \right) \end{aligned}$$

Impulsoperator wirkt als Erzeugende der Translation

Damit $[T_a, H] = 0$ sofort klar, da T_a mit kinetischer Energie vertauscht und potentielle Energie periodisch ist.

- Floquet-Bloch Theorem

Betrachte Eigenwertgleichung

$$T_a \psi(x) = \lambda_a \psi(x) \quad (407)$$

Mit

$$T_{-a}T_a\psi(x) = T_aT_{-a}\psi(x) = \psi(x) \quad (408)$$

folgt

$$\lambda_a\lambda_{-a} = 1 \implies \lambda_a = e^{\sigma a} \quad (409)$$

Betrachte

$$u(x) := e^{-\sigma x}\psi(x) \quad (410)$$

Es folgt:

$$\begin{aligned} T_a u(x) &= u(x+a) = e^{-\sigma(x+a)}T_a\psi(x) \\ &= e^{-\sigma(x+a)}e^{\sigma a}\psi(x) = e^{-\sigma x}\psi(x) \\ &= u(x) \end{aligned}$$

Ergo: $u(x)$ ist Eigenfunktion von T_a : $u(x+a) = u(x)$ und damit periodisch

- Wegen Periodizität

$$|\psi(x+a)|^2 = |\psi(x)|^2 \implies e^{\sigma a} = e^{iqa}, \quad q \in \mathbb{R} \quad (411)$$

folgt das

Floquet-Bloch Theorem:

In einem periodischen Potential ist die Wellenfunktion gegeben durch

$$\psi(x) = e^{iqx}u(x), \quad \text{mit } u(x+a) = u(x) \quad (412)$$

Beispiel: Kronig-Penney Modell (1931) mit periodischem δ -Potential

- Betrachte Potential:

$$V(x) = -V_0 \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} \delta(x+na), \quad V_0 > 0 \quad (413)$$

Im Bereich $0 < x < a$ ist $V(x) = 0$

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad \text{mit } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (414)$$

- Nun gilt mit Floquet-Bloch Theorem

$$\begin{aligned}
 \psi(x-a) &= e^{iq(x-a)}u(x-a) = e^{iq(x-a)}u(x) \\
 \text{mit F-B T umgedreht} \quad u(x) &= \psi(x) e^{-iqx} \\
 \text{folgt} \quad \psi(x-a) &= \psi(x) e^{-iqa} \\
 \psi(x) &= e^{iqa}\psi(x-a)
 \end{aligned}$$

Also gilt im Bereich $a < x < 2a$

$$\psi(x) = e^{iqa}(Ae^{ik(x-a)} + Be^{-ik(x-a)}) \quad (415)$$

- Wellenfunktion in a stetig, aber Ableitung nicht

Integriere Schrödinger-Gleichung um a

$$\int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} dx E\psi(x) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V_0 \delta(x-a) \psi(x) = 0 \quad (416)$$

Für $\epsilon \rightarrow 0$ folgt

$$\frac{d}{dx} \psi(a+0) - \frac{d}{dx} \psi(a-0) + \frac{2m}{\hbar^2} V_0 \psi(a) = 0 \quad (417)$$

- Zwei Anschlussbedingungen bei a

Stetigkeit:

$$Ae^{ika} + Be^{-ika} = e^{iqa}(A + B) \quad (418)$$

Ableitung:

$$e^{iqa}(ikA - ikB) - (ikAe^{ika} - ikBe^{-ika}) + \frac{2m}{\hbar^2} V_0 (Ae^{ika} + Be^{-ika}) = 0 \quad (419)$$

Matrixschreibweise:

$$\begin{pmatrix} e^{iqa} - e^{ika} & e^{-ika} - e^{iqa} \\ ik(e^{iqa} - e^{ika}) + \frac{2m}{\hbar^2} V_0 e^{ika} & -ik(e^{iqa} - e^{ika}) + \frac{2m}{\hbar^2} V_0 e^{-ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0 \quad (420)$$

Determinante muss verschwinden

$$0 = -ik(2e^{i(k+q)a} - 2 - 2e^{2iqa} + 2e^{i(q-k)a}) + \frac{2m}{\hbar^2} V_0 (e^{ika} - e^{-ika}) e^{iqa} \quad (421)$$

Multipliziere mit e^{-iqa} , dividiere durch $-4ik$, ...

$$\cos(qa) = \cos(ka) - \frac{amV_0}{\hbar^2} \frac{\sin(ka)}{ka} =: f(ka) \quad (422)$$

- Beachte: Linke Seite hat Werte in $[-1, 1]$
Ergo: Gleichung hat nur eine Lösung, wenn $f(ka)$ auch im Bereich $[-1, 1]$ liegt.
- Erinnere $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$
Betrachte $E < 0$, gebundene Zustände

$$k = i\beta, \quad \beta = \sqrt{2m|E|/\hbar^2} \in \mathbb{R}_+ \quad (423)$$

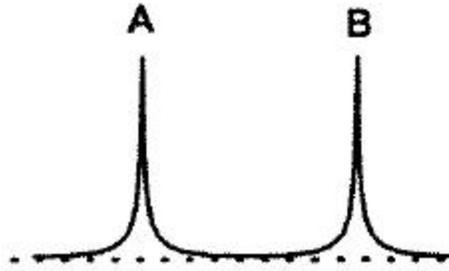


Abbildung 4.9: Gebundene Zustände

Mit $\sin(i\gamma) = i \sinh \gamma$, $\cos(i\gamma) = \cosh \gamma$, folgt

$$f(i\beta a) = \cosh(\beta a) - \frac{amV_0}{\hbar^2} \frac{\sinh(\beta a)}{\beta a} \quad (424)$$

monoton wachsende Funktion, die bei $\beta_0 a$ grösser als 1 wird.

Damit

$$|E| = \beta^2 \frac{\hbar^2}{2m} < \beta_0^2 \frac{\hbar^2}{2m} = E_{\min} \quad (425)$$

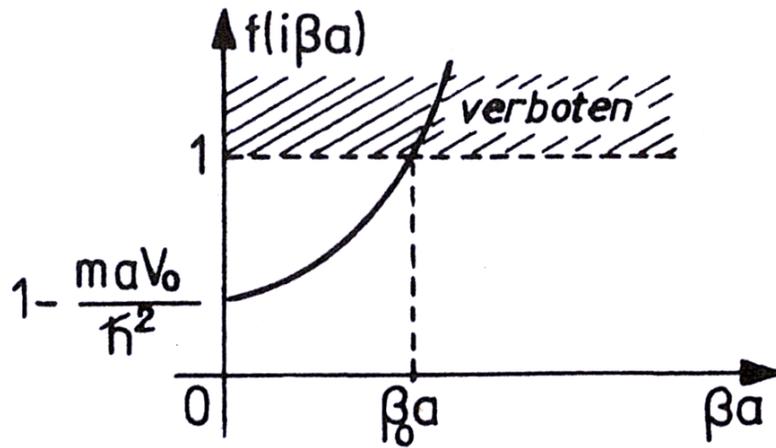


Abbildung 4.10

Es sind keine beliebig tiefen Energien erlaubt

- Betrachte $E > 0$

$f(ka)$, Eins-Stellen liegen bei $ka = x$ mit

$$\cos x - \frac{amV_0}{\hbar^2} \frac{\sin x}{x} = 1 \quad (426)$$

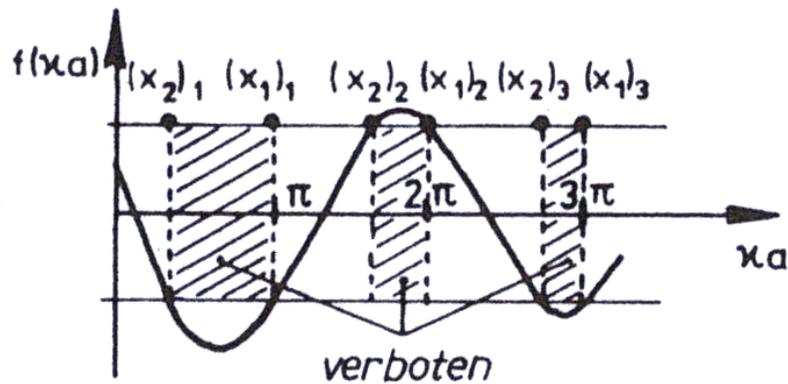


Abbildung 4.11: für $f(ka)$

Es entstehen Energiebänder

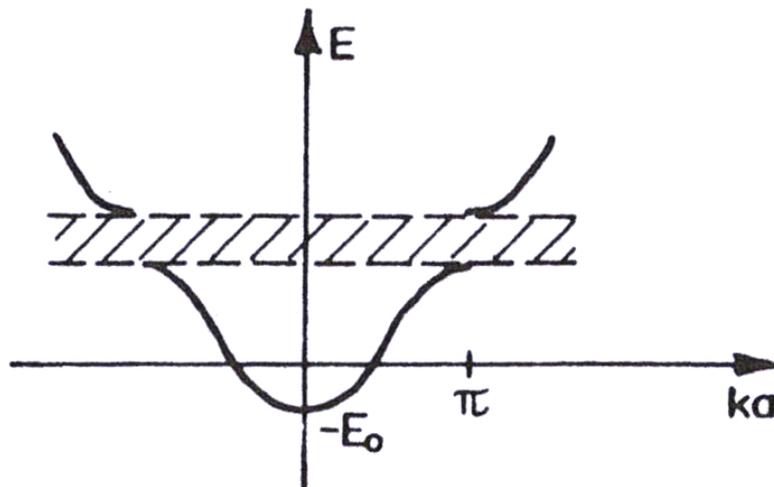


Abbildung 4.12: für $E(ka)$

Energiebänder spielen zentrale Rolle in der Festkörperphysik, Stichworte: Leitungsband, Valenzband

Übung: Kronig-Penney Modell mit periodischem Kastenpotential

Lessons learned:

- Quantenmechanische Dispersion: freie Wellenpakete zerfließen
- Tunneleffekt als Wellenphänomen
- Diskrete Energien im Potentialtopf und beim harmonischen Oszillator
- Jeweils Nullpunktenergien in Übereinstimmung mit der Unschärferelation
- Harmonischer Oszillator: (Nicht-hermitesche) Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren werden wichtig in Quantenfeldtheorie
- Harmonischer Oszillator: Kohärente Zustände, Ehrenfest-Theorem und klassischer Grenzfall
- Periodische Potentiale: Energiebänder in der Festkörperphysik

5 Drehimpuls

- In ≥ 2 Dimensionen zusätzlich zu Translation auch Rotation. Speziell wichtig für Atomphysik.
- Klassischer Drehimpuls

$$\vec{L} = m\vec{r} \times \vec{v} = \vec{r} \times \vec{p} \quad (427)$$

- Rotation in x - y -Ebene

$$L_z = xp_y - yp_x \quad (428)$$

5.1 Der quantenmechanische Drehimpuls

Betrachte L_z

- Korrespondenz-Prinzip: Ersetze die klassischen Impulse durch die entsprechenden Operatoren

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \quad (429)$$

- Damit Operator \hat{L}_z

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad (430)$$

- Rotation um beliebige Achse: $\hat{\vec{L}} = (\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z)^T$ mit

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \quad \hat{L}_y = \frac{\hbar}{i} \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad (431)$$

Erinnere Kap. 4.5: Impulsoperator war Erzeugende der Translation

- Betrachte Drehung um x -Achse um Winkel α

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \alpha & -\sin \alpha \\ 0 & \sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \quad (432)$$

Für infinitesimalen Winkel $\alpha = \epsilon$, nur sin-Terme tragen bei, folgt

$$x' = x, \quad y' = y - \epsilon z, \quad z' = z + \epsilon y \quad (433)$$

- Für Funktion $\psi(x, y, z)$ folgt:

$$\begin{aligned} \psi(x', y', z') &= \psi(x, y - \epsilon z, z + \epsilon y) \\ &= \left(1 - \epsilon z \frac{\partial}{\partial y} + \epsilon y \frac{\partial}{\partial z} \right) \psi(x, y, z) \\ &= \left(1 + \frac{i\epsilon}{\hbar} L_x \right) \psi(x, y, z) \end{aligned}$$

Der Drehimpuls-Operator ist Erzeuger der Drehung

- Endliche Drehung $R(\alpha)$

$$R(\alpha) = \exp\left(\frac{i\alpha}{\hbar} L_x\right) \quad (434)$$

Kommutatoren

- Kommutator $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = \hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x$

$$\begin{aligned} \hat{L}_x \hat{L}_y &= -\hbar^2 \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ &= -\hbar^2 \left(y \underbrace{\frac{\partial}{\partial z} z}_{=1+z\frac{\partial}{\partial z}} \frac{\partial}{\partial x} - y \frac{\partial}{\partial z} x \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} z \frac{\partial}{\partial x} + z \frac{\partial}{\partial y} x \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ &= -\hbar^2 \left(y \frac{\partial}{\partial x} + yz \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial}{\partial x} - yx \frac{\partial^2}{\partial z^2} - z^2 \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x} + zx \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial z} \right) \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} \hat{L}_y \hat{L}_x &= -\hbar^2 \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ &= -\hbar^2 \left(zy \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial z} - z^2 \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} - xy \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \underline{x \frac{\partial}{\partial y}} + xz \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial}{\partial y} \right) \end{aligned}$$

- Damit Kommutator

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= \hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x \\ &= -\hbar^2 \left(y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) = i\hbar \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = i\hbar \hat{L}_z \end{aligned}$$

Wie in der Klassischen Mechanik: Drehungen um verschiedene Achsen vertauschen nicht

- Merke:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z \quad (435)$$

Entsprechend

$$\begin{aligned} [\hat{L}_y, \hat{L}_z] &= i\hbar \hat{L}_x \\ [\hat{L}_z, \hat{L}_x] &= i\hbar \hat{L}_y \end{aligned}$$

Dies impliziert Unschärferelationen

- Da die \hat{L}_i nicht kommutieren, kann immer nur eine Komponente des Drehimpulses scharf gemessen werden.

Betrachte Quadrat des Drehimpulsoperators \hat{L}^2

- \hat{L}^2 :

$$\hat{L}^2 = \vec{\hat{L}} \cdot \vec{\hat{L}} = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \quad (436)$$

- Es gilt

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_x] = [\hat{L}^2, \hat{L}_y] = [\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0 \quad (437)$$

- \hat{L}^2 und \hat{L}_i kommutieren. Daher können \hat{L}^2 und einer der \hat{L}_i s simultan diagonalisiert und ohne Unschärfe gemessen werden.
- Alle Kommutator-Relationen gelten auch für den Spin von Elementarteilchen, siehe Kap. 8

Kugel- und Zylinder-Koordinaten

1/2
8. Wo.

- Azimutwinkel ϕ : $0 \leq \phi \leq 2\pi$
- Polarwinkel θ : $0 \leq \theta \leq \pi$
- Radius r : $\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$

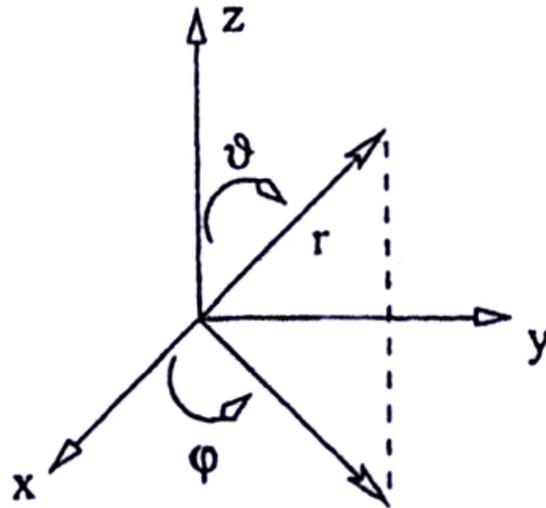


Abbildung 5.1

- Kugelkoordinaten:

$$x = r \sin \theta \cos \phi$$

$$y = r \sin \theta \sin \phi$$

$$z = r \cos \theta$$

- Zylinderkoordinaten in x - y -Ebene

$$x = r \cos \phi$$

$$y = r \sin \phi$$

$$z = z$$

mit $r = \sqrt{x^2 + y^2}$

Berechnung von \hat{L}_z in Zylinderkoordinaten

- Ausgangspunkt: \hat{L}_z in kartesischen Koordinaten

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad (438)$$

- Für Funktion $f(x, y) = f(x(\phi), y(\phi))$ gilt

$$\frac{df}{d\phi} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \phi} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \phi} \quad (439)$$

- Mit

$$\begin{aligned} \frac{\partial x}{\partial \phi} &= -r \sin \phi = -y \\ \frac{\partial y}{\partial \phi} &= r \cos \phi = x \end{aligned}$$

folgt

$$\frac{\partial f}{\partial \phi} = -y \frac{\partial f}{\partial x} + x \frac{\partial f}{\partial y} \quad (440)$$

und damit

$$\frac{\partial}{\partial \phi} = x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \quad (441)$$

Folglich, \hat{L}_z in Zylinder- (und Kugel-) Koordinaten:

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (442)$$

- Übung: Zeige, dass in Kugelkoordinaten gilt:

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \quad (443)$$

Übung: Auf Grund von welchem mathematisch-intuitiven Argument kommutieren \hat{L}^2 und \hat{L}_z ?

5.2 Eigenfunktionen von \hat{L}_z

Betrachte Eigenwert-Gleichung von \hat{L}_z

- Beispiel für Quantisierung

$$\hat{L}_z \psi(\phi) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \psi(\phi) = \lambda \psi(\phi) \quad (444)$$

- Lösung durch Hingucken

$$\psi(\phi) = A e^{\frac{i}{\hbar} \lambda \phi} \quad (445)$$

- Es muss gelten

$$\psi(\phi + 2\pi) = e^{\frac{i}{\hbar} \lambda 2\pi} \psi(\phi) = \psi(\phi) \quad (446)$$

Dies führt zur Quantisierung:

$$e^{\frac{i}{\hbar} \lambda 2\pi} = 1 = e^{i 2\pi m} \rightarrow \frac{i}{\hbar} \lambda 2\pi = i 2\pi m, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (447)$$

- Damit Eigenwerte λ und Eigenfunktionen ψ_m von \hat{L}_z

$$\begin{aligned} \lambda &= m\hbar, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \\ \psi_m(\phi) &= A_m e^{im\phi} \end{aligned}$$

Energie der zweidimensionalen Bewegung

- Klassische Formel der Rotationsenergie in der x - y -Ebene

$$H = \frac{L_z^2}{2mr^2} = \frac{1}{2I} L_z^2, \quad I = mr^2 \text{ das Trägheitsmoment} \quad (448)$$

Siehe Analogie zur freien Bewegung: $E = \frac{p^2}{2m}$

- Quantenmechanisch:

$$\hat{H} = \frac{1}{2I} \hat{L}_z^2 \quad (449)$$

- Eigenwertgleichung:

$$\frac{1}{2I} \hat{L}_z^2 \psi = E \psi \quad (450)$$

Aus

$$\hat{L}_z \psi = m\hbar \psi \quad (451)$$

folgt

$$\hat{L}_z^2 \psi = m^2 \hbar^2 \psi \quad (452)$$

- Ergo: Die Eigenfunktionen $\psi(\phi)$ von \hat{L}_z sind auch Eigenfunktionen von \hat{H} mit den Eigenwerten

$$E_m = \frac{\hbar^2}{2I} m^2 \quad (453)$$

Merke:

- Drehimpuls-Eigenfunktionen sind auch Energie-Eigenfunktionen
- Zustände mit $m \neq 0$ sind zweifach entartet, die beiden Eigenfunktionen entsprechen den entgegengesetzten Drehsinnen
- Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Drehimpulseigenzustand ist $|\psi_m(\phi)|^2 = |A_m|^2$, damit unabhängig von $\phi \implies$ Kenntnis von Drehimpuls schließt Kenntnis des Winkels aus.

- Unschärferelation

Winkeloperator $\hat{\Phi}$

$$\hat{\Phi} \psi(\phi) = \phi \psi(\phi) \quad (454)$$

Damit Kommutator

$$[\hat{\Phi}, \hat{L}] = i\hbar \quad (455)$$

und Unschärferelation

5.3 Eigenfunktionen von \hat{L}^2

- Die Eigenwert-Gleichung des Operators \hat{L}^2 ergibt:

$$\hat{L}^2 Y_{lm}(\theta, \phi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \phi), \quad l \geq 0 \quad (456)$$

mit

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \quad (457)$$

- Ergebnis

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \left(\frac{2l+1}{4\pi} \frac{l-|m|!}{l+|m|!} \right)^{1/2} P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\phi}$$

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x)$$

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2-1)^l$$

mit

$$l = 0, 1, 2, \dots \quad \text{Drehimpulsquantenzahl}$$

$$m = -l, \dots, 0, \dots, l \quad \text{magnetische Quantenzahl}$$

und

- $Y_{lm}(\theta, \phi)$: Kugelflächenfunktionen
- $P_l^m(x)$: Legendre-Funktionen
- $P_l(x)$: Legendre-Polynome
- Übung zu Legendre-Polynomen

- Es gilt

$$Y_{l,-m}(\theta, \phi) = Y_{lm}^*(\theta, \phi) \quad (458)$$

und

$$\hat{L}_z Y_{lm}(\theta, \phi) = m\hbar Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (459)$$

Y_{lm} sind Eigenfunktionen von \hat{L}_z und \hat{L}^2 . Das geht & muss so sein, da \hat{L}_z und \hat{L}^2 kommutieren.

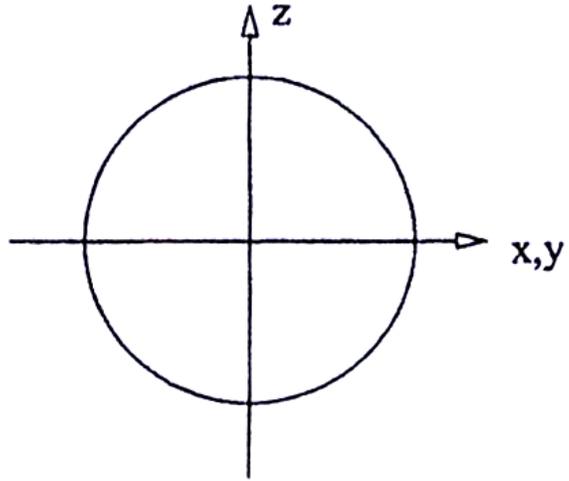


Abbildung 5.3

- $l = 1, m = 0$ liefert $Y_{10} = \sqrt{3/4\pi} \cos \theta$
Das p_z -Orbital

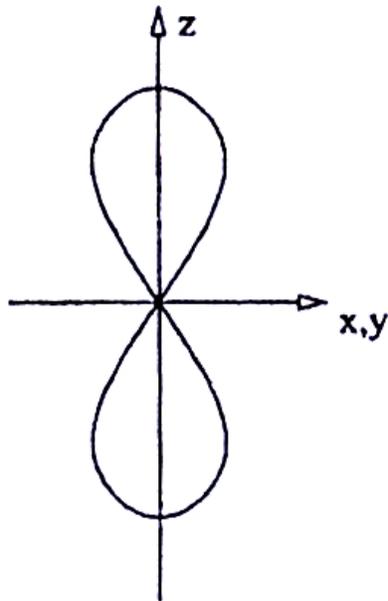


Abbildung 5.4

- $l = 1, m = \pm 1$ liefert $Y_{1,\pm 1} = -\sqrt{3/8\pi} \sin \theta e^{\pm i\phi}$

Durch Linearkombination zu reellen Orbitalen

$$-\frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{11} + Y_{1,-1}) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \theta \cos \phi \quad p_x - \text{Orbital}$$

$$-\frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{11} - Y_{1,-1}) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \theta \sin \phi \quad p_y - \text{Orbital}$$

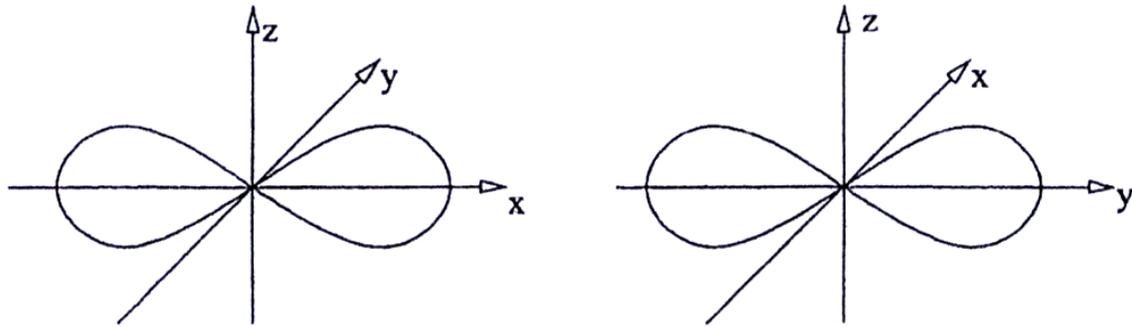


Abbildung 5.5

Energie der drei-dimensionalen Rotation

- Klassisch

$$H = \frac{1}{2mr^2} L^2 = \frac{1}{2I} L^2 \quad (462)$$

Ergibt quantenmechanisch

$$\hat{H} = \frac{1}{2I} \hat{L}^2 \quad (463)$$

- Eigenfunktionen Y_{lm} sind also auch Eigenfunktionen der Schrödinger-Gleichung für die drei-dimensionale Rotation

$$\hat{H}Y_{lm} = \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1)Y_{lm} \quad (464)$$

Die Energieeigenwerte

$$E_l = \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1) \quad (465)$$

hängen nicht von m ab, sind damit unabhängig von Orientierung von \vec{L} zur z -Achse

- Wegen $m = -l, \dots, 0, \dots, l$ gibt es zu jedem Eigenwert $2l + 1$ Eigenfunktionen, E_l ist $2(l + 1)$ -fach entartet

Rotationsspektroskopie

- Durch elektromagnetische Strahlung der Energie $\hbar\omega$, Bereich Mikrowellen, können Übergänge zwischen benachbarten Rotationsniveaus eines Moleküls induziert werden

$$\hbar\omega = E_{l+1} - E_l = \frac{\hbar^2}{2I}(l+1)(l+2) - \frac{\hbar^2}{2I}l(l+1) = \frac{\hbar^2}{I}(l+1), \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (466)$$

Absorptionsspektroskopie: Aus einer Richtung kommend, in alle Richtungen abstrahlen

- Rotationspektrum weist äquidistante Linien bei

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2}{I}, 2\frac{\hbar^2}{I}, 3\frac{\hbar^2}{I}, \dots \quad (467)$$

auf

Damit läßt sich Trägheitsmoment eines Moleküls bestimmen

8. Woche
Kurz Klausur

5.4 Eigenwerte von Drehimpulsoperatoren

Die Bedingungen für die Quantenzahlen l und m

$$l = 0, 1, 2, \dots, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (468)$$

ergaben sich oben als Lösung der Eigenwert-Gleichung für L^2

Hier: Rein algebraische Ermittlung von möglichen Eigenwerten, d.h. vergiss alles außer

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z \text{ und zyklisch, } [L^2, L_i] = 0 \quad (469)$$

- Definiere die nicht-hermitschen Operatoren

$$L_{\pm} = L_x \pm iL_y \quad (470)$$

Diese haben folgende Eigenschaften

$$(L_{\pm})^{\dagger} = L_{\mp} \quad (471)$$

$$[L_z, L_{\pm}] = i\hbar L_y \pm \hbar L_x = \pm \hbar L_{\pm} \quad (472)$$

$$[L_+, L_-] = -2i[L_x, L_y] = 2\hbar L_z \quad (473)$$

$$[L^2, L_{\pm}] = 0 \quad (473)$$

$$L^2 = L_+L_- - \hbar L_z + L_z^2 = L_-L_+ + \hbar L_z + L_z^2 \quad (474)$$

Beweise als Übung

- Es sei ψ_{l_z} Eigenfunktion von L_z

$$L_z\psi_{l_z} = l_z\psi_{l_z} \quad (475)$$

Mit Gl. (472) folgt

$$L_zL_{\pm}\psi_{l_z} = L_{\pm}L_z\psi_{l_z} \pm \hbar L_{\pm}\psi_{l_z} \quad (476)$$

oder

$$L_z(L_{\pm}\psi_{l_z}) = (l_z \pm \hbar)L_{\pm}\psi_{l_z} \quad (477)$$

- Interpretation:
 - Ist ψ_{l_z} Eigenfunktion zu L_z mit Eigenwert l_z , dann ist $L_{\pm}\psi_{l_z}$ Eigenfunktion zu L_z mit Eigenwert $l_z \pm \hbar$
 - L_{\pm} erhöht/erniedrigt Eigenwert l_z um \hbar
 - Beachte Analogie zu Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren a^{\dagger} und a
- Bezeichne Eigenfunktionen von L^2 und L_z als ψ_{lm} und repräsentiere Eigenwertgleichungen als

$$L^2\psi_{lm} = \hbar^2l(l+1)\psi_{lm}, \quad l \in \mathbb{R}_0^+$$

$$L_z\psi_{lm} = \hbar m\psi_{lm}, \quad m \in \mathbb{R}$$

Offensichtlich lässt sich jeder der Eigenwerte des positiv semidefiniten Operators L^2 und des Operators L_z so darstellen. Beachte: Wegen $l \in \mathbb{R}_+$ und $m \in \mathbb{R}$ ist dies allgemeinsten Ansatz, wir hätten auch

$$\begin{aligned} L^2\psi_{lm} &= \lambda_1 \psi_{lm}, & \lambda_1 &\in \mathbb{R}_0^+ \\ L_z\psi_{lm} &= \lambda_2 \psi_{lm}, & \lambda_2 &\in \mathbb{R} \end{aligned}$$

schreiben können

- Wir wissen bereits:

$$L_{\pm} \psi_{lm} \propto \psi_{l,m\pm 1} \quad (478)$$

- Mit Gl. (473)

$$[L^2, L_{\pm}] = 0$$

folgt

$$L^2(L_{\pm}\psi_{lm}) = L_{\pm}L^2\psi_{lm} = \hbar^2 l(l+1)(L_{\pm}\psi_{lm}) \quad (479)$$

Ergo: $L_{\pm}\psi_{lm}$ ist Eigenfunktion von L^2 zum gleichen Eigenwert wie ψ_{lm}

- Betrachte die Norm von $L_{\pm}\psi_{lm}$, verwende Gln. (471, 474)

$$\begin{aligned} (L_{\pm})^{\dagger} &= L_{\mp} \\ L^2 &= L_+L_- - \hbar L_z + L_z^2 = L_-L_+ + \hbar L_z + L_z^2 \\ L_+L_- &= L^2 - L_z^2 + \hbar L_z \\ L_-L_+ &= L^2 - L_z^2 - \hbar L_z \end{aligned}$$

ψ_{lm} sei normiert

$$\begin{aligned} \langle L_{\pm}\psi_{lm} | L_{\pm}\psi_{lm} \rangle &= \langle \psi_{lm} | L_{\mp} L_{\pm} \psi_{lm} \rangle \\ &= \langle \psi_{lm} | (L^2 - L_z^2 \mp \hbar L_z) \psi_{lm} \rangle \\ &= \hbar^2 (l(l+1) - m^2 \mp m) \end{aligned}$$

Da Norm nicht negativ, gilt

$$\langle L_{\pm}\psi_{lm} | L_{\pm}\psi_{lm} \rangle = \hbar^2 (l(l+1) - m(m \pm 1)) \geq 0 \quad (480)$$

Daher gilt:

$$\begin{aligned}
 \text{für } m > 0 & : l(l+1) \geq m(m+1) \\
 \text{für } m < 0 & : l(l+1) \geq m(m-1) = (-m)(-m+1) = |m|(|m|+1) \\
 m = -3 & : -3(-3-1) = 3(3+1) = |-3|(|-3|+1) = 12 \quad : -)
 \end{aligned}$$

Zusammen

$$l(l+1) \geq |m|(|m|+1) \quad \text{und damit} \quad |m| \leq l \quad (481)$$

- Sei nun l fester Wert und M das maximale zugehörige $m \leq l$

Damit $L_+\psi_{lM}$ nicht Eigenfunktion mit größerem Eigenwert $M+1$ ist, muss gelten

$$L_+\psi_{lM} = 0 \quad (482)$$

Aus Normierungsgleichung (480) folgt sofort

$$l(l+1) = M(M+1) \quad \text{und damit} \quad M = l \quad (483)$$

- Analog: Sei μ minimales m

Damit $L_-\psi_{l\mu}$ nicht Eigenfunktion mit kleinerem Eigenwert $\mu-1$ sein kann, muss $L_-\psi_{l\mu} = 0$ gelten und damit $\mu = -l$.

- Nun lassen sich rekursiv alle Werte von m gewinnen

$$L_-\psi_u \propto \psi_{l,l-1}, \quad (L_-)^2\psi_u \propto L_-\psi_{l,l-1} \propto \psi_{l,l-2}, \quad \dots \quad (484)$$

Damit dies am Ende auf $-l$ führt, muss $l-k = -l$, wobei k eine natürliche Zahl ist

Daraus folgt:

$$l = \frac{k}{2}, \quad k \in \mathbb{N} \quad (485)$$

- Knaller 1: Allein aus der algebraischen Struktur der Vertauschungsrelationen für den Drehimpuls folgt für das Eigenwertspektrum, dass es nur zwei Möglichkeiten gibt:

$$\text{Entweder } : l = 0, 1, 2, 3, \dots \quad \text{oder} \quad l = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots \quad (486)$$

mit den zugehörigen Werten für m in ganzzahligen Schritten

$$m = l, l - 1, \dots, -l + 1, -l \quad (487)$$

- Knaller II: Ganzzahlige Drehimpulse von Natur bei Bahndrehimpuls genutzt. Frage: Halbzahlige Drehimpulse auch genutzt ? Ja, beim Spin, Kap. 8.

Lessons learned:

- Drehimpuls-Operator ist infinitesimale Erzeugende der Drehung
- $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$ und zyklisch
- $[L_i, L^2] = 0$, simultan diagonalisierbar, gleichzeitig scharf messbar, gleiche Eigenfunktionen
- Drehimpulswerte können nur ganz- oder halbzahlig sein
- Bahndrehimpuls realisiert ganzzahlige Drehimpulswerte
- Spin die halbzahligen

15 25

6 Wasserstoffatom

6.1 Hamiltonian

- Vom Zweikörper-Problem zum Einkörper-Problem
 - Schwerpunkts- und Relativbewegung separieren
 - Reduzierte Masse, im wesentlichen unverändert
- Klassischer Hamiltonian

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \quad (488)$$

Quantenmechanisch:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \quad (489)$$

- Da V nur vom Radius $|r|$ abhängt, V ist Zentralfeld, gehe in Kugelkoordinaten:

$$\begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \phi \\ y &= r \sin \theta \sin \phi \\ z &= r \cos \theta \end{aligned}$$

Damit

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \quad (490)$$

- Operator für kinetische Energie \hat{T} in Kugelkoordinaten:

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \right)^2 - \frac{\hbar^2}{2mr^2} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \quad (491)$$

Merke: In Kugelkoordinaten ist Berechnung des Potentials einfacher, Berechnung der kinetischen Energie aber schwieriger.

- Mit

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \quad (492)$$

folgt

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \right)^2 + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} = \hat{T}_r + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} \quad (493)$$

T_r : Kinetische Energie der Radialbewegung

$\frac{\hat{L}^2}{2mr^2}$: Kinetische Energie der Winkelbewegung, erinnere Zentrifugalbarriere

- Somit der allgemeine Hamilton-Operator für Zentralpotentiale

$$\hat{H} = \hat{T}_r + V(r) + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} \quad (494)$$

Hier

$$\hat{H} = \hat{T}_r - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} \quad (495)$$

Übung: $SO(4)$ - Symmetrie

6.2 Lösung der Schrödinger-Gleichung

- Löse

$$\hat{H}\psi(r, \theta, \phi) = E\psi(r, \theta, \phi) \quad (496)$$

Eigenfunktionen von Term $\frac{\hat{L}^2}{2mr^2}$ bekannt: Kugelflächenfunktionen Y_{lm}

- Separationsansatz

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (497)$$

Damit

$$\left(T_r + V(r) + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} \right) R(r)Y_{lm}(\theta, \phi) = ER(r)Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (498)$$

- Mit

$$\frac{\hat{L}^2}{2mr^2} R(r)Y_{lm}(\theta, \phi) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} R(r)Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (499)$$

folgt

$$\left(T_r + V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right) R(r)Y_{lm}(\theta, \phi) = ER(r)Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (500)$$

Teile durch $Y_{lm}(\theta, \phi)$, ergibt Radialgleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \right)^2 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right) R(r) = ER(r) \quad (501)$$

eine gewöhnliche Differentialgleichung 2. Ordnung

- Transformation:

$$R(r) = \frac{u(r)}{r} \quad (502)$$

ergibt

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \right)^2 \frac{u(r)}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \frac{u(r)}{r} + V(r) \frac{u(r)}{r} = E \frac{u(r)}{r} \quad (503)$$

Mit

$$\left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r\right)^2 \frac{u(r)}{r} = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} u(r) \quad (504)$$

folgt

$$\frac{1}{r} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right) u(r) = E \frac{u(r)}{r}, \quad \frac{1}{r} \text{ raus} \quad (505)$$

und damit die übliche Form der eindimensionalen Schrödinger-Gleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + V_{\text{eff}}(r) \right) u(r) = E u(r) \quad (506)$$

mit dem effektiven Potential der Radialbewegung

$$V_{\text{eff}}(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m} \frac{1}{r^2} \quad (507)$$

ganz in Analogie zur Klassischen Mechanik mit abstoßendem Zentrifugalterm

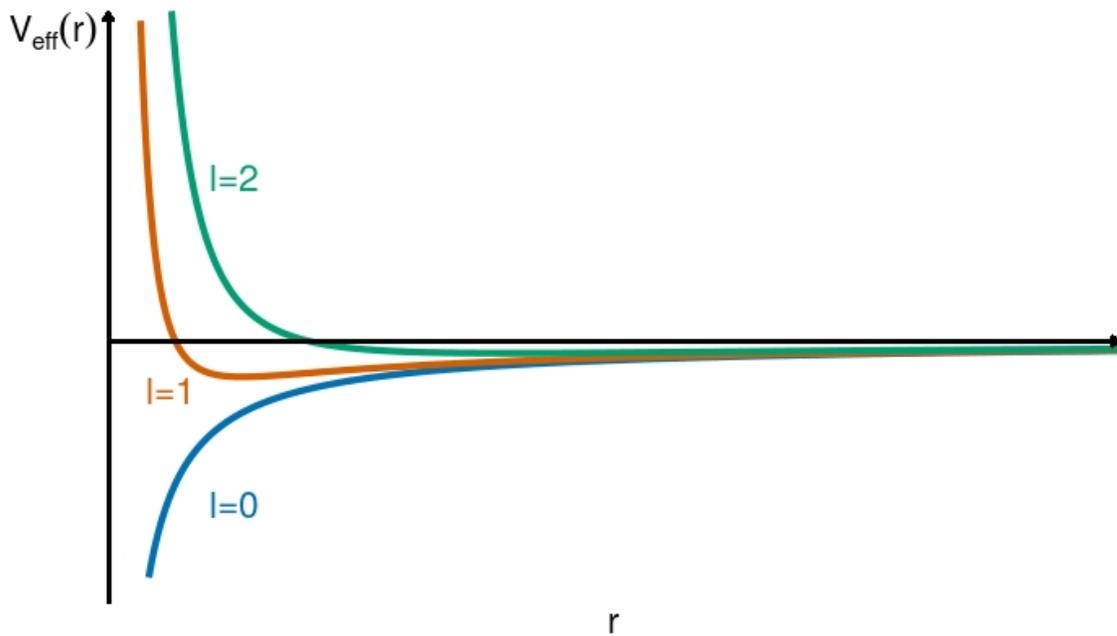


Abbildung 6.1

- Randbedingungen

- Fall $r \rightarrow \infty$

Aus Normierbarkeit

$$\begin{aligned} \int d^3x |\psi(x)|^2 &= \int d\theta d\phi dr \sin\theta r^2 |R(r)Y_{lm}(\theta, \phi)|^2 \\ &\propto \int_0^\infty dr r^2 \frac{1}{r^2} |u(r)|^2 < \infty \end{aligned}$$

folgt

$$\lim_{r \rightarrow \infty} |u(r)| \leq \frac{a}{r^{1/2+\epsilon}} \quad \text{mit } \epsilon > 0 \quad (508)$$

$u(r)$ muss stärker abfallen als $\frac{1}{\sqrt{r}}$

- Fall $r = 0$

Für $V(r) \neq \delta(r)$ gilt $u(0) = 0$, denn sonst

$$\Delta\psi(0) = \Delta|_{r=0} \frac{u(r)}{r} = \delta(x)u(0) \quad (509)$$

Diese führen ganz analog zum Harmonischen Oszillator wieder zur Quantisierung, Radial- oder Hauptquantenzahl

1/2
9. Wo-
che

- Schema der Lösung

- Grenzfall $r \rightarrow 0$: Gl. (505)

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) u(r) = E u(r)$$

geht für $l \neq 0$ über in

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right) u(r) = E u(r) \quad (510)$$

Lösung

$$u(r) = Ar^{l+1} + Br^{-l} \quad (511)$$

B-Term wegen Randbedingung raus

Ansatz

$$u(r) = r^{l+1}(a_0 + a_1 r + \dots) \quad (512)$$

– Grenzfall $r \rightarrow \infty$: Gl. (505) geht über in

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} u(r) = E u(r) \quad (513)$$

Lösung

$$u(r) = C e^{-gr} \quad (514)$$

– Vereinigter Ansatz

$$u(r) = r^{l+1} e^{-gr} w(r) \quad (515)$$

Jetzt ganz analog zum harmonischen Oszillator:

- Einsetzen in Gl. (505) gibt Differentialgleichung für $w(r)$
- Potenzreihenansatz $w(r) = \sum_i a_i r^i$
- Eingesetzt: Rekursionsgleichung für Koeffizienten
- Divergierende Lösung: Reihe muss abbrechen
- Quantisierungsbedingung

- Energieeigenwerte:

$$E_n = -\text{Ry} \frac{1}{n^2}, \quad \text{mit Rydberg-Konstante Ry} = \frac{\mu e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} = 13.67 \text{eV}, \quad \mu = \frac{m_p m_e}{m_p + m_e} \quad (516)$$

Kugelsymmetrie: Energieeigenwerte unabhängig von m

$SO(4)$ Symmetrie des $\frac{1}{r}$ -Potentials Energieeigenwerte auch unabhängig von l

Beweis als Übung

- Eigenfunktionen

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = A_{nl} R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (517)$$

Normierungsfaktor A_{nl}

$$A_{nl} = \left(\frac{(n-l-1)! \alpha_n^3}{2n((n+l)!)^3} \right) \quad \alpha_n = \frac{2}{na_0} \quad (518)$$

mit Bohr'schem Atomradius a_0

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} = 5.2917 \cdot 10^{-11} \text{m} \approx 0.5 \text{\AA} \quad (519)$$

Radial-Wellenfunktionen, erinnere Ansatz Gl. (515)

$$R_{nl} = (\alpha_n r)^l e^{-\alpha_n r/2} L_{n-l}^{2l+1}(\alpha_n r) \quad (520)$$

mit den Laguerre-Polynomen

$$L_m^s(x) = \sum_{k=0}^{m-s} (-1)^{k+s} \frac{(m!)^2}{k!(k+s)(m-k-s)} x^k \quad (521)$$

- Struktur der Radial-Wellenfunktionen: $R_{nl}(r) \propto e^{-r} \cdot \text{Polynom}(r)$ mit $n-l-1$ Nullstellen

Radiale Wahrscheinlichkeitsdichte: $r^2 R_{nl}^2(r)$

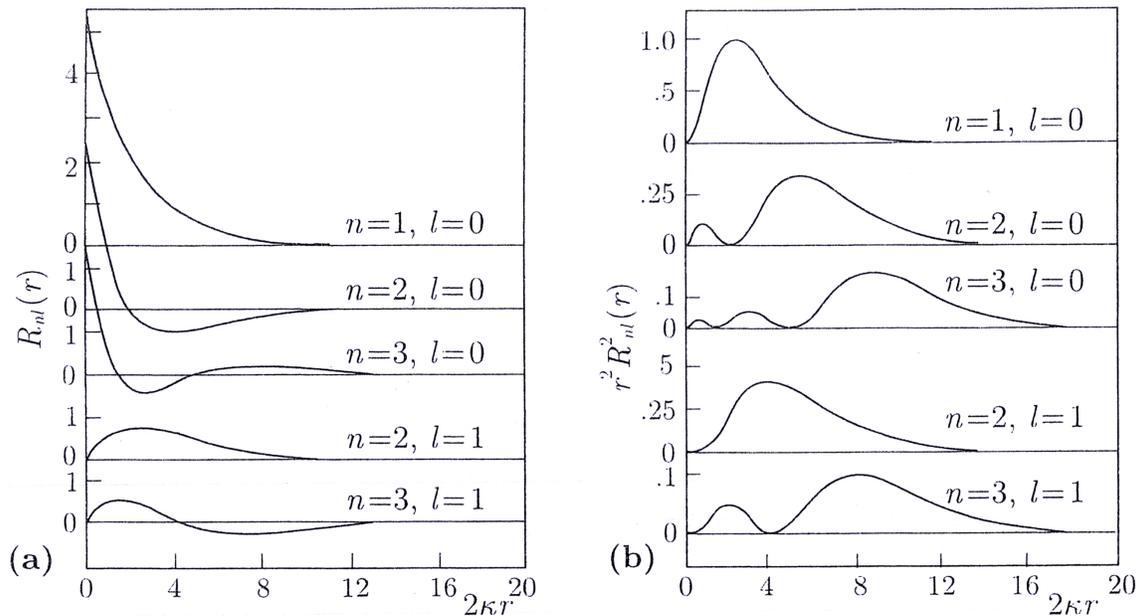


Abbildung 6.2

- Man zeigt leicht

$$\langle r \rangle \propto n^2, \quad \text{für große } n \quad (522)$$

- Konvention: Eigenfunktionen zu $l = 0, 1, 2, 3$ werden als s-, p-, d- und f-Orbitale bezeichnet

- Aus Normierungsfaktor A_{nl} , Gl. (518)

$$A_{nl} = \left(\frac{(n-l-1)! \alpha_n^3}{2n((n+l)!)^3} \right) \quad \alpha_n = \frac{2}{na_0}$$

folgt, beachte: $0! = 1$

$$n-l-1 \geq 0, \quad \text{resp. } l \leq n-1 \quad (523)$$

Damit ergibt sich für die Quantenzahlen

n	l	m	Entartungsgrad	
1	0	0	1	
2	0	0	4-fach	
		1		0, ±1
		0		0
3	1	0, ±1	9-fach	
		2		0, ±1, ±2
4	16-fach	

Für den Entartungsgrad g_n gilt:

$$g_n = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2 \quad (524)$$

16 25

Spektroskopie am Wasserstoffatom

- Spektroskopie misst Energiedifferenzen zwischen Zuständen

$$E_{\text{Photon}} = \hbar\omega = \Delta E_{\text{Atom}} = E_i - E_f \quad (525)$$

folgt

$$\hbar\omega = \text{Ry} \left(-\frac{1}{n_i^2} + \frac{1}{n_f^2} \right) \quad (526)$$

- Wichtigste Fälle

$n_f = 1$	$n_i = 2, 3, \dots$	Lyman-Serie	im UV
$n_f = 2$	$n_i = 3, 4, \dots$	Balmer-Serie	im Sichtbaren
$n_f = 3$	$n_i = 4, 5, \dots$	Paschen-Serie	im Infrarot

Die Serien waren lange vor der Quantenmechanik experimentell bekannt

Abschlußbemerkungen:

- Dass es drei Quantenzahlen gibt, sollte nicht überraschen, da es sich um ein drei-dimensionales Problem handelt
- Wie gehabt: Minimale Grundzustandsenergie mit Unschärferelation verträgliche Energie
- Klassischer Grenzfall: Es lassen sich kohärente Wellenpakete konstruieren, die lokalisiert sind und dem 3. Kepler'schen Gesetz $T^2 \propto r^3$ gehorchen
- Korrekturen

– Feinstrukturkonstante:

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137} \quad (527)$$

- Relativistische Korrekturen ergeben Feinstruktur, Stichworte: Relativistische kinetische Energie, Darwin-Term und Spin-Bahn-Kopplung. Effektgröße: α^2
- Quantenfeldtheorie: Lamb-Verschiebung. Effektgröße: $\alpha^3 \log \alpha$
- Wechselwirkung Elektron und Kernspin: Hyperfeinstruktur. Effektgröße: $m_e/m_K \approx 1/1500$

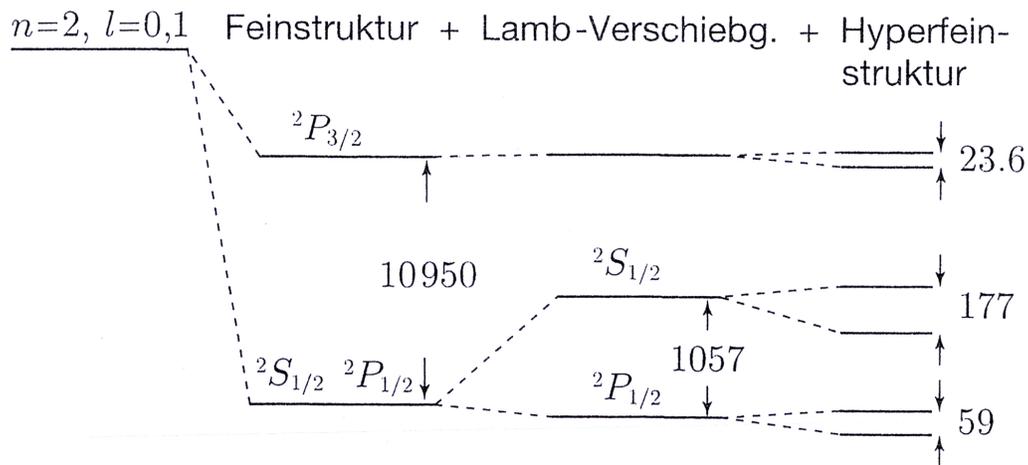


Abbildung 6.3

- Theorie und Experiment: Beliebig gute Übereinstimmung

Lessons learned:

- Separationsansatz nach Winkeln und Radius
- Winkelanteil aus \hat{L}^2 Eigenfunktionen
- Lösung Radialgleichung analog zum harmonischen Oszillator.
- Quantisierung der Hauptquantenzahl n aus Radialgleichung
- Hauptquantenzahlen sind entartet
- Entartungen werden durch relativistische, quantenfeldtheoretische und Kernspin-Effekte aufgehoben.

7 Bewegung im magnetischen Feld

Betrachte Teilchen mit Masse m und Ladung e im magnetischen Feld

7.1 Magnetismus, Zeeman-Effekt & Landau-Niveaus

7.1.1 Magnetismus

- Hamilton-Funktion

$$H = \frac{1}{2m} \left(p - \frac{e}{c} A \right)^2 \quad (528)$$

mit Vektorpotential A

- Erinnere Klassische Mechanik:

p ist der kanonische Impuls, $m\dot{x} = p - \frac{e}{c}A$ ist kinetischer Impuls

- Es gilt

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}, \quad [\hat{x}_i, \hat{x}_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 \quad (529)$$

$$[\hat{x}_i, m\hat{x}_j] = i\hbar\delta_{ij}, \quad [m\hat{x}_i, m\hat{x}_j] = i\hbar\frac{e}{c}\epsilon_{ijk}B_k \quad (530)$$

Das Nicht-kommutieren der kinetischen Impulse hat wichtige Konsequenzen

- Korrespondenz-Prinzip ergibt Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left(\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e}{c} A \right)^2 \right) \psi \quad (531)$$

Multipliziere Quadrat aus, verwende Coulomb-Eichung $\nabla A = 0$, ergibt

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + \frac{i\hbar e}{mc} A \nabla \psi + \frac{e^2}{2mc^2} A^2 \psi \quad (532)$$

- Wähle konstantes Magnetfeld $B \parallel e_z$

$$A = -\frac{1}{2} (x \times B) \quad (533)$$

Betrachte A abhängige Terme:

- 2. Term RHS

$$\begin{aligned} \frac{i\hbar e}{mc} A \cdot \nabla \psi &= -\frac{i\hbar e}{mc} \frac{1}{2} (x \times B) \cdot \nabla \psi \\ &= -\frac{i\hbar e}{2mc} (x \times \nabla) \cdot B \psi = -\frac{e}{2mc} L \cdot B \psi \end{aligned}$$

Dies liefert einen¹⁶ Beitrag zum Paramagnetismus, verstärkt äußeres Magnetfeld

- 3. Term RHS

$$\begin{aligned} \frac{e^2}{2mc^2} A^2 \psi &= \frac{e^2}{8mc^2} (x \times B)^2 \psi \\ &= \frac{e^2}{8mc^2} (\vec{x}^2 \vec{B}^2 - (\vec{x} \cdot \vec{B})^2) \psi, \quad B \parallel e_z \\ &= \frac{e^2 |B|^2}{8mc^2} (x^2 + y^2) \psi \end{aligned}$$

Diamagnetismus, schwächt äußeres Magnetfeld ab. Extremfall: Supraleiter

- Para- und Diamagnetismus sind reinst quantenmechanisches Phänomene.

¹⁶Spin fehlt, siehe Kap. 8

- Meistens : Paramagnetismus grösser als Diamagnetismus

Ausnahmen:

- Metallelektronen
- freie Elektronen
- Neutronensterne

7.1.2 Normaler Zeeman-Effekt

- Betrachte Wasserstoffatom in konstantem Magnetfeld
- Mit H_0 Hamilton-Operator H-Atom ohne Magnetfeld, A^2 Term vernachlässigt,

$$H = H_0 - \frac{e}{2mc}BL_z, \quad B \parallel e_z \quad (534)$$

- Wirkung auf ψ_{nlm_l} , m_l zur Unterscheidung von der Masse m

$$H\psi_{nlm_l} = \left(-\frac{Ry}{n^2} - \frac{e\hbar B}{2mc}m_l \right) \psi_{nlm_l} \quad (535)$$

da ψ_{nlm_l} auch Eigenfunktion von L_z mit Eigenwert $\hbar m_l$

- Damit

$$E_{nlm_l} = -\frac{Ry}{n^2} + \hbar\omega_L m_l \quad (536)$$

mit Larmor-Frequenz

$$\omega_L = -\frac{e\hbar B}{2mc} = \frac{e\hbar B}{2mc} \quad (537)$$

- Zeeman-Effekt:
 - Magnetfeld hebt die $(2l + 1)$ -fache Entartung der Energieniveaus auf
 - Die Größe der Aufspaltung ist unabhängig von l

Zur vollständigen Beschreibung muss noch der Spin berücksichtigt werden:
Anomaler Zeeman-Effekt

- Übung: Spin & B -Feld

7.1.3 Freie Elektronen im Magnetfeld

- Sei $B \parallel e_3$

Dann hat Vektorpotential nur Komponenten senkrecht zu e_3
 p_3 Anteil der kinetischen Energie unverändert

$$H = H_{\perp} + \frac{p_3^2}{2m} \quad (538)$$

In e_3 Richtung freie Bewegung

- Ausgedrückt durch kinetischen Impuls

$$H_{\perp} = \frac{m}{2}(\dot{x}_1^2 + \dot{x}_2^2) \quad (539)$$

Erinnere

$$[m\dot{x}_1, m\dot{x}_2] = i\hbar \frac{e}{c} B \quad (540)$$

- Skala rausnehmen

$$\pi_i = \frac{m\dot{x}_i}{\sqrt{eB/c}} \quad (541)$$

Damit $[\pi_1, \pi_2] = i\hbar$, wie bei Ort und Impuls, und Hamiltonoperator

$$H_{\perp} = \frac{1}{2} \frac{eB}{cm} (\pi_1^2 + \pi_2^2) \quad (542)$$

wie der des Harmonischen Oszillators.

- Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

$$a = \frac{1}{2\hbar}(\pi_2 + i\pi_1), \quad a^{\dagger} = \frac{1}{2\hbar}(\pi_2 - i\pi_1) \quad (543)$$

Damit

$$H_{\perp} = \hbar\omega_z \left(a^{\dagger} a + \frac{1}{2} \right) \quad (544)$$

mit Zyklotronfrequenz

$$\omega_z = \frac{eB}{cm} \quad (545)$$

- Energieeigenwerte:

$$E_n = \hbar\omega_z \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (546)$$

genannt Landau-Niveaus, wichtig in der Festkörperphysik

9. Woche

7.2 U(1) Eichsymmetrie & minimale Kopplung

Im folgenden $c = 1$

- Erinnere Elektrodynamik, Felder \vec{E}, \vec{B} und Potentiale \vec{A}, V

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}, \quad \vec{E} = -\nabla V - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \quad (547)$$

Es gilt Eichinvarianz: Transformation der Potentiale

$$\vec{A} \rightarrow \vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla}\chi(x, t), \quad V \rightarrow V' = V - \frac{\partial\chi(x, t)}{\partial t} \quad (548)$$

mit $\chi(\vec{x}, t)$ beliebige differenzierbare Funktion ändern \vec{E} and \vec{B} nicht

- Phase der Wellenfunktion ψ ist nicht beobachtbar
- $|\psi(x, t)|^2$ ändert sich nicht unter

$$\psi(x, t) \rightarrow e^{i\phi(x, t)} \psi(x, t) \quad (549)$$

$e^{i\phi(x, t)}$ ist lokale Eichsymmetrie beschrieben durch $U(1)$:

- lokal, weil von x und t abhängig
- Eichsymmetrie, weil sich nichts ändert, erinnere Noether-Theorem
- Drehung auf dem Kreis: $U(1)$: eindimensionale unitäre Gruppe
- eine Lie-Gruppe

- Betrachte ein-dimensionale freie Schrödinger-Gleichung

$$\hat{E}\psi(x, t) = \frac{1}{2m}\hat{p}^2\psi(x, t)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t) = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \psi(x, t)$$

und berechne

$$\frac{\partial}{\partial t} (e^{i\phi(x,t)}\psi(x, t)) = e^{i\phi(x,t)} \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) + i \frac{\partial \phi(x, t)}{\partial t} e^{i\phi(x,t)} \psi(x, t)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} (e^{i\phi(x,t)}\psi(x, t)) = e^{i\phi(x,t)} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t) + i \frac{\partial \phi(x, t)}{\partial x} e^{i\phi(x,t)} \psi(x, t)$$

Legt nahe, die "alten" partiellen Ableitungen $\frac{\partial}{\partial t}$ und $\frac{\partial}{\partial x}$ zu ersetzen durch die kovarianten Ableitungen¹⁷:

$$D_t = \frac{\partial}{\partial t} + i \frac{\partial \phi(x, t)}{\partial t}$$

$$D_x = \frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial \phi(x, t)}{\partial x}$$

- Ersetze im Impulsoperator nun $\frac{\partial}{\partial x}$ durch D_x , so folgt:

$$\hat{p}_i = -i\hbar D_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} + \hbar \frac{\partial \phi(x, t)}{\partial x} \quad (550)$$

Analog für Energie-Operator

$$\hat{E} = i\hbar D_t = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hbar \frac{\partial \phi(x, t)}{\partial t} \quad (551)$$

- Setze dies in freie Schrödinger-Gleichung ein

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hbar \frac{\partial \phi(x, t)}{\partial t} \right) \psi(x, t) = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} + \hbar \frac{\partial \phi(x, t)}{\partial x} \right)^2 \psi(x, t) \quad (552)$$

Erinnere Gl. (548) und Gl. (549)

$$\vec{A} \rightarrow \vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla} \chi(x, t), \quad V \rightarrow V' = V - \frac{\partial \chi(x, t)}{\partial t}$$

$$\psi(x, t) \rightarrow e^{i\phi(x,t)} \psi(x, t)$$

¹⁷Da steckt viel Differentialgeometrie drin

- Zentrale Idee: Identifiziere $\phi(x, t)$ mit $\chi(x, t)$, modulo Faktoren
- Setze $A = 0, V = 0$
- Rechne
- Gehe ins 3-dimensionale
- Sortiere Terme
- $c = 1 \rightarrow c = c$
- $A' \rightarrow A, V' \rightarrow V$

so folgt

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left(\frac{1}{2m} (-i\hbar \nabla - eA(x, t))^2 + eV(x, t) \right) \psi(x, t) \quad (553)$$

oder

$$\hat{E}\psi = \left(\frac{1}{2m} (\hat{p} - eA)^2 + eV \right) \psi \quad (554)$$

Ersetzen von \hat{p} durch $\hat{p} - eA$ und Addition von eV heißt minimale Kopplung

- Beachte: Die Forderung nach lokaler Eichinvarianz bringt die elektromagnetische Wechselwirkung, die Photonen, in die Welt
- Elementarteilchenphysik, nicht-abelsche Eichtheorien mit nicht-kommutierenden Gruppen
 - schwache Wechselwirkung: $SU(2)$ -Gruppe, W & Z-Bosonen
 - starke Wechselwirkung: $SU(3)$ -Gruppe, Gluonen
 - Allgemeine Relativitätstheorie etwas komplizierter ...

7.3 Aharanov-Bohm Effekt

- Theorie: 1959
- Experiment: 1960
- Newton'sche Physik: \vec{E} and \vec{B} physikalisch relevant, da sie Lorentz-Kraft festlegen, Potentiale \vec{A} und V eher Hilfsgrößen

- Betrachte Schrödinger-Gleichung mit Vektorpotential A und Einfluss der Eichung

$$A \rightarrow A' = A + \nabla\chi \quad (555)$$

Ungeeicht:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \left(\frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla - eA)^2\right)\psi \quad (556)$$

Im Falle der Eichung gilt, erinnere letztes Kapitel

$$\psi' = \exp\left(\frac{ie}{\hbar c}\chi\right)\psi \quad (557)$$

- Betrachte unendlich lange Spule, außerhalb verschwindet Magnetfeld

$$B = \text{rot } A = 0 \quad (558)$$

Dort ist A durch Gradienten eines skalaren Feldes χ darstellbar

$$\begin{aligned} A &= \nabla\chi \\ \chi(x) &= \int_{x_0}^x d\vec{s} \vec{A}(\vec{s}) \end{aligned}$$

- Wellenfunktion entweder aus

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \left(\frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla - eA)^2\right)\psi \quad (559)$$

oder aus eichtransformierter Gleichung ohne Vektorpotential

$$A' = A + \nabla(-\chi) = 0 \quad (560)$$

nämlich

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi' = \left(\frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla)^2\right)\psi' \quad (561)$$

- Zusammenhang der Wellenfunktionen mit Gl. (557)

$$\psi = \psi' \exp\left(\frac{ie}{\hbar c}\chi\right) = \psi' \exp\left(\frac{ie}{\hbar c} \int_{x_0}^x ds A(s)\right) \quad (562)$$

- Betrachte Doppelspaltexperiment mit unendlich langer Spule zwischen den Spalten

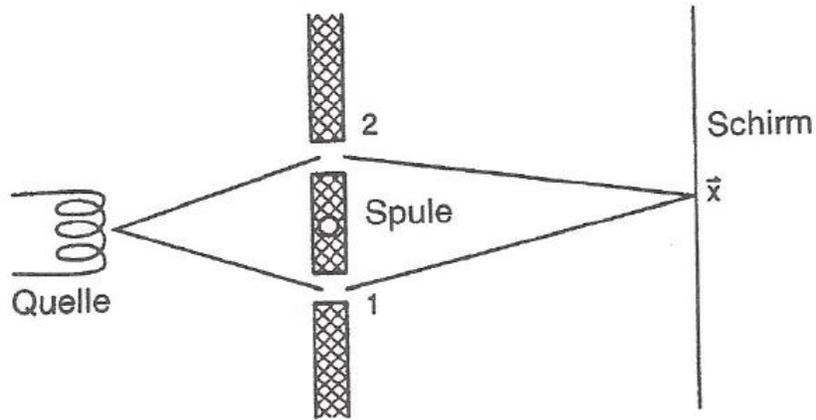


Abbildung 7.1

- Wellenfunktion $\psi_{1,A}$, wenn nur Spalt 1 geöffnet ist, ergibt sich aus Wellenfunktion $\psi_{1,0}$ ohne Feld aus

$$\psi_{1,B} = \psi_{1,0} \exp\left(\frac{ie}{\hbar c} \int_1 ds A(s)\right) \quad (563)$$

Entsprechend für Spalt 2

$$\psi_{2,B} = \psi_{2,0} \exp\left(\frac{ie}{\hbar c} \int_2 ds A(s)\right) \quad (564)$$

- Superposition auf dem Schirm

$$\psi_B = \psi_{1,0} \exp\left(\frac{ie}{\hbar c} \int_1 ds A(s)\right) + \psi_{2,0} \exp\left(\frac{ie}{\hbar c} \int_2 ds A(s)\right) \quad (565)$$

$\psi_{1,0}$ und $\psi_{2,0}$ unbekannt, aber relative Phase bekannt

$$\int_1 ds A(s) - \int_2 ds A(s) = \oint ds A(s) = \int df \operatorname{rot} A = \Phi_B \quad (566)$$

mit Φ_B dem magnetischen Fluss der unendlichen Spule

Damit

$$\psi_B = \left(\psi_{1,0} \exp\left(\frac{ie}{\hbar c} \Phi_B\right) + \psi_{2,0} \right) \exp\left(\frac{ie}{\hbar c} \int_2 ds A(s)\right) \quad (567)$$

- Phasenrelation zwischen ψ_1 und ψ_2 wird bei Änderung des magnetischen Flusses Φ_B , den die Elektronen nicht sehen, der aber das Vektorpotential \vec{A} , das die Elektronen sehen, verändert und damit wird Interferenzbild auf dem Schirm verschoben.
- Ergo: \vec{A} (und V) sind fundamental, nicht \vec{B} (und \vec{E})
Physikalische Effekte hängen nur von eichinvarianten Größen ab, hier dem magnetischen Fluss Φ_B

Lessons learned:

- Para- und Diamagnetismus als lineare und quadratische Effekte von \vec{B}
- Aufhebung der m -Entartung im Wasserstoffatom, normaler Zeeman Effekt
- Landau-Niveaus analog zum harmonischen Oszillator bei freien Elektronen
- Eichsymmetrien induzieren Wechselwirkungen
- Potentiale sind physikalischer als Kräfte

8 Spin

- Stern-Gerlach Versuch: Elektron hat "inneren Drehimpuls", genannt Spin, der nur die Werte $+\hbar/2$ (spin up) und $-\hbar/2$ (spin down) annehmen kann
- Spin ist messbar, es muss also einen selbstadjungierten Spinoperator $\vec{S} = (S_x, S_y, S_z)$ geben, der ein Drehimpulsoperator ist.
- Sei \vec{e} Einheitsvektor, so gilt

$$\vec{S} \cdot \vec{e} |\vec{e}, \pm\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} |\vec{e}, \pm\rangle \quad (568)$$

Sei o.B.d.A: $\vec{e} = \vec{e}_z$. Bezeichnungsweise

$$|\vec{e}_z, \pm\rangle =: \begin{cases} |\uparrow\rangle \\ |\downarrow\rangle \end{cases} \quad (569)$$

- Eigenwertgleichung für S_z lautet dann:

$$S_z \begin{pmatrix} |\uparrow\rangle \\ |\downarrow\rangle \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} +|\uparrow\rangle \\ -|\downarrow\rangle \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\uparrow\rangle \\ |\downarrow\rangle \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_z \begin{pmatrix} |\uparrow\rangle \\ |\downarrow\rangle \end{pmatrix} \quad (570)$$

mit der Pauli-Spinmatrix σ_z

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (571)$$

- Für Spin $s = \frac{1}{2}$ hat S^2 den Eigenwert $\frac{3}{4}\hbar^2$

$$S^2|\uparrow\rangle = \hbar^2 s(s+1)|\uparrow\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\uparrow\rangle, \quad S^2|\downarrow\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\downarrow\rangle \quad (572)$$

- Da S_z hermitesch, sind die zu verschiedenen Eigenwerten gehörenden Zustände $|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$ orthogonal

$$\langle\uparrow|\downarrow\rangle = 0 \quad (573)$$

Normierung auf 1

$$\langle\uparrow|\uparrow\rangle = \langle\downarrow|\downarrow\rangle = 1 \quad (574)$$

- Bestimmung der Pauli-Spinmatrizen σ_x und σ_y

Erinnere Kap. 5.4, Vertauschungsrelationen für Drehimpulsoperatoren

Mit Leiteroperatoren

$$S_{\pm} = S_x \pm iS_y, \quad \text{entsprechend } S_x = \frac{1}{2}(S_+ + S_-) \quad S_y = \frac{1}{2i}(S_+ - S_-) \quad (575)$$

gilt

$$[S_i, S_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}S_k, \quad [S_z, S_{\pm}] = \pm\hbar S_{\pm}, \quad [S_+, S_-] = 2\hbar S_z \quad (576)$$

Nach Kap. 5.4, Normargument Gl. (480)

$$\langle L_{\pm} \psi_{lm} | L_{\pm} \psi_{lm} \rangle = \hbar^2 (l(l+1) - m(m \pm 1)) \geq 0$$

folgt mit $l = \frac{1}{2}$ und $m = \pm \frac{1}{2}$

$$S_+ | \uparrow \rangle = 0, \quad S_- | \uparrow \rangle = \hbar | \downarrow \rangle \quad (577)$$

$$S_+ | \downarrow \rangle = \hbar | \uparrow \rangle, \quad S_- | \downarrow \rangle = 0 \quad (578)$$

Damit Darstellung der Spinoperatoren in der Basis der Zustände $| \uparrow \rangle$ und $| \downarrow \rangle$

$$S_{\pm} = \begin{pmatrix} \langle \uparrow | S_{\pm} | \uparrow \rangle & \langle \uparrow | S_{\pm} | \downarrow \rangle \\ \langle \downarrow | S_{\pm} | \uparrow \rangle & \langle \downarrow | S_{\pm} | \downarrow \rangle \end{pmatrix} \quad (579)$$

Mit Gln. (577, 578) folgt

$$S_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (580)$$

und damit mit Gl. (575) und $\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$ die Pauli-Spinmatrizen

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (581)$$

- Eigenschaften der Pauli-Spinmatrizen

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \mathbb{1}$$

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z \quad \text{und zyklisch}$$

$$[\sigma_x, \sigma_y]_{\pm} = 0 \quad \text{und zyklisch}$$

$$\sigma_x \sigma_y = -\sigma_y \sigma_x = i\sigma_z \quad \text{und zyklisch}$$

$$\sigma_x \sigma_y \sigma_z = i\mathbb{1}$$

$$\text{Sp } \sigma_x = \text{Sp } \sigma_y = \text{Sp } \sigma_z = 0$$

$$\text{Det } \sigma_x \text{ Det } \sigma_y \text{ Det } \sigma_z = -1$$

Spinoren

- Allgemeiner Spinzustand $| \rangle$ in Basis $\{ | \uparrow \rangle, | \downarrow \rangle \}$

$$| \rangle = a_+ | \uparrow \rangle + a_- | \downarrow \rangle, \quad a_+, a_- \in \mathbb{C}, \quad \text{mit } |a_+|^2 + |a_-|^2 = 1 \quad (582)$$

- Darstellung des allgemeinen Zustandes $|\rangle$ durch Spinor χ , dessen Komponenten sich durch Projektion auf Basissystem ergeben

$$\chi = \begin{pmatrix} a_+ \\ a_- \end{pmatrix}, \quad a_+ = \langle \uparrow | \rangle, \quad a_- = \langle \downarrow | \rangle \quad (583)$$

Polarisation von Photonen

- Photonen haben Spin 1, Spin 1 ist normaler Weise 3-komponentig
- Da Licht transversale Welle, geht ein Freiheitsgrad verloren
- Den jeweils zwei mal drei Möglichkeiten von Spin $\frac{1}{2}$ Teilchen entspricht
 - Horizontal / vertikal, entspricht Eigenzuständen zu σ_z

$$|h\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |v\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (584)$$

- $\pm 45^\circ$ polarisiert, entspricht Eigenzuständen zu σ_x

$$\begin{aligned} | + 45^\circ \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|h\rangle + |v\rangle) \\ | - 45^\circ \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|h\rangle - |v\rangle) \end{aligned}$$

- rechts/links zirkular polarisiert, entspricht Eigenzuständen zu σ_y

$$\begin{aligned} |R\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|h\rangle + i|v\rangle) \\ |L\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|h\rangle - i|v\rangle) \end{aligned}$$

Magnetisches Moment μ

- Allgemeine Definition

$$\mu = -\frac{\partial H}{\partial B} \quad (585)$$

Für paramagnetischen Anteil des Bahndrehimpulses, siehe Kap. 7.1, gilt

$$\mu_{\text{Bahn}} = \frac{e}{2mc} L \quad (586)$$

- Für Spin gilt

$$\mu_{\text{Spin}} = g \frac{e}{2mc} S \quad (587)$$

mit Landé- oder gyromagnetischem Faktor g fast genau 2

- (Relativistische) Dirac Gleichung: Exakt 2
- Quantenelektrodynamische Korrektur bis $\mathcal{O}(\alpha^3)$: 2.002319...

- Gesamtes magnetisches Moment des Elektrons damit

$$\mu = \mu_{\text{Bahn}} + \mu_{\text{Spin}} = \frac{e}{2mc}(L + 2S) = \frac{e}{2mc}(L + \sigma\hbar) \quad (588)$$

Gesamt-Wechselwirkungsenergie mit Magnetfeld

$$H = -\mu \cdot B = \mu_B \left(\frac{L}{\hbar} + \sigma \right) \cdot B \quad \text{Bohr'sches Magneton: } \mu_B = \frac{e\hbar}{2mc} \quad (589)$$

Lessons learned:

- Spin nutzt die Möglichkeit auf halbzahligen Drehimpuls aus Kapitel 5.4
- Photonen, obwohl Spin 1, sehr ähnlich zu massiven Spin $\frac{1}{2}$ -Teilchen
- Spin gibt Beitrag zu magnetischem Moment mit Landé-Faktor fast genau 2

17 25
1/2
10. Wo-
che
21

9 Näherungsmethoden für stationäre Zustände

Exakt lösbare Systeme sind selten, hier drei Näherungsmethoden

- Störungstheorie
Gut, wenn sich Problem nur wenig von exakt lösbarem unterscheidet
Ausführlich

- Ritz'sche Variationsprinzip
Gut zur Berechnung der Grundzustandsenergie, wenn qualitative Vorstellung von Form der Wellenfunktion vorhanden
Nur das Prinzip
- WKB-Näherung
Gut, wenn nah am klassischen Grenzfall
Nur das Prinzip

9.1 Störungstheorie

Hamilton-Operator bestehe aus zwei Anteilen

$$H = H_0 + \lambda H_1 \quad (590)$$

- Annahmen
 - Eigenwerte E_n^0 und Eigenfunktionen $|n^0\rangle$ von H_0 seien exakt bekannt

$$H_0 |n^0\rangle = E_n^0 |n^0\rangle \quad (591)$$

- "Störterm" λH_1 sei klein im Vergleich zu H_0
- Gesucht: Die Zustände $|n\rangle$ und Eigenwerte E_n von

$$H |n\rangle = E_n |n\rangle \quad (592)$$

- Ansatz: Entwickle Eigenwerte und Eigenfunktionen in λ

$$\begin{aligned} E_n &= E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots \\ |n\rangle &= |n^0\rangle + \lambda |n^1\rangle + \lambda^2 |n^2\rangle + \dots \end{aligned}$$

wobei jeweils der erste Term der ungestörte ist

- Hoffnung: Da Störterm λH_1 klein, Entwicklung in niedriger Ordnung hinreichend

9.1.1 Nicht entartete zeitunabhängige Störungstheorie

- Setze alles in die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung ein:

$$(H_0 + \lambda H_1)(|n^0\rangle + \lambda|n^1\rangle + \lambda^2|n^2\rangle + \dots) = (E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots)(|n^0\rangle + \lambda|n^1\rangle + \lambda^2|n^2\rangle + \dots) \quad (593)$$

Koeffizientenvergleich für

$$\lambda^0 : H_0|n^0\rangle = E_n^0|n^0\rangle \quad (594)$$

$$\lambda^1 : H_0|n^1\rangle + H_1|n^0\rangle = E_n^0|n^1\rangle + E_n^1|n^0\rangle \quad (595)$$

$$\lambda^2 : H_0|n^2\rangle + H_1|n^1\rangle = E_n^0|n^2\rangle + E_n^1|n^1\rangle + E_n^2|n^0\rangle \quad (596)$$

- Klug, Begründung unten: Normierung von $|n\rangle$ durch

$$\langle n^0|n\rangle = 1 \quad (597)$$

Dann

$$\langle n^0|n\rangle = \langle n^0|n^0\rangle + \lambda\langle n^0|n^1\rangle + \lambda^2\langle n^0|n^2\rangle + \dots = 1 \quad (598)$$

Muss $\forall\lambda$ gelten. Damit folgt

$$\langle n^0|n^1\rangle = \langle n^0|n^2\rangle = \dots = 0 \quad (599)$$

- 1. Ordnungs-Korrektur der Energie

Multipliziere Gl. (595) mit $\langle n^0|$

$$\langle n^0|H_0|n^1\rangle + \langle n^0|H_1|n^0\rangle = E_n^0\langle n^0|n^1\rangle + E_n^1\langle n^0|n^0\rangle \quad (600)$$

und nutze Gl. (594) adjungiert

$$E_n^0\langle n^0|n^1\rangle + \langle n^0|H_1|n^0\rangle = E_n^0\langle n^0|n^1\rangle + E_n^1\langle n^0|n^0\rangle \quad (601)$$

ergibt mit Gl. (599) oder sowieso

$$E_n^1 = \langle n^0|H_1|n^0\rangle \quad (602)$$

Merke: 1. Ordnungs-Korrektur der Energie ist Erwartungswert des Stör-Hamiltonian bezüglich des ungestörten Zustandes

- 1. Ordnungs-Korrektur der Zustände

Da die ungestörten Zustände $|m^0\rangle$ ein vollständiges Orthonormalsystem bilden, gilt wegen Gl. (599) die Entwicklung

$$|n^1\rangle = \sum_{m \neq n} c_m |m^0\rangle, \quad \text{mit } c_m = \langle m^0 | n^1 \rangle \quad (603)$$

Multipliziere Gl. (595):

$$\lambda^1 : H_0 |n^1\rangle + H_1 |n^0\rangle = E_n^0 |n^1\rangle + E_n^1 |n^0\rangle$$

mit $\langle m^0 |$, verschieden von $\langle n^0 |$

$$\underbrace{\langle m^0 | H_0 | n^1 \rangle}_{=c_m E_m^0} + \langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle = E_n^0 \underbrace{\langle m^0 | n^1 \rangle}_{=c_m} + E_n^1 \underbrace{\langle m^0 | n^0 \rangle}_{=0} \quad (604)$$

Es folgt

$$\langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle = c_m (E_n^0 - E_m^0) \quad (605)$$

und somit die erste Korrektur zum Zustand $|n^0\rangle$

$$|n^1\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0} |m^0\rangle \quad (606)$$

$m \neq n$ folgt aus kluger Wahl der Normierung, Gl. (597), sonst gäbe es einen divergierenden Term

- Energie in 2. Ordnung

Multipliziere Gl. (596):

$$\lambda^2 : H_0 |n^2\rangle + H_1 |n^1\rangle = E_n^0 |n^2\rangle + E_n^1 |n^1\rangle + E_n^2 |n^0\rangle$$

mit $\langle n^0 |$ und nutze Gln. (599, 606)

$$E_n^2 = \langle n^0 | H_1 | n^1 \rangle = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0} \quad (607)$$

- Bemerkungen
 - Für Grundzustand ist die Verschiebung 2. Ordnung E_0^2 immer negativ
 - Störungstheorie funktioniert, wenn sich Zustand mit kleinem λ nicht qualitativ vom ungestörten System unterscheidet.
Gegenbeispiel: Cooper-Paare in der Supraleitung
- Übung: Oszillator mit kubischer/quartischer Störung

18 25

9.2 Störungstheorie für entartete Zustände

- Seien $|n_a^0\rangle, |n_b^0\rangle, \dots, |n_p^0\rangle$ entartet, d.h.

$$H_0|n_i^0\rangle = \epsilon|n_i^0\rangle, \quad i = 1, \dots, p \quad (608)$$

Führt zu Divergenzen in der Entwicklung nach

$$\frac{\langle m^0|H_1|n^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0} \quad (609)$$

- Idee: Gehe in entartetem Unterraum in Basissystem $\{|n_\alpha^0\rangle\}$, in dem H_1 diagonalisiert wird

$$\langle n_\alpha^0|H_1|n_\beta^0\rangle = H_1^\alpha \delta_{\alpha\beta} \quad (610)$$

Dann fallen divergente Terme raus

- Die Matrixelemente, Index 1 der Lesbarkeit wegen wenn nötig nach oben

$$H_{ij}^1 = \langle n_i^0|H_1|n_j^0\rangle \quad (611)$$

bilden eine hermitesche Matrix

- Die gesuchten neuen Zustände

$$|n_\alpha^0\rangle = \sum_i c_{\alpha i} |n_i^0\rangle \quad (612)$$

geben die Matrixelemente

$$H_{\alpha\beta}^1 = \langle n_\alpha^0|H_1|n_\beta^0\rangle = \sum_{ij} c_{i\alpha}^* H_{ij}^1 c_{j\beta} \quad (613)$$

- Satz: Jede hermitesche Matrix kann durch unitäre Transformation auf Diagonalgestalt gebracht werden

Damit kann man die $c_{\alpha i}$ immer so wählen, dass Gl. (610) erfüllt ist.

- Gln. (610, 613) zusammen

$$\sum_{ij} c_{i\alpha}^* H_{ij}^1 c_{j\beta} = H_1^\alpha \delta_{\alpha\beta} \quad (614)$$

multipliziere mit $c_{i\alpha}$, nutze Unitarität:

$$\sum_{\alpha} c_{i\alpha} c_{j\alpha}^* = \delta_{ij} \quad (615)$$

- Ergibt Eigenwert-Gleichung

$$\sum_j H_{ij}^1 c_{j\beta} = H_1^\beta c_{i\beta} \quad (616)$$

- Lösung aus

$$\text{Det}(H_{ij}^1 - H_1^\beta \delta_{ij}) = 0 \quad (617)$$

Gemeinsam mit Gl. (616) erhält man H_1^β und $c_{i\beta}$ und damit die gesuchten Zustände

- Übung : Linearer Stark-Effekt

9.2.1 Beispiele

Beispiel: Quadratischer Stark-Effekt

- Einfluß von äußerem elektrischen Feld auf Wasserstoff-Atom für $n = 1$
Bewirkt Polarisierung des Atoms

- Störung

$$H_1 = -eEz, \quad \vec{E} \parallel e_z \quad (618)$$

- Berechne Matrixelemente

$$\langle n, l, m | z | n', l', m' \rangle \quad (619)$$

- Auswahlregeln

– Aus $[L_z, z] = 0$ folgt

$$\langle n, l, m | [L_z, z] | n', l', m' \rangle = \langle n, l, m | L_z z - z L_z | n', l', m' \rangle = (m - m') \langle n, l, m | z | n', l', m' \rangle = 0 \quad (620)$$

und damit die Auswahlregel $m' = m$

– Absorption oder Abstrahlung eines Photons ändert Bahndrehimpuls um 1, daher gilt Auswahlregel

$$\langle n, l, m | z | n', l', m' \rangle \neq 0, \quad \text{nur, wenn } l' = l \pm 1 \quad (621)$$

Nur wenn beide Auswahlregeln erfüllt sind, kann das Matrixelement ungleich Null sein

- Störungstheorie 1. Ordnung

Erinnere: Matrixelement der Störung bezüglich des ungestörten Grundzustand

$$E_1^1 = -eE \langle 1, 0, 0 | z | 1, 0, 0 \rangle = 0 \quad (622)$$

Symmetrieargument

Kein Stark-Effekt 1. Ordnung !

- Störungstheorie 2. Ordnung

Benötigte Matrixelemente nach Gl. (607)

$$E_n^2 = \langle n^0 | H_1 | n^1 \rangle = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0}$$

Mit Auswahlregeln & da Grundzustand gestört wird

$$E_1^2 = \sum_{n=2}^{\infty} e^2 E^2 \frac{|\langle n, 1, 0 | z | 1, 0, 0 \rangle|^2}{E_1^0 - E_n^0} \quad (623)$$

$n = 2$ - Term, a_0 Bohr'scher Atomradius, r dimensionslos, Kugelkoordinaten:

$$\begin{aligned} \langle 2, 1, 0 | z | 1, 0, 0 \rangle &= \frac{a_0}{\sqrt{3}} \int dr \underbrace{r^2}_{Kk.} \underbrace{\frac{r e^{-r/2}}{2\sqrt{6}}}_{\langle 2, 1, 0 |} \underbrace{r}_z \underbrace{2e^{-r}}_{|1, 0, 0 \rangle} \\ &= \frac{a_0}{3\sqrt{2}} \int dr r^4 e^{-3r/2} = \frac{2^7 \sqrt{2}}{3^5} a_0 \end{aligned}$$

Mit

$$E_1^0 - E_2^0 = -\frac{3}{8} \frac{e^2}{a_0} \quad (624)$$

folgt

$$E_1^2 \approx -1.48 a_0^3 E^2 \quad (625)$$

Mit allen n - Termen, Trick zum Ausrechnen: Rekursionsgleichungen für Laguerre-Polynome nutzen

$$E_1^2 = -\frac{9}{4} a_0^3 E^2, \quad \text{beachte } 1.48 \approx \frac{2}{3} \cdot \frac{9}{4} \quad (626)$$

$n = 2$ -Term erklärt 2/3 des Effekts

Quadratischer Stark-Effekt

- Übung: Störungstheorie für Stark-Effekt im H-Atom für $n = 2$

Beispiel Heliumatom

- Näherungsweise Bestimmung des Grundzustandsenergie des Heliumatoms
- Störung: Wechselwirkung zwischen den Elektronen

$$H = \underbrace{\frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} - 2e^2 \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right)}_{=H_0} + \underbrace{\frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}}_{=H_1} \quad (627)$$

Energie im ungestörten Grundzustand E_0^0 ist die Doppelte derjenigen im Grundzustand eines wasserstoffähnlichen Atoms mit $Z = 2$

$$E_1^0 \approx -108 \text{ eV} \quad (628)$$

- Zugehöriger Eigenvektor $|1\rangle$ ist Produkt der Einteilchen-Eigenvektoren.

$$|1\rangle = \frac{8}{\pi a_0} e^{-\frac{2(r_1+r_2)}{a_0}} \quad (629)$$

1. Ordnung Korrektur zu E_1^0

$$E_1^1 = \langle 1|H_1|1\rangle = \int \int dr_1 dr_2 \frac{64e^2}{\pi^2 a_0^2} \frac{e^{-\frac{4}{a_0}(r_1+r_2)}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = \frac{5}{4} \frac{e^2}{a_0} \quad (630)$$

- Somit

$$E_1 \approx E_1^0 + E_1^1 = -\frac{11e^2}{4a_0} \approx -74 \text{ eV} \quad (631)$$

Experimenteller Wert: $E_0 = -78.96 \text{ eV}$: Störungstheorie 1. Ordnung not too bad.

- Physikalische Interpretation: Abschirmeffekt des Kernpotentials durch das jeweils andere Elektron

10. Woche 16

9.3 Ritz'sches Variationsprinzip

- Ziel: Bestimme näherungsweise Energie E_0 und Wellenfunktion ψ_0 des Grundzustandes
- Ansatz: Test-Wellenfunktion ψ_T , z.B. parametrisierte Linearkombination von Wellenfunktionen
- Ritz'sches Variationsprinzip: Der zu ψ_T gehörende Erwartungswert der Energie E_T ist immer größer oder gleich der exakten Grundzustandsenergie E_0

$$E_T = \frac{\langle \psi_T | H | \psi_T \rangle}{\langle \psi_T | \psi_T \rangle} \geq E_0 \quad (632)$$

Gleichheit wenn $\psi_T = \psi_0$

- Beweis:

Betrachte exakte Eigenfunktionen $|\psi_n\rangle$ und Eigenwerte E_n

$$H|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle \quad (633)$$

Entwickle Test-Wellenfunktion bezüglich der Eigenfunktionen

$$|\psi_T\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle \quad (634)$$

Betrachte

$$\begin{aligned}
 \langle \psi_T | H - E_0 | \psi_T \rangle &= \sum_{nm} c_n^* c_m \langle \psi_n | H - E_0 | \psi_m \rangle \\
 &= \sum_{nm} c_n^* c_m (E_m - E_0) \underbrace{\langle \psi_n | \psi_m \rangle}_{=\delta_{nm}} \\
 &= \sum_n |c_n|^2 (E_n - E_0) \geq 0
 \end{aligned}$$

Gleichheitszeichen für $|c_0|^2 = 1$ und $|c_{n \neq 0}|^2 = 0$, d.h. Test-Wellenfunktion ψ_T ist identisch mit exakter Grundzustands-Wellenfunktion ψ_0 .

- Strategie:
 - Wähle Ansatz für Test-Wellenfunktion, der freie Parameter $\vec{\mu}$ enthält
 - Hier lässt sich qualitatives Vorwissen einbringen
 - Bestimme Parameter so, dass $\frac{\langle \psi_T(\mu) | H | \psi_T(\mu) \rangle}{\langle \psi_T(\mu) | \psi_T(\mu) \rangle}$ minimal wird
 - Variationsprinzip garantiert, dass die so gewonnene Wellenfunktion die Optimale im Rahmen des gewählten Ansatzes ist

- Genauigkeit

Sei $|0\rangle$ wahrer Grundzustand, $|\epsilon\rangle$ der Fehler von $|\psi_T\rangle$

$$|\psi_T\rangle = |0\rangle + |\epsilon\rangle, \quad \text{mit } \langle 0 | \epsilon \rangle = 0 \quad (635)$$

Dann folgt

$$\frac{\langle \psi_T | H | \psi_T \rangle}{\langle \psi_T | \psi_T \rangle} = E_0 + \langle \epsilon | H | \epsilon \rangle = E_0 + \mathcal{O}(\epsilon^2) \quad (636)$$

Merke: Energie wird beim Variationsverfahren genauer bestimmt als Wellenfunktion

9.4 WKB-Näherung

- WKB: Wentzel-Kramers-Brillouin

Semi-klassische Näherung

- Betrachte Zustand mit hinreichend großer Energie
Wellenlänge dann klein gegen charakteristischen Distanz, auf der sich Potential ändert
Wellenfunktion kann durch ortsabhängige Wellenzahl beschrieben werden
- Erinnere Schrödingers Ansatz: Der Kreis schließt sich
- Für die ein-dimensionale zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) = (E - V(x))\psi(x) \quad (637)$$

verwende allgemeinen Ansatz

$$\psi(x) = e^{iS(x)/\hbar}, \quad S(x) \in \mathbb{C} \quad (638)$$

mit

$$\psi'(x) = \frac{i}{\hbar}S'(x)e^{iS(x)/\hbar} \quad (639)$$

und

$$\psi''(x) = \frac{i}{\hbar}S''(x)e^{iS(x)/\hbar} - \frac{1}{\hbar^2}S'(x)^2e^{iS(x)/\hbar} \quad (640)$$

- Ansatz eingesetzt

$$S'(x)^2 = 2m(E - V(x)) + i\hbar S''(x) \quad (641)$$

- Idee: Entwickle S nach Potenzen von \hbar
- Letzter Term in Gl. (641) klein
Nullte Näherung:

$$S'_0(x)^2 = 2m(E - V(x)) \equiv p(x)^2 \quad (642)$$

Lösung:

$$S_0(x) = \pm \int dx p(x) + \text{const} \quad (643)$$

und damit in Gl. (638):

$$\psi(x) = e^{iS(x)/\hbar}, \quad S(x) \in \mathbb{C}$$

eingesetzt

$$\psi(x) = \text{const} \exp\left(\pm \frac{i}{\hbar} \int dx p(x)\right) \quad (644)$$

- Ansatz für systematische Entwicklung in \hbar

$$S(x) = S_0(x) + \frac{\hbar}{i} S_1(x) + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 S_2(x) + \dots \quad (645)$$

S_0 erfüllt Gl. (641):

$$S'(x)^2 = 2m(E - V(x)) + i\hbar S''(x)$$

in Ordnung \hbar^0

Bestimme $S_1(x)$ so, dass Gl. (641) in Ordnung \hbar^1 erfüllt wird, $S_2(x)$ sorgt für Ordnung \hbar^2 , usw.

- Bestimmung von $S_1(x)$

Setze $S(x) \approx S_0(x) + \frac{\hbar}{i} S_1(x)$ in Gl. (641) ein, so folgt für Terme der Ordnung \hbar

$$\frac{2\hbar}{i} S'_0(x) S'_1(x) = i\hbar S''_0(x) \quad (646)$$

Aufgelöst nach S_1 :

$$S'_1(x) = -\frac{1}{2} \frac{S''_0(x)}{S'_0(x)} \quad (647)$$

Integriert, nutze Gl. (643):

$$S_1(x) = -\frac{1}{2} \log |S'_0(x)| + \text{const} = \log |p(x)|^{-\frac{1}{2}} + \text{const} \quad (648)$$

Lösung in erster Ordnung von \hbar , setze $S(x) \approx S_0(x) + \frac{\hbar}{i}S_1(x)$ in Gl. (638):

$$\psi(x) = e^{iS(x)/\hbar}, \quad S(x) \in \mathbb{C}$$

ein

- Ergibt WKB-Näherung

$$\psi(x) = \frac{\text{const.}}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(\pm \frac{i}{\hbar} \int dx p(x)\right) \quad (649)$$

- \pm entspricht zwei unabhängigen Lösungen.

Allgemeine Lösung

$$\psi(x) = \frac{A}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int dx p(x)\right) + \frac{B}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int dx p(x)\right) \quad (650)$$

Gültigkeitsbereich der WKB-Näherung

- Letzter Term in Gl. (641):

$$S'(x)^2 = 2m(E - V(x)) + i\hbar S''(x)$$

wird als klein angesehen.

Gilt wenn:

$$|i\hbar S''(x)| \ll p(x)^2 \quad (651)$$

Mit Gl. (642):

$$S'_0(x)^2 = 2m(E - V(x)) \equiv p(x)^2$$

entspricht dies

$$\left| \frac{dV}{dx} \right| m\hbar \ll p^3 \quad (652)$$

- Mit Wellenlänge λ und kinetischer Energie E_{kin}

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}, \quad E_{kin} = \frac{p^2}{2m} \quad (653)$$

folgt

$$\left| \frac{dV}{dx} \right| \lambda \ll E_{kin} \quad (654)$$

- Änderung des Potentials im Bereich einer Wellenlänge klein gegen kinetische Energie.
- WKB-Näherung gilt nicht für $p(x) = 0$, z.B. an den Umkehrpunkten des harmonischen Oszillators
 - Linearisiere Potential
 - Löse Schrödinger-Gleichung analytisch
 - Stücke Lösungen zusammen

Übung: Potentialbarriere in WKB-Näherung

Lessons learned:

- Störungstheorie:
 - Entwicklung nach Parameter λ , der aber *de facto* wieder rausfällt
 - Entartete Zustände: Diagonalisiere H_1 gibt "gute" Basis
 - Stark-Effekt bei H-Atom für $n = 1$ quadratischer Effekt in \vec{E}
 - Helium Atom: 1. Ordnung gute Näherung für Grundzustandsenergie
- Ritz'sches Variationsprinzip: Näherung der Nullpunktsenergie und deren Eigenfunktion, gut bei qualitativem Vorwissen
- WKB Näherung. Ausgehend von der Klassik: Entwicklung in \hbar . Erinnt sehr an Schrödinger's geniale Spekulation aus Kap. 1.2

19 25

10 Vielteilchen Systeme

10.1 Symmetrie der Vielteilchenwellenfunktionen

- Betrachte N nicht wechselwirkende Teilchen mit Hamiltonian

$$H = \sum_i h_i(x_i, p_i) \quad (655)$$

Schrödinger-Gleichung für Einteilchen-Hamiltonian h_i

$$h_i|k_i\rangle = \epsilon_{k_i}|k_i\rangle \quad (656)$$

mit Eigenzuständen $|k_i\rangle$, k_i Quantenzahl

- Betrachte zunächst unterscheidbare Teilchen

Dann Gesamtwellenfunktion Produkt der Ein-Teilchenzustände:

$$|k_1, k_2, \dots, k_N\rangle = |k_1\rangle|k_2\rangle \dots |k_N\rangle \quad (657)$$

Ergibt:

$$\begin{aligned} H|k_1, \dots, k_N\rangle &= \sum_i |k_1\rangle \dots h_i|k_i\rangle \dots |k_N\rangle = \sum_i |k_1\rangle \dots \epsilon_{k_i}|k_i\rangle \dots |k_N\rangle \\ &= \sum_i \epsilon_{k_i}|k_1, \dots, k_N\rangle \end{aligned}$$

In Quantenmechanik Ununterscheidbarkeit fundamental

- Betrachte zwei ununterscheidbare Teilchen mit Gesamtwellenfunktion $\psi(r_1, r_2)$ und Permutationsoperator \hat{P} :

$$\hat{P}\psi(r_1, r_2) = \psi(r_2, r_1) \quad (658)$$

Nochmalige Anwendung:

$$\hat{P}\psi(r_2, r_1) = \psi(r_1, r_2) \quad (659)$$

damit

$$\forall \psi : \hat{P}^2\psi(r_1, r_2) = \psi(r_1, r_2) \implies \hat{P}^2 = \mathbb{1} \quad (660)$$

Folglich hat \hat{P} Eigenwerte $\lambda = \pm 1$. Zudem ist $[\hat{P}, \hat{H}] = 0$

- Gemeinsame Eigenzustände zu \hat{H} und \hat{P} definieren offensichtlich zwei Arten von Teilchen
- Spin-Statistik Theorem¹⁸, Pauli, 1940

¹⁸Leseempfehlung: R.F. Streater, A.S. Wightman. PCT, Spin and Statistics, and All That

- Bosonen, Spin ganz-zahlig, $S = 0, 1, \dots$, besitzen eine symmetrische Vielteilchenwellenfunktion: $\psi_S = \hat{P}\psi_S$
Besetzungszahlen können alle Werte $0, 1, \dots, \infty$ annehmen
- Fermionen, Spin halb-zahlig, $S = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$, besitzen eine anti-symmetrische Vielteilchenwellenfunktion: $\psi_A = -\hat{P}\psi_A$
Besetzungszahlen können die Werte $0, 1$ annehmen

Zusammenfassend:

$$\hat{P}\psi(r_1, r_2) = (-1)^{2S}\psi(r_2, r_1) \quad (661)$$

Folge: Reiner Produktansatz

$$\psi(r_1, r_2) = \phi_a(r_1)\phi_b(r_2) \quad (662)$$

geht für ununterscheidbare Teilchen nicht durch.

- (Anti)symmetrisierung:

$$\begin{aligned} \psi_S(r_1, r_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_a(r_1)\phi_b(r_2) + \phi_a(r_2)\phi_b(r_1)) \\ \psi_A(r_1, r_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_a(r_1)\phi_b(r_2) - \phi_a(r_2)\phi_b(r_1)) \end{aligned}$$

Folge: Pauli-Prinzip: Für identische Einteilchen-Wellenfunktionen verschwindet die antisymmetrische Gesamtwellenfunktion

$$\phi_a = \phi_b \implies \psi_A = 0 \quad (663)$$

Zwei Elektronen können nicht im selben Zustand sein. Hierbei ist der Spin zu berücksichtigen.

Betrachte N Teilchen

- Permutationsoperator:

$$\hat{P}_{ij}\psi(r_1, \dots, r_i, \dots, r_j, \dots, r_N) = \psi(r_1, \dots, r_j, \dots, r_i, \dots, r_N) \quad (664)$$

Damit

$$\begin{aligned} \psi_S(r_1, \dots, r_N) &= A \sum_P \hat{P}\psi(r_1, \dots, r_N) \\ \psi_A(r_1, \dots, r_N) &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P \hat{P}\psi(r_1, \dots, r_N) \end{aligned}$$

mit

$$(-1)^P = \begin{cases} +1 & \text{für gerade Anzahl von Vertauschungen} \\ -1 & \text{für ungerade Anzahl von Vertauschungen} \end{cases} \quad (665)$$

Normierungsfaktor A abhängig davon, wie viele der Quantenzahlen gleich sind

- Geht man vom Produktansatz von Einteilchen-Wellenfunktionen aus, folgt für den antisymmetrischen Fall:

$$\psi_A(r_1, \dots, r_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P \hat{P} \phi_a(r_1) \dots \phi_N(r_N) \quad (666)$$

Dieses läßt sich als Determinante schreiben:

$$\psi_A(r_1, \dots, r_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \begin{pmatrix} \phi_a(r_1) & \dots & \phi_a(r_N) \\ \phi_b(r_1) & \dots & \phi_b(r_N) \\ \vdots & & \vdots \\ \phi_N(r_1) & \dots & \phi_N(r_N) \end{pmatrix} \quad (667)$$

die Slater-Determinante

Diese verschwindet in Übereinstimmung mit dem Pauli-Prinzip, wenn zwei Zeilen gleich sind.

10.2 Hartree-Fock Verfahren

Betrachte Atom mit N Elektronen

- Hamilton-Operator

$$H = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \frac{Ze^2}{r_i} \right) + \sum_{i>j} \frac{e^2}{|x_i - x_j|} \quad (668)$$

Schrödinger-Gleichung

$$H\Psi(x_1, \dots, x_N) = E\Psi(x_1, \dots, x_N) \quad (669)$$

Exakte Lösung hoffnungslos

- Idee: Jedes Elektron sieht neben dem Kernpotential ein weiteres effektives Potential, das durch die anderen Elektronen verursacht wird.
- Hartree-Näherung: Produktansatz für Wellenfunktion

$$\Psi(x_1, \dots, x_N) = \psi_1(x_1)\psi_2(x_2) \dots \psi_N(x_N) \quad (670)$$

Beachte: Keine Anti-Symmetrisierung

- Für jedes der $\psi_i(x_i)$ gilt dann die Hartree-Gleichung:

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \frac{Ze^2}{r_i} + V_i(x_i) \right) \psi_i(x_i) = \epsilon_i \psi_i(x_i) \quad (671)$$

mit

$$V_i(x_i) = \sum_{j \neq i} \int d^3x_j \frac{e^2}{|x_i - x_j|} |\psi_j(x_j)|^2 \quad (672)$$

Hartree-Gleichung für jedes der $\psi_i(x)$ enthält im Potential $V_i(x)$ nicht-linear alle übrigen Wellenfunktionen $\psi_{j \neq i}$

- Ein Selbstkonsistenz-Problem: Die $\{\psi_s\}$ müssen so gewählt werden, dass sie Potentiale $\{V_s\}$ ergeben, die mit Gl. (671) die $\{\psi_s\}$ reproduzieren.
- Iterative Lösung
 1. Setze $k = 0$, wähle Start-Wellenfunktionen ψ_i^0 , z.B. $|n, l, m\rangle$ vom H-Atom
 2. Setze $k \rightarrow k + 1$ berechne $V_i^k(x_i) \forall i$ nach Gl. (672)
 3. Berechne $\psi_i^k(x) \forall i$ nach Gl. (671)
 4. Überprüfe ob $V_i^k(x_i) = V_i^{k-1}(x_i)$ und $\psi_i^k(x_i) = \psi_i^{k-1}(x_i) \forall i$
Wenn ja: fertig. Wenn nein: Gehe zu 2.
- Beispiel für eine mean field Theorie oder Molekularfeld-Näherung
- Hartree-Fock Näherung: Verwende statt Produktwellenansatz Gl. (670) Slater-Determinanten nach Gl. (667)

1/2
11. Woche
21

10.3 Dichtematrix

Reine Zustände

- Bisher haben wir nur reine Zustände $|\psi\rangle$ betrachtet. Diese lassen sich durch Wellenfunktionen beschreiben, z.B. "Elektron befindet sich in Zustand $|n, l, m\rangle$ "
- Viele Teilchen mit Zustand $|\psi\rangle$: Reine Gesamtheit oder Reines Ensemble
- Beachte: Die Superposition von zwei reinen Zuständen gibt wieder einen reinen Zustand, d.h. lässt sich wieder durch Wellenfunktion $|\phi\rangle = a|\psi_1\rangle + b|\psi_2\rangle$ beschreiben.
- Definition: Sei $|n\rangle$ ein vollständiges Orthonormalsystem. Dann ist die Spur der Matrix M definiert als

$$\text{Sp}(M) = \sum_n \langle n|M|n\rangle \quad (673)$$

Spur ist unabhängig von der Basis, im Eigenvektorsystem von M besonders anschaulich

- Definition Dichtematrix¹⁹ ρ für reine Zustände:

$$\rho := |\psi\rangle\langle\psi| \quad (674)$$

- Für Observable A kann Erwartungswert $\langle A \rangle$ mit Dichtematrix berechnet werden. Sei $|n\rangle$ Orthonormalsystem. Trick: Einschleiben der Eins

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \langle \psi|A|\psi \rangle = \sum_n \langle \psi|A|n\rangle \langle n|\psi \rangle \\ &= \sum_n \langle n|\psi \rangle \langle \psi|A|n \rangle \\ &= \sum_n \langle n|\rho A|n \rangle = \text{Sp}(\rho A) \end{aligned}$$

Man zeigt leicht:

$$\begin{aligned} \text{Sp } \rho = 1 & : \sum_n \langle n|\psi \rangle \langle \psi|n \rangle = \sum_n \langle \psi|n \rangle \langle n|\psi \rangle = \langle \psi|\psi \rangle = 1 \\ \rho^2 = \rho & : |\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi| = |\psi\rangle\langle\psi| \end{aligned}$$

¹⁹Eigentlich Dichteoperator, wird in einer Basis zur Matrix

Für reine Zustände ist das reine Spielerei

Gemischte Zustände oder Gemischte Gesamtheit oder Gemischtes Ensemble

- Betrachte Ensemble von N Teilchen, von denen sich N_i im Zustand $|\psi_i\rangle$ befinden
- Wahrscheinlichkeit, das sich ein zufällig herausgegriffenes Teilchen im Zustand $|\psi_i\rangle$ befindet, ist

$$p_i = \frac{N_i}{N}, \quad \sum_i p_i = 1 \quad (675)$$

- Gemischter Zustand lässt sich nicht durch Wellenfunktion beschreiben

$$\nexists |\phi\rangle \text{ mit } |\phi\rangle = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \quad (676)$$

aber durch eine Dichtematrix

- Definition Dichtematrix ρ für gemischte Zustände:

$$\rho := \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| := \sum_i p_i \rho_i \quad (677)$$

Es gilt wieder $\langle A \rangle = \text{Sp}(\rho A)$:

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \sum_i p_i \langle \psi_i | A | \psi_i \rangle = \sum_i \sum_n p_i \langle \psi_i | A | n \rangle \langle n | \psi_i \rangle \\ &= \sum_i \sum_n \langle n | p_i \psi_i \rangle \langle \psi_i | A | n \rangle \\ &= \sum_n \langle n | \rho A | n \rangle = \text{Sp}(\rho A) \end{aligned}$$

Es gilt immer noch

$$\text{Sp} \rho = 1, \quad \rho^\dagger = \rho \quad (678)$$

aber nun

$$\rho^2 \neq \rho \text{ und } \text{Sp} \rho^2 < 1, \quad \text{falls } p_i \neq 0 \text{ für mehr als ein } i \quad (679)$$

Beweis 1. Aussage:

Wähle Operator $A = \mathbb{1}$

$$\rho^2 = \sum_i \sum_j |p_i \psi_i\rangle \langle \psi_i | p_j \psi_j\rangle \langle \psi_j| = \sum_i \sum_j p_i p_j |\psi_i\rangle \langle \psi_i | \psi_j\rangle \langle \psi_j| \neq \rho \quad (680)$$

Beweis der 2. Aussage:

$$\begin{aligned} \text{Sp } \rho^2 &= \sum_n \sum_{ij} \langle n | p_i \psi_i\rangle \langle \psi_i | p_j \psi_j\rangle \langle \psi_j | n\rangle \\ &= \sum_n \sum_{ij} p_i p_j \langle \psi_i | \psi_j\rangle \langle \psi_j | n\rangle \langle n | \psi_i\rangle \\ &= \sum_{ij} p_i p_j |\langle \psi_i | \psi_j\rangle|^2 < \sum_i p_i \sum_j p_j = 1 \end{aligned}$$

20 25

Zeitentwicklung der Dichtematrix ρ

- Betrachte ein ρ_i

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_i = \frac{\partial}{\partial t} (|\psi_i\rangle \langle \psi_i|) = \left(\frac{\partial}{\partial t} |\psi_i\rangle \right) \langle \psi_i| + |\psi_i\rangle \left(\frac{\partial}{\partial t} \langle \psi_i| \right) \quad (681)$$

Mit Schrödingergleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi_i\rangle = -\frac{i}{\hbar} H |\psi_i\rangle, \quad \frac{\partial}{\partial t} \langle \psi_i| = \frac{i}{\hbar} \langle \psi_i| H \quad (682)$$

folgt

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_i = -\frac{i}{\hbar} H |\psi_i\rangle \langle \psi_i| + \frac{i}{\hbar} |\psi_i\rangle \langle \psi_i| H = -\frac{i}{\hbar} H \rho_i + \frac{i}{\hbar} \rho_i H \quad (683)$$

und mit $\rho = \sum_i p_i \rho_i$ folgt die von-Neumann-Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho] \quad (684)$$

Beachte: Klassische Bewegungsgleichung für Phasenraumdichte $\rho_k(q, p, t)$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_k = \{H, \rho_k\}, \quad \underline{\text{Liouville-Gleichung}} \quad (685)$$

- Zusammenhang: Ersetze (klassische) Poisson-Klammer durch (quantenmechanischen) Kommutator

$$\{H, \rho_k\} \rightarrow -\frac{i}{\hbar}[H, \rho] \quad (686)$$

- Es gilt: $\text{Sp } \rho^2$ ist im Schrödingerbild zeitunabhängig

Beweis: Zyklische Invarianz der Spur, erinnere Zeitentwicklungsoperator $U(t, t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t - t_0)\right)$ und Unitarität $U^\dagger U = \mathbb{1}$

$$\text{Sp } \rho^2(t) = \text{Sp } U\rho(t_0)U^\dagger U\rho(t_0)U^\dagger = \text{Sp } \rho^2(t_0) \quad (687)$$

Damit folgt: Einmal rein, immer rein. Einmal gemischt, immer gemischt

Merke:

- Unterscheidung reiner und gemischter Zustand an Hand von $\overline{\rho^2} \neq \overline{\rho}$ und $\text{Sp } \overline{\rho^2} < 1$
- Auch für Dichtematrix Dynamik
- Dichtematrix-Formalismus allgemeiner als Wellenfunktion, da sich gemischte Zustände nicht durch Wellenfunktionen, wohl aber durch Dichtematrizen beschreiben lassen.

Beispiel

- Reiner Zustand: Betrachte Zwei-Niveau-System, z.B. Spin, mit $|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$
- Befindet sich System in einem der Zustände, gilt für Wellenfunktion und Dichtematrix

$$\begin{aligned} |\psi\rangle = |\uparrow\rangle &\rightarrow \rho = |\uparrow\rangle\langle\uparrow| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \text{oder } |\psi\rangle = |\downarrow\rangle &\rightarrow \rho = |\downarrow\rangle\langle\downarrow| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (688)$$

- Kohärente Superposition der Zustände, z.B.:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \rightarrow \rho = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix} \quad (689)$$

ergibt wieder einen reinen Zustand, da $\rho^2 = \rho$ und $\text{Sp } \rho^2 = 1$.

- Gemisch der Zustände mit $p_1 = p_2 = 0.5$ ergibt

$$\rho = \frac{1}{2}|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + \frac{1}{2}|\downarrow\rangle\langle\downarrow| = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix} \quad (690)$$

$$\begin{aligned} \rho^2 &= \frac{1}{4}(|\uparrow\rangle\langle\uparrow| |\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow| |\downarrow\rangle\langle\downarrow| + |\uparrow\rangle\langle\uparrow| |\downarrow\rangle\langle\downarrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow| |\uparrow\rangle\langle\uparrow|) \\ &= \frac{1}{4}|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + \frac{1}{4}|\downarrow\rangle\langle\downarrow| = \frac{1}{2}\rho \neq \rho \end{aligned}$$

- Off-Diagonalelemente des reinen Zustands in Gl. (689) beschreiben die Kohärenz zwischen $|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$, die im Gemisch nicht existiert.
- Last not least: Es gibt keine Wellenfunktion, die die Dichtematrix des gemischten Zustands ergeben würde.
- Erinnere Übungsblatt 10: Blochvektor

Bloch-Kugel

Bloch-Vektor Betrag = 1: Reiner Zustand

Bloch-Vektor Betrag < 1: Gemischter Zustand

10.4 Verschränkte Zustände

Übergang von Ein-Teilchen zu N -Teilchen Fall

- Klassische Mechanik:
Zustandsraum ist Phasenraum (q, p)
Phasenraum von N Teilchen ist das kartesische Produkt der Einteilchen Phasenräume
Dimensionen addieren sich
- Quantenmechanik:
Zustandsraum ist Hilbertraum, ein Vektorraum.
Für Vektorräume ist Produktraum für N Teilchen das Tensorprodukt der Ausgangsvektorräume
Dimensionen multiplizieren sich

Betrachte 2-Teilchen System

- Seien H_A und H_B zwei Hilberträume mit Basisvektoren $\{|e_i\rangle\}$ und $\{|f_j\rangle\}$

Definition Tensorprodukt

- Das Tensorprodukt $H = H_A \otimes H_B$ ist der Vektorraum, der durch die Paare von Basisvektoren $\{|e_i, f_j\rangle\}$ aufgespannt wird
- Nomenklatur

$$|e_i, f_j\rangle \equiv |e_i\rangle \otimes |f_j\rangle \quad (691)$$

- Das Tensorprodukt ist wieder ein Hilbertraum, Vektorgesetze gelten und Skalarprodukt existiert
- Dimension des Hilbertraums H

$$\dim H = \dim H_A \cdot \dim H_B \quad (692)$$

- Sei $|a\rangle = \sum_i a_i |e_i\rangle \in H_A$ und $|b\rangle = \sum_j b_j |f_j\rangle \in H_B$, dann ist

$$|a\rangle \otimes |b\rangle = \left(\sum_i a_i |e_i\rangle \right) \otimes \left(\sum_j b_j |f_j\rangle \right) = \sum_{ij} a_i b_j |e_i\rangle \otimes |f_j\rangle \quad (693)$$

das Tensorprodukt der beiden Vektoren, merke $a_i b_j$ für unten

Skalarprodukt

- Für Skalarprodukt von zwei Vektoren $|x\rangle, |y\rangle$ des Tensorproduktraum H

$$|x\rangle = \sum_{i,j} x_{ij} |e_i\rangle \otimes |f_j\rangle, \quad |y\rangle = \sum_{k,l} y_{kl} |e_k\rangle \otimes |f_l\rangle \quad (694)$$

gilt:

$$\langle y|x\rangle = \sum_{i,j,k,l} y_{lk}^* x_{ij} \langle e_i|e_k\rangle \langle f_j|f_l\rangle \quad (695)$$

- Im Falle von Orthonormalbasen $|e_i\rangle$ und $|f_j\rangle$:

$$\langle y|x\rangle = \sum_{i,j} y_{ji}^* x_{ij} \quad (696)$$

Anders formuliert:

Seien $|\psi\rangle, |\phi\rangle$ aus H mit $|\psi\rangle = |\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle$ und $|\phi\rangle = |\gamma\rangle \otimes |\delta\rangle$ dann gilt

$$\langle \psi|\phi\rangle = \langle \alpha|\gamma\rangle \langle \beta|\delta\rangle \quad (697)$$

Operatoren

11. Woche 16

- Sei A linearer Operator und $|\psi\rangle$ Vektor in H_A und B linearer Operator und $|\phi\rangle$ Vektor in H_B , so gilt

$$(A \otimes B)(|\psi\rangle \otimes |\phi\rangle) = A|\psi\rangle \otimes B|\phi\rangle \quad (698)$$

- Mit den Erweiterungen der Operatoren $A \rightarrow A \otimes \mathbb{1}$ und $B \rightarrow \mathbb{1} \otimes B$ auf H folgt, dass Operatoren, die auf verschiedene Hilberträume wirken, immer kommutieren

$$(A \otimes \mathbb{1})(\mathbb{1} \otimes B) = (\mathbb{1} \otimes B)(A \otimes \mathbb{1}) \quad (699)$$

- Allgemein lässt sich Operator C auf H immer als Linearkombination der Form

$$C = \sum_i A_i \otimes B_i \quad (700)$$

schreiben

Analog ist der allgemeinste Vektor $|\psi\rangle$ in H von der Form

$$|\psi\rangle = \sum_{i,j} c_{ij} |a_i\rangle \otimes |b_j\rangle \quad (701)$$

- Beachte: In diesem Sinne ist H "größer" als die Menge der Produkte von Zuständen aus H_A und H_B mit Gl. (693): c_{ij} hat N^2 , $a_i b_j$ nur $2N$ Freiheitsgrade
- Frage: Lässt sich jedem Vektor aus H ein Zustand aus H_A und H_B zuordnen ?

Separable und verschränkte Zustände

- Definition: Ein Vektor $|\psi\rangle \in H$ heißt separabel, wenn es Vektoren $|a\rangle \in H_1$ und $|b\rangle \in H_2$ gibt, so dass gilt

$$|\psi\rangle = |a\rangle \otimes |b\rangle \quad (702)$$

- Andernfalls heißt der Vektor verschränkt
Der berühmteste verschränkte (Spin-, Polarisations-)Zustand

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle + |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle) \quad (703)$$

siehe Kap. 11

- Theorem: Schmidt-Zerlegung:
Jeder Zustand $|\psi\rangle \in H = H_A \otimes H_B$ lässt sich darstellen als

$$|\psi\rangle = \sum_i \lambda_i |j_A\rangle \otimes |j_B\rangle, \quad \lambda_i \in \mathbb{R}^+, \quad \sum_i \lambda_i^2 = 1 \quad (704)$$

mit $\{|j_A\rangle\}$ Orthonormalbasis auf H_A und $\{|j_B\rangle\}$ ONB auf H_B

Wesentlich einfacher als Gl. (701), da nur über einen Index summiert wird.

- Bezüglich der Frage nach Zuordnung von Zuständen aus H_A und H_B , betrachte Projektor $|\psi\rangle\langle\psi|$ in Basis $|j_A\rangle, |j_B\rangle$

$$|\psi\rangle\langle\psi| = \sum_{j,j'} \lambda_j \lambda_{j'} |j_A\rangle\langle j'_A| \otimes |j_B\rangle\langle j'_B| \quad (705)$$

Annahme: Schmidt-Zerlegung, Gl. (704), habe nur einen nicht verschwindenden Koeffizienten, $\lambda_j = \delta_{jk}$, Zustand ist separabel.

- Es folgt:

$$|\psi\rangle\langle\psi| = |k_A\rangle\langle k_A| \otimes |k_B\rangle\langle k_B| \quad (706)$$

Bilde die partielle Spur über vollständige Basis $\{|m\rangle\}$ von H_B

$$\text{Sp}_B |\psi\rangle\langle\psi| = \sum_m |k_A\rangle\langle k_A| \langle m|k_B\rangle\langle k_B|m\rangle \quad (707)$$

$$= \sum_m |k_A\rangle\langle k_A| \underbrace{\langle k_B|m\rangle\langle m|k_B\rangle}_{=1} \quad (708)$$

$$= |k_A\rangle\langle k_A| \langle k_B|k_B\rangle = |k_A\rangle\langle k_A| \quad (709)$$

- Damit ist eindeutige Zuordnung zwischen $|\psi\rangle \in H$ und $|k_A\rangle \in H_A$ gelungen.
Analog für H_B

$$\text{Sp}_A |\psi\rangle\langle\psi| = |k_B\rangle\langle k_B| \quad (710)$$

- Interpretation:

Partielle Spurbildung bedeutet, auf alle Information des entsprechenden Unterraums zu verzichten

Das Resultat sagt, dass unter der Annahme $\lambda_j = \delta_{jk}$ der Verzicht auf die Information über einen Teilraum die Identifikation von $|\psi\rangle \in H$ mit einem Zustand im anderen Teilraum nicht beeinträchtigt.

Annahme: Schmidt-Zerlegung habe mehr als einen nicht-verschwindenden Term, verschränktes System

- Partielle Spurbildung für H_B

$$\begin{aligned} \text{Sp}_B |\psi\rangle\langle\psi| &= \sum_m \sum_{j,j'} \lambda_j \lambda_{j'} |j_A\rangle\langle j'_A| \underbrace{\langle m|j_B\rangle}_{=\delta_{mj}} \underbrace{\langle j'_B|m\rangle}_{=\delta_{j'm}} \\ &= \sum_m \lambda_m^2 |m_A\rangle\langle m_A| \end{aligned} \quad (711)$$

führt auf einen diagonalen Operator mit Eigenwerten $\lambda_m^2 < 1$ auf H_A

- Interpretation: $\text{Sp}_B |\psi\rangle\langle\psi|$ lässt sich nicht mit einem Zustand in H_A identifizieren, sondern nur mit einem Gemisch.
- Merke: Partielle Spurbildung führt im Allgemeinen auf operator-wertige Ausdrücke wie Gl. (711)

- Nur für separable Zustände gilt dies nicht.

Reduktion von Dichtematrizen

- Die Dichtematrix des Gesamtzustandes ist

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| \quad (712)$$

- Durch partielle Spurbildung

$$\begin{aligned} \rho_A &= \text{Sp}_B |\psi\rangle\langle\psi| \\ \rho_B &= \text{Sp}_A |\psi\rangle\langle\psi| \end{aligned}$$

ergeben sich die auf H_A , resp. H_B , reduzierten Dichtematrizen

- Für ρ_A , analog für ρ_B , gilt

$$\text{Sp } \rho_A^2 < 1 \iff \rho_A = \sum_i p_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i| \quad (713)$$

$$\text{oder} \quad (714)$$

$$\text{Sp } \rho_A^2 = 1 \iff \rho_A = |\phi\rangle\langle\phi| \quad (715)$$

Gilt Gl. (715), so ist der durch ρ_A beschriebene Zustand ein reiner Zustand, der durch $|\phi\rangle \in H_A$ dargestellt wird.

- Anderenfalls, Gl. (713), repräsentiert ρ_A einen gemischten Zustand

Beispiele

- Sei $\rho_A = |\phi\rangle\langle\phi|$

Dann gilt

$$\begin{aligned} \rho_A &= \left(\sum_i c_i |i\rangle \right) \left(\sum_j c_j^* \langle j| \right) \\ &= \sum_{i,j} c_i c_j^* |i\rangle\langle j| \\ &= \begin{pmatrix} |c_1|^2 & c_1 c_2^* & c_1 c_3^* & \dots \\ c_2 c_1^* & |c_2|^2 & c_2 c_3^* & \dots \\ c_3 c_1^* & c_3 c_2^* & |c_3|^2 & \dots \\ \vdots & & & \ddots \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (716)$$

Diagonalisieren führt auf

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \\ \vdots & & \ddots \end{pmatrix} \quad (717)$$

da $|\phi\rangle$ Eigenvektor von ρ_A zum Eigenwert 1 ist und der zu $|\phi\rangle$ orthogonale Unterraum zum entarteten Eigenwert 0 gehört.

- Ein gemischter Zustand hat wegen Gl. (711)

$$\text{Sp}_B |\psi\rangle\langle\psi| = \sum_m \lambda_m |m_A\rangle\langle m_A|$$

die Form

$$\begin{pmatrix} |c_1|^2 & 0 & \\ 0 & |c_2|^2 & \\ & & \ddots \end{pmatrix} \quad (718)$$

und kann nicht in die Form von Gl. (717) gebracht werden.

Merke: Ein Zustand ist genau dann verschränkt, wenn die Dichtematrizen der ausreduzierten Teilräume gemischte Zustände beschreiben

Beispiele

- Betrachte Zwei-Zustandssysteme: Spin $\frac{1}{2}$ Systeme oder Polarisation von Photonen
- $|\downarrow\rangle = |0\rangle, |\uparrow\rangle = |1\rangle$
- Wähle Basis $\{|00\rangle, |10\rangle, |01\rangle, |11\rangle\}$ mit $|ij\rangle = |i\rangle \otimes |j\rangle$

Beispiel *a*

- $|\psi_a\rangle = |0\rangle \otimes |1\rangle$
- Spin von Teilchen 1 down, Spin von Teilchen 2 up oder Polarisation von Photon 1 horizontal, Polarisation von Photon 2 vertikal.

- Dichtematrix $\rho = |\psi_a\rangle\langle\psi_a|$

$$\rho = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (719)$$

Seien $|n\rangle$ und $|m\rangle$ die Basisvektoren. Matrixelement ρ_{mn} gegeben durch

$$\rho_{mn} = \langle m|\rho|n\rangle = \langle m|\psi_a\rangle\langle\psi_a|n\rangle = \langle m|(|0\rangle \otimes |1\rangle) \langle(|0\rangle \otimes |1||n\rangle \quad (720)$$

Beispiele:

$$\begin{aligned} \rho_{13} &= \langle 00|\rho|01\rangle \\ &= \langle(\langle 0| \otimes \langle 0|)|(|0\rangle \otimes |1\rangle)\rangle \langle(\langle 0| \otimes \langle 1|)|(|0\rangle \otimes |1\rangle)\rangle \\ &= \langle 0|0\rangle \cdot \langle 0|1\rangle \cdot \langle 0|0\rangle \cdot \langle 1|1\rangle \\ &= 1 \cdot 0 \cdot 1 \cdot 1 = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \rho_{33} &= \langle 01|\rho|01\rangle \\ &= \langle(\langle 0| \otimes \langle 1|)|(|0\rangle \otimes |1\rangle)\rangle \langle(\langle 0| \otimes \langle 1|)|(|0\rangle \otimes |1\rangle)\rangle \\ &= \langle 0|0\rangle \cdot \langle 1|1\rangle \cdot \langle 0|0\rangle \cdot \langle 1|1\rangle \\ &= 1 \cdot 1 \cdot 1 \cdot 1 = 1 \end{aligned}$$

- Partielle Spurbildung bezüglich Teilchen 2 mit $(\mathbb{1} \otimes |j\rangle)$, $j = 0, 1$ Mit Gln. (707, 708, 709)

$$\begin{aligned} \text{Sp}_B |\psi\rangle\langle\psi| &= \sum_m |k_A\rangle\langle k_A| \langle m|k_B\rangle\langle k_B|m\rangle \\ &= \sum_m |k_A\rangle\langle k_A| \underbrace{\langle k_B|m\rangle\langle m|k_B\rangle}_{=1} \\ &= |k_A\rangle\langle k_A| \langle k_B|k_B\rangle = |k_A\rangle\langle k_A| \end{aligned}$$

folgt hier

$$\text{Sp}_B = |0\rangle\langle 0|$$

- Damit reduzierte Dichtematrix von ρ_1 in der H_A Basis $\{|0\rangle, |1\rangle\}$:

$$\rho_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \rho^2 = \rho \quad \text{Sp } \rho_1^2 = 1 \quad (721)$$

Demnach ist $|\psi_a\rangle$ separabel

Beispiel *b*

- $|\psi_b\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes |1\rangle$
- Teilchen 1: Superposition von Spin up und spin down, Teilchen 2: Spin up
- Dichtematrix

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (722)$$

- Reduzierte Dichtematrizen:

$$\rho_1 = \text{Sp}_2 \rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \rho_1^2 \quad (723)$$

$$\rho_2 = \text{Sp}_1 \rho = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \rho_2^2 \quad (724)$$

Damit $|\psi_b\rangle$ separabel

Beispiel *c*

- $|\psi_c\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \otimes |1\rangle) + \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle \otimes |0\rangle)$
- Beide Teilchen in Superposition beider Zustände
- Dichtematrix

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \rho^2 = \rho, \quad \text{Sp } \rho_1^2 = 1 \quad (725)$$

Reiner Zustand

- Reduzierte Dichtematrix:

$$\rho_1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (726)$$

Beachte: Diagonalelemente sind verschwunden: Dekohärenz

$$\rho_1^2 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \neq \rho_1, \quad \text{Sp } \rho_1^2 < 1 \quad (727)$$

Gilt entsprechend für ρ_2

Damit ist $|\psi_c\rangle$ nicht separabel

- Nach partieller Spurbildung ergibt sich ein Gemisch von Zuständen
- Das Gesamtsystem lässt sich nicht mit der "reduzierten" Information über die beiden Untersysteme beschreiben
- Merke: Handelt es sich bei den Dichtematrizen der ausreduzierten Teilräume um reine Zustände, ist der Zustand separabel, sind es Dichtematrizen zu gemischten Zuständen, ist der Zustand verschränkt

Verschränktheit/Separabilität, resp. Gemischtheit/Reinheit lässt sich messen

- Seien p_i Wahrscheinlichkeiten, $p_i \leq 1$, $\sum_i p_i = 1$, definiere Entropie S

$$S = - \sum_i p_i \log p_i, \quad \text{erinnere: } 0 \log 0 = 0 \quad (728)$$

Mass für Unwissenheit/Überraschung

- Von Neumann-Entropie für Dichtematrizen ρ

$$S = - \text{Sp } \rho \log \rho \quad (729)$$

- Für reine Zustände ist sie Null
- Für Gemische positiv mit $S \leq \log \dim H$
- Gleichheit bei Gleichverteilung der Zustände im Gemisch

Lessons learned

- Ununterscheidbarkeit quantenmechanischer Teilchen hat Konsequenzen:
 - Bosonen: symmetrische Wellenfunktionen
 - Fermionen: anti-symmetrische Wellenfunktionen
- Hartree-Fock als Selbstkonsistenzmethode für Viel-Elektronen Atome
- Dichtematrix als allgemeine Beschreibung quantenmechanischer Zustände
- Verschränkte Zustände auf Grund des Tensorproduktes
- Ausreduzierte Dichtematrizen (reiner) verschränkter Zustände beschreiben ein Gemisch
- Von Neumann-Entropie für Dichtematrizen misst Reinheit/Verschränktheit

1/2
12. Wo-
che
21 25

11 Einstein-Podolsky-Rosen – Paradoxon

Übung: Fassen Sie EPR paper stichwortartig zusammen

11.1 Theorien verborgener Parameter

Natürliche Erwartung an eine physikalische Theorie

- Lokal, die 1.: keine Informationsübertragung schneller als Lichtgeschwindigkeit
- Lokal, die 2.: Messung am Orte A sollte Messung am Orte B zu gleicher Zeit in keiner Weise beeinflussen
- Deterministisch: Zustand gibt eindeutiges Messergebnis
- Real: Theorie und Realität in 1 zu 1 Verhältnis

Klassische Physik:

- Alles im grünen Bereich

Quantenmechanik:

- Lokal, die 1.: O.K.
- Lokal, die 2.: Wir werden sehen
- Deterministisch: Nein
- Real: Nein, Wellenfunktion

Theorien verborgener Parameter

- Klassische Statistische Physik von 10^{23} Teilchen
 - Im Prinzip alle (deterministischen) Trajektorien ermittelbar
 - Aber: Praktisch nicht machbar und inhaltlich nicht relevant
- Übertragung auf die Quantenmechanik
 - Es gibt eine zu Grunde liegende lokale, deterministische, reale Theorie, die die individuellen Messergebnisse festlegt
 - Nur kennen wir sie nicht

- Beispiel: Spin-Messung

Quantenmechanik: Bei Messung von S_x im Eigenzustand S_z : Für jedes Teilchen 50 % Wahrscheinlichkeit für $\pm\hbar/2$

Theorie verborgener Parameter legt für jedes Teilchen fest, ob $+\hbar/2$ oder $-\hbar/2$ resultiert, so dass in je 50 % der Fälle $\pm\hbar/2$ vorkommt

Einstein, Podolsky, Rosen "Can²⁰ Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete?", 1935, modernisiert für Photonen von Bohm, 1951

- Betrachte 2 Spin 1/2 Teilchen im (verschränkten) Singulett-Zustand

$$\psi_{\text{EPR}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle) \quad (730)$$

Präparation:

- Spin 1/2 Teilchen: Zweiatomigen Molekül mit Gesamtspin 0 mit Laser in 2 Spin 1/2 Teilchen zerschießen
- Polarisierte Photonen: Parametrische Fluoreszenz von nichtlinear optischen Kristallen. Aus einem Photon der Energie E werden zwei verschränkte der Energie $E/2$
- Teilchen bewegen sich von einander weg.
- Misst man die z -Komponenten der Spins und findet bei Teilchen 1 Spin up, so ergibt sich für Teilchen 2 spin down.
- Misst man stattdessen die x -Komponenten, so impliziert $+\hbar/2$ bei Teilchen 1 $-\hbar/2$ bei Teilchen 2
- Messung an einem Teilchen legt Ergebnis für das andere fest, auch wenn dieses raum-zeitlich getrennt ist, d.h. keine Information mit Lichtgeschwindigkeit ausgetauscht werden konnte. Nicht-lokal, die 2.: "spooky action at a distance"
- Aber: Kein Widerspruch zur speziellen Relativitätstheorie, lokal, die 1., da keine Information übermittelt werden kann
- EPR: Da Teilchen separiert, kann es keine Beeinflussung der Teilchen geben. Deshalb müssen die Werte von S_x , S_z , usw. schon vor der Messung festgelegt haben.

²⁰Fehlender Artikel wird auf schlechtestes English des Russen Podolsky zurückgeführt

- Forderung nach einer vollständigen, lokalen, deterministischen, realen Theorie mit verborgenen Parameter

11.2 Bell'sche Ungleichungen

Kausale Inferenz

- Beobachtbar sind nur Korrelationen
- Von Korrelationen auf Kausalitäten schließen geht nicht
- Aber man kann auf Grund von Korrelationen bestimmte Kausalstrukturen ausschließen: Kausale Inferenz

Zwei widerstreitende Theorien

- Einigt Euch auf ein Experiment
- Berechnet Vorhersagen basierend auf den beiden Theorien
- Am Ende entscheidet das Experiment :-)

Quantenmechanische Vorhersage:

- Messung Spinkomponente S_{z_1} des ersten Teilchens in z -Richtung
Messung Spinkomponente S_{ϕ_2} des zweiten Teilchen in Winkel ϕ zur z -Achse
- Falls erste Messung $+\frac{\hbar}{2}$ ergibt, ist S_{z_2} notwendiger Weise $-\frac{\hbar}{2}$, Spinor:

$$\chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (731)$$

Spinoperator \hat{S}_ϕ mit Winkel ϕ zu z -Achse ist gegeben durch, erinnere Pauli-Spinmatrizen

$$\hat{S}_\phi = \hat{S}_z \cos \phi + \hat{S}_x \sin \phi = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \phi & \sin \phi \\ \sin \phi & -\cos \phi \end{pmatrix} \quad (732)$$

- Eigenwerte: $\pm\hbar/2$, Eigenvektoren von \hat{S}_ϕ

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\phi}{2} \\ \sin \frac{\phi}{2} \end{pmatrix}, \quad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} -\sin \frac{\phi}{2} \\ \cos \frac{\phi}{2} \end{pmatrix} \quad (733)$$

Die $\phi/2$ haben es in sich.

Entwicklung der Wellenfunktion χ_- nach Eigenvektoren von \hat{S}_ϕ

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \sin \frac{\phi}{2} \begin{pmatrix} \cos \frac{\phi}{2} \\ \sin \frac{\phi}{2} \end{pmatrix} + \cos \frac{\phi}{2} \begin{pmatrix} -\sin \frac{\phi}{2} \\ \cos \frac{\phi}{2} \end{pmatrix} \quad (734)$$

- Wahrscheinlichkeit, dass nach spin up (+) Messung an Teilchen 1, auch an Teilchen 2 spin up gemessen wird, ist:

$$P_{++}(\phi) = \sin^2 \frac{\phi}{2} \quad (735)$$

Die anderen möglichen Ergebnisse

$$P_{+-}(\phi) = \cos^2 \frac{\phi}{2}, \quad P_{-+}(\phi) = \cos^2 \frac{\phi}{2}, \quad P_{--}(\phi) = \sin^2 \frac{\phi}{2} \quad (736)$$

- Mittelwert des Produktes $S_{z_1} S_{\phi_2}$: Kovarianzkoeffizient $C(\phi)$

$$\begin{aligned} C_{QM}(\phi) &= \frac{\hbar^2}{8} (P_{++}(\phi) - P_{+-}(\phi) - P_{-+}(\phi) + P_{--}(\phi)) \\ &= \frac{\hbar^2}{4} \left(\sin^2 \frac{\phi}{2} - \cos^2 \frac{\phi}{2} \right) \\ C_{QM}(\phi) &= -\frac{\hbar^2}{4} \cos(\phi) \end{aligned} \quad (737)$$

Vorhersage von Theorien verborgener Parameter

- Parameter λ legt Werte von S_{z_1} und S_{ϕ_2} fest. Beide Teilchen wissen λ lokal
- Jedes Teilchenpaar hat bestimmten Wert von λ . Das einzige, was wir darüber wissen:

$$\int d\lambda p(\lambda) = 1 \quad (738)$$

- Kovarianzkoeffizient:

$$C_{hv}(\phi) = \int d\lambda p(\lambda) S_{z_1}(\lambda) S_{\phi_2}(\lambda) \quad (739)$$

- Betrachte weiteres Experiment mit Winkel θ zur z -Achse

$$C(\phi) - C(\theta) = \int d\lambda p(\lambda)(S_{z_1}(\lambda)S_{\phi_2}(\lambda) - S_{z_1}(\lambda)S_{\theta_2}(\lambda)) \quad (740)$$

Es muss gelten

$$S_{\phi_1}(\lambda) = -S_{\phi_2}(\lambda), \quad S_{\theta_1}(\lambda) = -S_{\theta_2}(\lambda) \quad (741)$$

Damit

$$\begin{aligned} C(\phi) - C(\theta) &= - \int d\lambda p(\lambda)S_{z_1}(\lambda)(S_{\phi_1}(\lambda) - S_{\theta_1}(\lambda)) \\ \text{mit } (S_{\phi_1}(\lambda))^2 &= \frac{\hbar^2}{4} \\ C(\phi) - C(\theta) &= - \int d\lambda p(\lambda)S_{z_1}(\lambda)S_{\phi_1}(\lambda) \left(1 - \frac{4}{\hbar^2}S_{\phi_1}(\lambda)S_{\theta_1}(\lambda)\right) \end{aligned}$$

- Betragsmässige Abschätzung

$$|C(\phi) - C(\theta)| \leq \int d\lambda p(\lambda)|S_{z_1}(\lambda)S_{\phi_1}(\lambda)| \left(1 - \frac{4}{\hbar^2}S_{\phi_1}(\lambda)S_{\theta_1}(\lambda)\right) \quad (742)$$

- Mit $|S_{z_1}(\lambda)S_{\phi_1}(\lambda)| = \frac{\hbar^2}{4}$ und $S_{\theta_1}(\lambda) = -S_{\theta_2}(\lambda)$

$$\begin{aligned} |C(\phi) - C(\theta)| &\leq \int d\lambda p(\lambda) \left(\frac{\hbar^2}{4} - S_{\phi_1}(\lambda)S_{\theta_1}(\lambda)\right) \\ &= \frac{\hbar^2}{4} + \int d\lambda p(\lambda)S_{\phi_1}(\lambda)S_{\theta_2}(\lambda) \end{aligned}$$

Korrelation hängen nur von relativer Orientierung der Messungen ab, Integral:
 $C(\theta - \phi)$

Damit

$$|C_{hv}(\phi) - C_{hv}(\theta)| - C_{hv}(\theta - \phi) \leq \frac{\hbar^2}{4} \quad (743)$$

die Bell'sche Ungleichung

- Folgt notwendig aus jeder lokalen, deterministischen, realen Theorie verborgener Parameter

Vergleich mit Vorhersage der Quantenmechanik. Betrachte Fall: $\theta = 2\phi$

- Gl. (737) ergibt:

$$C_{QM}(\phi) = -\frac{\hbar^2}{4} \cos \phi, \quad C_{QM}(\theta) = -\frac{\hbar^2}{4} \cos 2\phi \quad (744)$$

In Gl. (743) eingesetzt

$$\frac{\hbar^2}{4} (|\cos \phi - \cos 2\phi| + \cos \phi) \leq \frac{\hbar^2}{4} \quad (745)$$

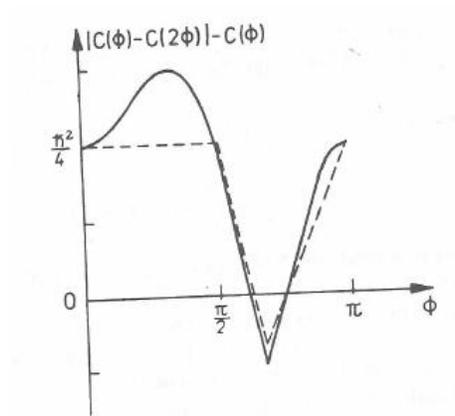


Abbildung 11.1: Bell'sche Ungleichung für QM und eine Theorie verborgener Variablen

- Für $0 \leq \phi \leq \pi/2$ ist die Ungleichung deutlich verletzt, maximale Verletzung bei $\phi = \pi/3$, Cosinus-Terme ergeben dort $3/2$.
- Ergo: Quantenmechanik im Widerspruch zu verborgenen Parametern
- Tiefer Grund: $SU(2)$ ist die zweifache Überlagerung der $SO(3)$... erinnere $\phi/2$

Vergleich mit dem Experiment

- Theorie: Bell, 1962
- Freedman, Clauser, 1972: Erster Bericht über Verletzung der Bell'schen Ungleichung
- Aspect, 1982: Deutlicher Hinweis auf Verletzung

- Kritik an den Experimenten: Loopholes
 - Effizienz der Detektoren
 - wirkliche raum-zeitliche Trennung der Detektoren
- Final ausgeräumt Dezember 2015
- Rekord für "Größe" von verschränktem Zustand $> 100 \text{ km}$

Lessons learned:

- Quantenmechanische Messungen stellen Eigenschaften nicht fest, sondern her
- Wir stehen selbst enttäuscht und sehn betroffen
den Vorhang zu und alle Fragen offen
Bertolt Brecht: Der gute Mensch von Sezuan



Significant-Loophole-Free Test of Bell's Theorem with Entangled Photons

Marissa Giustina,^{1,2,*} Marijn A. M. Versteegh,^{1,2} Sören Wengerowsky,^{1,2} Johannes Handsteiner,^{1,2} Armin Hochrainer,^{1,2} Kevin Phelan,¹ Fabian Steinlechner,¹ Johannes Kofler,³ Jan-Åke Larsson,⁴ Carlos Abellán,⁵ Waldimar Amaya,⁵ Valerio Pruneri,^{5,6} Morgan W. Mitchell,^{5,6} Jörn Beyer,⁷ Thomas Gerrits,⁸ Adriana E. Lita,⁸ Lynden K. Shalm,⁸ Sae Woo Nam,⁸ Thomas Scheidl,^{1,2} Rupert Ursin,¹ Bernhard Wittmann,^{1,2} and Anton Zeilinger^{1,2,†}

¹*Institute for Quantum Optics and Quantum Information (IQOQI), Austrian Academy of Sciences, Boltzmannngasse 3, Vienna 1090, Austria*

²*Quantum Optics, Quantum Nanophysics and Quantum Information, Faculty of Physics, University of Vienna, Boltzmannngasse 5, Vienna 1090, Austria*

³*Max-Planck-Institute of Quantum Optics, Hans-Kopfermann-Straße 1, 85748 Garching, Germany*

⁴*Institutionen för Systemteknik, Linköpings Universitet, 581 83 Linköping, Sweden*

⁵*ICFO – Institut de Ciències Fotoniques, The Barcelona Institute of Science and Technology, 08860 Castelldefels, Barcelona, Spain*

⁶*ICREA – Institució Catalana de Recerca i Estudis Avançats, 08015 Barcelona, Spain*

⁷*Physikalisch-Technische Bundesanstalt, Abbestraße 1, 10587 Berlin, Germany*

⁸*National Institute of Standards and Technology (NIST), 325 Broadway, Boulder, Colorado 80305, USA*

(Received 10 November 2015; published 16 December 2015)

Local realism is the worldview in which physical properties of objects exist independently of measurement and where physical influences cannot travel faster than the speed of light. Bell's theorem states that this worldview is incompatible with the predictions of quantum mechanics, as is expressed in Bell's inequalities. Previous experiments convincingly supported the quantum predictions. Yet, every experiment requires assumptions that provide loopholes for a local realist explanation. Here, we report a Bell test that closes the most significant of these loopholes simultaneously. Using a well-optimized source of entangled photons, rapid setting generation, and highly efficient superconducting detectors, we observe a violation of a Bell inequality with high statistical significance. The purely statistical probability of our results to occur under local realism does not exceed 3.74×10^{-31} , corresponding to an 11.5 standard deviation effect.

DOI: 10.1103/PhysRevLett.115.250401

PACS numbers: 03.65.Ud, 42.50.Xa

Einstein, Podolsky, and Rosen (EPR) argued that the quantum mechanical wave function is an incomplete description of physical reality [1]. They started their discussion by noting that quantum mechanics predicts perfect correlations between the outcomes of measurements on two distant entangled particles. This is best discussed considering Bohm's example of two entangled spin-1/2 atoms [2,3], which are emitted from a single spin-0 molecule and distributed to two distant observers, now commonly referred to as Alice and Bob. By angular momentum conservation, the two spins are always found to be opposite. Alice measures the spin of atom 1 in a freely chosen direction. The result obtained allows her to predict with certainty the outcome of Bob should he measure atom 2 along the same direction. Since Alice could have chosen any possible direction and since there is no interaction between Alice and Bob anymore, one may conclude that the results of all possible measurements by Bob must have

been predetermined. However, these predetermined values did not enter the quantum mechanical description via the wave function. This is the essence of the argument by EPR that the quantum state is an incomplete description of physical reality [1].

Bell's theorem states that quantum mechanics is incompatible with *local realism*. He showed that if we assume, in line with Einstein's theory of relativity, that there are no physical influences traveling faster than the speed of light (the assumption of *locality*) and that objects have physical properties independent of measurement (the assumption of *realism*), then correlations in measurement outcomes from two distant observers must necessarily obey an inequality [4]. Quantum mechanics, however, predicts a violation of the inequality for the results of certain measurements on entangled particles. Thus, Bell's inequality is a tool to rule out philosophical standpoints based on experimental results. Indeed, violations have been measured.

Do these experimental violations invalidate local realism? That is not the only logical possibility. The experimental tests of Bell's inequality thus far required extra assumptions, and therefore left open *loopholes* that still allow, at least in principle, for a local realist explanation of the measured data. (Note that empirically closing a

Published by the American Physical Society under the terms of the Creative Commons Attribution 3.0 License. Further distribution of this work must maintain attribution to the author(s) and the published article's title, journal citation, and DOI.



Strong Loophole-Free Test of Local Realism*

Lynden K. Shalm,^{1,†} Evan Meyer-Scott,² Bradley G. Christensen,³ Peter Bierhorst,¹ Michael A. Wayne,^{3,4} Martin J. Stevens,¹ Thomas Gerrits,¹ Scott Glancy,¹ Deny R. Hamel,⁵ Michael S. Allman,¹ Kevin J. Coakley,¹ Shellee D. Dyer,¹ Carson Hodge,¹ Adriana E. Lita,¹ Varun B. Verma,¹ Camilla Lambrocco,¹ Edward Tortorici,¹ Alan L. Migdall,^{4,6} Yanbao Zhang,² Daniel R. Kumor,³ William H. Farr,⁷ Francesco Marsili,⁷ Matthew D. Shaw,⁷ Jeffrey A. Stern,⁷ Carlos Abellán,⁸ Waldimar Amaya,⁸ Valerio Pruneri,^{8,9} Thomas Jennewein,^{2,10} Morgan W. Mitchell,^{8,9} Paul G. Kwiat,³ Joshua C. Bienfang,^{4,6} Richard P. Mirin,¹ Emanuel Knill,¹ and Sae Woo Nam^{1,‡}

¹National Institute of Standards and Technology, 325 Broadway, Boulder, Colorado 80305, USA

²Institute for Quantum Computing and Department of Physics and Astronomy, University of Waterloo, 200 University Avenue West, Waterloo, Ontario, Canada, N2L 3G1

³Department of Physics, University of Illinois at Urbana-Champaign, Urbana, Illinois 61801, USA

⁴National Institute of Standards and Technology, 100 Bureau Drive, Gaithersburg, Maryland 20899, USA

⁵Département de Physique et d'Astronomie, Université de Moncton, Moncton, New Brunswick E1A 3E9, Canada

⁶Joint Quantum Institute, National Institute of Standards and Technology and University of Maryland, 100 Bureau Drive, Gaithersburg, Maryland 20899, USA

⁷Jet Propulsion Laboratory, California Institute of Technology, 4800 Oak Grove Drive, Pasadena, California 91109, USA

⁸ICFO-Institut de Ciències Fòtiques, The Barcelona Institute of Science and Technology, 08860 Castelldefels (Barcelona), Spain

⁹ICREA-Institució Catalana de Recerca i Estudis Avançats, 08015 Barcelona, Spain

¹⁰Quantum Information Science Program, Canadian Institute for Advanced Research, Toronto, Ontario, Canada

(Received 10 November 2015; published 16 December 2015)

We present a loophole-free violation of local realism using entangled photon pairs. We ensure that all relevant events in our Bell test are spacelike separated by placing the parties far enough apart and by using fast random number generators and high-speed polarization measurements. A high-quality polarization-entangled source of photons, combined with high-efficiency, low-noise, single-photon detectors, allows us to make measurements without requiring any fair-sampling assumptions. Using a hypothesis test, we compute p values as small as 5.9×10^{-9} for our Bell violation while maintaining the spacelike separation of our events. We estimate the degree to which a local realistic system could predict our measurement choices. Accounting for this predictability, our smallest adjusted p value is 2.3×10^{-7} . We therefore reject the hypothesis that local realism governs our experiment.

DOI: 10.1103/PhysRevLett.115.250402

PACS numbers: 03.65.Ud, 42.50.Xa, 42.65.Lm

But if [a hidden variable theory] is local it will not agree with quantum mechanics, and if it agrees with quantum mechanics it will not be local. This is what the theorem says. —JOHN STEWART BELL [1].

Quantum mechanics at its heart is a statistical theory. It cannot, with certainty, predict the outcome of all single events, but instead it predicts probabilities of outcomes. This probabilistic nature of quantum theory is at odds with the determinism inherent in Newtonian physics and relativity, where outcomes can be exactly predicted given sufficient knowledge of a system. Einstein and others felt that quantum mechanics was incomplete. Perhaps quantum

systems are controlled by variables, possibly hidden from us [2], that determine the outcomes of measurements. If we had direct access to these hidden variables, then the outcomes of all measurements performed on quantum systems could be predicted with certainty. The 1927 pilot-wave theory of de Broglie was a first attempt at formulating a hidden variable theory of quantum physics [3]; it was completed in 1952 by Bohm [4,5]. While the pilot-wave theory can reproduce all of the predictions of quantum mechanics, it has the curious feature that hidden variables in one location can instantly change values because of events happening in distant locations. This seemingly violates the locality principle from relativity, which says that objects cannot signal one another faster than the speed of light. In 1935 the nonlocal feature of quantum systems was popularized by Einstein, Podolsky, and Rosen [6], and is something Einstein later referred to as “spooky actions at a distance” [7]. But in 1964 Bell showed that it is impossible to construct a hidden variable theory that obeys locality and simultaneously reproduces all of the predictions of quantum mechanics [8]. Bell’s theorem

*This work includes contributions of the National Institute of Standards and Technology, which are not subject to U.S. copyright.

Published by the American Physical Society under the terms of the Creative Commons Attribution 3.0 License. Further distribution of this work must maintain attribution to the author(s) and the published article’s title, journal citation, and DOI.

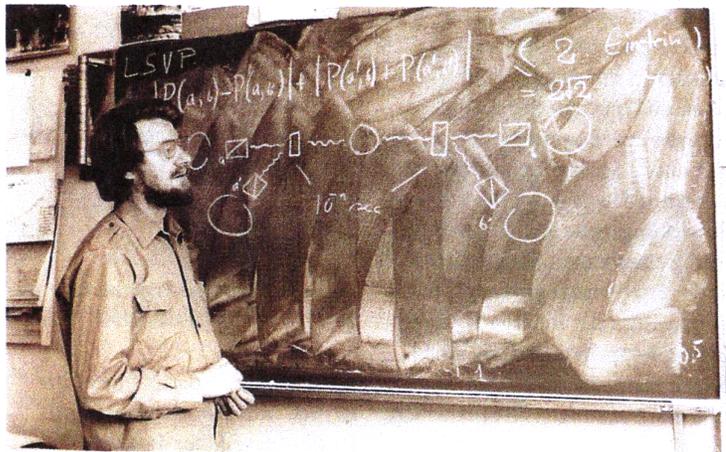
Keine Ausreden mehr!

Drei Experimente schließen durch Verletzung der Bellschen Ungleichungen lokal-realistische Modelle aus.

Wenn zwei Verdächtige bei einem Verhör dieselbe Geschichte erzählen, kann es dafür verschiedene Gründe geben. Der eine kann von der Version des anderen erfahren haben und seine Darstellung des Geschehens danach ausgerichtet haben. Oder es gibt eine gemeinsame Ursache für die Übereinstimmung: Im besten Fall erzählen beide nichts als die Wahrheit; sie können sich aber auch im Vorhinein abgesprochen haben. Finden die Verhöre gleichzeitig an verschiedenen Orten statt, liegt eine gemeinsame Ursache nahe.

Das illustriert, wie natürlich es ist, bei Korrelationen eine gemeinsame Ursache anzunehmen. Das ist auch als Reichenbach-Prinzip bekannt. Gilt dieses Prinzip auch in der Physik? In der Quantenmechanik kann es starke Korrelationen zwischen weit entfernten Teilchen geben, falls sie miteinander verschränkt sind. Möchte man diese durch gemeinsame Ursachen erklären, stößt man auf das Problem, dass dies nicht im Formalismus der Quantenmechanik vorgesehen ist. Muss sie also durch zusätzliche Parameter vervollständigt werden, die die Messresultate im Voraus festlegen? Oder muss man akzeptieren, dass es in der Quantenmechanik so etwas wie eine „spukhafte“ Fernwirkung gibt? Das ist einer der Punkte beim Gedankenexperiment von Einstein, Podolsky und Rosen [1]. Sie waren der Meinung, dass der Formalismus der Quantenmechanik durch eine vollständigere Beschreibung ersetzt werden soll.

Vor etwas mehr als fünfzig Jahren hat der irische Physiker John Bell jedoch gezeigt, dass eine solche Komplettierung nicht ohne Weiteres möglich ist [2]. Er betrachtete dabei eine beliebige physikalische Theorie, die folgende Bedingungen erfüllt: Physikalische Effekte breiten sich nicht instantan im Raum aus (Lokalität), physikalische Eigenschaften sind unabhängig von einer Messung und liegen bereits davor fest (Realismus), und ein experi-



Der irische Physiker John Bell, hier im Jahr 1982 am CERN, zeigte 1964 mathematisch, dass sich die Quantenmechanik

nicht auf eine lokal-realistische Theorie zurückführen lässt, wie es sich beispielsweise Albert Einstein erhofft hatte.

mentator kann frei wählen, welche Messungen er an einem System durchführt. Solche Theorien heißen lokal-realistisch.

Nun wird die Situation betrachtet, bei der zwei Parteien, meist Alice und Bob genannt, Messungen an zwei Teilchen durchführen. Beide haben je zwei Messungen A_1 , A_2 und B_1 , B_2 mit den Resultaten $+1$ oder -1 zur Verfügung. Dann gilt unter den obigen Annahmen die Bellsche Ungleichung

$$\langle B \rangle = \langle A_1 B_1 \rangle + \langle A_1 B_2 \rangle + \langle A_2 B_1 \rangle - \langle A_2 B_2 \rangle \leq 2,$$

die in der Quantenmechanik mit $\langle B \rangle = 2\sqrt{2}$ verletzt werden kann. Deshalb ist in der Quantenmechanik mindestens eine der obigen Annahmen nicht erfüllt.

Wie lässt sich diese Ungleichung experimentell überprüfen? Bisher hat es verschiedene Versuche mit polarisierten Photonen und in Fallen gefangenen Ionen oder neutralen Atome gegeben. Dabei ließ sich eine Verletzung beobachten, aber noch nicht so, dass alle Anhänger des lokalen Realismus ihre Überzeugungen aufgeben mussten. Dabei gibt es im Wesentlichen zwei Schlupflöcher [3]: Zum einen sind in einigen Experimenten die Messungen von Alice und Bob nicht raumartig im Sinne der Relativi-

tätstheorie getrennt. Damit ist es im Prinzip möglich, dass Alice von Bobs Wahl der Messung erfährt und ihr Messergebnis von Bobs Wahl abhängt. Ein anderes Schlupflöcher bilden die Detektoren, die nur einen Bruchteil aller Teilchen nachweisen. Dann muss man annehmen, dass die nicht detektierten Teilchen sich genauso verhalten wie die detektierten. Natürlich sind solche Zusatzannahmen im Rahmen der Quantenmechanik begründbar. Allerdings ist das Ziel eines Bell-Experiments nicht, die Quantenmechanik zu bestätigen, sondern die Klasse aller lokal-realistischen Theorien auszuschließen. Deshalb ist das Schließen aller Schlupflöcher wichtig. In drei aktuellen Experimenten ist das nun gelungen.

Das erste Experiment haben Bas Hensen und Kollegen an der TU Delft durchgeführt [4]. Dabei kamen Stickstoff-Fehlstellen-Zentren (NV-Zentren) in Diamant als Quantensystem zum Einsatz, die sich effektiv wie ein quantenmechanisches Spin-1-System verhalten. Die Energieniveaus $m_s = -1 = |\downarrow\rangle$ und $m_s = 0 = |\uparrow\rangle$ dienen als Quantenbits. Im Experiment waren Alice und Bob 1280 Meter voneinander entfernt und besaßen beide einen Diamantkristall mit NV-Zentrum.

Um die Verschränkung zwischen beiden Parteien herzustellen, be-