Einführung in die Quantenmechanik

Vorlesungsskript zum theoretischen Teil des Moduls P3 "Einführung in die Quantenphysik"

Prof. Dr. Jan Plefka

Quantenfeld- und Stringtheorie Institut für Physik



Version 16. Oktober 2013

Inhaltsverzeichnis

Inha	alt	i
0	Der V	Veg zur Quantenmechanik
	0.1	Grenzen der klassischen Physik; Quantenhypothese 1
Ι	Weller	nfunktion und Schrödingergleichung
	I.1	Das Doppelspaltexperiment und die Wellenfunktion
	I.2	Schrödinger-Gleichung für freie Teilchen
	I.3	Das Zerfließen von Wellenpaketen
	I.4	Die Wahrscheinlichkeitsdichte im Impulsraum
	I.5	Nichtvernachlässigbarkeit des Messprozesses 13
	I.6	Der Impuls im Ortsraum 13
	I.7	Operatoren und Skalarprodukt
	I.8	Schrödinger-Gleichung für Teilchen im Potential 18
	I.9	Das Ehrenfest'sche Theorem 19
	I.10	Die Kontinuitätsgleichung für die Wahrscheinlichkeitsdichte
	I.11	Mehrteilchensysteme
	I.12	Stationäre Zustände
	I.13	Eigenwertgleichungen
Π	Eindii	mensionale Probleme
	II.1	Der harmonische Oszillator
	II.2	Kohärente Zustände 33
	II.3	Potentialsprünge und Anschlussbedingungen
	II.4	Potentialstufe
		II.4.1 Teilchenenergie oberhalb der Potentialstufe $(E > V_0)$
		II.4.2 Teilchenenergie unterhalb der Potentialstufe $(E < V_0)$
		II.4.3 Grenzfall unendlich hoher Stufe $(V_0 \to \infty)$
	II.5	Potentialschwelle und Tunneleffekt
		II.5.1 $E < V_0$
		II.5.2 $E > V_0$
	II.6	Kontinuierliche Potentialberge 41
	II.7	Endlicher Potentialtopf
	II.8	Parität
	II.9	Das allgemeine Verhalten eindimensionaler stationärer Lösungen
	II.10	Streuzustände des Potentialtopfes, Resonanzen
	II.11	Das Kronig-Penney Modell
III	Grund	llagen der Quantenmechanik (Dirac Formalismus)
	III.1	Zustandsbegriff
	III.2	Präparation eines reinen Zustands
	III.3	Observable
	III.4	Hilbert-Raum
	III.5	Dualer Raum \mathcal{H}^*
	III.6	Uneigentliche (Dirac-) Vektoren
	III.7	Lineare Operatoren in \mathcal{H}

i

	III.8	Das Eigenwertproblem für hermitesche Operatoren
	III.9	Spezielle Operatoren
	III.10	Funktionen und Ableitungen von Operatoren
	III.11	Matrixelemente von Operatoren
IV	Die st	atistischen Aussagen der Quantenmechanik
	IV.1	Wahrscheinlichkeit, Erwartungswert, Streuung, Unschärfe
	IV.2	Postulate der Quantenmechanik
	IV.3	Der Messprozess
	IV.4	Verträgliche und nicht-verträgliche Observablen
	IV.5	Verallgemeinerte Heisenberg'sche Unschärferelation
	IV.6	Orts- und Impulsdarstellung
	IV.7	Eigenwertprobleme in der Ortsdarstellung
		IV.7.1 Impuls
		IV.7.2 Energie
V	Der D	Prehimpuls
	V.1	Vertauschungsrelationen
	V.2	Drehungen
	V.3	Eigenwerte von Drehimpulsoperatoren 83
	V.4	Bahndrehimpuls in Polarkoordinaten, Kugelflächenfunktionen 86
\mathbf{VI}	Zentra	alpotential und Wasserstoffatom
	VI.1	Kugelkoordinaten für Zentralpotentiale
	VI.2	Allgemeine Aussagen zu Bindungszuständen in drei Dimensionen 96
	VI.3	Das Coulomb-Potenzial: Spektrum
	VI.4	Das Coulomb-Potential: Eigenfunktionen 99
VII	Quan	tenmechanische Dynamik
	VII.1	Axiome der Quantenmechanik 103
	VII.2	Schrödinger-, Heisenberg- und Wechselwirkungsbild 106
	VII.3	Erhaltungssätze der Quantenmechanik 108

Abbildungsverzeichnis

$\begin{array}{c} 0.1 \\ 0.2 \end{array}$	Photoelektrischer Effekt	$\frac{2}{3}$
I.1 I.2 I.3 I.4 I.5	Schematischer Aufbau des Doppelspaltexperiments	6 8 8 10 10
1.0	Impulsible trag Photon \rightarrow Mars ist verhachassignar	13
II.1 II.2 II.3 II.4	Potential mit Unstetigkeit	34 35 36 38
II.5	Wellenfunktion an Potential $V = V_0 \theta(x)$ mit $V_0 > E$	38
11.6 11.7	Eindimensionale Potentialschwelle	39 30
II.7 II.8	Approximation eines kontinuierlichen Potentialbergs durch Potentialstufen	41
II.9	Eindimensionaler endlicher Potentialtopf der Breite $2a$ und Tiefe V_0	42
II.10 II 11	Rechte und linke Seite von (II.92) für verschiedene Werte von ξ . Schnittpunkte sind erlaubte Werte von qa	43
11.11	erlaubte Werte von qa	44
II.12	Energieniveauschema eines Potentialtopfes mit $\frac{3}{2}\pi < \xi < 2\pi$; Energien gerade Zustände	
II 13	sind blau, Energien ungerader Zustande rot dargestellt	45 45
II.13 II.14	Potential $V(x)$ mit Mulde	46
II.15		47
II.16 II.17	Gebundener stationärer quantenmechanischer Zustand einer Potentialmulde \ldots Auch wenn eine Energie E Eigenwert zum Hamiltonoperator ist kann sie zum Diver- gieren der Wellenfunktion im klassisch verbotenen Bereich führen und dadurch die	47
	Normierbarkeitsbedingung verletzen.	47
II.18	Potential $V(x)$ mit Berg	48
II.19	Endlicher Potentialtopf mit von links einlaufendem Teilchen mit Energie $E>0$	49
II.20	Transmissionswahrscheinlichkeit in Abhängigkeit der Energie der einlaufenden Welle für $\xi = 6, 24, 96, 384$. Die Halbwertsbreite der Maxima der Transmissionswahrschein- lichkeit (Resonanzen) wird mit wachsendem ξ kleiner, das heißt die Resonanzen wer-	
	den schärfer.	50
II.21	Schematische Darstellung der Bandstruktur eines Festkörpers	51
1I.22 1I.23	Bandlücke und Fermienergie bei den drei Typen von Festkörpern	51
11.20	Überlagerung von δ -Funktionen	51

Abbildungsverzeichnis

II.24	II.24 Eindimensionaler Festkörper mit N Elementarzellen der Länge a , zum Ring geschlo	
TT 05	sen	2
11.25	$\cos x + \alpha \frac{\sin x}{x}$	4
11.20	Bandstruktur des Kronig-Penney-Potentials	4
11.27	Enauble Energiebander über $v_0 \cdot a \dots \dots$	4
III.1	Trenner $T(A)$ mit Blenden	6
III.2	Wiederholte Messung der Observablen \hat{A} mittels Trenner $T(A)$ für (a): gleiche Blende	
	offen; (b): andere Blende offen 5	7
III.3	Messung zweier Verträglicher Observablen nacheinander	7
III.4	Trenner mit zwei Öffnungen	8
III.5	Trenner, bei dem alle Blenden geöffnet sind 5	8
III.6	Komponenten eines Vektors φ in einer diskreten bzw. einer kontinuierlichen Basis . 6	2
III.7	Diskretisierung der kontinuierlichen Koordinate x in Schritten Δx 6	2
IV 1	Die drei Akteure des Quantenmechanischen Messprozesses 7	3
IV.2	Wiederholte Messung der gleichen Observablen	3
IV.3	Nacheinander werden die Observablen \hat{A} und \hat{B} gemessen	$\overline{5}$
	0	
V.1	$\vec{x} \to \vec{x}' = \vec{x} + \delta \vec{\varphi} \times \vec{x}$ ist infinitesimale Drehung	2
V.2	Vektor in Kugelkoordinaten; $\vec{x} = r\vec{e}_r$; $d^3x = r^2 \sin\theta dr d\varphi d\theta$	7
V.3	Punktspiegelung am Ursprung in Kugelkoordinaten	0
V.4	Polardiagramme der des Betragsquadrats der ersten Kugelflächenfunktionen als Funk-	1
	tionen von θ	T
VI.1	Anziehendes Coulomb-Potential: Möglichkeit von Bindungszuständen, also Zuständen	
	$mit E < 0! \qquad $	5
VI.2	Effektives eindimensionales Potential zum Zentralpotential	6

0 Der Weg zur Quantenmechanik

0.1 Grenzen der klassischen Physik; Quantenhypothese

Teilchen	Elektromagnetische Strahlung
Teilchendynamik (Newton)	Wellendynamik (Maxwell)
Ort, Impuls	Feldgröße

 \Rightarrow deterministische Darstellung

Ab 1900: atomare und subatomare Teilchen und deren Wechselwirkungen können nicht im Rahmen der klassischen Physik beschrieben werden.

A) Teilchencharakter der elektromagnetischen Strahlung

Elektromagnetische Strahlung wird in Quanten (Photonen) absorbiert und emittiert.

a) Spektrale Energie
dichte (Energie pro Volumen- und Frequenzeinheit) der Hohlraumstrahlung
 (U - innere Energie)

$$\frac{dU}{d\omega} = \frac{1}{2\pi} \frac{dU}{d\nu} \qquad \qquad u(\omega, T) = V^{-1} \frac{dU}{d\omega} \qquad \qquad u(\omega, T) d\omega = w_{\nu}(T) d\nu = V^{-1} dU$$

klassisch:

• Rayleigh-Jeans-Gesetz:

$$u(\omega, T) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} k_{\rm B} T \qquad (k_{\rm B}: \text{Boltzmann-Konstante}) \qquad (0.1)$$
$$\int_{0}^{\infty} u(\omega) d\omega = \infty \qquad \text{Ultraviolettkatastrophe}$$

• Wien (empirisch): Wien'sches Strahlungsgesetz:

$$u(\omega, T) \approx A\omega^3 \exp\left(-\frac{g\omega}{T}\right)$$
 $(\omega \to \infty)$ (0.2)

$\mathbf{quantentheoretisch:}$

• Planck(1900): Interpolationsformel mit Planck'schem Wirkungsquantum h (universell)

$$u(\omega,T) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{\hbar\omega}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_{\rm B}T}\right) - 1} \qquad \qquad \hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.0546 \cdot 10^{-27} \rm{erg} \cdot s \qquad (0.3)$$



Abbildung 0.1: Photoelektrischer Effekt

Ableitung durch *Quantenhypothese*, dass Energie von Wandatomen (\rightarrow Oszillatoren) nur in ganzzahligen Vielfachen von $\hbar\omega$ an die Strahlung abgegeben (und absorbiert) wird.

$$u(\omega,T) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \sum_{n=0}^{\infty} \underbrace{n\hbar\omega P(n\hbar\omega)}_{\text{mittlere Oszillatorenergie}} \\ P(n\hbar\omega) = \frac{\exp\left(-\frac{n\hbar\omega}{k_{\rm B}T}\right)}{\sum_{m=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{m\hbar\omega}{k_{\rm B}T}\right)}$$
Boltzmannverteilung (0.4)

b) Photoelektrischer Effekt

Licht kann Elektronen aus Metalloberfläche herauslösen (siehe Abb. 0.1). Maximale Energie der Elektronen:

$$E_{\max} = \frac{1}{2}mv^2 = \hbar\omega - W \qquad \text{mit } W: \text{Austrittsarbeit}$$
$$E_{\max} \sim \text{Frequenz}$$

 \Rightarrow Widerspruch zu klassischer Wellentheorie (Energie \sim Intensität). Zahl der freigesetzten Elektronen: $N_{\rm e}\sim$ intensität des Lichts

 \Rightarrow Lichtquantenhypothese (Einstein 1905, Nobelpreis für Physik für 1921)

$$E = \hbar \omega \qquad \omega = 2\pi\nu$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} \qquad \stackrel{h=6.62 \cdot 10^{-34} \text{ Js}}{\hbar = 1.054 \cdot 10^{-27} \text{ erg \cdot sec}} \text{ universell}$$

$$\omega = kc \qquad k = \frac{2\pi}{\lambda} \text{ Wellenzahl}$$

Andererseits:

$$\begin{split} E &= pc \qquad \text{Energie (Relativitätstheorie:} E &= c\sqrt{m^2c^2 + \vec{p}^2} \xrightarrow{m \to 0} pc) \\ \text{Vergleich:} p &= \hbar k \qquad \text{bzw} \qquad \boxed{\vec{p} = \hbar \vec{k}} \\ (\vec{p} \parallel \vec{k}) \text{Impuls} \end{split}$$

Zuordnung von Teilchengrößen Energie, Impuls! Hohlraumstrahlung $\widehat{=}$ Photonengas

c) Compton-Effekt

Streuung von Elektron und Photon (siehe Abb. 0.2). Erhaltung des Gesamt-Viererimpulses

$$p^{\mu}_{\gamma} = \begin{pmatrix} E/c\\ \vec{p} \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} |\vec{k}|\\ \vec{k} \end{pmatrix} \quad \text{etc.} \quad (p^2_{\gamma} = 0)$$

0.1 Grenzen der klassischen Physik; Quantenhypothese



Abbildung 0.2: Compton-Effekt

$$\lambda' - \lambda = 2\pi \lambda_{\rm C} (1 - \cos \theta)$$

$$\lambda_{\rm C} = \frac{\hbar}{m_{\rm e}c}$$

$$\lambda_{\rm C} = 3.86 \cdot 10^{-13} \,\mathrm{m}$$

Comptonwellenlänge
des Elektrons ($m_{\rm e} = 0.91 \cdot 10^{-27} \,\mathrm{g}$)

B) Wellencharakter der Ausbreitungseigenschaften atomarer Teilchen

de-Broglie-Hypothese 1924

Materiewellen:

Vermutung: Teilchenstrahlen zeigen Welleneigenschaften mit de-Broglie-Relationen:

$$\vec{k} = rac{1}{\hbar} \vec{p} \quad \omega = rac{1}{\hbar} E$$

 \rightarrow Wellenzahlvektor \vec{k} , Frequenz ω zugeordnet.

Experimentelle Bestätigung durch die Beugung und Interferenz von Elektronenstrahlen an Kristallen (Davisson, Germer 1927); analog zu Röntgen-Interferenzen (von Laue 1912)

C) Quantisierung des Drehimpulses

Bohr'sches Atommodell 1913

Postulate:

- 1) Atomelektron bewegt sich auf Kreisbahn mit quantisiertem Drehimpuls $L = m_e r v = n\hbar$ ([L] = $[\hbar]$)
- 2) elektromagnetische Strahlung bei Übergang in eine andere Bahn; $\omega = \frac{E_i E_j}{\hbar}$

Berechnung von Radius r, Geschwindigkeit v und Energie E:

Kräftegleichgewicht:

$$\frac{Ze^2}{\underline{r^2}} = \frac{mv^2}{\underline{r}}$$
Coulombkraft Fliehkraft (0.5)

ulombkraft Flichkraft

$$L = mrv = n\hbar$$
 (0.6)
 $v = \frac{n\hbar}{mr}$

 \Rightarrow

0 Der Weg zur Quantenmechanik

Quadriere (0.6) und dividiere durch (0.5):

$$r = \frac{1}{Z\alpha} \lambda_{\rm C} n^2 \qquad \left(\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}\right)$$
$$v = (Z\alpha)c \cdot \frac{1}{n}$$

Weiter:

$$E_{\text{pot}} = -\frac{Ze^2}{r}$$

$$E_{\text{kin}} = \frac{mv^2}{2} \stackrel{(0.5)}{=} \frac{1}{2} \frac{Ze^2}{r}$$

$$E = E_{\text{pot}} + E_{\text{kin}} = -\frac{Ze^2}{2r} = -\frac{mv^2}{2}$$

$$\boxed{E_n = -\frac{1}{2}(Z\alpha)^2 mc^2 \frac{1}{n^2}} \quad \text{Energie ist ,,quantisiert"} \qquad (0.7)$$

$$mc^2 = 0.51 \,\text{MeV}$$

$$\alpha = \frac{e^2}{hc} \approx \frac{1}{137} \quad \text{Feinstrukturkonstante}$$

n = 1, Z = 1: $E_1 = -13.6 \,\mathrm{eV}$ Grundzustand

I.1 Das Doppelspaltexperiment und die Wellenfunktion

Wir wollen nun drei Gedankenexperimente diskutieren (siehe Abb. I.1):

a) Q sendet klassische Teilchen (Kugeln, Schrotkörner, ...) aus.

 $\mathsf{D} \text{ zeigt } \textit{identisches Bild für } \begin{cases} 1 & \mathsf{S}_1 \And \mathsf{S}_2 \text{ gemeinsam offen für } \Delta t \\ 2 & \text{ Erst nur } \mathsf{S}_1, \text{ dann nur } \mathsf{S}_2 \text{ offen für je } \Delta t \end{cases}$

Gesamtintensität: (für beide Fälle) \Rightarrow

$$I^{(a)}(x,y) = I_1^{(a)}(x,y) + I_2^{(a)}(x,y)$$

Klassisch selbstverständliches Resultat! Einschlag einzelner Teilchen messbar.

- b) Q sendet elektromagnetische Wellen (Licht, Röntgen, ...) aus. D zeigt unterschiedliche Bilder für

 - $\begin{cases} 1) & \mathsf{S}_1 \And \mathsf{S}_2 \text{ gemeinsam offen für } \Delta t \\ 2) & \mathrm{Erst nur } \mathsf{S}_1, \mathrm{ dann nur } \mathsf{S}_2 \mathrm{ offen für je } \Delta t \end{cases}$

Resultat:

1)
$$I^{(b)}(x,y) = I_1^{(b)}(x,y) + I_2^{(b)}(x,y) + I_{12}^{(b)}(x,y)$$
(I.1)

2)
$$I^{(b)}(x,y) = I_1^{(b)}(x,y) + I_2^{(b)}(x,y)$$
(I.2)

 $I_{12}^{\rm (b)}(x,y) {:}$ Interferenz
term

und

Begründung:

 $I \sim |\vec{E}|^2$ mit \vec{E} elektrischer Feldstärke (I.3)

$$|\vec{E}_1 + \vec{E}_2|^2 = |\vec{E}_1|^2 + |\vec{E}_2|^2 + \underbrace{2(\operatorname{Re}\vec{E}_1^*\vec{E}_2)}_{(\mathrm{I.4})}$$

$$\neq |\vec{E}_1|^2 + |\vec{E}_2|^2$$
 Interferenzterm (I.5)

c) Q sendet quantenmechanische Teilchen (Elektronen, ...) aus.

Die Teilchen werden einzeln in D detektiert, genau wie klassische Teilchen. Der Ankunftsort ist zufällig und nicht vorhersagbar! D zeigt unterschiedliche Bilder für

- $\begin{cases} 1) & \mathsf{S}_1 \And \mathsf{S}_2 \text{ gemeinsam offen für } \Delta t \\ 2) & \text{Erst nur } \mathsf{S}_1, \text{ dann nur } \mathsf{S}_2 \text{ offen für je } \Delta t \end{cases}$



Abbildung I.1: Schematischer Aufbau des Doppelspaltexperiments

- Q: Quelle emittiert Materieteilchen, elektromagnetische Wellen, quantenmechanische Teilchen
- S: Undurchlässiger Schirm

 S_1, S_2 : Spalte, verschließbar

D: Detektorschirm. Nachweis der Teilchen bzw. Wellen auf Fotoplatte

Resultat: Analog zu elektromagnetischer Welle:

1)
$$I^{(c)}(x,y) = I_1^{(c)}(x,y) + I_2^{(c)}(x,y) + I_{12}^{(c)}(x,y)$$
(I.6)

2)
$$I^{(c)}(x,y) = I_1^{(c)}(x,y) + I_2^{(c)}(x,y)$$
(I.7)

 $I_{12}^{(c)}(x,y)$: Interferenzterm

Elektronen interferieren! Teilchen haben auch Wellencharakter! Wir erhalten ein identisches Ergebnis für Photonen.

Welle-Teilchen-Dualität

Man spricht aufgrund dieser Dualität auch von Materiewellen.

Die Wellenfunktion Das Doppelspaltexperiment legt nahe:

- 1) Zufälligkeit im Verhalten des Elementarteilchens: Lediglich die *Wahrscheinlichkeit* des Auftreffens eines Elektrons auf D kann angegeben werden. Diese ist proportional zu I(x, y).
- 2) Einführung einer Größe, die der Amplitude \vec{E} im elektromagnetischen Fall b) entspricht:

"Wellenfunktion" oder "Wahrscheinlichkeitsamplitude" $\psi(\vec{x},t) \in \mathbb{C}$

Zuordnung: Materiewellen \leftrightarrow Wahrscheinlichkeitswellen

Hypothese: Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Quantenteilchens (Elektron, ...) am Ort \vec{x} zur Zeit t im Volumenelement d^3x lautet

I.2 Schrödinger-Gleichung für freie Teilchen

$$|\psi(\vec{x},t)|^2 d^3 x$$

Wahrscheinlichkeitsdichte oder -verteilung:

 $\rho(\vec{x},t) = |\psi(\vec{x},t)|^2$

- Erklärung des Interferenzphänomens von quantenmechanischen Teilchen im Fall c): Von S_1 und S_2 gehen Materiewellen der Wahrscheinlichkeitsamplitude $\psi_1(\vec{x}, t)$ bzw. $\psi_2(\vec{x}, t)$ aus.
 - 1) Bei einem geöffneten Spalt ergeben sich die Wahrscheinlichkeitsamplituden $\rho_1(\vec{x},t) = |\psi_1(\vec{x},t)|^2$ bzw. $\rho_2(\vec{x},t) = |\psi_2(\vec{x},t)|^2$ auf D, die dort nachgewiesen werden.
 - 2) Bei zwei geöffneten Spalten gilt das Superpositionsprinzip für die Wellenfunktion:

$$\psi(\vec{x},t) = \psi_1(\vec{x},t) + \psi_2(\vec{x},t)$$
(I.8)

 \Rightarrow Interferenz in der Wahrscheinlichkeitsamplitude

$$\rho(\vec{x},t) = |\psi_1(\vec{x},t) + \psi_2(\vec{x},t)|^2 \tag{I.9}$$

$$= |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + 2\operatorname{Re}(\psi_1^*\psi_2) \tag{I.10}$$

Führt zu der gemessenen Intensitätsverteilung!

Bemerkungen:

- i) Elektronen sind Teilchen und Wellen zugleich. Lokalisierte Einschläge einzelner Elektronen können gezählt werden.
- ii) $\rho(\vec{x},t)$ entsteht *nicht* durch Interferenz vieler gleichzeitig einfallender Elektronen! Interferenzbild baut sich bei geringer Intensität der Quelle langsam auf.
- ⇒ Wellenfunktion $\psi(\vec{x}, t)$ ist Eigenschaft jedes einzelnen Quantenteilchens und beschreibt den Zustand des Quantenteilchens.
- Messgröße: $\rho(\vec{x}, t) \in \mathbb{R}$ Wahrscheinlichkeitsdichte
- Wellenfunktion $\psi(\vec{x},t) \in \mathbb{C}$ ist nicht direkt messbar, legt jedoch $\rho(\vec{x},t)$ unmittelbar fest.

Aber: $\psi(\vec{x},t)$ und $e^{i\alpha}\psi(\vec{x},t)$ ($\alpha \in \mathbb{R}$) besitzen identisches $\rho(\vec{x},t)$. "Freie Phasenwahl"

I.2 Schrödinger-Gleichung für freie Teilchen

- **Nun:** Aufstellen einer Theorie, die die Wellenfunktion $\psi(\vec{x}, t)$ festlegt. \rightarrow Schrödingergleichung
- **Aber:** Schrödingergleichung lässt sich nicht aus ersten Prinzipien ableiten, sie hat einen axiomatischen Charakter.



Abbildung I.2: Beziehungen zwischen fundamentalen physikalischen Theorien



Abbildung I.3: Teilchen in Kiste mit Volumen ${\cal V}$

Denn: Die Quantenmechanik ist *fundamentaler* als die klassische Mechanik. Die klassische Mechanik muss sich als Grenzfall der Quantenmechanik für makroskopische Objekte ergeben: (Abb. I.2)

Gesucht: Bewegungsgleichung (Differentialgleichung) für Wellenfunktion $\psi(\vec{x}, t)$

Anforderungen aus experimentellen Befunden:

- i) Superpositionsprinzip \Rightarrow Differential gleichung für $\psi(\vec{x}, t)$ muss linear in ψ sein.
- ii) $\psi(\vec{x}, 0)$ bekannt $\Rightarrow \psi(\vec{x}, t) \forall t.$ \Rightarrow Differential gleichung muss 1. Ordnung in t sein.
- iii) Wahrscheinlichkeitserhaltung: Teilchen ist mit Sicherheit (Wahrscheinlichkeit 1) irgendwo in V (Abb. I.3).

$$\int_{V} d^{3}x |\psi(\vec{x},t)|^{2} = 1 \qquad \forall t \qquad (I.11)$$

Wobei V das dem quantenmechanischen System zur Verfügung stehende Volumen bezeichnet. Dies schränkt mögliche $\psi(\vec{x}, t)$ ein.

iv) Aus Elektronenbeugungsexperimenten: Freie ebene Wellen sollen Lösungen der Differentialgleichung sein:

$$\begin{aligned}
\dot{k} &= \vec{p}/\hbar \\
\psi(\vec{x}, t) &= c \cdot e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} & \omega &= E/\hbar \\
E &= \frac{\vec{p}^2}{2m}
\end{aligned}$$
(I.12)

Nun ist:

$$\partial_t \psi(\vec{x}, t) = -i\omega\psi(\vec{x}, t) = -i\frac{\vec{p}^2}{2m\hbar}\psi(\vec{x}, t) = -i\hbar\frac{\vec{k}^2}{2m}\psi(\vec{x}, t)$$
$$= \frac{i\hbar}{2m}\vec{\nabla}_x^2\psi(\vec{x}, t)$$
$$\Rightarrow \qquad i\hbar\partial_t\psi(\vec{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\psi(\vec{x}, t) \qquad (I.13)$$

Schrödingergleichung des freien Teilchens

"Frei" heißt: Ohne Einfluss äußerer Kräfte.

I.3 Das Zerfließen von Wellenpaketen

EBENE WELLEN $\psi_{\rm E}(\vec{x},t) = c \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{x}-\frac{\vec{p}^2}{2m}t)\right]$ haben räumlich und zeitlich homogene Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\rho(\vec{x},t) = |\psi_{\rm E}(\vec{x},t)|^2 = c^2 = \text{const.}$$
(I.14)

Sei z.B. ein Teilchen in einer makroskopischen Kiste vom Volumen V eingeschlossen, dann gilt $\int_V d^3x \, |c|^2 = 1 \implies c = 1/\sqrt{v}$. D.h. ebene Welle $\psi_{\rm E}$ beschreibt ein maximal unlokalisiertes Teilchen! Lokalisierte Zustände, d.h. solche mit räumlichem Profil, erhält man durch Superposition ebener Wellen:

$$\psi_{\varphi}(\vec{x},t) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \varphi(\vec{p}) \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{x}-\frac{\vec{p}^2}{2m}t)\right]$$
(I.15)

"3-D Wellenpaket" mit Profilfunktion $\varphi(\vec{p})$.

• Ist $\psi_{\varphi}(\vec{x}, t)$ Lösung der freien Schrödingergleichung (I.13)?

$$(i\hbar\partial_t + \frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}_x^2)\psi_{\varphi}(\vec{x},t) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\varphi(\vec{p}) \left[\frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{1}{2m}\vec{p}\cdot\vec{p}\right]e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{x} - \frac{\vec{p}^2}{2m}t)} = 0 \quad \checkmark$$
(I.16)

Gauß'sches Wellenpaket (1D)

$$\psi_{\rm G}(x,t) = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \varphi(p) \cdot \exp\left[\frac{i}{\hbar} \left(px - \frac{\vec{p}^2}{2m}t\right)\right] \tag{I.17}$$

 mit

Sei

$$\varphi(p) = A \cdot \exp\left[-\frac{d^2}{\hbar^2}(p - p_0)^2\right]$$
(I.18)

Integration (Übung):

$$\psi_{\rm G}(x,t) = A \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp\left[-\frac{d^2}{\hbar^2}(p-p_0)^2 + \frac{i}{\hbar}\left(px - \frac{p^2}{2m}t\right)\right]$$
(I.19)

$$= \frac{A}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp \, \exp\left[-a\left(p - \frac{b}{a}\right)^2 + \frac{b^2}{a} - c\right] \tag{I.20}$$



Abbildung I.4: (I.18) beschreibt Wellenpaket mit Impulsverteilung um $p_0: p \approx \left[p_0 - \frac{\hbar}{d}, p_0 + \frac{\hbar}{d}\right]$



Abbildung I.5: Zerfließen eines Gauß'schen Wellenpakets im Ortsraum

mit $a = \frac{d^2}{\hbar^2} + i \frac{t}{2m\hbar}$, $b = \frac{d^2 p_0}{\hbar^2} + i \frac{x}{2\hbar}$, $c = \frac{d^2 p_0^2}{\hbar^2}$ $\psi_{\rm G}(x,t) = \dots = \frac{A}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp\left[\frac{b^2}{a} - c\right]$ (I.21)

• Normierung: Teilchen ist mit Wahrscheinlichkeit 1 irgendwo in $x \in [-\infty, \infty]$:

$$1 \stackrel{!}{=} \int dx \, |\psi_{\rm G}(x,t)|^2 = \frac{|A|^2}{2\pi\hbar} \, \frac{\pi}{|a|} \int dx \, \exp\left[2\,{\rm Re}\left(\frac{b^2}{a} - c\right)\right] \tag{I.22}$$

$$2\operatorname{Re}\left(\frac{b^2}{a} - c\right) = -\frac{(x - vt)^2}{2d^2(1 + \Delta(t)^2)}$$
(I.23)

mit
$$v = \frac{p_0}{m}$$
, $\Delta(t) = t \frac{\hbar}{2md^2}$
Somit $A = (8\pi d^2)^{1/4}$ (I.24)

$$|\psi_{\rm G}(x,t)|^2 = \frac{1}{d\sqrt{2\pi(1+\Delta(t)^2)}} \exp\left[-\frac{(x-vt)^2}{2d^2(1+\Delta(t)^2)}\right]$$
(I.25)

 $\rho(x,t) = |\psi_{\rm G}|^2$ ist ebenfalls Gauß-Verteilung im Ortsraum. Das Maximum bewegt sich wie klassisches, freies Teilchen. $\Delta(t)$ wächst linear in t und führt zum Zerfließen des Wellenpakets (Abbildung I.5). Größenordnung der Zeit, in der sich die Breite verdoppelt:

$$\tau \sim \frac{md^2}{\hbar} \tag{I.26}$$

Sei $m = m_e, d = 10^{-8} \,\mathrm{cm} \quad \Rightarrow \quad \tau \sim 10^{-16} \,\mathrm{s}$

• Ortsmittelwert des Gauß'schen Wellenpakets

= vt

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \, |\psi_{\rm G}(x,t)|^2 \cdot x \tag{I.27}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \, |\psi_{\rm G}(x,t)|^2 \cdot (x-vt) + \int_{-\infty}^{\infty} dx \, |\psi_{\rm G}(x,t)|^2 \cdot vt \tag{I.28}$$

• Schwankungsquadrat des Ortes:

$$(\Delta x)^2 := \left\langle (x - \langle x \rangle)^2 \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \, |\psi_{\rm G}(x,t)|^2 \cdot (x - vt)^2 \tag{I.30}$$

$$= d^2 (1 + \Delta(t)^2)$$
 (I.31)

 Da

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \, e^{-\alpha x^2} = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \int_{-\infty}^{\infty} dx \, e^{-\alpha x^2} = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \tag{I.32}$$

$$=\frac{1}{2}\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha^{3/2}} = \left(\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}\right)\frac{1}{2\alpha} \tag{I.33}$$

$$\Rightarrow \qquad \Delta x = d\sqrt{1 + \Delta(t)^2} \qquad \text{Ortsunschärfe}$$
(I.34)
$$\boxed{\langle x \rangle = vt} \qquad \text{Ortsmittelwert}$$

I.4 Die Wahrscheinlichkeitsdichte im Impulsraum

• Ziel: Wahrscheinlichkeitsdichte für Impulsmessungen

Die Wahrscheinlichkeitsdichte ein Teilchen am Ort \vec{x} im Volumenelement d^3x zu finden ist $\rho(\vec{x},t)\,d^3x=|\psi(\vec{x},t)|^2\,d^3x$

- Analogie: $W(\vec{p}, t) d^3p$ beschreibt die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen mit Impuls \vec{p} in d^3p zu messen.
- Normierung: $\int d^3p W(\vec{p},t) = 1.$

Frage: WIE ERHALTEN WIR $W(\vec{p}, t)$?

• Betrachten Fourier-Transformierte der Ortswellenfunktion mit Profilfunktion $\varphi(\vec{p}, t)$:

$$\psi(\vec{x},t) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \,\varphi(\vec{p},t) \,e^{\frac{i}{\hbar}\,\vec{p}\cdot\vec{x}} \tag{I.35}$$

Dann ist

$$1 = \int d^3x \, |\psi(\vec{x}, t)|^2 \tag{I.36}$$

$$= \int d^3x \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \int \frac{d^3p'}{(2\pi\hbar)^3} e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{p}')\cdot\vec{x}}\varphi(\vec{p},t)\varphi^*(\vec{p}',t)$$
(I.37)

$$= \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p' \,\delta^{(3)}(\vec{p} - \vec{p}') \,\varphi(\vec{p}, t)\varphi^*(\vec{p}', t) \tag{I.38}$$

$$= \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} |\varphi(\vec{p}, t)|^2$$
(I.39)

In (I.37) nutzen wir
$$\int d^3x \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{p}')\cdot\vec{x}\right] = (2\pi\hbar)^3\delta^{(3)}(\vec{p}-\vec{p}')$$
 (I.40)

$$\Rightarrow \qquad \int d^3x \, |\psi(\vec{x},t)|^2 = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \, |\varphi(\vec{p},t)|^2 = 1 \tag{I.41}$$

Dies legt für die Wahrscheinlichkeitsdichte im Impulsraum die Definition nahe: **Definition I.4.1** (Wahrscheinlichkeitsdichte im Impulsraum).

$$W(\vec{p},t) := \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} |\varphi(\vec{p},t)|^2$$
(I.42)

 $\varphi(\vec{p},t)$ ist dann die *Impulswellenfunktion* $\widehat{=}$ Wahrscheinlichkeitsamplitude im Impulsraum. Beispiele:

i) EBENE WELLE:

$$\psi_{p_0}(\vec{x}, t) = C \cdot \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\vec{p}_0 \cdot \vec{x} - E_{p_0} \cdot t)\right]$$
(I.43)

$$\stackrel{!}{=} \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \varphi_{p_0}(\vec{p}, t) e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}}$$
(I.44)

$$\Rightarrow \qquad \qquad \varphi_{p_0}(\vec{p},t) = (2\pi\hbar)^3 C \,\delta^{(3)}(\vec{p}-\vec{p}_0)e^{-\frac{i}{\hbar}E_p t} \qquad \text{mit } E_p = \frac{\vec{p}^2}{2m} \tag{I.45}$$

 $\varphi(\vec{p},t)$ ist nur für $\vec{p} = \vec{p}_0$ von Null verschieden. \Leftrightarrow Ebene Welle definiert einen scharfen Impulszustand. Der Impuls ist maximal lokalisiert, der Ort völlig delokalisiert!

ii) Gauss'sches Wellenpaket: (Aus I.3, \Rightarrow 1-D)

$$\varphi(p) = A \exp(-(p - p_0)^{2d^2}/\hbar^2)$$
 (I.46)

$$\Rightarrow \qquad W(p,t) = \frac{1}{2\pi\hbar} |\varphi(p)|^2 = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{d}{\hbar} \exp\left(-2(p-p_0)^2 d^2/\hbar^2\right) \qquad (I.47)$$

 $\bullet \ {\it Impulsmittelwert:}$

$$\langle p \rangle = \int dp W(p,t)p = \int dp W(p,t) \cdot (p-p_0) + \int dp W(p,t)p_0 \qquad (I.48)$$

$$= p_0 \quad \checkmark \tag{I.49}$$



Abbildung I.6: Impulsübertrag Photon \rightarrow Mars ist vernachlässigbar.

• Impulsunschärfe:

$$(\Delta p)^2 = \left\langle (p - \langle p \rangle)^2 \right\rangle = \int dp \, W(p, t) \cdot (p - p_0)^2 = \left(\frac{\hbar}{2d}\right)^2 \quad \checkmark \tag{I.50}$$

Somit zusammen mit Ortsunschärfe aus (I.4):

$$\Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{2} \left(1 + \Delta(t)^2 \right)^{1/2} \tag{I.51}$$

Dies ist ein Spezialfall der Heisenberg'schen Unschärferelation

$$\Delta x \cdot \Delta p \ge \frac{\hbar}{2} \tag{I.52}$$

(I.51) ist kein fundamentales Ergebnis, sondern hier eine Eigenschaft der speziellen Gauß'schen Wellenfunktion. Die allgemeine Herleitung von (I.52) folgt später.

1.5 Nichtvernachlässigbarkeit des Messprozesses

Die Feststellung des Zustands eines physikalischen Systems erfordert eine Messung.

• *Klassische Physik:* (Makrokosmos) Der Einfluss der Messapparatur auf den Zustand des Systems kann vernachlässigt werden.

Beispiel: Positionsbestimmung eines Planeten (Abb. I.6)

- *Quantenphysik:* (Mikrokosmos) Eine Messung beeinflusst den Zustand des Systems maßgeblich, es ist *prinzipiell* unmöglich vom Messprozess zu abstrahieren.
 - Konsequenz: Zwei verschiedene physikalische Größen ("Observablen") können im Allgemeinen nicht mit beliebiger Präzision simultan gemessen werden!
 - *Beispiel:* Optische Positionsbestimmung eines Elektrons: Der Impulsübertrag vom Photon auf das Elektron kann nicht vernachlässigt werden.

I.6 Der Impuls im Ortsraum

Den Mittelwert des Impulses erhalten wir aus der Impulswellenfunktion $\varphi(\vec{p}, t)$:

$$\langle \vec{p} \rangle = \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \,\varphi^*(\vec{p},t) \vec{p} \,\varphi(\vec{p},t) \tag{I.53}$$

Frage: Lässt sich $\langle \vec{p} \rangle$ auch im Ortsraum berechnen?

$$\varphi(\vec{p},t) = \int d^3x \,\psi(\vec{x},t) \,e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}} \tag{I.54}$$

 somit

$$\langle \vec{p} \rangle = \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 x' \, e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}'} \psi^*(\vec{x}', t) \, \vec{p} \int d^3 x \, e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \psi(\vec{x}, t)$$

$$= \int d^3 x \, \left[-\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_x e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \right] \psi(\vec{x}, t)$$

$$= \int d^3 x \, e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_x \psi(\vec{x}, t)$$

$$= \int d^3 x' \int d^3 x \left[\underbrace{\int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\frac{i}{\hbar} (\vec{x} - \vec{x}') \cdot \vec{p}}}_{\delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}')} \right] \psi^*(\vec{x}', t) \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_x \psi(\vec{x}, t)$$

$$(I.55)$$

D.h.

$$\langle \vec{p} \rangle = \int d^3x \, \psi^*(\vec{x}, t) \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \psi(\vec{x}, t) \tag{I.57}$$

Somit
$$\vec{p} \to \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$$
 (I.58)

"Impulsoperator im Ortsraum"

In der Quantenmechanik werden physikalische Größen ("Observablen") durch *Operatoren* dargestellt. Diese sollen nun eingehender studiert werden.

I.7 Operatoren und Skalarprodukt

Operatoren wirken auf Wellenfunktionen. Diese sollen aus physikalischem Grund normierbar sein, im Sinne von

$$\int d^3x \,\psi(\vec{x})\psi^*(\vec{x}) = 1 \quad \to \text{,Quadratintegrable Funktionen}^{\text{``oder }L^2\text{-Funktionen}} \tag{I.59}$$

Definition I.7.1 (Operator). Ein Operator \hat{A} bildet $\psi \in L^2$ auf $(A\psi) \in L^2$ ab.

$$\hat{A}\psi(\vec{x}) = \varphi(\vec{x}) \in L^2 \tag{I.60}$$

Beispiele:

(1)
$$\hat{A}\psi = \psi^2 + \frac{\partial}{\partial x_1}\psi$$
 (3) $\hat{A}\psi = \vec{\nabla}\psi$
(2) $\hat{A}\psi = e^{\psi}\psi^2$ (4) $\hat{A}\psi = \vec{\nabla}^2\psi$
(I.61)

Wir schreiben Operatoren mit " $\hat{}$ " (Dach), lassen dies später jedoch häufig auch weg.

Definition I.7.2 (Linearer Operator). Ein *linearer Operator* erfüllt mit $A \cdot \psi_1 = \varphi_1, A \cdot \psi_2 = \varphi_2$

$$\hat{A}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2 \tag{I.62}$$

wobei $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$ und $\psi_1, \psi_2, \varphi_1, \varphi_2 \in L^2$.

(1) und (2) sind *nicht* linear, (3) und (4) sind linear (I.61). Beispiele linearer Operatoren:

$$\frac{\partial}{\partial x_i}, \ \vec{\nabla}, \ \vec{\nabla}^2, \ \frac{\partial}{\partial t}, \ \underbrace{f(\vec{x}, t), \ x_i}_{\text{als Multiplikator}}$$
 (I.63)

- lineare Operatoren erfüllen Relationen, die wieder auf lineare Operatoren führen:
 - Multiplikation mit Zahl $c \in \mathbb{C}$: \widehat{cA} ist linearer Operator.

$$(\hat{c}\hat{A})\psi \coloneqq c(\hat{A})\psi$$
 (I.64)

- Summe zweier Operatoren $\hat{A} + \hat{B}: \widehat{(A+B)}\psi := \hat{A}\psi + \hat{B}\psi$
- Produkt zweier Operatoren $\hat{A} \cdot \hat{B}: \widehat{(AB)}\psi := (\hat{A}(\hat{B}\psi))$
- Einheits operator: $\mathbbm{1}\psi=\psi$
- Nulloperator: $0 \cdot \psi = 0$

Es gilt
$$1A = A1 = A$$
 $0 \cdot A = A \cdot 0 = 0$ (I.65)

• Im Allgemeinen ist das Produkt von Operatoren nicht kommutativ!

$$\hat{A}\hat{B}\psi \neq \hat{B}\hat{A}\psi \tag{I.66}$$

Definition I.7.3 (Kommutator zweier linearer Operatoren). Für \hat{A}, \hat{B} lineare Operatoren ist

$$[\hat{A},\hat{B}] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \tag{I.67}$$

definiert.

Hierbei ist $[\hat{A}, \hat{B}]$ wiederum als Operator zu verstehen, d.h. es wirkt auf L^2 -Funktionen nach rechts. Beispiele:

i)

$$\begin{bmatrix} x_i, \frac{\partial}{\partial x_j} \end{bmatrix} \psi = \left(x_i \frac{\partial}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} x_i \right) \psi = x_i \frac{\partial}{\partial x_j} \psi - \delta_{ij} \psi - x_i \frac{\partial}{\partial x_j} \psi$$

= $-\delta_{ij} \psi$ (I.68)

(I.68) gilt für beliebige L^2 -Funktionen $\psi,$ deshalb gilt sogar auf Operatorebene

$$\left[x_i, \frac{\partial}{\partial x_j}\right] = -\delta_{ij} \tag{I.69}$$

ii)

$$\left[f(\vec{x}), \frac{\partial}{\partial x_j}\right] \psi = f \frac{\partial}{\partial x_j} \psi - \left(\frac{\partial}{\partial x_j}f\right) \psi - f \frac{\partial}{\partial x_j} \psi$$
$$= -\left(\frac{\partial}{\partial x_j}f\right) \psi$$
$$\Rightarrow \qquad [f(\vec{x}), \psi] = -\frac{\partial}{\partial x_j} f(\vec{x}) \tag{I.70}$$

iii)

$$[x_i, x_j] = 0$$
 (Reelle Zahlen sind vertauschbar.) (I.71)

iv)

$$\left[\frac{\partial}{\partial x_i}, \frac{\partial}{\partial x_j}\right] = 0 \quad \text{(Ableitungen von } L^2\text{-Funktionen kommutieren.)} \tag{I.72}$$

Grundlegende Kommutatoren von Orts- und Impulsoperatoren:

$$[x_i, x_j] = 0 \quad , \quad \left[\frac{\hbar}{i}\partial_i, \frac{\hbar}{i}\partial_j\right] = 0$$

$$\left[x_i, \frac{\hbar}{i}\partial_j\right] = i\hbar\,\delta_{ij}$$
(I.73)

Bzw. mit der Interpretation (I.58)

$$\begin{bmatrix} \hat{x}_i, \hat{x}_j \end{bmatrix} = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 \\ [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \,\delta_{ij}$$
(I.74)

 $Kanonische\ Kommutatorrelationen$

Definition I.7.4 (Skalar produkt). Das Skalar produkt zweier Wellenfunktionen φ und ψ in L^2 ist durch

$$(\varphi,\psi) := \int d^3x \,\varphi^*(\vec{x})\psi(\vec{x}) \tag{I.75}$$

definiert.

Eigenschaften:

$$(\varphi, \psi)^* = (\psi, \varphi) \tag{I.76}$$

Linearität:
$$(\varphi, c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1(\varphi, \psi_1) + c_2(\varphi, \psi_2)$$
 (I.77)

Antilinearität:
$$(c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2, \psi) = c_1^*(\varphi_1, \psi) + c_2^*(\varphi_2, \psi)$$
 (I.78)

Es gilt
$$(\varphi, \varphi) \ge 0$$
 (I.79)

und
$$(\varphi, \varphi) = 0 \Leftrightarrow \varphi = 0$$
 (I.80)

Operatoren im Skalarprodukt:

$$(\varphi, \hat{A}\psi) = \int d^3x \, \varphi^*(\vec{x}) \hat{A}\psi(\vec{x}) \tag{I.81}$$

Definition I.7.5 (Adjungierter Operator). \hat{A}^{\dagger} heißt zu \hat{A} adjungierter Operator. \hat{A}^{\dagger} ist definiert durch:

$$(\hat{A}^{\dagger}\varphi,\psi) = (\varphi,\hat{A}\psi) \tag{I.82}$$

D.h.:
$$\int d^3x \, (\hat{A}^{\dagger}\varphi)^* \psi = \int d^3x \, \varphi^* \hat{A}\psi \qquad \forall \varphi, \psi \in L^2$$
(I.83)

Beispiel: $(\vec{\nabla})^{\dagger} = -\vec{\nabla}$ (I.84)

da
$$(\varphi, \vec{\nabla}\psi) = \int d^3x \, \varphi^* \vec{\nabla}\psi = -\int d^3x \, (\vec{\nabla}\varphi^*)\psi$$
 (I.85)

$$= \int d^3x \, (-\vec{\nabla}\varphi)^* \psi \tag{I.86}$$

Definition I.7.6 (Hermitescher Operator). Erfüllt ein Operator $\hat{A}^{\dagger} = \hat{A}$, so heißt er "selbstadjungiert" oder *hermitesch*.

 $(\hat{A}\varphi,\psi) = (\varphi,\hat{A}\psi) \tag{I.87}$

Bemerkung::

Hermitesche Operatoren spielen in der Physik eine herausragende Rolle: Alle physikalischen Größen werden durch hermitesche Operatoren dargestellt.

$$\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\right)^{\dagger} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} = \hat{\vec{p}}$$
(I.88)

Eigenschaften:

i) Aus (I.82) folgt

$$(\hat{A}\hat{B})^{\dagger} = \hat{B}^{\dagger}\hat{A}^{\dagger}$$
(I.89)
Beweis: $(\varphi, AB\psi) = (A^{\dagger}\varphi, B\psi) = (B^{\dagger}A^{\dagger}\varphi, \psi) \stackrel{!}{=} ((AB)^{\dagger}\varphi, \psi)$

ii)

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$$
Beweis:
$$[AB, C] = ABC - CAB = ABC - ACB + ACB - CAB$$

$$= A(BC - CB) + (AC - CA)B = A[B, C] + [A, C]B$$
(I.90)

iii)

$$([A, B])^{\dagger} = -[A^{\dagger}, B^{\dagger}]$$
Beweis: $([A, B])^{\dagger} = (AB)^{\dagger} - (BA)^{\dagger} = B^{\dagger}A^{\dagger} - A^{\dagger}B^{\dagger} = -[A^{\dagger}, B^{\dagger}]$
(I.91)

Baker-Campbell-Hausdorff Identität (wichtig!)

$$e^{A}Be^{-A} = B + [A, B] + \frac{1}{2!} [A, [A, B]] + \frac{1}{3!} [A, [A, [A, B]]] + \cdots$$
 (I.92)

 $(\rightarrow \ddot{\mathrm{U}}\mathrm{bung})$

Insbesondere gilt für den Fall, dass [A, B] mit A und B kommutiert:

$$e^{A}e^{B} = e^{B}e^{A}e^{[A,B]} (I.93)$$

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{-[A,B]/2} \tag{I.94}$$

 $(\rightarrow \text{Übung})$

I.8 Schrödinger-Gleichung für Teilchen im Potential

• Wir hatten gesehen: $\langle \vec{p} \rangle = (\psi, -i\hbar \vec{\nabla} \psi)$ Weiterhin gilt für ebene, freie Wellen:

$$\psi(\vec{x},t) = C \, \exp\left[i(\vec{p}' \cdot \vec{x} - E \cdot t)/\hbar\right] \tag{I.95}$$

$$-i\hbar\vec{\nabla}\psi = \vec{p}'\cdot\psi \tag{I.96}$$

$$i\hbar\partial_t\psi = E\cdot\psi\tag{I.97}$$

• Dies legt das *Korrespondenzprinzip* nahe:

IMPULS:
$$\vec{p} \to -i\hbar \vec{\nabla}$$

ENERGIE: $E \to i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ (I.98)

Den klassischen physikalischen Größen sind Operatoren zugeordnet.

• Lassen sich klassische Beziehungen mittels dieses Korrespondenzprinzips quantenmechanischen Relationen zuordnen? Sicherlich nicht ganz, da

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m} \quad \to \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} = -\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\vec{\nabla}^2 \quad ? \tag{I.99}$$

als Operatori
dentität im Allgemeinen nicht wahr ist. Diese Gleichung
 gilt aber in Anwendung auf Wellenfunktionen eines freien Teilchens:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\psi \tag{I.100}$$

 \rightarrow Schrödingergleichung für Freie Teilchen

Anwendung des Korrespondenzprinzips auf Teilchen im Potential $V(\vec{x})$:

KLASSISCH:

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x})$$
 (I.101)

Korrespondenzprinzip: $\vec{p} \rightarrow -i\hbar \vec{\nabla}$, $E \rightarrow i\hbar \partial_t$

QUANTENMECHANISCH:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x},t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V(\vec{x})\right)\psi(\vec{x},t)$$
(I.102)

Postulat: Schrödingerglg. Eines Teilchens im Potential

Beschreibt die Dynamik der Zustandsfunktion $\psi(\vec{x}, t)$. Kompakt geschrieben:

•HAMILTONOPERATOR:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V(\vec{x}) \qquad (I.103)$$
•SCHRÖDINGERGLG.:

$$i\hbar\partial_t\psi(\vec{x},t) = \hat{H}\psi(\vec{x},t) \qquad (I.104)$$

(Vorläufige) Postulate der Quantentheorie

- 1.) Der Zustand eines Systems wird durch die Wellenfunktion $\psi(\vec{x}, t)$ beschrieben. $|\psi(\vec{x}, t)|^2 d^3x$ ist die Wahrscheinlichkeit das Teilchen zum Zeitpunkt t, am Ort \vec{x} im Volumenelement d^3x anzutreffen.
- 2.) Messgrößen (Observablen) der klassischen Physik entsprechen in der Quantentheorie hermiteschen Operatoren $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \ldots$
- 3.) Mittelwerte der Operatoren sind im Zustand $\psi(\vec{x}, t)$ des Systems durch

$$\langle A \rangle = (\psi, A\psi) = \int d^3x \, \psi^*(\vec{x}, t) A\psi(\vec{x}, t) \tag{I.105}$$

gegeben.

4.) Die Zeitentwicklung der Zustände wird durch die Schrödingerglg. beschrieben:

$$i\hbar\partial_t\psi(\vec{x},t) = H\psi(\vec{x},t) \qquad \text{mit } H = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V(\vec{x})$$
 (I.104, I.103)

Bemerkungen::

- i) Wir werden sehen, warum Observablen stets hermitesche Observablen sein müssen.
- ii) Die Wahrscheinlichkeitsdichte im Impulsraum $|\varphi(\vec{p},t)|^2/(2\pi\hbar)^3$ folgt aus (2) und (3) \rightarrow Später.

I.9 Das Ehrenfest'sche Theorem

Ziel: Klassischer Grenzfall der Quantenmechanik

- Schrödingerglg.: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi = H\psi$ (I.104)
- Komplex konjugierte Glg.: $-i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi^* = H\psi^*$ (I.106)
- Mittelwert eines beliebigen linearen Operators:

$$\langle A \rangle = \int d^3x \,\psi^*(\vec{x}, t) A \psi(\vec{x}, t) \tag{I.107}$$

Ein Operator A hängt im Allgemeinen von \vec{x} , $\vec{\nabla}$ und t ab: $A = A(\vec{x}, \vec{\nabla}, t)$. Zeitentwicklung von $\langle A \rangle$:

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle(t) = \int d^3x \left(\dot{\psi}^* A \psi + \psi^* \frac{\partial A}{\partial t} \psi + \psi^* A \dot{\psi}^* \right) \\
= \frac{i}{(1.98)} \frac{i}{\hbar} \int d^3x \left(H^* \psi^* A \psi - \psi^* A H \psi \right) + \int d^3x \, \psi^* \frac{\partial A}{\partial t} \psi \tag{I.108}$$

Intermezzo: Hermitizität des Hamiltonoperators

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V(\vec{x}) \qquad H^{\dagger} = ?$$
(I.109)

i) kinetischer Term:

Folgt auch aus bekannter Relation $(\vec{\nabla})^{\dagger} = -\vec{\nabla}$:

$$(\vec{\nabla}^2)^{\dagger} = (\vec{\nabla})^{\dagger} (\vec{\nabla})^{\dagger} = (-)^2 \vec{\nabla}^2 = \vec{\nabla}^2 \qquad \Box \qquad (I.111)$$

ii) Potentialterm: $(V(\vec{x}))^{\dagger} = V(\vec{x})$ Da $V(\vec{x})$ nur vom Ort abhängt und $(\vec{x})^{\dagger} = \vec{x}$:

$$(\psi, V(\vec{x})\psi) = \int d^3x \psi^* V(\vec{x})\psi = \int d^3x (V(\vec{x})\psi)^*\psi$$

= $(V\psi, \psi)$ \Box (I.112)

Somit:

$$\hat{H}^{\dagger} = \hat{H} \tag{I.113}$$

Zurück zur $\frac{d}{dt}\langle A \rangle$:

$$\int d^3x H^* \psi^* A \psi = (H\psi, A\psi) = (\psi, HA\psi)$$
(I.114)

Angewandt auf (I.108) ergibt sich:

$$\frac{d}{dt}\langle A \rangle = \frac{i}{\hbar} \left[(\psi, HA\psi) - (\psi, AH\psi) \right] + \left(\psi, \frac{\partial A}{\partial t} \psi \right)$$
$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H, A] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle$$
(I.115)

Ehrenfest-Theorem

Vergleich mit der klassischen Mechanik

Die Bewegungsgleichungen der generalisierten Orts- q_i und Impuls- p_i Koordinaten im Hamiltonformalismus lauten:

$$\frac{d}{dt}f(p,q,t) = \{H,f\} + \frac{\partial f}{\partial t}$$
(I.116)

Für beliebige Phasenraumfunktion f(p, q, t).

Poisson-Klammern:

$$\{g, f\} := \left(\frac{\partial g}{\partial p_i} \frac{\partial f}{\partial x_i} - \frac{\partial g}{\partial x_i} \frac{\partial f}{\partial p_i}\right)$$
(I.117)

Die Analogie der klassischen Bewegungsgleichungen (I.116) zum Ehrenfest'schen Theorem (I.115) ist offenkundig.

Berechnung der wichtigsten Kommutatoren

$$[H, x_i] = \left[\sum_{j=1}^{3} \frac{p_j^2}{2m}, x_i\right] + \underbrace{[V(\vec{x}), x_i]}_{=0}$$
$$= \sum_{j=1}^{3} \frac{1}{2m} \left(p_j \underbrace{[p_j, x_i]}_{\frac{\hbar}{i} \delta_{ij}} + [p_j, x_i] p_j \right)$$
$$= \frac{\hbar}{i} \frac{1}{m} p_i$$
$$[H, p_i] = \left[\sum_{j=1}^{3} \frac{p_j^2}{2}, p_i\right] + [V(\vec{x}), p_i]$$
(I.118)

$$p_{i}[p_{i}] = \underbrace{\left|\sum_{j=1}^{\infty} \frac{p_{j}}{2m}, p_{i}\right|}_{=0} + \left[V(\vec{x}), p_{i}\right]$$
$$= i\hbar \frac{\partial}{\partial x_{i}} V(\vec{x})$$
(I.119)

Anwendung von (I.104) auf x_i und p_i

$$\frac{d}{dt}\langle x_i \rangle = \frac{i}{\hbar} \left\langle [H, x_i] \right\rangle = \frac{1}{m} \left\langle p_i \right\rangle \tag{I.120}$$

$$\frac{d}{dt}\langle p_i \rangle = \frac{i}{\hbar} \left\langle [H, p_i] \right\rangle = -\left\langle \frac{\partial}{\partial x_i} V(\vec{x}) \right\rangle \tag{I.121}$$

Beziehungsweise mit Einführung der Kraft $\vec{K} = -\vec{\nabla}V(\vec{x})$

$$\frac{d}{dt}\langle \vec{p} \rangle = \langle \vec{K}(\vec{x}) \rangle \tag{I.122}$$

Somit quantenmechanisches Analogon der Newton'schen Bewegungsgleichungen:

$$m\frac{d^2}{dt^2}\langle \vec{x}\rangle = \langle \vec{K}(\vec{x})\rangle \tag{I.123}$$

DIE KLASSISCHEN GLEICHUNGEN GELTEN FÜR DIE MITTELWERTE. "Ehrenfest'sches Theorem"

Nebenbemerkung:

Das bedeutet nicht, dass die Mittelwerte $\langle \vec{x} \rangle$ und $\langle \vec{p} \rangle$ selbst den klassischen Bewegungsgleichungen genügen, da im Allgemeinen $\langle \vec{K}(\vec{x}) \rangle \neq \vec{K}(\langle \vec{x} \rangle)$ ist.

Bemerkung: $\langle \vec{K}(\vec{x}) \rangle = \vec{K}(\langle \vec{x} \rangle)$ ist nur gültig für lineare Funktionen $\vec{K}(\vec{x}) \Leftrightarrow$ Das Potential darf maximal quadratisch in \vec{x} sein: $V(\vec{x}) = V_0 + \vec{b} \cdot \vec{x} + \omega \vec{x}^2$. Ist dies als Näherung gültig? Wir entwickeln dazu $\vec{K}(\vec{x})$ um den Mittelwert $\langle \vec{x} \rangle$:

$$K_{i}(\vec{x}) = K_{i}(\langle \vec{x} \rangle) + (x_{j} - \langle x_{j} \rangle) K_{i,j}(\langle x \rangle) + \frac{1}{2} (x_{j} - \langle x_{j} \rangle) (x_{k} - \langle x_{k} \rangle) K_{i,j,k}(\langle x \rangle) + \cdots$$

mit $K_{i,j} := \frac{\partial}{\partial x_{j}} K_{i}$ etc.

$$\Rightarrow \langle K_i(\vec{x}) \rangle = K_i(\langle \vec{x} \rangle) + \frac{1}{2} (x_j - \langle x_j \rangle) (x_k - \langle x_k \rangle) K_{i,j,k}(\langle \vec{x} \rangle) + \cdots$$
(I.124)

Das heißt, die Näherung $\langle K_i(\vec{x}) \rangle = K_i(\langle \vec{x} \rangle)$ ist gültig, falls

$$\frac{(\Delta x_j)^2 K_{i,j,j}(\langle \vec{x} \rangle)}{K_i(\langle \vec{x} \rangle)} \ll 1$$
(I.125)

wobei $\left\langle \left(x_j - \langle x_j \rangle \right) \left(x_k - \langle x_k \rangle \right) \right\rangle = \delta_{jk} (\Delta x_k)^2$ vorausgesetzt wurde.

Nebenbemerkungen:

- i) Die Tatsache, dass $\langle \vec{x} \rangle$ für den harmonischen Oszillator der klassischen Bewegungsgleichung genügt bedeutet nicht, dass quantenmechanische Effekte für den harmonischen Oszillator unwichtig sind.
- ii) Physikalische Interpretation von (I.104): Quantenphänomene in Abweichung der klassischen Dynamik werden sichtbar, wenn die charakteristische Länge des Potentials kleiner als die des Wellenpakets ist.

1.10 Die Kontinuitätsgleichung für die Wahrscheinlichkeitsdichte

Die zeitliche Veränderung der Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(\vec{x}, t) = \psi^* \psi$ folgt aus (I.104) und (I.106):

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\vec{x},t) = \dot{\psi}^*\psi + \psi^*\dot{\psi}^* = \frac{i}{\hbar}(H\psi^*)\psi - \frac{i}{\hbar}\psi^*H\psi$$
(I.126)
$$\stackrel{||}{\stackrel{i}{\hbar}H\psi^*} - \stackrel{i}{\stackrel{-i}{\hbar}H\psi}$$

Potentialterme fallen heraus.

$$\Rightarrow \qquad \frac{\partial}{\partial t}\rho(\vec{x},t) = \frac{\hbar}{2mi} \left[(\vec{\nabla}^2 \psi^*)\psi - \psi^* \vec{\nabla}^2 \psi \right] \tag{I.127}$$

Definition I.10.1 (Wahrscheinlichkeitsstromdichte).

$$\vec{j} := \frac{\hbar}{2mi} \left[\psi^* \vec{\nabla} \psi - (\vec{\nabla} \psi^*) \psi \right]$$
(I.128)

I.11 Mehrteilchensysteme

Es folgt die Kontinuitätsgleichung

$$\partial_t \rho(\vec{x}, t) + \vec{\nabla} \vec{j} = 0 \tag{I.129}$$

Die Integralform folgt über den Gauß'schen Integralsatz für ein Volumen V mit der Oberfläche O:

$$\frac{d}{dt} \int_{V} d^3x \,\rho(\vec{x},t) = -\int_{\partial V} d\vec{f} \cdot \vec{j}(\vec{x},t) \tag{I.130}$$

Für $V = \mathbb{R}^3$ folgt so die zeitliche Konstanz der Norm:

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x \, |\psi(\vec{x}, t)|^2 = 0 \tag{I.131}$$

da für $L^2\mbox{-}{\rm Funktionen}$ auch die Stromdichte \vec{j} im Unendlichen verschwindet. Beweis:

- i) Da $\psi \in L^2$ (quadratintegrabel) muss ψ im Unendlichen stärker als $\frac{1}{|x|^{3/2}}$ abfallen.
- ii) Es seien periodische Abhängigkeiten von $\psi(\vec{x}, t)$ für $|x| \to \infty$ von der Form $e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}}$.

$$\Rightarrow \qquad \lim_{|x| \to \infty} |\vec{\nabla}\psi| < \lim_{|x| \to \infty} |\psi| < \frac{1}{|x|^{3/2}} \tag{I.132}$$

iii) Dann ist $\lim_{|x|\to\infty}|\vec{j}|<\frac{1}{|x|^3}$ und für eine Kugel mit Radius R gilt:

=

$$\lim_{V \to \infty} \int_{O} d\vec{f} \cdot \vec{j} < \lim_{R \to \infty} \int d\Omega R^2 \frac{1}{R^3} \to 0 \qquad \qquad \square (I.133)$$

I.11 Mehrteilchensysteme

Der Zustand eines N-Teilchensystems wird durch die Mehrteilchenwellenfunktion $\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N, t)$ beschrieben.

$$|\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N, t)|^2 d^{3N} x$$
 (I.134)

(I.134) entspricht der Wahrscheinlichkeit, das Teilchen Nummer 1 am Ort \vec{x}_1 , das Teilchen Nummer 2 am Ort \vec{x}_2, \ldots jeweils im Volumenelement d^3x anzutreffen. Die klassische Energie eines Mehrteilchensystems ist gegeben durch

$$E = \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} + \dots + \frac{\vec{p}_N^2}{2m_N} + V(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N, t)$$
(I.135)

Die Schrödinger-Gleichung folgt aus dem Korrespondenzprinzip $\vec{p_i} \rightarrow -i\hbar \vec{\nabla}_i$

$$i\hbar\partial_t\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_1}\vec{\nabla}_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\vec{\nabla}_2^2 - \dots - \frac{\hbar^2}{2m_N}\vec{\nabla}_N^2 + V(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N, t) \right] \psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N, t)$$
(I.136)

(I.136) zeigt insbesondere, dass $\psi(\vec{x},t)$ nicht als Massen dichte oder Ladungsdichte interpretiert werden kann. Diese Größen würden auch im Mehrteilchenfall Funktion einer Koordinate \vec{x} bleiben. Hier sehen wir, dass jedes einzelne Teilchen Welleneigenschaft besitzt.

I.12 Stationäre Zustände

Falls H zeitunabhängig ist, lässt sich die Schrödinger-Gleichung mittels Produktansatz in zeitabhängigen und ortsabhängigen Teil separieren:

Ansatz

$$\psi(\vec{x},t) = f(t) \cdot \psi(\vec{x}) \tag{I.137}$$

$$(I.104) \Rightarrow \qquad \frac{1}{f(t)} i\hbar \partial_t f(t) = \frac{1}{\psi(\vec{x})} H\psi(\vec{x}) \tag{I.138}$$

Da $\partial_t H = 0$ ist, müssen sowohl die linke als auch die rechte Seite von (I.138) unabhängig voneinander konstant sein.

$$\frac{1}{f(t)}i\hbar\partial_t f(t) = E = \text{const.}$$
(I.139)

$$\Rightarrow \qquad f(t) = C \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}E \cdot t} \tag{I.140}$$

Ortsabhängiger Teil

$$\hat{H}\psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x}) \tag{I.141}$$

Zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

Bemerkungen:

i) Die Zustände $\psi(\vec{x},t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E \cdot t}\psi(\vec{x})$ heißen stationär, da zugehörige Wahrscheinlichkeitsdichten zeitunabhängig sind: $|\psi(\vec{x},t)|^2 = |\psi(\vec{x})|^2 = \rho_{\rm st.}^2(\vec{x})$

ii) Die konstante E ist als Energie zu interpretieren, da für stationäre Zustände gilt:

$$\langle H \rangle = (\psi, H\psi) = E(\psi, \psi) = E \tag{I.142}$$

iii) Die Normierungsbedingung $(\psi, \psi) = 1$ wird die zulässigen Energien E einschränken.

I.13 Eigenwertgleichungen

Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung (I.141) ist eine Eigenwertgleichung. Definition I.13.1 (Eigenwertgleichung). ψ heißt *Eigenfunktion* zum Operator \hat{A} mit *Eigenwert* a falls

$$\hat{A}\psi = a\psi \tag{I.143}$$

"EIGENWERTGLEICHUNG"

gilt.

Dies ist völlig analog zum Eigenwertproblem in der linearen Algebra: **Theorem I.13.1.** *Eigenwerte hermitescher Operatoren sind reell.*

Beweis:

$$(\psi, A\psi) = a(\psi, \psi)$$

$$= (A\psi, \psi) = a^{*}(\psi, \psi)$$

$$\Rightarrow \qquad 0 = (a - a^{*})\underbrace{(\psi, \psi)}_{>0}$$

$$\Rightarrow \qquad a = a^{*}$$

Theorem I.13.2. Eigenfunktionen hermitescher Operatoren zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal.

Beweis:

Sei
$$\hat{A}\psi_m = a_m\psi_m$$
, $\hat{A}\psi_n = a_n\psi_n$
 $a_n(\psi_n, \psi_m) = (A\psi_n, \psi_m) = (\psi_n, A\psi_m) = a_m(\psi_n, \psi_m)$
 $\Rightarrow \quad 0 = (a_n - a_m)(\psi_n, \psi_m)$
 $\neq 0$ nach Voraussetzung
 $\Rightarrow \qquad (\psi_n, \psi_m) = 0$

Problem der Entartung: Es können aber mehrere Eigenfunktionen zu einem Eigenwert gehören (*"Entartung"*).

$$A\psi_{n,i} = a_n \psi_{n,i} \qquad i = 1, \dots, g \tag{I.144}$$

Man sagt: ", a_n ist g-fach entartet." g
 nennt man den Entartungsgrad. Die entarteten Eigenfunktionen sind im Allgemeinen nicht orthogonal zu
einander:

$$(\psi_{n,i},\psi_{n,j}) = c_{ij} \neq 0 \tag{I.145}$$

Hierbei ist c_{ij} eine hermitesche $g \times g$ Matrix. Diese kann durch eine unitäre Transformation U_{ij} auf Diagonalgestalt gebracht werden:

$$c_{ij}^{\mathrm{D}} = \sum_{k,l} U_{ik}^{\dagger} c_{kl} U_{lj} = \delta_{ij} c_j^{\mathrm{D}}$$
(I.146)

Nun ist

$$\delta_{ij}c_j^{\rm D} = \sum_{k,l} U_{ki}^*(\psi_{n,k}, \psi_{n,l})U_{lj}$$
(I.147)

$$= \left(\sum_{k} \psi_{n,k} U_{ki}, \sum_{l} \psi_{n,l} U_{lj}\right) \tag{I.148}$$

Das heißt die neuen Funktionen $\tilde{\varphi}_{n,i} := \sum_{j} \psi_{n,j} U_{ji}$ sind orthogonal zueinander! (\rightarrow Basiswechsel) Mit Normierung $\varphi_{n,i} = \tilde{\varphi}_{n,i} (\tilde{\varphi}_{n,i}, \tilde{\varphi}_{n,i})^{-1/2}$ gilt:

$$(\varphi_{n,i},\varphi_{n,j}) = \delta_{ij} \tag{I.149}$$

Orthogonalitätsrelation: Eigenfunktionen ψ_n eines hermiteschen Operators können stets so gewählt werden, dass die Orthogonalitätsrelation

$$(\psi_n, \psi_m) = \delta_{nm} \tag{I.150}$$

gilt.

Vollständigkeitsrelation: Die $\psi_n(\vec{x})$ bilden eine Basis des Funktionenraums L^2 . Für die von uns betrachteten Operatoren gilt die Vollständigkeitsrelation

$$\sum_{n} \psi_{n}^{*}(\vec{x}')\psi_{n}(\vec{x}) = \delta^{(3)}(\vec{x}' - \vec{x})$$
(I.151)

Nebenbemerkung:

Der mathematische Beweis für einen gegebenen Operator $\hat{A} = \hat{A}^{\dagger}$ ist nicht trivial.

Das heißt, die $\psi_n(\vec{x})$ bilden ein vollständiges Orthonormalsystem des L^2 .

Entwickelbarkeit (Zerlegung) einer beliebigen Zustandsfunktion $\psi(\vec{x})$ nach den $\psi_n(\vec{x})$

$$\psi(\vec{x}) = \int d^3 x' \,\delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}')\psi(\vec{x}')$$

= $\sum_n \int d^3 x' \,\psi_n^*(\vec{x}')\psi_n(\vec{x})\psi(\vec{x}')$
= $\sum_n \left(\int d^3 x' \,\psi_n^*(\vec{x}')\psi(\vec{x}')\right)\psi_n(\vec{x})$
= $\sum_n \psi_n(\vec{x}) \,(\psi_n, \psi)$ (I.152)

oder

mit

 $(\psi,\psi)=1$ und (I.150) implizieren $\sum\limits_n |c_n|^2=1.$

Entwickeln nach stationären Zuständen Orthogonalität und Vollständigkeit gelten insbesondere für Eigenfunktionen des Hamiltonoperators:

 $\psi(\vec{x}) = \sum_{n} c_{n} \psi_{n}(\vec{x})$ $c_{n} = (\psi_{n}, \psi)$

$$H\psi_n = E_n\psi_n \tag{I.154}$$

$$\psi_n(\vec{x},t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n \cdot t}\psi_n(\vec{x}) \tag{I.155}$$

mit E_n : Energieeigenwert, ψ_n : Energieeigenfunktion

(I.156)

(I.153)

Für gegebene Zustandsfunktionen zum Zeitpunktt=0folgt für alle späteren Zeiten:

$$\psi(\vec{x},t) = \sum_{n} c_n e^{-\frac{i}{\hbar} E \cdot t} \psi_n(\vec{x})$$
(I.157)
mit $c_n = \left(\psi_n, \psi(\vec{x},t=0)\right)$

II Eindimensionale Probleme

II.1 Der harmonische Oszillator

Die Quantentheorie des harmonischen Oszillators stellt das in der theoretischen Physik wichtigste Modellsystem dar. Die Hamilton-Funktion des harmonischen Oszillators lautet

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 \tag{II.1}$$

Daraus folgt für die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2\right]\psi(x) = E\psi(x)$$
(II.2)

Wir führen nun die charakteristische Länge $x_0=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ ein.

Algebraische Diagonalisierung von H

 Sei

$$a = \frac{\omega mx + ip}{\sqrt{2\omega m\hbar}} \qquad \Rightarrow \quad a^{\dagger} = \frac{\omega mx - ip}{\sqrt{2\omega m\hbar}}$$
$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^{\dagger}) \qquad \qquad p = -i\sqrt{\frac{\hbar\omega m}{2}} (a - a^{\dagger}) \qquad (\text{II.3})$$

beziehungsweise

a und
$$a^{\dagger}$$
 werden als "Leiteroperatoren" bezeichnet. Aus $[\hat{x}, \hat{p}]$ folgt:

$$\boxed{[a, a^{\dagger}] = 1 \quad [a, a] = 0 = [a^{\dagger}, a^{\dagger}]}$$

$$[a, a^{\dagger}] = 1 \quad [a, a] = 0 = [a^{\dagger}, a^{\dagger}]$$
 (II.4)

Mit x_0 geschrieben haben wir die Differential operatorschreibweise:

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{x_0} + x_0 \frac{d}{dx} \right) \qquad \qquad a^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{x_0} - x_0 \frac{d}{dx} \right)$$
(II.5)

 ${\cal H}$ ausgedrückt durch Leiter
operatoren:

$$H = \frac{1}{2}\hbar\omega(a^{\dagger}a + aa^{\dagger}) = \hbar\omega(a^{\dagger}a + 1/2)$$
(II.6)

Definition II.1.1 (Besetzungszahloperator).

$$\hat{n} := \hat{a}^{\dagger} \hat{a} \tag{II.7}$$

$$\Rightarrow \qquad H = \hbar\omega(\hat{n} + 1/2) \tag{II.8}$$

Somit wurde das Eigenwertproblem von H auf jenes von \hat{n} überführt. Dies wollen wir nun lösen.

Sei ψ_{ν} Eigenfunktion zu \hat{n} mit Eigenwert ν .

$$\hat{n}\psi_{\nu} = \nu\psi_{\nu} \tag{II.9}$$

Die ψ_{ν} seien normiert: $(\psi_{\nu}, \psi_{\nu}) = 1$. Weiterhin gilt

$$\nu \ge 0 \tag{II.10}$$

da $\nu = \nu(\psi_{\nu}, \psi_{\nu}) = (\psi_{\nu}, a^{\dagger}a\psi_{\nu}) = (a\psi_{\nu}, a\psi_{\nu}) = ||a\psi_{\nu}||^2 \ge 0.$ Das heißt, niedrigster Eigenwert ist $\nu = 0$. Aus obigem Argument folgt

$$\hat{n}\psi_0 = 0 \qquad \Rightarrow \qquad a\psi_0 = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \left(\frac{d}{dx} + \frac{x}{x_0}\right)\psi_0 = 0$$
 (II.11)

Eine auf 1 normierte Lösung dieser Differentialgleichung lautet

j

$$\psi_0(x) = \left(\sqrt{\pi}x_0\right)^{1/2} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2}$$
(II.12)

Dies ist die Grundzustandswellenfunktion des harmonischen Oszillators:

$$H\psi_0(x) = \hbar\omega(0 + 1/2)\psi_0(x) = \frac{\hbar\omega}{2}\psi_0(x)$$
(II.13)

mit der GRUNDZUSTANDSENERGIE $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$.

Weitere Kommutatoren

$$[\hat{n}, a^{\dagger}] = a^{\dagger} \qquad ; \qquad [\hat{n}, a] = -a \tag{II.14}$$

Übrige Eigenfunktionen und Eigenwerte:

Behauptung: $a^{\dagger}\psi_{\nu}$ ist Eingenfunktion zum Eigenwert $\nu + 1$.

Beweis:

$$\hat{n}a^{\dagger}\psi_{\nu} = (a^{\dagger}\hat{n} + a^{\dagger})\psi_{\nu} = (\nu + 1)a^{\dagger}\psi_{\nu}$$
(II.15)

Normierung:

$$(a^{\dagger}\psi_{\nu}, a^{\dagger}\psi_{\nu}) = (\psi_{\nu}, aa^{\dagger}\psi_{\nu}) = (\psi_{\nu}, (a^{\dagger}a + 1)\psi_{\nu})$$

= $(\nu + 1)(\psi_{\nu}, \psi_{\nu}) \ge 0$ (II.16)

Somit gilt für normierte ψ_{ν} und $\psi_{\nu+1}$:

$$\frac{1}{\sqrt{\nu+1}}a^{\dagger}\psi_{\nu} = \psi_{\nu+1} \tag{II.17}$$

beziehungsweise ausgehend von (II.12):

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n}} a^{\dagger} \psi_{n-1} = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(a^{\dagger} \right)^n \psi_0 \tag{II.18}$$

Der harmonische Oszillator besitzt ein diskretes Spektrum

$$E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$$
 $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ (II.19)

(Siehe auch Tabelle II.1)
(II.21)

Zustand	\hat{n}	$H ext{-}\mathrm{Eigenwert}$
ψ_0	0	$\hbar\omega/2$
ψ_1	1	$\hbar\omega \frac{3}{2}$
ψ_2	2	$\hbar\omega \frac{5}{2}$
ψ_3	3	$\hbar\omega\frac{7}{2}$
:	:	÷
ψ_n	n	$\hbar\omega(n+1/2)$

Tabelle II.1: Eigenzustände des harmonischen Oszillators

Interpretation von a^{\dagger} **und** a: a^{\dagger} wird als Aufsteigeoperator interpretiert (II.15). a ist Absteigeoperator, da $a\psi_{\nu}$ Eigenvektor zu \hat{n} mit Eigenwert $\nu - 1$ ist:

 $(a\psi_{\nu}, a\psi_{\nu}) = (\psi_{\nu}, a^{\dagger}a\psi_{\nu}) = \nu(\psi_{\nu}, \psi_{\nu}) \ge 0$

$$\hat{n}a\psi_{\nu} = (a\hat{n} - a)\psi_{\nu} = (\nu - 1)a\psi_{\nu}$$
 (II.20)

Normierung:

Somit ist $a\psi_{\nu} = \sqrt{\nu}\psi_{\nu-1}$ für normierte ψ_{ν} und $\psi_{\nu-1}$.

Behauptung: Mit ψ_n , n = 0, 1, 2, ... sind alle Eigenfunktionen zu H gefunden.

Beweis durch Widerspruch:

- Annahme: \exists Eigenwert $\nu = n + \alpha$ mit $0 < \alpha < 1$ und $\hat{n}\psi_{\nu} = (n + \alpha)\psi_{\nu}$.
- Dann:

$$\hat{n}(a^{n}\psi_{\nu}) = \alpha(a^{n}\psi_{\nu}) \qquad ; \quad \alpha > 0$$

$$\hat{n}(a^{n+1}\psi_{\nu}) = (\alpha - 1)(a^{n+1}\psi_{\nu}) \quad ; \quad (\alpha - 1) < 0$$

(II.22)

Somit hätten wir eine Eigenfunktion $\psi_{\alpha-1} = a^{n+1}\psi_{\nu}$ mit *negativem* Eigenwert konstruiert.

Norm:
$$(a^{n+1}\psi_{\nu}, a^{n+1}\psi_{\nu}) = (a^n\psi_{\nu}, (a^{\dagger}a)a^n\psi_{\nu}) = \alpha \cdot (a^n\psi_{\nu}, a^n\psi_{\nu}) > 0$$
 (II.23)

Es gibt keine normierbare Eigenfunktion mit negativem Eigenwert (siehe auch II.2).

Das heißt, wir haben sämtliche Eigenwerte und Eigenfunktionen gefunden. Die $a^{\dagger}(a)$ erhöhen (erniedrigen) den Energieeigenwert um $\hbar\omega$. Deshalb werden die Erzeugungs- (Vernichtungs-) Operatoren auch Leiteroperatoren genannt.

Bemerkungen:

i) \hat{n} besitzt durchaus Eigenfunktionen mit negativen Eigenwerten. Diese sind jedoch nicht in $L^2.$

Beispiel: $\psi_{-1} = e^{\frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0}\right)^2}$ ist nicht quadratintegrabel und erfüllt $\hat{n}\psi_{-1} = -\psi_{-1}$.

ii) Der Grundzustand ist nicht entartet, da $a\psi_0 = 0$ nur eine Lösung besitzt. Daraus folgt, dass auch alle angeregten Zustände nicht entartet sind.

Aus (II.18) ergeben sich die Energieeigenzustände des harmonischen Oszillators zu

$$\psi_n = \left(n!\sqrt{\pi}x_0\right)^{-1/2} \left(a^{\dagger}\right)^n e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2}$$
(II.24)

II Eindimensionale Probleme

beziehungsweise

$$\psi_n = \left(2^n n! \sqrt{\pi} x_0\right)^{-1/2} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0}\right)^2} H_n\left(\frac{x}{x_0}\right)$$
(II.25)

mit $H_n(x)$: Hermite-Polynome Definition II.1.2 (Hermite-Polynome).

$$H_{n}(x) := e^{\frac{x^{2}}{2}} \left(\sqrt{2}a^{\dagger}\right)^{n} \Big|_{x_{0}=1} e^{-\frac{x^{2}}{2}}$$

$$= e^{x^{2}} \underbrace{e^{-\frac{x^{2}}{2}} \left(x - \frac{d}{dx}\right)^{n} e^{\frac{x^{2}}{2}}}_{= (-)^{n} \frac{d^{n}}{dx^{n}}} e^{-x^{2}}$$

$$H_{n}(x) = (-)^{n} e^{x^{2}} \frac{d^{n}}{dx^{n}} e^{-x^{2}}$$
(II.26)

Eigenschaften der Hermite-Polynome

 \Rightarrow

• $H_n(x)$ ist Polynom vom Grad n:

$$H_0(x) = 1 H_3(x) = 8x^3 - 12x H_1(x) = 2x H_4(x) = 16x^4 - 48x^3 + 12 (II.27) H_2(x) = 4x^2 - 2 H_5(x) = 32x^5 - 160x^3 + 120x (II.27)$$

- $H_n(-x) = (-)^n H(x)$
- Orthogonalitäts relation:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \, e^{-x^2} H_n(x) H_m(x) = \sqrt{\pi} 2^n n! \delta_{mn} \tag{II.28}$$

• Erzeugende Funktion:

$$e^{-t^2 + 2tx} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} t^n H_n(x)$$
(II.29)

• Differentialgleichung:

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - 2x\frac{d}{dx} + 2n\right]H_n(x) = 0$$
(II.30)

• Vollständigkeit:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \psi_n(x)\psi_n(x') = \delta(x - x') \tag{II.31}$$

II.2 Kohärente Zustände

Für stationäre Zustände des harmonischen Oszillators gilt $\langle x \rangle = 0.$

$$\langle x \rangle = \frac{x_0}{\sqrt{2}} (\psi_n, (a+a^{\dagger})\psi_n) = \frac{x_0}{\sqrt{2}} \left[\sqrt{n}(\psi_n, \psi_{n-1}) + \sqrt{n+1}(\psi_n, \psi_{n+1}) \right] = 0$$
(II.32)

Ebenso gilt $\langle p \rangle = 0$ für stationäre Zustände. Demnach haben die stationären Zustände nichts mit klassischen Oszillatorbewegungen gemein! Wir wollen nun Zustände φ_{α} konstruieren, für die $\langle x \rangle \neq 0$ ist.

$$\hat{a}\varphi_{\alpha} = \alpha\varphi_{\alpha} \qquad \qquad \alpha \in \mathbb{C} \quad (\text{II.33})$$

"Kohärente Zustände"

Dann ist

Ansatz:

$$\langle x \rangle = \frac{x_0}{\sqrt{2}} (\alpha + \alpha^*) = \sqrt{2} x_0 \operatorname{Re}(\alpha)$$
(II.34)

Entwicklung nach Eigenfunktionen von \hat{H}

 \Rightarrow

 \Rightarrow

$$\varphi_{\alpha}(x) = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \psi_n(x)$$
(II.35)

Zeitentwicklung Die Zeitentwicklung der kohärenten Zustände folgt aus der bekannten Zeitentwicklung der ψ_n :

$$\psi_n(x,t) = e^{-i\omega(n+1/2)t}\psi_n(x)$$
 (II.36)

$$\varphi_{\alpha}(x,t) = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left(\alpha e^{-i\omega t}\right)^n}{\sqrt{n!}} \psi_n \, e^{-\frac{i}{2}\omega t} \tag{II.37}$$

bzw.

 \Rightarrow

 \Rightarrow

$$\varphi_{\alpha}(x,t) = \varphi_{\alpha(t)}(x) e^{-\frac{i}{2}\omega t} \quad \text{mit } \alpha(t) = \alpha e^{-i\omega t}$$
(II.38)

Ortsmittelwert

$$\langle x \rangle(t) = (\varphi_{\alpha(t)}, x\varphi_{\alpha(t)}) = \frac{x_0}{\sqrt{2}} (\alpha(t) + \alpha^*(t))$$
(II.39)

oder mit $\alpha = |\alpha| e^{i\delta}$

$$\langle x \rangle(t)\sqrt{2}x_0|\alpha|\cos(\omega t - \delta)$$
 (II.40)



Abbildung II.1: Potential mit Unstetigkeit

Der Ortsmittelwert eines kohärenten Zustands besitzt identische Zeitabhängigkeit wie die klassische Trajektorie.

II.3 Potentialsprünge und Anschlussbedingungen

Es ist häufig sinnvoll, reale Potentiale durch Stufen anzunähern. Deshalb wollen wir zunächst klären, wie sich die Wellenfunktion an einer Unstetigkeit des Potentials verhält.

a) Wie verhält sich $\psi(x)$ und $\psi'(x)$ an einer Unstetigkeit? Wir betrachten nun einen Potentialsprung wie in Abb. II.1:

$$V(x \approx a) = V_0 \theta(x - a) + V_{\text{stetig}}(x)$$
(II.41)

Einschub: Theta-Funktion: $\theta(x) := \begin{cases} 1 & x \ge 0\\ 0 & x < 0 \end{cases}$ $\theta'(x) = \delta(x)$ Da $f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dy \, \delta(x - y) f(y)$ $= \int_{-\infty}^{\infty} dy \, \theta'(x - y) f(y)$ $= -\int_{-\infty}^{\infty} dy \, \theta(x - y) f'(y)$ $= -\int_{x}^{\infty} dy \, f'(y) = f(x) - \widehat{f(\infty)} \quad \text{für } f \in L^2$



Abbildung II.2: Potential mit δ -Funktionssingularität

Schrödinger-Gleichung:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} \left(E - V(x) \right) \psi(x) \tag{II.42}$$

Da $V(x) \sim \theta(x-a)$ muss auch $\psi''(x) \sim \theta(x-a)$ gelten. $\psi(x)$ und $\psi'(x)$ müssen jedoch stetig bei x = a sein, da ansonsten

$$\psi(x) \sim \theta(x-a) \quad \Rightarrow \quad \psi'' \sim \delta'(x-a) \quad \notin \psi'(x) \sim \theta(x-a) \quad \Rightarrow \quad \psi'' \sim \delta(x-a) \quad \notin$$
(II.43)

Daraus folgen die Anschlussbedingungen:

Stetigkeit der logarithmischen Ableitung:

$$\frac{d}{da}\ln\psi_{\rm I}(a) = \frac{d}{da}\ln\psi_{\rm II}(a) \tag{II.46}$$

b) Dirac δ -Funktionssingularität

$$V(x) = V_0 \,\delta(x-a) + V_{\text{stetig}}(x) \tag{II.47}$$

Siehe auch Abb. II.2. Das Verhalten der Wellenfunktion erhalten wir durch Integration der stationären Schrödinger-Gleichung von 1 nach 2:

$$\int_{1}^{2} \psi''(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_{1}^{2} (E - V(x)) \psi(x) \, dx \tag{II.48}$$

Nimmt man an, dass $\psi(x)$ stetig ist, dann verbleiben im Grenzfall $1 \rightarrow a, a \leftarrow 2$ lediglich die linke Seite und der δ -Funktionsterm übrig.

$$\psi'_{\rm II}(a) - \psi'_{\rm I}(a) = \frac{2m}{\hbar^2} V_0 \psi(a)$$
 (II.49)

Das heißt, es ergeben sich die Anschlussbedingungen

$$\psi_{\rm I}(a) = \psi_{\rm II}(a) \qquad \psi_{\rm II}'(a) - \psi_{\rm I}'(a) = \frac{2m}{\hbar^2} V_0 \psi_{\rm I/II}(a)$$
(II.50)

35

(II.45)



Abbildung II.3: Potentialstufe in einer Dimension

II.4 Potentialstufe

Wir betrachten nun das Potential

$$V(x) = V_0 \theta(x) \qquad ; \qquad \theta(x) = \begin{cases} 1 & x \ge 0 & (\text{II}) \\ 0 & x < 0 & (\text{I}) \end{cases}$$
(II.51)

(Siehe auch Abb. II.3) Wir betrachten dazu die Schrödinger-Gleichung im Gebiet (I) und (II) getrennt:

I:
$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi$$
(II.52)

II:
$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}\psi$$
 (II.53)

Das Vorzeichen von $(E - V_0)$ wird die Form der Lösung in Gebiet II diktieren.

II.4.1 Teilchenenergie oberhalb der Potentialstufe ($E > V_0$)

Dann ist:

I:
$$\psi'' = -k^2 \psi$$
 $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ (II.54)

II:
$$\psi'' = -q^2 \psi$$
 $q = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}$ (II.55)

Dies sind die Schwingungsgleichungen mit den Fundamentallösungen

$$e^{i\kappa x}, e^{-i\kappa x}$$
 $\kappa = \begin{cases} k & \text{wenn } x < 0 \\ q & \text{wenn } x > 0 \end{cases}$ (II.56)

Wir wollen den Einfall des Teilchens von links (x < 0) betrachten: Im Gebiet I findet eine Überlagerung von einfallender und reflektierter Welle statt. Im Gebiet II ist nur die durchgehende (transmittierte) Welle vorhanden:

$$\psi_{\mathrm{I}}(x) = e^{ikx} + R e^{-ikx}$$

$$\psi_{\mathrm{II}}(x) = T e^{iqx}$$

$$\psi(x) = \theta(-x)\psi_{\mathrm{I}}(x) + \theta(x)\psi_{\mathrm{II}}(x)$$

(II.57)

Wir bestimmen nun R und T aus den Anschlussbedingungen (II.50)

$$1 + R = T$$

$$ik(1 - R) = iq T$$

$$R = \frac{k - q}{k + q}$$

$$T = \frac{2k}{k + q}$$
(II.58)

Wir wollen nun eine physikalische Interpretation dieser Koeffizienten ableiten, indem wir die Wahrscheinlichkeitsstromdichten $\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi}(\psi^* \vec{\nabla} \psi - c.c.)$ bestimmen:

$$j_{I}(x) = \frac{\hbar}{2mi} \left[(e^{-ikx} + R^{*} e^{ikx}) ik (e^{ikx} - R e^{-ikx}) - c.c. \right]$$

$$= \frac{\hbar}{2mi} \left[ik (1 - |R|^{2} - R e^{-2ikx} + R^{*} e^{2ikx}) - c.c \right]$$

$$= \frac{\hbar k}{m} (1 - |R|^{2}) = \underbrace{j_{\text{einf}}(x)}_{\frac{\hbar k}{m}} - \underbrace{j_{\text{ref}}(x)}_{\frac{\hbar k}{m}|R|^{2}}$$
(II.59)

$$j_{\rm II}(x) = \frac{\hbar q}{m} |T|^2 = j_{\rm trans}(x) \tag{II.60}$$

Definition II.4.1 (Reflections- und Transmissionskoeffizienten r und t).

$$r := \frac{j_{\text{refl}}}{j_{\text{einfl}}} = |R|^2$$

$$t := \frac{j_{\text{trans}}}{j_{\text{einfl}}} = \frac{q}{k}|T|^2$$

(II.61)

Bemerkungen:

Beweis:

 \Rightarrow

 \Rightarrow

- a) Ein einfallendes Teilchen wird mit Wahrscheinlichkeit r reflektiert. Klassisch gäbe es keine Reflexion, das Teilchen würde sich lediglich mit kleinerer Geschwindigkeit jenseits der Stufe weiterbewegen.
- b) Grenzfall $E \to \infty$ beziehungsweise $E \gg V_0: q \to k \Rightarrow R \to 0$ und $T \to 1$
- c) Es gilt Teilchenzahlerhaltung: $j_{\rm ein} = j_{\rm refl} + j_{\rm trans}$

$$(1 - R^2) = \frac{(k+q)^2 - (k-q)^2}{(k+q)^2} = \frac{4kq}{(k+q)^2}$$
(II.62)

$$\frac{\hbar k}{m}(1 - |R|^2) = \frac{\hbar q}{m}|T|^2$$
(II.63)

d) Darstellung: Abb. II.4



Abbildung II.4: Wellenfunktion an Potential stufe $V = V_0 \cdot \theta(x)$ mit $V_0 < E$



Abbildung II.5: Wellenfunktion an Potential stufe $V=V_0\,\theta(x)$ mit $V_0>E$

II.4.2 Teilchenenergie unterhalb der Potentialstufe ($E < V_0$)

Die Lösung für Gebiet I bleibt unverändert.

II:
$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \kappa^2\psi \qquad \text{mit } \kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E) \qquad (II.64)$$

Fundamentallösung: $e^{-\kappa x}$ für x > 0, da $e^{\kappa x}$ nicht normierbar ist. (\rightarrow Wellenpakete?)

$$\Rightarrow \qquad \psi_{\rm II}(x) = T \, e^{-\kappa x} \tag{II.65}$$

Sämtliche Lösungen aus Fall i) sind mit Ersetzung $q = \kappa i$ auf Fall ii) übertragbar:

• Reflexions- und Transmissionsamplituden:

$$R = \frac{k - i\kappa}{k + i\kappa} \qquad \qquad T = \frac{2k}{k + i\kappa} \tag{II.66}$$

 $|R|^2 = 1 \Rightarrow$ es tritt vollständige Reflexion auf.

• Teilchenfluss nach rechts:

$$j_{\rm II} = \frac{\hbar}{2mi} \left(T^*(-k)T \, e^{-2kx} - c.c. \right) = 0 \tag{II.67}$$

Teilchen dringen bis zu einer Tiefe κ^{-1} in den klassisch verbotenen Bereich x > 0 ein.

• Darstellung: Abb. II.5

II.4.3 Grenzfall unendlich hoher Stufe ($V_0 \rightarrow \infty$)

Wenn $V_0 \to \infty$ dann ist $k \to \infty$, $T \to 0$ und $R \to -1$.

$$\Rightarrow \qquad \psi_{\rm I}(x) = e^{ikx} - e^{-ikx} = 2i \cdot \sin kx \text{ und } \psi_{\rm II}(x) = 0 \tag{II.68}$$



Abbildung II.6: Eindimensionale Potentialschwelle



Abbildung II.7: Einlaufende, reflektierte und transmittierte Welle an der Potentialschwelle

Allgemeine Randbedingung eines unendlich hohen Potentialsprungs:

$$\psi|_{\text{Sprung}} = 0$$
 (II.69)

II.5 Potentialschwelle und Tunneleffekt

Wir betrachten nun eine Potentialschwelle (siehe Abb. II.6)

$$V(x) = V_0 \theta(a - |x|) \tag{II.70}$$

mit Höhe $V_0 > 0$ und Breite 2a. Wir wollen wieder von links (x < -a) einfallende Teilchen betrachten.

II.5.1 $E < V_0$

Ein klassisches Teilchen würde von der Schwelle vollkommen reflektiert werden. Quantenmechanisch ist jedoch ein "Durchtunneln" möglich: Das exponentielle Abfallen der Wellenfunktion ψ im Bereich |x| < a führt zu nichtverschwindender Amplitude für x > a! Dieser "TUNNELEFFEKT" ist ein rein quantenmechanisches Phänomen.

Ansatz:

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{ikx} + B e^{-ikx} & x < -a \\ C e^{-\kappa x} + D e^{\kappa x} & -a < x < a \\ F e^{ikx} + G e^{-ikx} & a < x \end{cases}$$
(II.71)

mit $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ und $\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$. Die Lösung folgt aus den Anschlussbedingung (Abb. II.7)

α) Anschlussbedingung bei x = -a

$$A e^{-ika} + B e^{ika} = C e^{\kappa a} + D e^{-\kappa a}$$

$$ik(A e^{-ika} - B e^{ika}) = -\kappa(C e^{\kappa a} - D e^{-\kappa a})$$
(II.72)

II Eindimensionale Probleme

 \Rightarrow

beziehungsweise in Matrixnotation:

Wobei folgende Identität für die Inverse einer nichtsingulären 2×2 -Matrix benutzt wurde:

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}^{-1} = \frac{1}{ad - bc} \begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix}$$
(II.75)

 β) Anschlussbedingung bei x = a In Analogie ergibt sich

$$\binom{F}{G} = M(-a) \binom{C}{D}$$
(II.76)

und somit der Zusammenhang zwischen $\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$ und $\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}$.

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

$$= \begin{pmatrix} (\cosh 2\kappa a + \frac{i\epsilon}{2}\sinh 2\kappa a)e^{2ika} & \frac{i\eta}{2}\sinh 2\kappa a \\ -\frac{i\eta}{2}\sinh 2\kappa a & (\cosh 2\kappa a - \frac{i\epsilon}{2}\sinh 2\kappa a)e^{-2ika} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}$$
(II.77)

mit $\epsilon = \frac{\kappa}{k} - \frac{k}{\kappa}$ und $\eta = \frac{\kappa}{k} + \frac{k}{\kappa}$. Für ein von links einfallendes Teilchen gilt A = 1 und G = 0.

$$\Rightarrow \qquad 1 = F\left(\cosh 2\kappa a + \frac{i\epsilon}{2}\sinh 2\kappa a\right)e^{2ika}$$
$$B = F\left(-\frac{i\eta}{2}\right)\sinh 2\kappa a \qquad (II.78)$$

Definition II.5.1 (Transmissionsamplitude).

$$S(E) := F = \frac{e^{-2ika}}{\cosh 2\kappa a + \frac{i\epsilon}{2}\sinh 2\kappa a}$$
(II.79)

_

Zusätzlich definieren wir den DURCHLÄSSIGKEITSKOEFFIZIENTEN als die Wahrscheinlichkeit für das Durchdringen der Potentialschwelle:

$$|S(E)^{2}| = \frac{1}{1 + \left(1 + \frac{\epsilon^{2}}{4}\right)\sinh^{2} 2\kappa a}$$
(II.80)



Abbildung II.8: Approximation eines kontinuierlichen Potentialbergs durch Potentialstufen

Wir betrachten nun den Grenzfall einer hohen breiten Schwelle; $\kappa a \gg 1$ beziehungsweise sinh $2\kappa a \sim \frac{1}{2}e^{2\kappa a}$:

$$|S(E)|^{2} \sim \frac{4}{1 + \frac{\epsilon^{2}}{4}} e^{-4\kappa a}$$

= $\frac{16E(V_{0} - E)}{V_{0}^{2}} \cdot \exp\left[-4\sqrt{2m(V_{0} - E)}\frac{a}{\hbar}\right]$
= $\exp\left[-\frac{4}{\hbar}a\sqrt{2m(V_{0} - E)} + \ln\left(\frac{16E(V_{0} - E)}{V_{0}^{2}}\right)\right]$ (II.81)

II.5.2
$$E > V_0$$

Dieser Fall wird in den Übungen diskutiert.

II.6 Kontinuierliche Potentialberge

Realistische Potentialberge besitzen kein Rechteckprofil (Abb. II.8). Wir wollen nun die Tunnelwahrscheinlichkeit näherungsweise aus der Approximation des kontinuierlichen Potentialbergs durch Potentialschwellen berechnen $(2a \rightarrow dx)$.

Annahmen:

- a) Wir können in (II.81) den
ln-Term gegenüber dem $\sqrt{\ }$ -Term vernachlässigen.
- b) Die Transmissionswahrscheinlichkeiten der einzelnen Segmente sind so klein, dass wir sie als unabhängig ansehen können.

Dann gilt für den Strom, der alle ${\cal N}$ Wände durchtunnelt

$$j_{\text{trans}}^{(N)} = |S_N|^2 j_{\text{trans}}^{(N-1)} = |S_N|^2 |S_{N-1}|^2 j_{\text{trans}}^{(N-2)}$$

:
$$= \left(\prod_{i=1}^N |S_i|^2\right) j_{\text{einfl}}^{(0)}$$

und somit für die Gesamtwahrscheinlichkeit:

$$|S(E)|^2 = \prod_{i=1}^{N} |S_i|^2$$
(II.82)

II Eindimensionale Probleme



Abbildung II.9: Eindimensionaler endlicher Potentialtopf der Breite 2a und Tiefe V_0

Damit folgt für ein konkretes Potential V(x):

$$|S(E)|^{2} \underset{Ann}{\overset{}{\underset{a}{\rightarrow}}} \prod_{i=1}^{N} \exp\left[-\sqrt{\frac{2m(V(x_{i})-E)}{\hbar^{2}}} 2dx\right]$$
$$= \exp\left[-\sum_{i=1}^{N} \sqrt{\frac{2m(V(x_{i})-E)}{\hbar^{2}}} 2dx\right]$$
$$\underset{N\to\infty}{\overset{}{\underset{N\to\infty}{\rightarrow}}} \exp\left[-2\int_{a}^{b} dx \sqrt{\frac{2m(V(x_{i})-E)}{\hbar^{2}}}\right]$$
(II.83)

TUNNELWAHRSCHEINLICHKEIT FÜR KONTINUIERLICHE POTENTIALBERGE

II.7 Endlicher Potentialtopf

Wir wollen nun die gebundenen Zustände des Potentials

$$V(x) = -V_0 \,\theta(a - |x|)$$
 (II.84)

bestimmen (Abb. II.9). Dies ist ein einfaches Modell für kurzreichweitige Kernpotentiale oder Störstellen in der Festkörperphysik. Der dimensionslose Parameter

$$\xi := \sqrt{2mV_0} \cdot \frac{a}{\hbar} \tag{II.85}$$

bestimmt das Problem. Wir betrachten wiederum die Lösung der Schrödinger-Gleichung in Gebieten verschiedener Potentialstärke getrennt. Die *Bindungszustände* liegen im Energie
intervall $-V_0 \le E \le 0$.

$$|x| > a \qquad \qquad \psi'' = \kappa^2 \psi \qquad \qquad \kappa = \frac{\sqrt{2m(-E)}}{\hbar} \tag{II.86}$$

$$|x| < a \qquad \qquad \psi'' = -q^2 \psi \qquad \qquad q = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar} \tag{II.87}$$

Für x < -aist $e^{\kappa x}$ und für x > aist $e^{-\kappa x}$ als Lösung zu wählen. Im Bereich |x| < aliegen oszillierende Lösungen vor.

Ansatz: Gerade und ungerade Lösungen.

• Gerade:

$$\psi(x) = \psi(-x) = \begin{cases} A \cos qx & \text{für } |x| < a \\ e^{\mp \kappa x} & \text{für } |x| \gtrless a \end{cases}$$
(II.88)



Abbildung II.10: Rechte und linke Seite von (II.92) für verschiedene Werte von ξ . Schnittpunkte sind erlaubte Werte von qa.

• Ungerade:

$$\psi(x) = -\psi(-x) = \begin{cases} A \sin qx & \text{für } |x| < a \\ \pm e^{\mp \kappa x} & \text{für } |x| \ge a \end{cases}$$
(II.89)

Wir wollen diese beiden Fälle nun getrennt betrachten.

i) Gerade Symmetrie

Anschlussbedingungen
$$\Rightarrow$$

 \Rightarrow
 \Rightarrow
 \Rightarrow
 \Rightarrow
 $xan(qa) = \frac{K}{q}$
 $(qa)^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} + \xi^2 = -(\kappa a)^2 + \xi^2$
 \Rightarrow
 $\tan(qa) = \frac{\sqrt{\xi^2 - (qa)^2}}{qa}$
(II.90)

(II.90) ist eine transzendente Gleichung zur Bestimmung von (qa) und somit für $E = -V_0 \left(1 - \frac{(qa)^2}{\xi^2}\right)$. Wegen $E \in [-V_0, 0]$ liegen die Wellenzahlen qa im Intervall

$$0 \le qa \le \xi \tag{II.91}$$

Graphische Diskussion

$$\tan z = \frac{\sqrt{\xi^2 - z^2}}{z} =: f(z)$$
(II.92)

Siehe Abb. II.10.

$$\alpha) \text{ Da } f(z) = \frac{\sqrt{\xi^2 - z^2}}{z} \text{ bei } z = \xi \text{ verschwindet gilt für die Zahl der Schnittpunkte } n_G:$$
$$n_G = \left\lceil \frac{\xi}{\pi} \right\rceil \quad \text{Zahl der "geraden" Energieeigenwerte}$$
(II.93)

wobe
i $\lceil \alpha \rceil$ die nächstgrößere natürliche Zahl zu
 $\alpha \in \mathbbm{R}$ ist.



Abbildung II.11: Rechte und linke Seite von (II.96) für verschiedene Werte von ξ . Schnittpunkte sind erlaubte Werte von qa.

Zustand	qa	Symmetrie	Knotenzahl	Plot
Grundzustand	$[0, \pi/2]$	gerade	0	
1. angeregter	$[\pi/2,\pi]$	ungerade	1	
2. angeregter	$[\pi, 3\pi/2]$	gerade	2	
3. angeregter	$[3\pi/2, 2\pi]$	ungerade	3	

Tabelle II.2: gebundene Energie
eigenzustände eines Potentialtopfes mit $\frac{3}{2}\pi<\xi<2\pi$

 $\beta)$

$$n_G \ge 1 \tag{II.94}$$

ii) Ungerade Symmetrie

Anschlussbedingungen
$$\Rightarrow$$

 $A \sin qa = e^{-\kappa a}$
 $Aq \cos qa = -\kappa e^{-\kappa a}$
 \Rightarrow
 $-\cot(qa) = \frac{K}{q} = \frac{\sqrt{\xi^2 - (qa)^2}}{qa}$
(II.95)

Graphische Diskussion

$$-\cot z = \frac{\sqrt{\xi^2 - z^2}}{z} =: g(z)$$
 (II.96)

Siehe Abb. II.11. Für $\xi \in \left[\frac{\pi}{2}(2n_U-1), \frac{\pi}{2}(2n_U+1)\right]$ hat (II.96) genau n_U Lösungen. Insbesondere existieren Lösungen nur, wenn $\xi > \frac{\pi}{2} \Rightarrow \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} > \frac{\pi^2}{4}$ ist. Das Potential muss also eine minimale Stärke überschreiten um ungerade Eigenzustände zu erlauben.

Beispiel: $\xi = 5 \Rightarrow n_G + n_U = 4$ Zustände (Tabelle II.2) Energieniveauschema: Abb. II.12



Abbildung II.12: Energieniveauschema eines Potentialtopfes mit $\frac{3}{2}\pi < \xi < 2\pi$; Energien gerade Zustände sind blau, Energien ungerader Zustände rot dargestellt



Abbildung II.13: Eigenzustände des unendlich hohen Potentialtopfes

Grenzfall: Unendlich hoher Potentialtopf Betrachten wir nun den Grenzfall $V_0 \to \infty$, dann geht auch $\xi \to \infty$ und die Zahl der gebundenen Zustände geht ebenfalls gegen ∞ . Die Schnittpunkte (Lösungen von (II.90) und (II.95)) verschieben sich auf die Asymptoten von tan z und $-\cot z$.

i) Gerade:

$$\varphi_q(x) = \theta(a - |x|)\cos(qx)$$

$$qa = (s + 1/2)\pi \qquad s = 0, 1, 2, \dots \qquad (II.97)$$

ii) Ungerade:

4

$$\varphi_q(x) = \theta(a - |x|) \sin(qx)
qa = s\pi \qquad \qquad s = 1, 2, \dots$$
(II.98)

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{2a}\right)^2 (n+1)^2$$
(II.99)

Insbesondere sehen wir aus diesem Grenzfall, dass $\psi'(x)$ unstetig an der unendlich hohen Stufe ist.

II.8 Parität

Wir haben gesehen, dass für ein symmetrisches Potential V(x) = V(-x) die Basis der Eigenfunktionen in symmetrische und antisymmetrische Funktionen zerfällt. Dies ist stets so!

Definition II.8.1 (Paritätsänderung P). Der Paritätsoperator wird durch seine Wirkung auf beliebige Testzustände (Funktionen) definiert:

$$Pf(x) := f(-x) \tag{II.100}$$

45

Energien:



Sei PV(x) = V(x) (symmetrisches Potential), dann gilt

$$P(Hf(x)) = Hf(-x) = HPf(x)$$
(II.101)

da $P\psi''(x) = \psi''(-x)$ ist.

$$[H, P] = 0 (II.102)$$

Behauptung: Sei $\psi(x)$ Eigenfunktion von \hat{H} mit Eigenwert E.

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x) \tag{II.103}$$

Dann ist $\hat{P}\psi(x)$ Eigenfunktion zum gleichen Eigenwert.

Beweis:

 \Rightarrow

$$\hat{H}\psi(-x) = \hat{P}\hat{H}\psi(x) = \hat{P}E\psi(x) = E\psi(-x)$$
(II.104)

Dann ist $\psi_{g_{/u}}(x) = \psi(x) \pm \psi(-x)$ ebenfalls Eigenfunktion zu \hat{H} mit Energie E und es gilt

$$\hat{P}\psi_{g/u}(x) = \pm\psi_{g/u}(x) \tag{II.105}$$

 $\Rightarrow \hat{H}$ und \hat{P} sind diagonal bezüglich der gleichen Basis. Ist E nicht entartet und [H, P] = 0, so ist die zugehörige Eigenfunktion *entweder* gerade *oder* ungerade.

II.9 Das allgemeine Verhalten eindimensionaler stationärer Lösungen

$$\frac{\hbar^2}{2m}\psi_E''(x) = [V(x) - E]\psi_E(x)$$
(II.106)

Zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

Bereits für einfache Potentiale V(x) führt diese Differentialgleichung auf Wellenfunktionen, die nicht durch elementare Funktionen auszudrücken sind. Das qualitative Verhalten von $\psi_E(x)$ für gegebene Energie und V(x) lässt sich jedoch angeben.

a) Potentialmulde Siehe Abb. II.14. Wir wollen nun das Verhalten der Wellenfunktion in den Bereichen ①, ② und ③ gesondert diskutieren.



Abbildung II.15: überall konvexe Funktion \Rightarrow nicht normierbar



Abbildung II.16: Gebundener stationärer quantenmechanischer Zustand einer Potentialmulde

Bereich ① Der Bereich ① ist klassisch und quantenmechanisch verboten.

klassisch: Die kinetische Energie ist negativ $(T = E - V) \Rightarrow$ Der Impuls ist imaginär.

quantenmechanisch: ψ_E und ψ''_E haben das gleiche Vorzeichen. $\Rightarrow \psi_E(x)$ ist konvex $\forall x$ (Abb. II.15). $\Rightarrow \psi_E(x)$ ist eine nicht normierbare Funktion.

Bereich ⁽²⁾

- **klassisch:** Teilchenbewegung ist im Intervall $x \in [a, b]$ möglich. Umkehrpunkte der Bewegung sind bei x = a und x = b.
- **quantenmechanisch:** Für $x \in [a, b]$ haben ψ_E und ψ''_E entgegengesetztes Vorzeichen, das heißt hier ist ψ_E konkav. Für x < a und x > b besitzen ψ_E und ψ''_E das gleiche Vorzeichen, das heißt hier ist ψ_E konvex. An den klassischen Umkehrpunkten gilt $\psi''_E(a) = \psi''_E(b) = 0$. Hier wechselt das Verhalten der Wellenfunktion also zwischen konkavem und konvexem Verhalten (Abb. II.16). \Rightarrow Im klassisch verbotenen Bereich fällt die Wellenfunktion exponentiell ab. Im klassisch erlaubten Bereich oszilliert die Wellenfunktion. Die Normierungsbedingung erlaubt nur bestimmte Funktionen ψ_E und liefert eine Einschränkung auf mögliche Energieeigenwerte *E. Beispiel:* Abb. II.17.
 - \Rightarrow Liefert Einschränkungen auf mögliche Energieeigenwerte E.

Bereich ③ Der Bereich ③ ist klassisch und quantenmechanisch erlaubt.



Abbildung II.17: Auch wenn eine Energie E Eigenwert zum Hamiltonoperator ist kann sie zum Divergieren der Wellenfunktion im klassisch verbotenen Bereich führen und dadurch die Normierbarkeitsbedingung verletzen.



klassisch: Die Bewegung des Teilchens ist für alle x erlaubt. Das Teilchen ist nicht gebunden.

quantenmechanisch: $\psi_E(x)$ ist konkav $\forall x$. Demnach zeigt die Wellenfunktion überall das oszillatorische Verhalten nichtgebundener Zustände. Zudem ist E kontinuierlich veränderlich, nicht eingeschränkt. Man spricht in diesem Fall auch von "Streuzuständen" des Potentials.

b) Potentialberg Siehe Abb. II.18. Wir wollen wieder das Verhalten der Wellenfunktion in den Bereichen ①, ② und ③ gesondert diskutieren.

Bereich ① Dieser Bereich ist klassisch und quantenmechanisch verboten aus denselben Gründen wie bei der Potentialmulde.

Bereich 2

- klassisch: Eine Teilchenbewegung ist erlaubt für x < a oder x > b. Das Überwinden des Potentialbergs ist ausgeschlossen.
- **quantenmechanisch:** Für x < a und x > b ist $\psi_E(x)$ konkav, was auf eine oszillierende Lösung führt. Für $x \in [a, b]$ ist $\psi_E(x)$ konvex, was auf eine exponentiell abklingende Lösung führt. Es handelt sich also um einen Tunneleffekt bei einlaufender Welle von links oder rechts.

Bereich ③

- klassisch: Eine Teilchenbeweung ist für alle x möglich. Ein einlaufendes Teilchen überwindet den Potentialberg immer.
- quantenmechanisch: ψ_E oszilliert für alle x. Wir definieren eine "lokale" Wellenlänge $\lambda(x) := \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m(E-V(x))}}$, die uns eine Abschätzung für den Abstand der Nullstellen von $\psi_E(x)$ liefert.

II.10 Streuzustände des Potentialtopfes, Resonanzen

Gegeben sei das Potential

$$V(x) = -V_0 \,\theta(a - |x|) \tag{II.107}$$

(Abb. II.19) und ein von links einlaufende Teilchen mit der Energie E > 0. Diese Streuzustände lassen sich aus stationären Lösungen der Potentialschwelle II.5 durch $V_0 \rightarrow -V_0$ gewinnen.



Abbildung II. 19: Endlicher Potentialtopf mit von links einlaufendem Teilchen mit Energi
eE>0

|x| > a Die Wellenzahl bleibt

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$
(II.108)

|x| < aIm Inneren ist die Lösung nun ebenfalls oszillierend und wir erhalten die Wellenzahl aus der Ersetzung $\kappa = iq$:

$$q = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar} \tag{II.109}$$

Dann gilt:

$$|x| < a:$$
 $\psi(x) = C e^{-iqx} + D e^{iqx}$ (II.110)

Wir betrachten eine von links einfallen Welle:

$$x < -a: \qquad \qquad \psi(x) = \psi_{\text{einfl}} + \psi_{\text{refl}} \qquad (\text{II.111})$$

$$\psi(x) = \psi_{\text{einfl}} + \psi_{\text{refl}}$$
(II.111)
$$\psi_{\text{einfl}}(x) = A e^{-ikx}$$
(II.112)
$$\psi_{\text{einfl}}(x) = A E^{i}(E) \frac{i}{k} \left(k - q\right) \sin(2\pi c) e^{-ikx}$$
(II.112)

$$\psi_{\text{refl}}(x) = A S(E) \frac{i}{2} \left(\frac{\kappa}{q} - \frac{q}{k}\right) \sin(2qa) e^{-ikx}$$
(II.113)

$$x > a:$$
 $\psi_{\text{trans}} = A S(E) e^{ikx}$ (II.114)

Die Transmissionsamplitude folgt aus (II.79) durch die Ersetzung $\kappa = -iq$:

$$S(E) = \frac{e^{-2ika}}{\cos(2qa) - \frac{i}{2}\left(\frac{k}{q} - \frac{q}{k}\right)\sin(2qa)}$$
(II.115)

Für die Transmissionswahrscheinlichkeit folgt

$$|S(E)|^{2} = \frac{1}{\cos^{2}(2qa) + \frac{1}{4}\left(\frac{k}{q} + \frac{q}{k}\right)^{2}\sin^{2}(2qa)}$$
$$= \left[1 + \frac{1}{4}\left(\frac{k}{q} - \frac{q}{k}\right)^{2}\sin^{2}(2qa)\right]^{-1}$$
$$= \left[1 + \frac{\sin^{2}(2qa)}{4\frac{E}{V_{0}}\left(1 + \frac{E}{V_{0}}\right)}\right]^{-1}$$
(II.116)

$$\operatorname{Da}\left(\frac{k}{q} - \frac{q}{k}\right)^2 = \left(\sqrt{\frac{E+V_0}{E}} - \sqrt{\frac{E}{E+V_0}}\right)^2 = \frac{E+V_0}{E} + \frac{E}{E+V_0} - 2 = \frac{V_0^2}{E(E+V_0)}$$



Abbildung II.20: Transmissionswahrscheinlichkeit in Abhängigkeit der Energie der einlaufenden Welle für $\xi = 6, 24, 96, 384$. Die Halbwertsbreite der Maxima der Transmissionswahrscheinlichkeit (Resonanzen) wird mit wachsendem ξ kleiner, das heißt die Resonanzen werden schärfer.

Insbesondere wird $|S(E)|^2 = 1$ für $2qa = n \cdot \pi$. Bei diesen Energiewerten der einfallenden Welle wird das Potential vollständig "transparent", es gibt keine Reflexion! Diese "Resonanzen" erscheinen bei

$$E_{\text{Res}} = \frac{\hbar^2 q^2}{2m} - V_0$$

$$= n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} - V_0$$
(II.117)

mit *n* geeignet groß, so dass $E_{\text{Res}} > 0$ ist. Diese Resonanzen treten also gerade bei den Energieeigenwerten der gebundenen Zustände des unendlich tiefen Potentialtopfes auf. Die Schärfe der Resonanzen nimmt mit wachsendem ξ zu (vergleiche Abb. II.20).

II.11 Das Kronig-Penney Modell

In einem Festkörper liegen die erlaubten Elektronenenergien in Energiebändern (siehe Abb. II.21). Man unterscheidet drei Typen von Festkörpern (Abb. II.22): Ursache für die Bandstruktur ist die Periodizität des Gitters sowie der Tunneleffekt.



Abbildung II.21: Schematische Darstellung der Bandstruktur eines Festkörpers



Abbildung II.22: Bandlücke und Fermienergie bei den drei Typen von Festkörpern. $E_{\rm F}$ ist die jeweilige Fermi-Energie

Eindimensionales Modell eines Kristalls (Kronig-Penney, 1931)

$$V(x) = V_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - n \cdot a) \qquad \text{(siehe Abb. II.23)} \qquad \text{(II.118)}$$

Sei nun E > 0. Klassisch erlaubte Gebiete sind die

$$B_n = \{x, na < x \le (n+1) \cdot a\}, \quad n \in \mathbb{Z}$$
(II.119)

mit Lösungen

$$\psi(x) = a_n e^{ik(x-na)} + b_n e^{-ik(x-na)}$$
(II.120)

mit $k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}, x \in B_n$. Die Phasenterme $e^{\pm ikna}$ sind rein zweckmäßig gewählt.







Abbildung II.24: Eindimensionaler Festkörper mit N Elementarzellen der Länge a, zum Ring geschlossen.

Anschlussbedingungen:

$$\psi(na - \epsilon) = \psi(na + \epsilon) = \psi(na) \tag{II.121}$$

$$\psi'(na+\epsilon) - \psi'(na-\epsilon) = \frac{2m}{\hbar^2} V_0 \psi(na)$$
(II.122)

mit $\epsilon \to 0$.

Bloch-Theorem Bevor wir uns den Anschlussbedingungen widmen, noch eine wichtige Beobachtung: Das Potential besitzt die Periodizität V(x) = V(x+a). Da auch $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$ bei der Verschiebung $x \to x + a$ unverändert ist, ist \hat{H} sowie alle messbaren physikalischen Größen *invariant unter Git*tertranslationen $x \to x + a$. Dies gilt auch für die Wahrscheinlichkeitsdichte:

$$|\psi(x+a)|^2 \stackrel{!}{=} |\psi(x)|^2 \tag{II.123}$$

Die Wellenfunktion kann sich jedoch um eine Phase ändern!

$$\psi(x+a) = e^{iKa}\psi(x) \qquad \text{mit } -\pi < Ka \le \pi \text{ (II.124)}$$

Demnach ist die Lösungsfunktion durch eine zusätzliche Wellenzahl K (Quantenzahl) gekennzeichnet:

$$\psi_K(x+na) = e^{iKna}\psi_K(x) \tag{II.125}$$

Also lässt sich die Wellenfunktion in folgende Form bringen:

$$\psi_K(x) = u_K(x)e^{iKx}$$
 mit $u_K(x+a) = u_K(x)$ (II.126)

"BLOCH-THEOREM"

Das Bloch-Theorem ist eine allgemeine Aussage für gitterperiodische Potentiale.

Endlichkeit des Festkörpers Wir betrachten einen eindimensionalen Festkörper mit der Länge $N \cdot a$ und periodischen Randbedingungen (Abb. II.24)

$$\psi_K(x+N\cdot a) \stackrel{!}{=} \psi_K(x) \tag{II.127}$$

Dies führt zur Diskretisierung der erlaubten Werte für K:

$$K = \frac{2\pi}{N \cdot a} m \qquad m = 0, 1, 2, 3, \dots, N - 1$$
(II.128)

Damit hat das Bloch-Theorem folgende Konsequenz für unsere Lösung (im Intervall $x \in B_0$):

$$\psi_{K}(x+na) = e^{iKna}\psi(x) = e^{iKna}(a_{0}e^{ikx} + b_{0}e^{-ikx})$$

$$\stackrel{!}{\underset{(\text{II.120})}{=}} a_{n}e^{ikx} + b_{n}e^{-ikx}$$

$$a_{n} = e^{iKna}a_{0} \qquad b_{n} = e^{iKna}b_{0} \qquad (\text{II.129})$$

 \Rightarrow

1):

Lediglich a_0 und b_0 sind aus den Anschlussbedingungen zu bestimmen!

ι

$$\psi_K(x) = e^{iKna}(a_0e^{ik(x-na)} + b_0e^{-ik(x-na)}) \qquad x \in B_n$$

$$\psi'_K(x) = iKe^{iKna}(a_0e^{ik(x-na)} - b_0e^{-ik(x-na)})$$

Anschlussbedingung bei x = a

$$(1): \ \psi_K(a)|_{B_0} = \psi_K(a)|_{B_1} \qquad (2): \ \psi'_K(a)|_{B_1} - \psi'_K(a)|_{B_0} = \frac{2m}{\hbar^2} V_0 \psi_K(a)$$

$$a_0 e^{ika} + b_0 e^{-ika} \stackrel{!}{=} e^{iKa} (a_0 + b_0)$$
(II.130)

$$(II.131)$$

In Matrixform:

$$\begin{pmatrix} e^{ika} - e^{-iKa} & e^{-ika} - e^{iKa} \\ ik(e^{iKa} - e^{-ika}) - \frac{2m}{\hbar^2} V_0 e^{iKa} & ik(-e^{iKa} + e^{-ika}) - \frac{2m}{\hbar^2} V_0 e^{iKa} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ b_0 \end{pmatrix} = 0$$
(II.132)

mit Determinante
$$\Delta = 2ie^{iKa} \left(2k\cos(K \cdot a) - 2k\cos(ka) - \frac{2m}{\hbar^2} V_0\sin(ka) \right)$$

Forderung: $\Delta \stackrel{!}{=} 0$ um Lösung von ① und ② zu erhalten.

$$\cos(Ka) = \cos(ka) + \frac{mV_0}{\hbar^2 k}\sin(ka)$$
(II.133)

Dies ist eine Bedingung für mögliche Elektronenenergien:

$$k = k \left(Ka, \frac{mV_0a}{\hbar^2}, n \right) \tag{II.134}$$

Diskussion

- i) Nur Energien $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ erlaubt für die die rechte Seite von (II.133) vom Betrag kleiner eins ist (Abb. II.25).
- ii) Beginn einer verbotenen Zone: $ka = n\pi$, n = 1, 2, 3, ...Die oberen Bandkanten sind unabhängig von V_0 und a bei

$$E_n|_{\text{obere Bandkante}} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2 \qquad (\text{II.135})$$

- iii) Für vorgegebene Wellenzahl
 $K~(-\frac{\pi}{a} < K \leq \frac{\pi}{a})$ gehörige Energiewerte erhält man durch explizites Lösen von (II.133) für entsprechendes Energieband (Abb. II.26).
- iv) Mit wachsendem $V_0 \cdot a$ werden die Lücken breiter (Abb. II.27). Für $V_0 \cdot a \to \infty$ werden die Bänder zu Niveaus.



Abbildung II.25: $\cos x + \alpha \frac{\sin x}{x}$; für $|\cdot| > 1$ ist die zugehörige Energie verboten. Die erlaubten Bereiche sind grün unterlegt.







Abbildung II. 27: Erlaubte Energiebänder über
 $V_0 \cdot a$

III Grundlagen der Quantenmechanik (Dirac Formalismus)

Orts- $(\psi(x))$ und Impulsdarstellung $(\varphi(p))$ der Wellenfunktion bilden zwei äquivalente Beschreibungen des quantenmechanischen Zustands. Dies legt eine übergeordnete, fundamentalere Beschreibung nahe!

Dirac'sche Formulierung der Quantenmechanik:

- Der Zustand eines quantenmechanischen Systems wird durch einen abstrakten Zustandsvektor in einem im Allgemeinen unendlich dimensionalen Vektorraum (Hilbert-Raum) beschrieben.
- Observable Größen sind lineare Operatoren, die in diesem Hilbert-Raum wirken.
- Die Formulierung der Dynamik und des Messprozesses erfolgt in diesen Objekten.

III.1 Zustandsbegriff

Klassischer Zustand: Punkt im Phasenraum
$$\{q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n\}$$

 $|\psi\rangle_{kl} \Leftrightarrow \pi = (\vec{q}, \vec{p})$ (III.1)

Dynamik (zeitliche Entwicklung) des klassischen Zustands folgt aus den Hamilton'schen Bewegungsgleichungen.

$$\dot{q}_j = \frac{\partial H}{\partial p_j}$$
 $\dot{p}_j = -\frac{\partial H}{\partial q_j}$ $j = 1, \dots, n$ (III.2)

Ist $\pi(\vec{q}, \vec{p}, t = t_0)$ gegeben und $H(\vec{q}, \vec{p}, t)$ bekannt, dann ist $\pi(\vec{q}, \vec{p}, t) \forall t$ vollständig bestimmt. Für ein quantenmechanisches System ist dies nicht möglich, da q_j und p_j nicht gleichzeitig scharf messbar sind.

Quantenmechanischer Zustand $|\psi\rangle$

 $|\psi\rangle$ wird bestimmt ("präpariert") durch gleichzeitige Messung eines maximalen Satzes von simultan messbaren ("verträglichen") Observablen.

Eigenschaften:



Abbildung III.1: Trenner T(A) mit Blenden

- 1) $|\psi\rangle$ heißt Zustandsvektor.
- 2) $|\psi\rangle \to \alpha \cdot |\psi\rangle$, $\alpha \in \mathbb{C}$ ändert den Zustand des Systems nicht.
- 3) Stehen mehrere Systeme in Wechselwirkung, so beschreibt |ψ⟩ das Gesamtsystem. Sind die Teilsysteme entkoppelt, dann zerfällt |ψ⟩ in ein direktes Produkt von Unterzuständen |ψ⟩ = |ψ⟩₁ ⊗ |ψ⟩₂ ⊗ |ψ⟩₃ ⊗ · · · wobei |ψ⟩_i den Zustand des *i*-ten Systems beschreibt.
- 4) Im Allgemeinen ist $|\psi\rangle = |\psi(t)\rangle$ zeitabhängig durch äußere Einflüsse oder auch durch eine Messung am System.
- 5) Die Schrödinger-Gleichung für $\psi(\vec{x}, t)$ ist eine spezielle Darstellung von $|\psi\rangle$, die sogenannte Ortsdarstellung. Es gibt andere Darstellungen (Impuls, Energie, Drehimpuls, Spin, ...)

III.2 Präparation eines reinen Zustands

Wir wollen nun ein *Gedankenexperiment* anstellen. Wir betrachten eine Observable \hat{A} mit gequantelten Messwerten $\{a_i, i = 1, ..., N\}$, zum Beispiel \hat{H} des harmonischen Oszillators.

Messung von \hat{A} : Die Messapparatur für \hat{A} sei ein Trenner T(A) mit Blenden wie in Abb. III.1. Der Trenner T(A) wird dargestellt durch den Projektionsoperator $\hat{P}(a_i)$.

Wiederholte Messung von \hat{A} : Siehe hierzu Abb. III.2. Wie man erkennt, gilt

$$P(a_j)P(a_i) = \delta_{ij}P(a_i) \tag{III.3}$$

Erst Messung von \hat{A} , dann Messung von \hat{B} : \hat{A} und \hat{B} seien verträglich (simultan messbar). Siehe hierzu Abb. III.3.

Wir schreiben:

$$\hat{P}(b_i)\hat{P}(a_i)|\varphi\rangle = |a_i, b_j\rangle \tag{III.4}$$

Da \hat{A} und \hat{B} simultan messbar sind, führt die Vertauschung der Messoperatoren zum selben Zustand:



Abbildung III.2: Wiederholte Messung der Observablen \hat{A} mittels Trenner T(A) für (a): gleiche Blende offen; (b): andere Blende offen



Abbildung III.3: Messung zweier Verträglicher Observablen nacheinander.



Abbildung III.4: Trenner mit zwei Öffnungen



Abbildung III.5: Trenner, bei dem alle Blenden geöffnet sind.

verträgliche Observablen \Leftrightarrow kommutierende Operatoren

Schaltet man einen maximalen Satz verträglicher Trenner hintereinander, lässt sich ein *reiner Zu*stand erzeugen:

$$|\psi\rangle \equiv |a_i, b_j, \dots, z_m\rangle = P(z_m) \cdots P(b_j)P(a_i)|\varphi\rangle$$
 (III.5)

Bemerkungen:

- Hintereinanderschalten von Trenner
n $\widehat{=}$ Produkt von Projektoren
- Trenner mit zwei Öffnungen $\widehat{=} \hat{P}(a_i) + \hat{P}(a_j)$ (siehe Abb. III.4).

$$|\varphi'\rangle = \left(\hat{P}(a_i) + \hat{P}(a_j)\right)|\varphi\rangle \tag{III.6}$$

• Öffnet man *alle* Blenden, führt man keine Messung durch und verändert den Zustand nicht (siehe Abb. III.5):

$$\sum_{i=1}^{N} \hat{P}(a_i) |\varphi\rangle = |\varphi\rangle \quad \forall |\varphi\rangle \tag{III.7}$$

Somit gilt:

i)

$$\sum_{i=1}^{N} \hat{P}(a_i) = 1$$
 (II.8)

ii) Da $\hat{P}(a_i)|\varphi\rangle \sim |a_i\rangle$ mit Proportionalitätskonstante c_i folgt:

$$|\varphi\rangle = \sum_{i=1}^{N} c_i |a_i\rangle \quad c_i \in \mathbb{C}$$
 (III.9)

III.3 Observable

Klassische Observablen \Leftrightarrow Funktionen im Phasenraum:

$$F = F(\vec{q}, \vec{p}) \tag{III.10}$$

- Beispiele:Kinetische Energie: $T(\vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m}$ Hamilton-Funktion: $H = H(\vec{q}, \vec{p}) = T(\vec{p}) + V(\vec{q})$ Drehimpulskomponente: $L_z = x \cdot p_y y \cdot p_x$
 - Übergang zur Quantenmechanik mittels Korrespondenzregeln:

$$x_i \to \hat{x}_i \qquad p_i \to \hat{p}_i \qquad (\text{III.11})$$

• Übersetzung von Funktionen im Phasenraum:

$$F(q_i, p_i) \to F(\hat{q}_i, \hat{p}_i)$$
 (III.12)

- Es gibt jedoch auch quantenmechanische Observablen, die kein klassisches Analogon besitzen, zum Beispiel Spin oder Parität.
- Das Korrespondenzprinzip ist nicht eindeutig: Ambiguitäten in der Quantisierung. Zum Beispiel

Das ist nicht verwunderlich, da die Quantenmechanik eine fundamentalere Theorie als die klassische Mechanik ist. Im Limes $\hbar \to 0$ verschwinden diese sogenannten "Ordnungsambiguitäten".

Häufige Vorschrift: Weyl-Symmetrisierung von nichtvertauschenden Operatoren:

$$p_i q_j \to \hat{p}_i \hat{q}_j + \hat{q}_j \hat{p}_i$$

reelle Größe \to hermitescher Operator (III.14)

Observable: quantenmechanischer Operator mit reellen Messwerten $\widehat{=}$ hermitescher Operator

III.4 Hilbert-Raum

Ein reiner Zustand eines Quantensystems wird als Vektor in einem abstrakten Hilbert-Raum beschrieben.

Definition: Hilbert-Raum \mathcal{H} : Abzählbar unendlich (oder endlich) dimensionaler unitärer Vektorraum.

Eigenschaften

- 1) \mathcal{H} ist komplexer, linearer Vektorraum. Seien im folgenden $|\alpha\rangle$, $|\beta\rangle$, $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, $c \in \mathbb{C}$. Dann müssen folgende Beziehungen gelten:
 - $|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\beta\rangle + |\alpha\rangle \equiv |\alpha + \beta\rangle \in \mathcal{H}$ • Addition: (III.15) $c|\alpha\rangle = |\alpha\rangle c \equiv |c\alpha\rangle \in \mathcal{H}$ • Multiplikation: (III.16) $|\alpha\rangle + (|\beta\rangle + |\gamma\rangle) = (|\alpha\rangle + |\beta\rangle) + |\gamma\rangle$ • Assoziativität: $c_1(c_2|\alpha\rangle) = c_2(c_1|\alpha\rangle) = c_1c_2|\alpha\rangle$ (III.17) $\exists |\emptyset\rangle \in \mathcal{H} \text{ mit } |\alpha\rangle + |\emptyset\rangle = |\alpha\rangle$ • Nullvektor: $c \cdot |\emptyset\rangle = |\emptyset\rangle$ (III.18) $\forall |\alpha\rangle \exists |-\alpha\rangle$ • Inverses bzgl. Addition:
 - Distributivität: $\begin{array}{l} \operatorname{mit} |\alpha\rangle + |-\alpha\rangle = |\alpha\rangle - |\alpha\rangle = 0 \quad (\text{III.19}) \\ c(|\alpha\rangle + |\beta\rangle) = c|\alpha\rangle + c|\beta\rangle \\ (c_1 + c_2)|\alpha\rangle = c_1|\alpha\rangle + c_2|\alpha\rangle \quad (\text{III.20}) \end{array}$

Begriffe:

- i) Die Vektoren $\{|\alpha_i\rangle, i \in I\}$ heißen *linear unabhängig* falls $\sum_{i=1}^n c_i |\alpha_i\rangle = |\emptyset\rangle$ nur durch $c_i = 0 \forall i \in I$ erfüllt ist.
- ii) Die Dimension von \mathcal{H} ist die maximale Anzahl linear unabhängiger Vektoren in \mathcal{H} .
- 2) \mathcal{H} ist ein unitärer Vektorraum. Jedem Paar $|\alpha\rangle, |\beta\rangle \in \mathcal{H}$ ist ein Skalarprodukt

$$\langle \alpha | \beta \rangle \in \mathbb{C} \tag{III.21}$$

zugeordnet.

- $\langle \alpha | \beta \rangle = \langle \beta | \alpha \rangle^*$ ("()*" bedeutet komplex konjugiert)
- $\langle \alpha | c_1 \beta_1 + c_2 \beta_2 \rangle = c_1 \langle \alpha | \beta_1 \rangle + c_2 \langle \alpha | \beta_2 \rangle$
- $\langle c\alpha|\beta\rangle = c^*\langle \alpha|\beta\rangle$
- $\langle \alpha | \alpha \rangle \ge 0 \, \forall | \alpha \rangle \in \mathcal{H} \text{ und } \langle \alpha | \alpha \rangle = 0 \Leftrightarrow | \alpha \rangle = | \emptyset \rangle$

Begriffe:

- i) Orthogonalität: $|\alpha\rangle$ und $|\beta\rangle$ heißen orthogonal zueinander wenn $\langle \alpha | \beta \rangle = 0$
- ii) Norm: Die Norm von $|\alpha\rangle$ wird durch das Skalarprodukt induziert:

$$\|\alpha\| = \sqrt{\langle \alpha | \alpha \rangle} \ge 0 \tag{III.22}$$

Eigenschaften der Norm:

• Schwarz'sche Ungleichung:
$$|\langle \alpha | \beta \rangle| \le ||\alpha|| \cdot ||\beta||$$
 (III.23)
• Dreiecksungleichung: $||\alpha|| - ||\beta|| \le ||\alpha + \beta|| \le ||\alpha|| + ||\beta||$ (III.24)

Für endlich dimensionale \mathcal{H} der Dimension n lässt sich eine vollständige Orthogonalbasis $|\alpha_1\rangle, |\alpha_2\rangle, \ldots, |\alpha_n\rangle$ angeben mit $\langle \alpha_i | \alpha_j \rangle = \delta_{ij}$. Für beliebige $|\beta\rangle \in \mathcal{H}$ gilt

$$|\beta\rangle = \sum_{j=1}^{n} c_j |\alpha_j\rangle \text{ mit } c_j = \langle \alpha_j |\beta\rangle$$
$$= \sum_{j=1}^{n} |\alpha_j\rangle \langle \alpha_j |\beta\rangle$$
$$\sum_{j=1}^{n} |\alpha_j\rangle \langle \alpha_j | = 1 \tag{III.25}$$

 \Rightarrow

Vollständigkeit:

3) *H* ist vollständig.

Jede Cauchy-Folge $|\alpha_n\rangle$ konvergiert in \mathcal{H} . Eine Folge $|\alpha_n\rangle$ nennt man Cauchy-Folge, wenn gilt:

$$\|\alpha_n - \alpha_m\| < \epsilon \,\forall m, n > N(\epsilon) \tag{III.26}$$

$$\lim_{n \to \infty} |\alpha_n\rangle = |\alpha\rangle \in \mathcal{H} \tag{III.27}$$

4) *H* ist separabel.
 Für jedes Element |φ⟩ ∈ *H* existiert eine Cauchy-Folge mit |φ⟩ als Grenzvektor.

Folgerungen

- ${\mathcal H}$ ist abzählbar unendlich dimensional.
- Entwicklungssatz: $\forall | \varphi \rangle \in \mathcal{H}$ gilt

$$|\varphi\rangle = \sum_{j=1}^{\infty} c_j |\alpha_j\rangle \qquad \langle \alpha_i |\alpha_j\rangle = \delta_{ij}$$

$$c_j = \langle \alpha_j |\varphi\rangle \qquad |\varphi\rangle = \sum_{j=1}^{\infty} |\alpha_j\rangle \langle \alpha_j |\varphi\rangle$$

$$\|\varphi\|^2 = \sum_{j=1}^{\infty} |c_j|^2 < \infty \qquad \mathbb{1} = \sum_{j=1}^{\infty} |\alpha_j\rangle \langle \alpha_j | \qquad (\text{III.28})$$

III.5 Dualer Raum \mathcal{H}^*

$$\begin{array}{c|c} \langle \varphi | & |\psi \rangle \\ \swarrow & \swarrow \\ \text{bra-c-ket} \end{array}$$
 (III.29)

 $\langle \varphi |$ ("bra-Vektoren") sind Vektoren des zu \mathcal{H} dualen Vektorraums \mathcal{H}^* . **Definition III.5.1** (Dualer Raum). Lineares Funktional $F_{\varphi}(|\psi\rangle)$; $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, dann sei

$$\mathcal{H}^* := \{ F_{\varphi}; F_{\varphi} : \mathcal{H} \to \mathbb{C}, F_{\varphi} \text{ linear} \}$$
(III.30)

"Dualer Raum zu \mathcal{H} "



Abbildung III.6: Komponenten eines Vektors φ in einer diskreten bzw. einer kontinuierlichen Basis



Abbildung III.7: Diskretisierung der kontinuierlichen Koordinate x in Schritten Δx

Hierbei bedeutet Linearität:

$$F_{\varphi}(c_{i}|\psi_{1}\rangle + c_{2}|\psi_{2}\rangle) = c_{1}F_{\varphi}(|\psi_{1}\rangle) + c_{2}F_{\varphi}(|\psi_{2}\rangle)$$

$$F_{\varphi_{1}+\varphi_{2}}(|\psi\rangle) = F_{\varphi_{1}}(|\psi\rangle) + F_{\varphi_{2}}(|\psi\rangle)$$

$$F_{c\varphi}(|\psi\rangle) = c^{*}F_{\varphi}(|\psi\rangle)$$
(III.31)

Wir schreiben:

$$F_{\varphi} = \langle \varphi | \qquad \text{(bra-Vektor)}$$
$$F_{\varphi}(|\psi\rangle) = \langle \varphi |\psi\rangle \qquad (\text{III.32})$$

III.6 Uneigentliche (Dirac-) Vektoren

Die Komponenten eines Vektors $|\varphi\rangle$ bezüglich eines Systems von Basisvektoren $\{\alpha_j\}$ lauten $\varphi_j = \langle \alpha_j | \varphi \rangle$. Wir wollen nun von diskreten j zu kontinuierlichen j übergehen (siehe Abb. III.6). Ein Beispiel für den kontinuierlichen Fall ist die Ortswellenfunktion:

$$\psi(x) \stackrel{?}{=} \langle \alpha_x | \psi \rangle, \, x \in \mathbb{R} \tag{III.33}$$

Obwohl physikalisch geboten, führt uns das jedoch jenseits der Axiome eines Hilbert-Raums, da die Basis nun *überabzählbar* unendlich ist. Demnach ist $|\alpha_x\rangle$ kein Vektor im Hilbertraum.

Ausweg: Wir führen uneigentliche (Dirac-) Vektoren als Grenzwertbildung ein. Eine Diskretisierung der Koordinate x in Schritten Δx führt auf eine assoziierte orthonormale Basis (siehe auch Abb. III.7):

$$|\alpha_{x,\Delta x}\rangle \in \mathcal{H} \tag{III.34}$$

Der Übergang zu kontinuierlichen $x \in \mathbb{R}$ erfolgt mittels

$$\psi(x) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\langle \alpha_{x,\Delta x} | \psi \rangle}{\sqrt{\Delta}}$$
(III.35)

Definition III.6.1 (Formaler Dirac-Vektor).

$$|\alpha_x^{\rm D}\rangle := \lim_{\Delta x \to 0} \frac{|\alpha_{x,\Delta x}\rangle}{\sqrt{\Delta}}$$
(III.36)

 \Leftrightarrow

 \Rightarrow

Entwicklungssatz:

$$\begin{split} |\psi\rangle &= \lim_{\Delta x \to 0} \sum_{x} |\alpha_{x,\Delta x}\rangle \langle \alpha_{x,\Delta x} |\psi\rangle \\ &= \lim_{\Delta x \to 0} |\alpha_{x}^{\mathrm{D}}\rangle \langle \alpha_{x}^{\mathrm{D}} |\psi\rangle \Delta x \\ &= \int dx \, |\alpha_{x}^{\mathrm{D}}\rangle \langle \alpha_{x}^{\mathrm{D}} |\psi\rangle \end{split}$$
(III.37)

Multiplikation mit $\langle \alpha^{\rm D}_{x'}|$ liefert Normierung:

$$\langle \alpha_{x'}^{\mathrm{D}} | \psi \rangle = \int dx \, \langle \alpha_{x'}^{\mathrm{D}} | \alpha_{x}^{\mathrm{D}} \rangle \langle \alpha_{x}^{\mathrm{D}} | \psi \rangle$$
$$\boxed{\langle \alpha_{x'}^{\mathrm{D}} | \alpha_{x}^{\mathrm{D}} \rangle = \delta(x' - x)}$$
(III.38)

Uneigentliche (Dirac-) Vektoren sind auf Deltafunktionen normiert! Umkehrung von (III.36):

$$|\alpha_{x,\Delta x}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\Delta x}} \int_{x}^{x+\Delta x} dx \, |\alpha_x^{\rm D}\rangle \tag{III.39}$$

Im folgenden werden wir im so definierten *"erweiterten" Hilbert-Raum* arbeiten, also in der Menge der eigentlichen und uneigentlichen Dirac-Vektoren.

 $\psi(x) = \langle \alpha_x^{\rm D} | \psi \rangle$

Einheitliche Notation: Der Entwicklungssatz im erweiterten Hilbert-Raum lässt sich kompakt schreiben als:

$$|\psi\rangle = \sum_{j} |\alpha_{j}\rangle \langle \alpha_{j} |\psi\rangle$$
(III.40)

mit
$$\sum_{j} = \begin{cases} \sum_{j} & : \text{ eigentliche Zustände} \\ \int dj & : \text{ uneigentliche (Dirac-) Zustände} \\ \sum_{j} \dots + \int dj \dots & : \text{ eigentliche und uneigentliche Zustände} \end{cases}$$

Weiterhin definieren wir (und lassen künftig das " $^{\rm D}$ " weg):

$$\langle \alpha_i | \alpha_j \rangle = \delta(i, j) = \begin{cases} \delta_{ij} & \text{für eigentliche Zustände} \\ \delta(i-j) & \text{für uneigentliche Zustände} \end{cases}$$
(III.41)

und finden

$$\mathbb{1} = \sum_{j} |\alpha_{j}\rangle\langle\alpha_{j}| \tag{III.42}$$

III.7 Lineare Operatoren in \mathcal{H}

Definition III.7.1 (Linearer Operator \hat{A}). \hat{A} ist eine lineare Abbildung, die $|\alpha\rangle \in D_A \subseteq \mathcal{H}$ einen Vektor $|\beta\rangle \in W_A \subseteq \mathcal{H}$ zuordnet. D_A heißt Definitionsbereich, W_A heißt Wertebereich von \hat{A} .

$$\hat{A}|\alpha\rangle = |\beta\rangle$$
 (III.43)

Eigenschaften (Vergleiche Definition I.7.2 in Abschnitt I.7)

$$(\hat{A}_1 + \hat{A}_2)|\alpha\rangle = \hat{A}_1|\alpha\rangle + \hat{A}_2|\alpha\rangle \tag{III.44}$$

$$(\hat{A}_1 \hat{A}_2) |\alpha\rangle = \hat{A}_1 (\hat{A}_2 |\alpha\rangle) \tag{III.45}$$

Nulloperator $\hat{0}$: $\hat{0}|\alpha\rangle = |\emptyset\rangle$ $\forall |\alpha\rangle \in \mathcal{H}$ (III.46) $1 |\alpha\rangle = |\alpha\rangle$ Einheitsoperator 1: $\forall |\alpha\rangle \in \mathcal{H}$ (III.47)

Definition III.7.2 (Adjungierter Operator \hat{A}^{\dagger}).

$$\hat{A}^{\dagger}|\gamma\rangle = |\bar{\gamma}\rangle \text{ mit } \langle\gamma|A|\alpha\rangle = \langle\bar{\gamma}|\alpha\rangle \qquad \qquad \forall |\alpha\rangle \in D_A \tag{III.48}$$

 $\langle \gamma | A | \alpha \rangle = \langle A^{\dagger} \gamma | \alpha \rangle = \langle \bar{\gamma} | \alpha \rangle = \langle \alpha | \bar{\gamma} \rangle^{*}$

 $= \langle \alpha | A^{\dagger} | \gamma \rangle^{*}$

Folgerungen

• Sei $|\alpha\rangle \in D_A$ und $|\gamma\rangle \in D_{A^{\dagger}}$, dann gilt:

$$\langle \gamma | A | \alpha \rangle = \langle \alpha | A^{\dagger} | \gamma \rangle^* \tag{III.49}$$

(III.50)

Beweis:

• \hat{A}^{\dagger} wirkt in \mathcal{H}^* wie \hat{A} in \mathcal{H} :

$$|\bar{\alpha}\rangle = \hat{A}|\alpha\rangle = |\hat{A}\alpha\rangle \Leftrightarrow \langle\bar{\alpha}| = \langle\bar{\alpha}| = \langle\alpha|\hat{A}^{\dagger} = \langle\hat{A}\alpha|$$
(III.51)

In diesem Sinne gilt:

$$(c\hat{A}|\alpha\rangle)^{\dagger} = c^* \langle \alpha | \hat{A}^{\dagger} \tag{III.52}$$

- Bei passenden Definitionsbereichen gilt $(\hat{A}^{\dagger})^{\dagger} = \hat{A}$.
 - $(\hat{A}\hat{B})^{\dagger} = \hat{B}^{\dagger}\hat{A}^{\dagger}$ (III.53)

Definition III.7.3 (Hermitescher Operator). Ein linearer Operator heißt hermitesch wenn gilt:

i)
$$D_A = D_{A^{\dagger}} \subseteq \mathcal{H}$$
 (III.54)

ii)
$$\hat{A}|\alpha\rangle = \hat{A}^{\dagger}|\alpha\rangle$$
 $\forall |\alpha\rangle \in D_A$ (III.55)
curz: $\hat{A}^{\dagger} = \hat{A}$

kurz:

•

Definition III.7.4 (Beschränkter Operator). Ein linearer Operator \hat{A} heißt beschränkt, falls ein c > 0 existient so dass ~

$$||A|\alpha\rangle|| \le c||\alpha\rangle|| \qquad \forall |\alpha\rangle \in D_A \tag{III.56}$$

gilt.

III.8 Das Eigenwertproblem für hermitesche Operatoren

Das Eigenwertproblem wird formuliert als EIGENWERTGLEICHUNG:

$$\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$$
Eigenvektor = |Eigenwert>

Häufige Notation:

Beweis:

Eigenschaften: Sei $\hat{A} = \hat{A}^{\dagger}$ (hermitesch) (vergleiche Abschnitt I.13), dann gilt:

• Die Erwartungswerte des Operators \hat{A} bezüglich beliebiger Zustände sind reell.

Beweis:
$$(\langle \alpha | \hat{A} | \alpha \rangle)^* = \langle \alpha | \hat{A}^{\dagger} | \alpha \rangle = \langle \alpha | \hat{A} | \alpha \rangle$$
 (III.58)

• Die Eigenwerte a sind reell.

$$a = \frac{\langle a | \hat{A} | a \rangle}{\langle a | a \rangle} \tag{III.59}$$

• Die Eigenzustände sind zueinander orthogonal:

$$\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle a_i|a_j\rangle = \delta_{ij}$$
 (III.60)

Verallgemeinerung zu eigentlichen und uneigentlichen Eigenzuständen

$$\langle a_i | a_j \rangle = \delta(i,j)$$
 (III.61)

Die Eigenzustände eines hermiteschen Operators bilden eine Basis von \mathcal{H} : Sei $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ beliebig, dann gilt:

$$|\psi\rangle = \sum_{j} |a_{j}\rangle\langle a_{j}|\psi\rangle \tag{III.62}$$

Weiterhin ist

$$\hat{A} |\psi\rangle = \sum_{(\text{III.57})} \sum_{j} a_{j} |a_{j}\rangle \langle a_{j} |\psi\rangle \qquad \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}$$
(III.63)

 $\mathrm{deshalb} \Rightarrow$

$$\hat{A} = \sum_{j} a_{j} |a_{j}\rangle\langle a_{j}| \tag{III.64}$$

"Spektraldarstellung von \hat{A} "

Der Spezialfall $\hat{A} = \mathbb{1}$ liefert die Vollständigkeitsrelation

$$\mathbb{1} = \sum_{j} |a_j\rangle\langle a_j| \tag{III.65}$$

Diese liefert einen häufigen Trick zur Umformung von Ausdrücken ("Einschieben einer Eins").

Beispiel:

$$\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \psi | \mathbb{1} \hat{A} \mathbb{1} | \psi \rangle$$

$$= \sum_{j} \sum_{k} \langle \psi | a_{j} \rangle \underbrace{\langle a_{j} | \hat{A} | a_{k} \rangle}_{a_{j} \delta(j,k)} \langle a_{k} | \psi \rangle$$

$$= \sum_{j} a_{j} |\langle a_{j} | \psi \rangle|^{2}$$
(III.66)

Satz: Die hermiteschen Operatoren \hat{A} und \hat{B} sind genau dann vertauschbar, [A, B] = 0, wenn sie dieselben Eigenvektoren besitzen.

Beweis:

,,⇐") Sei $\{\varphi_i\}$ ein gemeinsamer Satz von Eigenvektoren von \hat{A} und \hat{B} .

$$\hat{A}|\varphi_i\rangle = a_i|\varphi_i\rangle$$
 $\hat{B}|\varphi_i\rangle = b_i|\varphi_i\rangle$

Spektraldarstellungen:

"⇒") Es gelte $[\hat{A},\hat{B}]=0$ und $\hat{A}|\varphi_i\rangle=a_i|\varphi_i\rangle,$ dann folgt

$$\hat{A}\hat{B}|\varphi_i\rangle = \hat{B}\hat{A}|\varphi_i\rangle = \hat{B}a_i|\varphi_i\rangle$$
$$= a_i(\hat{B}|\varphi_i\rangle)$$
(III.68)

Das heißt $\hat{B}|\varphi_i\rangle$ ist Eigenvektor zu \hat{A} mit Eigenwert a_i . Lassen wir eine mögliche Entartung außer acht, dann folgt:

$$\hat{B}|\varphi_i\rangle \sim |\varphi_i\rangle \Rightarrow \hat{B}|\varphi_i\rangle = b_i|\varphi_i\rangle \qquad \Box \text{ (III.69)}$$

III.9 Spezielle Operatoren

Definition III.9.1 (Dyadisches Produkt). Das dyadische Produkt zweier Vektoren ist definiert als

$$D_{\alpha\beta} := |\alpha\rangle\langle\beta| \tag{III.70}$$
Für das dyadische Produkt gilt

$$D_{\alpha\beta}|\psi\rangle \||\alpha\rangle \qquad \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H} \tag{III.71}$$

$$(|\alpha\rangle\langle\beta|)^{\mathsf{T}} = |\beta\rangle\langle\alpha| \tag{III.72}$$

Definition III.9.2 (Projektionsoperator). Ist $|\alpha\rangle$ ein normierter Vektor ($\langle \alpha | \alpha \rangle = 1$), dann ist der zugehörige Projektionsoperator definiert als

$$\hat{P}(|\alpha\rangle) := |\alpha\rangle\langle\alpha| \tag{III.73}$$

Für Projektionsoperatoren gilt

Idempotenz
$$\hat{P}^2(|\alpha\rangle) = |\alpha\rangle\langle\alpha|\alpha\rangle\langle\alpha| = |\alpha\rangle\langle\alpha| = \hat{P}(|\alpha\rangle)$$
(III.74)Hermitizität $\hat{P}^{\dagger}(|\alpha\rangle) = \hat{P}(|\alpha\rangle)$ (III.75)

Definitionsbereich
$$D_{\hat{P}(|\alpha\rangle)} = \mathcal{H}$$
 (III.76)

Wertebereich
$$W_{\hat{P}(|\alpha\rangle)} = \{\text{Span}(|\alpha\rangle)\}$$
 (III.77)

 $\hat{P}(|\alpha\rangle)$ ist Operatordarstellung des Trenners aus Abschnitt III.2. Sei $\{|\alpha\rangle\}$ eine Orthonormalbasis (ONB) von \mathcal{H} . Dann gilt Ŷ

$$\hat{P}(|\alpha_i\rangle)\hat{P}(|\alpha_j\rangle) = \delta(i,j)\hat{P}(|\alpha_i\rangle)$$
(III.78)

Häufig schreibt man auch

$$\hat{P}_{|\alpha\rangle} = \hat{P}(|\alpha\rangle) \tag{III.79}$$

und

$$\mathbb{1} = \sum_{i} \hat{P}(|\alpha_i\rangle) \tag{III.80}$$

VERALLGEMEINERUNG: Projektionsoperator auf Unterraum $U \subset \mathcal{H}$: $\{|\mu_{\nu}\rangle\}$ sei Orthonormalbasis von U, dann ist

$$\hat{P}_U := \sum_{\nu} |\mu_{\nu}\rangle \langle \mu_{\nu}| \tag{III.81}$$

Projektionsoperator auf U. Es gilt weiterhin

$$D_{\hat{P}_U} = \mathcal{H} \tag{III.82}$$

$$W_{\hat{P}_U} = U \tag{III.83}$$

Definition III.9.3 (Inverser Operator). Der zu \hat{A} inverse Operator \hat{A}^{-1} ist definiert durch

$$\hat{A}^{-1}\hat{A} = \hat{A}\hat{A}^{-1} = \mathbb{1}$$
(III.84)

Für den inversen Operator gilt

$$(\hat{A}^{-1})^{\dagger} = (\hat{A}^{\dagger})^{-1}$$
 (III.85)

da

$$1 = 1^{\dagger} = (\hat{A}^{-1}\hat{A})^{\dagger} = \hat{A}^{\dagger}(\hat{A}^{-1})^{\dagger} \qquad \Box \text{ (III.86)}$$

Definition III.9.4. Als unitäre Operatoren bezeichnet man solche, für die gilt

$$\hat{U}^{\dagger} = \hat{U}^{-1} \tag{III.87}$$

$$\hat{U}^{\dagger}\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^{\dagger} = \mathbb{1} \tag{III.88}$$

beziehungsweise

Unitäre Operatoren werden häufig dargestellt als $\hat{U} = e^{i\hat{V}}$ mit \hat{V} hermitesch. **Definition III.9.5** (Unitäre Transformationen). Mittels unitärer Operatoren definieren wir unitäre Transformationen für

- i) Zustände: $|\psi\rangle \to |\bar{\psi}\rangle = U|\psi\rangle$ (III.89)
- ii) Operatoren: $\hat{A} = \rightarrow \hat{A} = U\hat{A}U^{\dagger}$ (III.90)

Unitäre Transformationen ändern Skalarprodukte, Erwartungswerte und Eigenwerte nicht:

a) Skalarprodukte: $\langle \bar{\psi} | \bar{\varphi} \rangle = \langle \psi | U^{\dagger} U | \varphi \rangle$ (III.91)

b) Erwartungswerte:
$$\langle \bar{\psi} | \bar{A} | \bar{\psi} \rangle = \langle \psi | U^{\dagger} U A U^{\dagger} U | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$$
 (III.92)

c) Eigenwerte: Folgt aus a) und b):

$$a_{i} = \frac{\langle a_{i} | \hat{A} | a_{i} \rangle}{\langle a_{i} | a_{i} \rangle} = \frac{\langle \bar{a}_{i} | \bar{A} | \bar{a}_{i} \rangle}{\langle \bar{a}_{i} | \bar{a}_{i} \rangle} = \bar{a}_{i}$$
(III.93)

Sämtliche messbaren Resultate der Quantenmechanik können über Skalarprodukte, Erwartungswerte und Eigenwerte ausgedrückt werden, deshalb ändert sich die Physik durch unitäre Transformationen in \mathcal{H} nicht!

Wir wollen nun noch eine infinitesimale unitäre Transformation betrachten:

$$\hat{U} = e^{i\epsilon\hat{V}} = \mathbb{1} + i\epsilon\hat{V} + \mathcal{O}(\epsilon^2)$$
(III.94)

$$\hat{U}_{\epsilon} = 1 + i\epsilon \hat{V} \tag{III.95}$$

Unter Vernachlässigung quadratischer Terme in ϵ .

III.10 Funktionen und Ableitungen von Operatoren

i) Funktionen linearer Operatoren sind über Potenzreihen erklärt:

$$f(\hat{A}) = \sum_{n} c_n(\hat{A})^n \tag{III.96}$$

- ii) Man definiert auch verschiedene Arten von Ableitung einer Operatorfunktion:
 - a) Ableitung nach einem Parameter: Gegeben sei eine Operatorfunktion, die zusätzlich noch von einem reellen oder komplexen Parameter abhänge: $f(\hat{A}, \eta)$ Dann ist

$$\frac{df}{d\eta} := \lim_{\epsilon \to 0} \frac{f(\hat{A}, \eta + \epsilon) - f(\hat{A}, \eta)}{\epsilon}$$
(III.97)

b) Nach einem Operator:

$$\frac{df(\hat{A})}{d\hat{A}} := \lim_{\epsilon \to 0} \frac{f(\hat{A} + \epsilon \mathbb{1}) - f(\hat{A})}{\epsilon}$$
(III.98)

Es gelten die üblichen Rechenregeln unter Beobachtung der Reihenfolge der Operatoren:

$$\frac{d}{d\hat{A}}\left(f(\hat{A})g(\hat{A})\right) = \frac{df(\hat{A})}{d\hat{A}}g(\hat{A}) + f(\hat{A})\frac{dg(\hat{A})}{d\hat{A}}$$
(III.99)

$$\frac{d}{d\hat{A}}\left(f(\hat{A}) + g(\hat{A})\right) = \frac{df(A)}{d\hat{A}} + \frac{dg(A)}{d\hat{A}}$$
(III.100)

 \Rightarrow

III.11 Matrixelemente von Operatoren

Gegeben sei eine abzählbare Orthonormalbasis $\{|\alpha_i\rangle, i = 1, 2, ...\}$, dann identifizieren wir

• ein Ket als Spaltenvektor in der Basis $\{\alpha_i\}$:

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} |\alpha_i\rangle \underbrace{\langle \alpha_i | \psi \rangle}_{\psi_i} \quad \leftrightarrow \quad \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \end{pmatrix} \text{ Spaltenvektor}$$
(III.101)

wobei sich die Komponenten des Vektors aus der Projektion auf die Basisvektoren ergeben.

$$\psi_i = \langle \alpha_i | \psi \rangle \tag{III.102}$$

Im überabzählbaren Fall $\{|\alpha_x\rangle, x\in\mathbb{R}\}$ werden diese Projektionen zu Funktionen von einer Variablen:

$$\psi(x) = \langle \alpha_x | \psi \rangle \tag{III.103}$$

• einen *Operator* als Matrix in der Basis $\{\alpha_i\}$:

$$\hat{A} = \mathbb{1} \cdot \hat{A} \cdot \mathbb{1} = \sum_{i,j} |\alpha_i\rangle \underbrace{\langle \alpha_i | \hat{A} | \alpha_j \rangle}_{A_{ij}} \langle \alpha_j | = \sum_{i,j} A_{ij} |\alpha_i\rangle \langle \alpha_j | \qquad (\text{III.104})$$

wobei wir die *Matrixelemente* identifizieren als

$$A_{ij} = \langle \alpha_i | \hat{A} | \alpha_j \rangle$$
(III.105)
$$A_{11} = A_{12} + \dots + A_{1i} + \dots \rangle$$

$$A_{ij} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1j} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & \dots & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \\ A_{i1} & & & A_{ij} & \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix}$$
(III.106)

Im überabzählbaren Fall $\{|\alpha_x\rangle, x\in\mathbb{R}\}$ werden die Matrixelemente zu Funktionen von zwei Variablen:

$$A(x, x') = \langle \alpha_x | \hat{A} | \alpha_{x'} \rangle \tag{III.107}$$

• ein Bra als Zeilenvektor mit konjugiert komplexen Einträgen:

$$\langle \psi | = \sum_{i} \langle \psi | \alpha_i \rangle \langle \alpha_i | = \sum_{i} \langle \alpha_i | \psi \rangle^* \langle \alpha_i | \quad \leftrightarrow \quad (\psi_1^* \ \psi_2^* \ \psi_3^* \ \dots)$$
(III.108)

Im Matrixelement des Produkts zweier Operatoren lässt sich die bekannte Matrixmultiplikation wiederfinden:

$$(\hat{A}\hat{B})_{ij} = \langle \alpha_i | \hat{A}\hat{B} | \alpha_j \rangle = \sum_k \langle \alpha_i | \hat{A} | \alpha_k \rangle \langle \alpha_k | \hat{B} | \alpha_j \rangle$$
$$= \sum_k A_{ik} B_{kj}$$
(III.109)

Weitere Eigenschaften

i)

$$(\hat{A}^{\dagger})_{ij} = A_{ji}^* \tag{III.110}$$

Da
$$\langle \alpha_i | \hat{A}^{\dagger} | \alpha_j \rangle = \langle \hat{A} \alpha_i | \alpha_j \rangle = \langle \alpha_j | \hat{A} | \alpha_i \rangle^* = A_{ji}^*$$
 (III.111)

ii) Für unitäre Operatoren $U^{\dagger}=U^{-1}$ gilt

$$(U^{-1})_{ij} = U_{ji}^* \tag{III.112}$$

Definition III.11.1 (Spur eines Operators).

$$\operatorname{Sp}(\hat{A}) = \operatorname{Tr}(\hat{A}) = \sum_{i} \langle \alpha_i | \hat{A} | \alpha_i \rangle$$
 (III.113)

Die Spur eines Operators ist unabhängig von der gewählten Darstellung, das heißt unabhängig von der verwendeten Orthonormalbasis.

IV Die statistischen Aussagen der Quantenmechanik

IV.1 Wahrscheinlichkeit, Erwartungswert, Streuung, Unschärfe

Wir wollen zunächst einige statistische Begriffe definieren. Bei N-maliger Messung einer Größe \hat{A} mit diskreten Messwerten a_k unter gleichen Anfangsbedingungen trete der Messwert a_k N_k -mal auf. **Definition IV.1.1** (Wahrscheinlichkeit). Die Wahrscheinlichkeit des Messwertes a_k ist definiert als

$$w_{a_k} := \lim_{N \to \infty} \frac{N_k}{N} \tag{IV.1}$$

Es gilt $\sum_k w_{a_k} = 1$. Ist $w_{a_{k_0}} = 1$ und $w_{a_k} = 0 \forall k \neq k_0$, so tritt a_{k_0} mit Sicherheit ein. Offensichtlich ist $0 \le w_{a_k} \le 1$.

Definition IV.1.2 (Erwartungs- oder Mittelwert).

$$\langle \hat{A} \rangle = \lim_{N \to \infty} \frac{1}{N} \sum_{k} N_k a_k = \sum_{k} w_{a_k} a_k \tag{IV.2}$$

Der Erwartungswert muss mit keinem Messwert übereinstimmen. Definition IV.1.3 (Streuung). Quadratische Abweichung vom Mittelwert.

$$(\Delta A)^2 = \lim_{N \to \infty} \frac{1}{N} \sum_k N_k \left(a_k - \langle \hat{A} \rangle \right)^2 = \sum_k w_{a_k} \left(a_k - \langle \hat{A} \rangle \right)^2 = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2$$
(IV.3)

Die Streuung ist als Summe positiver Größen stets positiv. Deshalb gilt:

$$(\Delta A)^2 = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \text{Messwert } a_{k_0} \text{ liegt mit Sicherheit vor; } w_{a_{k_0}} = 1, w_{a_k} = 0 \ \forall k \neq k_0$$
 (IV.4)

Definition IV.1.4 (Unschärfe).

$$\Delta A = \sqrt{\sum_{k} w_{a_k} \left(a_k - \langle \hat{A} \rangle \right)^2} = \sqrt{\langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2}$$
(IV.5)

Sind die möglichen Messwerte kontinuierlich verteilt, $a \in \mathbb{R}$, so tritt an Stelle der Wahrscheinlichkeit w_{a_k} die Wahrscheinlichkeitsdichte w(a).

Definition IV.1.5 (Wahrscheinlichkeit für Messwert im Intervall $[a_1, a_2]$).

$$w(a_1, a_2) = \int_{a_1}^{a_2} da \, w(a) \tag{IV.6}$$

Umfasst das Intervall alle möglichen Werte, so gilt:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} da \, w(a) \tag{IV.7}$$

Definition IV.1.6 (Erwartungswert).

$$\langle \hat{A} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} da \, w(a) \cdot a$$
 (IV.8)

Für diskrete und/oder kontinuierliche Messwerte gilt in zusammenfassender Schreibweise nach der Notation in Abschnitt III.6:

$$w(a_1, a_2) = \sum_{a_1}^{a_2} w(a)$$
(IV.9)

$$1 = \sum_{-\infty}^{\infty} w(a) \tag{IV.10}$$

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_{-\infty}^{\infty} w(a) \cdot a$$
 (IV.11)

IV.2 Postulate der Quantenmechanik

1)	Messapparatur einer physikalischen Größe (Observable)	⇔	linearer hermitescher Operator \hat{A}
2)	Reiner Zustand des Quantensystems	⇔	Hilbert-Vektor $ \psi\rangle$
3)	Messung bzw. Wechselwirkung zwischen System und Apparatur mit Messergebnis \boldsymbol{a}_k	⇔	Spektralzerlegung $ \psi\rangle = \sum_{k} a_k\rangle \langle a_k \psi\rangle$ $\xrightarrow{\text{Messung}} a_k\rangle \langle a_k \psi\rangle$ $\stackrel{a_k}{=} P_{ a_k\rangle} \psi\rangle$ Reduktion des Zustandsvektors
4)	Mögliche Messergebnisse von ${\cal A}$	\Leftrightarrow	Eigenwerte a_k des Operators \hat{A}
5)	Wahrscheinlichkeit für die Messung von ${\cal A}$	\Leftrightarrow	$w(a_k \psi) = \langle a_k \psi \rangle ^2$

Die Quantentheorie liefert lediglich statistische Aussagen die wesentlich schwächer sind als der Determinismus der klassischen Physik. Die Quantentheorie ist dennoch in der Lage die zwei Fragen



Abbildung IV.1: Die drei Akteure des Quantenmechanischen Messprozesses



Abbildung IV.2: Wiederholte Messung der gleichen Observablen

- i) Welche Messergebnisse sind überhaupt möglich?
- ii) Mit welcher Wahrscheinlichkeit stellen sich diese Messergebnisse ein?

 $zu\ beantworten.$

IV.3 Der Messprozess

Bei einer Messung an einem quantenmechanischen System spielen drei Akteure eine Rolle: Das System, die Messapparatur und der Beobachter (siehe auch Abb. IV.1). Wir wollen nun die zweimalige Messung der gleichen Observablen wie in Abb. IV.2 betrachten. Eine wiederholte Messung der gleichen Observablen ändert das Messergebnis nicht!



$$= \sum_{i} w(a_{i}) = \sum_{i} \langle \psi | a_{i} \rangle \langle a_{i} | \psi \rangle$$
$$= \langle \psi | \underbrace{\sum_{i} |a_{i} \rangle \langle a_{i}|}_{=1} \psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle$$
(IV.13)

iii) Der Erwartungswert von \hat{A} im Systemzustand $|\psi\rangle$ lautet:

$$\begin{split} \langle \hat{A} \rangle &= \sum_{k} a_{k} w_{a_{k}} = \sum_{k} a_{k} |\langle a_{k} | \psi \rangle|^{2} \\ &= \sum_{k} \langle \psi | \hat{A} | a_{k} \rangle \langle a_{k} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A} \sum_{k} |a_{k} \rangle \langle a_{k} | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \end{split}$$
(IV.14)

Alternative Beziehung:

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \operatorname{Sp}(P_{|\psi\rangle} \hat{A})$$
 (IV.15)

iv) Die Streuung von A im Zustand ist

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

= $\langle \psi | \hat{A}^{2} | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle^{2}$
= $\langle \hat{A}^{2} \rangle - \langle \hat{A} \rangle^{2}$ (IV.16)

v) Im Falle der *Entartung* von a_i mit $M(a_i) = \{ \text{Span} | a_{i,s} \rangle, s = 1, \dots, \dim M(a_i) \} \subset \mathcal{H}$ Unterraum zum Eigenwert a_i gilt:

$$w_{a_i} = \langle \psi | P_{M(a_i)} | \psi \rangle \tag{IV.17}$$

 mit

$$P_{M(a_i)} = \sum_{s} |a_{i,s}\rangle \langle a_{i,s}| \tag{IV.18}$$

wobei

$$A|a_{i,s}\rangle = a_i|a_{i,s}\rangle \quad \text{mit } s = 1, \dots, \dim M(a_i)$$

Nach Messung von a_i wird der Zustandsvektor nur in den Unterraum $M(a_i)$ projiziert:

$$|\psi\rangle \xrightarrow[Messung]{Messung} P_{M(a_i)}|\psi\rangle = \sum_{s}^{f} |a_{i,s}\rangle\langle a_{i,s}|\psi\rangle$$
 (IV.19)

IV.4 Verträgliche und nicht-verträgliche Observablen

Wir wollen einen Aufbau gemäß Abb. IV.3 betrachten.

Was passiert bei zweiter Messung von \hat{A} ?

- **1)** \hat{A} und \hat{B} verträglich $\Leftrightarrow [\hat{A}, \hat{B}] = 0$ Dann ist $|\psi_2\rangle$ Eigenzustand zu \hat{B} und \hat{A} : $|\psi_2\rangle = |a_i, b_j\rangle$. Die zweite Messung von \hat{A} liefert mit Sicherheit a_i . Die Reihenfolge der Messungen von \hat{A} und \hat{B} ist *irrelevant*.
- 2) \hat{A} und \hat{B} nicht verträglich $\Leftrightarrow [\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$ Der Messwert a_i stellt sich bei der zweiten Messung von \hat{A} nur mit Wahrscheinlichkeit $w_{a_i} = |\langle a_i | b_j \rangle|^2$ ein. Der Präparationseffekt durch die Messung von \hat{A} wird durch die Messung von \hat{B} aufgehoben.



Abbildung IV.3: Nacheinander werden die Observablen \hat{A} und \hat{B} gemessen.

Um einen Zustand vollständig festzulegen, bedarf es der Messung eines vollständigen Satzes an kommutierenden Operatoren. **Definition IV.4.1** (Vollständiger Satz von kommutierenden Observablen). Die Observablen $\{\underbrace{\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \ldots, \hat{O}}_{F \text{ Stück}}\}$

F Stü bilden einen vollständigen Satz kommutierender Observablen, wenn es genau ein gemeinsames System von Eigenzuständen gibt. F ist die Zahl der Freiheitsgrade des Systems. **Definition IV.4.2** (Reiner Zustand). Ein *reiner Zustand* wird durch Messung eines vollständigen Satzes von kommutierenden Observablen *präpariert*:

$$|\psi\rangle = |a, b, c, \dots, o\rangle \tag{IV.20}$$

Vollständigkeitsrelation Für einen vollständigen Satz verträglicher Observablen gilt die Vollständigkeitsrelation

$$\mathbb{1} = \sum_{i,j,k,l,\dots,p} |a_i, b_j, c_k, \dots, o_p\rangle \langle a_i, b_j, c_k, \dots, o_p|$$
(IV.21)

IV.5 Verallgemeinerte Heisenberg'sche Unschärferelation

Wir hatten gesehen, dass die Unschärfe $\Delta A_{\psi}^2 = \langle \psi | \hat{A}^2 | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle^2$ genau dann verschwindet, wenn $|\psi\rangle$ Eigenvektor zu \hat{A} ist. Das heißt aber falls $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$, wird im Allgemeinen $\Delta A_{\psi}^2 \cdot \Delta B_{\psi}^2$ ungleich Null sein, da $|\psi\rangle$ niemals simultan Eigenvektor zu \hat{A} und \hat{B} sein kann. Das heißt, die gleichzeitige scharfe Messung von \hat{A} und \hat{B} ist unmöglich. Wir wollen nun eine untere Schranke für $\Delta A_{\psi}^2 \cdot \Delta B_{\psi}^2$ finden:

• Betrachte die hermiteschen Operatoren:

$$\hat{\alpha} = \hat{A} - \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \cdot \mathbb{1} \qquad \qquad \hat{\beta} = \hat{B} - \langle \psi | \hat{B} | \psi \rangle \cdot \mathbb{1} \qquad (IV.22)$$

• Streuungen von A und B:

$$\Delta A_{\psi}^{2} = \langle \psi | (\hat{A} - \langle \psi | \hat{A} | \psi \langle \cdot \mathbf{1} \rangle^{2} | \psi \rangle$$

$$= \langle \psi | \hat{\alpha}^{2} | \psi \rangle$$

$$= \| \hat{\alpha} | \psi \rangle \|^{2} \qquad (IV.23)$$

$$\Delta B_{\psi}^{2} = \| \hat{\beta} | \psi \rangle \|^{2} \qquad (IV.24)$$

Dies sind Längen² der Vektoren $\hat{\alpha}|\psi\rangle$ und $\hat{\beta}|\psi\rangle$.

IV Die statistischen Aussagen der Quantenmechanik

• Die Schwarz'sche Ungleichung liefert:

$$\Delta A_{\psi}^{2} \Delta B_{\psi}^{2} = \|\hat{\alpha}|\psi\rangle\|^{2} \|\hat{\beta}|\psi\rangle\|^{2}$$

$$\geq |\langle \hat{\alpha}\psi|\hat{\beta}\psi\rangle|^{2} = \langle \psi|\hat{\alpha}\hat{\beta}|\psi\rangle\langle\psi|\hat{\beta}\hat{\alpha}|\psi\rangle \qquad (IV.25)$$

• Nun ist

$$\hat{\alpha}\hat{\beta} = \frac{1}{2}\{\hat{\alpha},\hat{\beta}\} + \frac{1}{2}[\hat{\alpha}\hat{\beta}]$$
(IV.26)

$$\hat{\beta}\hat{\alpha} = \frac{1}{2}\{\hat{\alpha},\hat{\beta}\} - \frac{1}{2}[\hat{\alpha}\hat{\beta}] \tag{IV.27}$$

 mit

$$\{\hat{A},\hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$$
 "Anti-Kommutator" (IV.28)

 \Rightarrow

$$\langle \psi | \hat{\alpha} \hat{\beta} | \psi \rangle \langle \psi | \hat{\beta} \hat{\alpha} | \psi \rangle = \frac{1}{4} \langle \psi | \{ \hat{\alpha}, \hat{\beta} \} | \psi \rangle^2 + \frac{1}{4} \langle \psi | i [\hat{\alpha}, \hat{\beta}] | \psi \rangle^2$$
(IV.29)

Da der Anti-Kommutator ein hermitescher Operator ist, gilt $\langle \hat{\psi} | \{ \hat{\alpha}, \hat{\beta} \} | \psi \rangle \in \mathbb{R}$ und liefert die Abschätzung

$$\Delta A_{\psi} \cdot \Delta B_{\psi} \ge \frac{1}{2} |\langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle|$$
 (IV.30)

wobei $[\hat{\alpha}, \hat{\beta}] = [\hat{A}, \hat{B}]$ benutzt wurde. (IV.30) ist die verallgemeinerte Heisenberg'sche Unschärferelation. Für $\hat{A} = \hat{q}$ und $\hat{B} = \hat{p}$ folgt aus $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$

$$\Delta p \cdot \Delta q \ge \frac{\hbar}{2} \tag{IV.31}$$

IV.6 Orts- und Impulsdarstellung

Wir wollen nun den abstrakten Dirac-Formalismus in Verbindung mit der Schrödinger'schen Wellenmechanik aus den Kapiteln I und II bringen.

Ortsdarstellung eindimensionaler Probleme Jede Observable ist darstellbar als $\mathcal{F}(\hat{x}, \hat{p}) = \mathcal{F}^{\dagger}(\hat{x}, \hat{p})$. Wegen

$$[\hat{\mathcal{F}}, \hat{x}] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \hat{\mathcal{F}}}{\partial \hat{p}}$$
(IV.32)

sind alle mit \hat{x} vertauschenden Operatoren auf diesem Hilbert-Raum allgemeine Funktionen von \hat{x} : $\hat{\mathcal{F}}(\hat{x})$. Das heißt, der vollständige Satz von Observablen ist durch $\{\hat{x}\}$ alleine gegeben. Die zugehörige Eigenwertgleichung lautet

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle \tag{IV.33}$$

Bemerkung:

Zuvor hatten wir $|\alpha_x^{\rm D}\rangle = |x\rangle$ geschrieben, $|x\rangle$ ist uneigentlicher Dirac-Vektor.

Wie lautet das Spektrum von \hat{x} ? Dazu betrachten wir den Operator

$$\hat{T}(\xi) := e^{-\frac{i}{\hbar}\xi\hat{p}} \qquad \xi \in \mathcal{R}$$
(IV.34)

Aus (IV.32) folgt:

$$[\hat{T}(\xi), \hat{x}] = -\xi \hat{T}(\xi) \tag{IV.35}$$

Nun wenden wir $[\hat{T}, \hat{x}]$ auf $|x\rangle$ an:

$$\hat{T}(\xi) \underbrace{\hat{x}|x}_{=x|x\rangle} - \hat{x}\hat{T}(\xi)|x\rangle = -\xi\hat{T}(\xi)|x\rangle$$
(IV.36)

$$\hat{x}(\hat{T}(\xi)|x\rangle) = (x+\xi)(\hat{T}(\xi)|x\rangle)$$
(IV.37)

Das heißt, $\hat{T}(\xi)|x\rangle$ ist ebenfalls Eigenvektor zu \hat{x} mit Eigenwert $(x + \xi)!$

$$T(\xi)|x\rangle = c \cdot |x+\xi\rangle \quad c \in \mathbb{C}$$
 (IV.38)

 $\hat{T}(\xi)$ ist für $\xi \in \mathbb{R}$ unitär:

$$\hat{T}^{\dagger}(\xi) = e^{\frac{i}{\hbar}\xi\hat{p}} = \hat{T}^{-1}(\xi)$$
 (IV.39)

Deswegen ist |c| = 1.

Beweis:

 \Rightarrow

$$\delta(x, x') = \langle x | x' \rangle = \langle x | \hat{T}^{\dagger}(\xi) \hat{T}(\xi) | x' \rangle$$

$$= \langle \hat{T}^{\dagger} x | \hat{T} x \rangle = c^* c \langle x + \xi | x + \xi \rangle$$

$$= |c|^2 \delta(x, x')$$

$$c = e^{i\alpha(x,\xi)}$$
(IV.40)

Wir setzen $\alpha = 0$. Das heißt:

$$\hat{T}(\xi)|x\rangle = |x+\xi\rangle$$
 (IV.41)

Da $\xi \in \mathbb{R}$ beliebig, sind somit die Eigenwerte x kontinuierlich verteilt: $x \in \mathbb{R}$

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x-x')$$
 (IV.42)

$$[|x\rangle] = (\text{Länge})^{-1/2} \tag{IV.43}$$

Wegen (IV.41) wird $\hat{T}(\xi)$ "Translations operator" genannt.

Zustandsvektor des quantentheoretischen Systems in der Ortsbasis

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \, |x\rangle \langle x|\psi\rangle \tag{IV.44}$$

Für die Wellenfunktion schreiben wir $\psi(x) = \langle x | \psi \rangle$.

$$\Rightarrow$$

IV Die statistischen Aussagen der Quantenmechanik

Normierung

$$1 = \langle \psi | \psi \rangle = \langle \psi | \int_{-\infty}^{\infty} dx \, |x\rangle \langle x| \, |\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \langle \psi | x \rangle \langle x| \psi\rangle$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \psi^*(x) \psi(x)$$
(IV.45)

Quadratintegrabilität!

Wahrscheinlichkeit einer Ortsmessung im Intervall [x, x + dx]

$$w(x, x + dx) = \left| \langle x | \psi \rangle \right|^2 dx = \psi^*(x)\psi(x)dx$$
 (IV.46)

Wirkung des Impulsoperators auf $|x\rangle$ Wir gehen aus von der infinitesimalen Translation

$$\hat{T}(\delta\xi) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\delta\xi \cdot \hat{p} \tag{IV.47}$$

(IV.41) ergibt dann:

$$|x\rangle - \frac{i}{\hbar}\delta\xi\hat{p}|x\rangle = |x + \delta\xi\rangle$$
$$\hat{p}|x\rangle = -\frac{\hbar}{i}\frac{|x + \delta\xi\rangle - |x\rangle}{\delta\xi}$$
(IV.48)

Für $\delta \xi \to 0$ folgt:

 \Rightarrow

 \Rightarrow

$$\hat{p}|x\rangle = -\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}|x\rangle \tag{IV.49}$$

Wirkung des Impulsoperators auf $\psi(x) = \langle x | \psi \rangle$:

$$\langle x|\hat{p}|\psi\rangle = \langle \hat{p}x|\psi\rangle = +\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\langle x|\psi\rangle$$
$$\hat{p}\circ\psi(x) = +\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\psi(x)$$
(IV.50)

Wirkung des Hamiltonoperators in der Ortsdarstellung

4

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + V(x)$$
$$\hat{H}|x\rangle = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)|x\rangle$$
(IV.51)

Wegen $\hat{H}=\hat{H}^{\dagger}$ gilt dann

$$\langle x|\hat{H}|\psi\rangle = \hat{H} \circ \psi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)\psi(x) \tag{IV.52}$$

Schrödinger-Gleichung:

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \hat{H}\circ\psi(x) \tag{IV.53}$$

Basisunabhängige Formulierung:
$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle \qquad (IV.54)$$

IV.7 Eigenwertprobleme in der Ortsdarstellung

IV.7.1 Impuls

$$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle$$

$$\Rightarrow \qquad \langle x|\hat{p}|p\rangle = p\langle x|p\rangle \qquad (IV.55)$$

mit $\psi_p(x) := \langle x | p \rangle$ ist

 $\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\psi_p(x) = p\,\psi_p(x)$ $\psi_p(x) = \langle x|p \rangle = c \cdot e^{\frac{i}{\hbar}p \cdot x}$ (IV.57)

 \Rightarrow

Aus der Normierungsbedingung erhalten wir c:

$$\langle p'|p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \psi_p^*(x) \psi_p(x)$$

= $|c|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \, e^{\frac{i}{\hbar}(p-p') \cdot x}$
= $|c|^2 (2\pi\hbar) \cdot \delta(p-p')$
 $c = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \cdot e^{i\alpha}$ (IV.58)

 \Rightarrow

Wir setzen wieder $\alpha=0$ und erhalten die normierten Impulseigenfunktionen

$$\langle x|p\rangle = \psi_p(x) = \frac{1}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}p \cdot x}$$
$$(IV.59)$$

IV.7.2 Energie

$$\hat{H}|E\rangle = E|E\rangle$$
 (IV.60)

Mit $\psi_E(x) := \langle x | E \rangle$ folgt

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)\psi_E(x) = E\psi_E(x)$$
(IV.61)

Zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

V Der Drehimpuls

V.1 Vertauschungsrelationen

Der Operator des Bahndrehimpulses lautet (in der Ortsdarstellung):

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{x}} \times \hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i} \vec{x} \times \vec{\nabla}$$

$$\hat{L}_i = \epsilon_{ijk} \hat{x}_j \hat{p}_k = \frac{\hbar}{i} \epsilon_{ijk} x_j \partial_k$$
(V.1)

beziehungsweise

wobe
i ϵ_{ijk} der vollständig antisymmetrische Tensor dritter Stufe mit
 $\epsilon_{123}=1$ ist.

Vertauschungsrelationen

$$\begin{aligned} & [\hat{L}_i, \hat{L}_j] &= i\hbar \,\epsilon_{ijk} \hat{L}_k \\ & [\hat{L}_i, \hat{x}_j] &= i\hbar \,\epsilon_{ijk} \hat{x}_k \\ & [\hat{L}_i, \hat{p}_j] &= i\hbar \,\epsilon_{ijk} \hat{p}_k \end{aligned}$$
 (V.2)

Diese Vertauschungsrelationen folgen sofort aus $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \,\delta_{ij}.$

V.2 Drehungen

Der *unitäre* Operator $U_{\vec{\varphi}} = e^{\frac{i}{\hbar}\vec{\varphi}\cdot\vec{L}}, \vec{\varphi} \in \mathbb{R}^3$ ist der Drehoperator. Man sagt, \vec{L} ist der Erzeugungsoperator der Drehung.

Beweis:

 \Rightarrow

a) Aus $\vec{L}^{\dagger} = \vec{L}$ folgt die Unitarität von $U_{\vec{\varphi}}$:

$$U_{\vec{\varphi}}^{\dagger} = e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\varphi}^{*}\cdot\vec{L}^{\dagger}} = e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\varphi}\cdot\vec{L}} = (U_{\vec{\varphi}})^{-1}$$
$$U_{\vec{\varphi}}^{\dagger}U_{\vec{\varphi}} = U_{\vec{\varphi}}U_{\vec{\varphi}}^{\dagger} = \mathbb{1}$$
(V.3)

V Der Drehimpuls



Abbildung V.1: $\vec{x} \to \vec{x}' = \vec{x} + \delta \vec{\varphi} \times \vec{x}$ ist infinitesimale Drehung.

b) Mit infinitesimalem Drehwinkel gilt in der Ortsdarstellung (siehe auch Abb. V.1):

$$U_{\delta\vec{\varphi}}\psi(\vec{x}) = e^{\delta\vec{\varphi}\cdot(\vec{x}\times\vec{\nabla})}\psi(\vec{x})$$

= $e^{(\delta\vec{\varphi}\times\vec{x})\cdot\vec{\nabla}}\psi(\vec{x})$
= $(1 + (\delta\vec{\varphi}\times\vec{x})\cdot\vec{\nabla})\psi(\vec{x}) + \mathcal{O}(\delta\vec{\varphi}^2)$
= $\psi(\vec{x} + \delta\vec{\varphi}\times\vec{x}) + \mathcal{O}(\delta\vec{\varphi}^2)$
 $U_{\delta\vec{\varphi}}\psi(\vec{x}) = \psi(\vec{x}')$; $\vec{x}' = \vec{x} + \delta\vec{\varphi}\times\vec{x}$ (V.4)

 \Rightarrow

Drehung des Vektors \vec{x} um infinitesimalen Winkel $|\delta \vec{\varphi}|$.

Frage: Wie sehen die Operatoren im gedrehten System aus? Sei \hat{A} ein Operator im System Σ . Wie lautet dann \hat{A}' im gedrehten System Σ' ?

$$\hat{A}\psi(\vec{x}) = \varphi(\vec{x}) \qquad \text{Multiplikation mit } U_{\delta\vec{\varphi}} \\
\Rightarrow \qquad U_{\delta\vec{\varphi}}\hat{A}\psi(\vec{x}) = \varphi(\vec{x}') \qquad \text{Einschieben von } \mathbb{1} = U^{\dagger}_{\delta\vec{\varphi}}U_{\delta\vec{\varphi}} \\
\Rightarrow \qquad (U_{\delta\vec{\varphi}}\hat{A}U^{\dagger}_{\delta\vec{\varphi}})U_{\delta\vec{\varphi}}\psi(\vec{x}) = \varphi(\vec{x}') \\
\underbrace{(\underbrace{U^{\dagger}_{\delta\vec{\varphi}}\hat{A}U_{\delta\vec{\varphi}}}_{=:\hat{A}'})\psi(\vec{x}') = \varphi(\vec{x}')}_{\hat{A}'\psi(\vec{x}') = \varphi(\vec{x}')} \qquad (V.5)$$

Das heißt, die Operatoren in Σ' lauten:

$$\hat{A} \to \hat{A}' = U_{\delta\vec{\varphi}} \hat{A} U^{\dagger}_{\delta\vec{\varphi}} \tag{V.6}$$

Dies entspricht genau dem Transformationsverhalten, das wir in Kapitel III Definition III.9.5 eingeführt hatten.

Aus der Entwicklung von (V.6) bis linearer Ordnung in $\delta \vec{\varphi}$ folgt

 \Rightarrow

Bemerkungen:

i) Ein skalarer Operator sollte drehinvariant sein, also in allen Systemen identisch. Dann ist A' = A und $[L_l, A] = 0$, zum Beispiel

$$A = \vec{p}^{2}$$
(V.8)
$$[L_{l}, \vec{p}^{2}] = [L_{l}, p_{m}p_{m}] = p_{m}[L_{l}, p_{m}] + [L_{l}, p_{m}]p_{m}$$

Nun ist $[L_l, p_m] = i\hbar\epsilon_{lmn}p_n$.

 \Rightarrow

 \Rightarrow

$$[L_l, \vec{p}^2] = p_m(i\hbar\epsilon_{lmn}p_n) + i\hbar\epsilon_{lmn}p_np_m$$

= $i\hbar\epsilon_{lmn}(p_mp_n + p_np_m)$
= $2i\hbar\epsilon_{lmn}p_mp_n = 0$ \Box (V.9)

Beispiel 2:

$$A = \vec{L}^{2}$$

$$[L_{l}, \vec{L}^{2}] = i\hbar \underbrace{\epsilon_{lmn}}_{\text{in } (n,m)} \underbrace{L_{m}L_{n} + L_{n}L_{m}}_{\text{in } (n,m)} = 0 \qquad (V.10)$$

ii) \hat{A} sei vektorwertiger Operator $\hat{\vec{v}}$, dann transformiert sich $\hat{\vec{v}}$ bei infinitesimalen Rotationen gemäß $\hat{\bar{v}}$

$$\hat{\vec{v}} \to \hat{\vec{v}}' = \hat{\vec{v}} + \delta \vec{\varphi} \times \hat{\vec{v}}$$
 (V.11)

Komponentenweiser Vergleich mit (V.7) liefert:

$$\hat{v}_j + \epsilon_{jlk} \delta \varphi_l \hat{v}_k \stackrel{!}{=} \hat{v}_j + \frac{i}{\hbar} \delta \varphi_l [L_l, \hat{v}_j]$$
$$[L_l, \hat{v}_j] = \frac{\hbar}{i} \epsilon_{jlk} \hat{v}_k$$
(V.12)

Dies ist das Transformationsverhalten der Vektoren \vec{L} , \vec{x} und \vec{p} , das wir in (V.2) beobachtet haben.

V.3 Eigenwerte von Drehimpulsoperatoren

Die Eigenwerte des Drehimpulses lassen sich aus den algebraischen Relationen

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{L}_k \qquad i, j, k = x, y, z \qquad (V.13)$$

ableiten. Das Ergebnis ist deshalb für jeden Drehimpuls (Bahndrehimpuls, Spin, Gesamtdrehimpuls) gültig.

Da die Komponenten \hat{L}_x , \hat{L}_y und \hat{L}_z nicht miteinander kommutieren existiert kein gemeinsames

V Der Drehimpuls

Basissystem. Es gilt jedoch

$$[\vec{L}^2, L_i] = 0 \qquad \qquad i = x, y, z \qquad \qquad \vec{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \qquad (V.14)$$

Demnach können wir $\hat{\vec{L}}^2$ und *eine* Komponente von $\hat{\vec{L}}$ gemeinsam diagonalisieren. Wir wählen \vec{L}^2 und L_z mit z als "Quantisierungsachse". Definition V.3.1.

$$L_{\pm} = L_x \pm iL_y \tag{V.15}$$

Eigenschaften

- $(L_{\pm})^{\dagger} = L_{\mp}$ (V.16)
- $[L_z, L_{\pm}] = i\hbar L_y \pm \hbar L_x = \pm \hbar L_{\pm}$ (V.17)
- $[L_{+}, L_{-}] = -2i[L_{x}, L_{y}] = 2\hbar L_{z}$ (V.18)
- $[\vec{L}^2, L_{\pm}] = 0$ (V.19)

•
$$\vec{L}^2 = L_- L_+ + \hbar L_z + L_z^2$$
 (V.20)
Da $L_- L_+ = (L_x - iL_y)(L_x + iL_y)$

Da

 $= L_x^2 + L_y^2 - \hbar L_z$ (V.21)

$$L_{+}L_{-} = L_{x}^{2} + L_{y}^{2} + \hbar L_{z} \tag{V.22}$$

Eigenwertproblem $\psi_{lm}(\vec{x})$ bezeichne eine gemeinsame Eigenfunktion zu \vec{L}^2 und L_z . Der zugehörige Ket-Zustand sei mit $|\psi_{lm}\rangle$ bezeichnet. Dann lautet das Eigenwertproblem:

$$\hat{L}_{z}|\psi_{lm}\rangle = \hbar m |\psi_{lm}\rangle$$

$$\hat{\vec{L}}^{2}|\psi_{lm}\rangle = \hbar^{2}l(l+1) |\psi_{lm}\rangle \text{ mit } l \ge 0$$
(V.23)

wobei $m, l \in \mathbb{R}$ zunächst beliebig sind. Wir werden später sehen warum diese Parametrisierung des Eigenwertproblems sinnvoll ist. Für den Moment wurden keine Annahmen bezüglich der Eigenwerte von \hat{L}_z und $\hat{\vec{L}}^2$ gemacht. L_{\pm} sind Leiteroperatoren:

$$L_z L_{\pm} |\psi_{lm}\rangle = (L_{\pm} L_z \pm \hbar L_{\pm}) |\psi_{lm}\rangle$$

= $\hbar (m+1) L_{\pm} |\psi_{lm}\rangle$ (V.24)

Wir sehen: L_{\pm} erhöht beziehungsweise erniedrigt den \hat{L}_z -Eigenwert eines Zustands um 1:

$$L_{\pm}|\psi_{lm}\rangle \sim |\psi_{l,m+1}\rangle \tag{V.25}$$

Wegen $[L_{\pm}, \vec{L}^2] = 0$ bleibt der \vec{L}^2 -Eigenwert l jedoch unverändert:

$$\hat{\vec{L}}^2 \hat{L}_{\pm} |\psi_{lm}\rangle = \hat{L}_{\pm} \hat{\vec{L}}^2 |\psi_{lm}\rangle = \hbar l(l+1) \hat{L}_{\pm} |\psi_{lm}\rangle \tag{V.26}$$

V.3 Eigenwerte von Drehimpulsoperatoren

Wir wollen nun die Norm von $\hat{L}_{\pm} |\psi_{lm}\rangle$ bestimmen:

$$\Rightarrow \qquad L_{\pm}|\psi_{lm}\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m\pm 1)}|\psi_{l,m\pm 1}\rangle \qquad (V.28)$$

Da $||L_{\pm}|\psi_{lm}\rangle||^2 \ge 0$, gilt:

$$l(l+1) - m(m \pm 1) \ge 0 \tag{V.29}$$

Es folgen die Bedingungen an m und l:

$$m > 0: \qquad \qquad l(l+1) \ge m(m+1) \quad \Rightarrow \quad l \ge m \tag{V.30}$$

$$m < 0$$
: $l(l+1) \ge -|m|(-|m| \pm 1)$ (V.31)

hieraus folgt als schärfere Bedingung:

$$l(l+1) \ge |m|(|m|+1) \tag{V.32}$$

$$|m| \le l \tag{V.33}$$

Damit:

Welche Werte nehmen l und m an? Sei M maximales m für gegebenes l. Dann muss $L_+|\psi_{lM}\rangle = 0$ sein, denn ansonsten wäre M nicht maximal. Aus der Normierungsbedingung $||L_+|\psi_{lm}\rangle||^2 = 0$ folgt dann

$$l(l+1) = M(M+1) \quad \text{oder} \quad \boxed{M = l} \tag{V.34}$$

Analoges Argument gilt auch für minimales Element μ der *m*-Eigenwerte.

$$\Rightarrow \qquad L_{-}|\psi_{l\mu}\rangle = 0 \\ \Rightarrow \qquad l(l+1) = |\mu|(|\mu|+1) \\ \Rightarrow \qquad \left[|\mu| = l \right]$$
 (V.35)

Somit kann man durch den Absteige
operator L_- ausgehend von $|\psi_{l,l}\rangle$ sämtliche Werte von
 m gewinnen:

$$\begin{aligned}
\hat{L}_{+}|\psi_{l,l}\rangle &= 0 \\
\hat{L}_{-}|\psi_{l,l}\rangle \sim |\psi_{l,l-1}\rangle \\
(\hat{L}_{-})^{2}|\psi_{l,l}\rangle \sim \hat{L}_{-}|\psi_{l,l-1}\rangle \sim |\psi_{l,l-2}\rangle \\
(\hat{L}_{-})^{3}|\psi_{l,l}\rangle \sim |\psi_{l,l-3}\rangle \\
&\vdots
\end{aligned}$$
(V.36)

V Der Drehimpuls

Diese Reihe muss bei m = -l abbrechen:

$$(L_{-})^{k}|\psi_{l,l}\rangle \sim |\psi_{l,-l}\rangle \quad \Rightarrow \quad k = 2l$$
 (V.37)

Das heißt $l = \frac{k}{2}$ mit $k \in \mathbb{N}$. *l nimmt halbzahlige Werte an.*

Drehimpulsspektrum:	
$ec{L}^2 \psi_{lm} angle = \hbar^2 l(l+1) \psi_{lm} angle \ L_z \psi_{lm} angle = \hbar m \psi_{lm} angle$	(V.38) (V.39)
mit $l = 0, 1, 2, 3, 4, \dots$ oder $l = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}, \dots$ und $m = -l, -l+1, -l+2, \dots, l-2, l-1, l$	(V.40) (V.41)

Die Quantenzahlen l und m sind diskret und halbzahlig.

Bemerkungen:

- i) Der \vec{L}^2 -Eigenraum ist (2l+1)-fach entartet.
- ii) Die Drehimpulsvertauschungsrelationen $[L_i, L_j] = \hbar \epsilon_{ijk} L_k$ werden mathematisch als SO(3)-Algebra bezeichnet. Die Drehgruppe, die SO(3)-Gruppe, folgt aus der Algebra durch Exponentiation: $D(\varphi) = e^{\frac{i}{\hbar} \vec{\varphi} \cdot \vec{L}}$.
- iii) Wir werden sehen, dass der Bahndrehimpuls stets ganzzahlige Werte l einnimmt. Eine berühmte Situation mit l = 1/2 ist der Spin 1/2 des Elektrons, der "Eigendrehimpuls" des Elektrons.
- iv) Quantenteilchen klassifiziert man unter anderem nach ihrem Spin. Ein Teilchen mit ganzzahligem Spin nennt man "Boson". Ein Teilchen mit halbzahligem Spin nennt man "Fermion".

V.4 Bahndrehimpuls in Polarkoordinaten, Kugelflächenfunktionen

Wir wollen nun im Ortsraum die expliziten Eigenfunktionen

$$\psi_{lm}(\vec{x}) = \langle \vec{x} | l, m \rangle \tag{V.42}$$

des Bahndrehimpulses $\vec{L} = \frac{\hbar}{i} \vec{x} \times \vec{\nabla}$ bestimmen. (Von nun an schreiben wir $|l, m\rangle := |\psi_{lm}\rangle$.) Dazu verwenden wir Polarkoordinaten wie in Abb. V.2.

$$\vec{\nabla} = \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \tag{V.43}$$

V.4 Bahndrehimpuls in Polarkoordinaten, Kugelflächenfunktionen



Abbildung V.2: Vektor in Kugelkoordinaten; $\vec{x} = r\vec{e}_r$; $d^3x = r^2 \sin\theta dr d\varphi d\theta$

Daraus ergibt sich durch direkte Rechnung:

$$\hat{L}_{x} = \frac{\hbar}{i} \left(-\sin\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} - \cos\varphi \cot\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right)$$
$$\hat{L}_{y} = \frac{\hbar}{i} \left(\cos\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} - \sin\varphi \cot\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right)$$
$$\hat{L}_{z} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial\varphi}$$
$$(V.44)$$
$$\hat{L}_{\pm} = \hbar e^{\pm i\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial\theta} + i \cot\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right)$$
$$\hat{L}^{2} = -\hbar^{2} \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^{2}\theta} \frac{\partial^{2}}{\partial\varphi^{2}} \right]$$

Die Bahndrehimpuls Eigenwertgleichungen lauten dann:

$$\left[\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right]\psi_{l,m}(\varphi,\theta) = -l(l+1)\psi_{l,m}(\varphi,\theta) \tag{V.45}$$

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} \psi_{l,m}(\varphi, \theta) = im \, \psi_{l,m}(\varphi, \theta) \tag{V.46}$$

Separationsansatz:

$$A_n(\varphi, \theta) = A(\varphi) \cdot B(\theta)$$
 (V.47)

Lösung von (V.46):

$$\psi_{l,m}(\varphi,\theta) = A(\varphi) \cdot B(\theta) \tag{V.47}$$

$$A(\varphi) = e^{im\varphi} \tag{V.48}$$

Dann verbleibt:

$$\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) - \frac{m^2}{\sin^2\theta} + l(l+1)\right]B(\theta) = 0$$
(V.49)

Die Lösung dieser Differentialgleichung ist bekannt. Es handelt sich um die assoziierten Legendre-Funktionen $P_{lm}(\cos\theta)^{1}$. Als Resultat für die Eigenfunktionen des Drehimpulsoperators erhalten wir

¹Vorsicht: Einige Authoren (z.B. Nolting) verwenden bei der Definition der assoziierten Legendre-Funktionen eine andere Vorzeichenkonvention. Bei Verwendeung dieser anderen Konvention werden die Funktionen dann aber meist " $P_l^m(x)$ " geschrieben.

V Der Drehimpuls

die "Kugelflächenfunktionen" $Y_{lm}(\varphi,\theta).$

$$\psi_{lm}(\varphi,\theta) = Y_{lm}(\varphi,\theta)$$

$$\coloneqq (-)^{(m+|m|)/2} P_{l|m|}(\cos\theta) \cdot e^{im\varphi} \cdot \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}$$
(V.50)

Wichtige Beobachtung::

Die Stetigkeit der Kugelflächenfunktionen

$$\psi_{lm}(\varphi + 2\pi, \theta) \stackrel{!}{=} \psi_{lm}(\varphi, \theta) \tag{V.51}$$

verlangt die Ganzzahligkeit von m und l.

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots$$

 $m = -l, -l + 1, -l + 2, \dots, l - 2, l - 1, l$

Assoziierte Legendre-Polynome

$$P_{lm}(x) = (1 - x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x), \quad m \ge 0$$
(V.52)

Legendre-Polynome

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - l)^l \qquad \text{Polynom } l\text{-ten Grades (V.53)}$$

$$\Rightarrow \qquad P_{lm}(x) = \frac{(1 - x^2)^{\frac{m}{2}}}{2^l l!} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (x^2 - 1)^l \qquad \text{Polynom } l\text{-ten Grades (V.54)}$$

Offensichtlich gilt:

$$P_{l,l+1}(x) = 0$$
(V.55)

$$P_{l,l}(x) = (2l-1)!! (1-x^2)^{\frac{l}{2}}$$
mit $(n)!! = n(n-2)(n-4)\cdots 1$ (V.56)

$$P_{l,0}(x) = P_l(x)$$
(V.57)

Relevantes Argument: $x = \cos \theta$

$$P_{lm}(\cos\theta) = \frac{(-)^l}{2^l l!} \sin^m \theta \frac{d^{l+m}}{d(\cos\theta)^{l+m}} \sin^{2l}\theta$$
(V.58)

Rekursionsrelation:

$$(l+1)P_{l+1}(x) = (2l+1) \cdot P_l(x) - l \cdot P_{l-1}(x)$$

$$(1-x^2)P'_l(x) = l(P_{l-1}(x) - xP_l(x))$$
(V.59)

Explizit:

$$P_{0} = 1 P_{2} = \frac{1}{2}(3x^{2} - 1) P_{1} = x P_{3} = \frac{1}{2}(5x^{3} - 3x) (V.60)$$

Differentialgleichung:

$$\left[(1-x^2)\frac{d^2}{dx^2} - 2x\frac{d}{dx} + l(l+1) - \frac{m}{1-x^2} \right] P_{lm}(x) = 0$$
 (V.61)

Parität:

$$P_{lm}(-x) = (-)^{l+m} P_{lm}(x)$$
 (V.62)

Norm:

$$\int_{-1}^{1} dx P_{lm}(x) P_{l'm}(x) = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta_{ll'} \quad \text{für } m \ge 0$$
(V.63)

Hieraus resultieren folgende Eigenschaften der Kugelflächenfunktionen $Y_{lm}(x)$:

Orthogonalität

$$\int_{0}^{\pi} d\theta \sin \theta \int_{0}^{2\pi} d\varphi Y_{lm}(\theta, \varphi)^* Y_{l'm'}(\theta, \varphi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$
(V.64)

Vollständigkeit

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} Y_{lm}(\theta,\varphi) Y_{lm}(\theta',\varphi')^* = \frac{1}{\sup_{\substack{\uparrow \\ Maßfaktor}}} \delta(\theta-\theta') \delta(\varphi-\varphi')$$
(V.65)

Additionstheorem (Summe über m)

$$\sum_{m=-l}^{l} Y_{lm}(\theta,\varphi) Y_{lm}(\theta',\varphi')^* = \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos\rho)$$
(V.66)

mit $\cos \rho = \cos \theta \cos \theta' + \sin \theta \sin \theta' \cos(\varphi - \varphi')$

$$Y_{l,-m}(\theta,\varphi) = (-)^m Y_{lm}(\theta,\varphi)^* \tag{V.67}$$

Explizite Kugelflächenfunktionen

$$Y_{00} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$$

$$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \qquad Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\varphi}$$

$$Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3\cos^2 \theta - 1) \qquad Y_{21} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{i\varphi} \qquad Y_{22} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{2i\varphi} \quad (V.68)$$

V Der Drehimpuls



Abbildung V.3: Punktspiegelung am Ursprung in Kugelkoordinaten

Parität Eine Punktspiegelung im Raum $P\vec{x} = -\vec{x}$ entspricht in Kugelkoordinaten $P(\theta, \varphi) = (\pi - \theta, \varphi + \pi)$. Siehe hierzu auch Abbildung V.3

$$PY_{lm}(\theta,\varphi) = Y_{lm}(\pi - \theta,\varphi + \pi) = (-)^{l}Y_{lm}(\theta,\varphi)$$
(V.69)

Demnach sind Y_{lm} Eigenfunktionen des Paritätsoperators.

Drehimpulsoperatoren

$$\vec{L}^2 Y_{lm}(\theta,\varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{V.70}$$

$$L_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar m Y_{lm}(\theta, \varphi) \tag{V.71}$$

Aber L_x und L_y werden *nicht* durch die $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ diagonalisiert.

Nomenklatur

l = 0	"s-Orbitale"
l = 1	"p-Orbitale"
l=2	, d-Orbitale``
l = 3	, f-Orbitale``

Plots Die Y_{lm} sind komplexwertige Funktionen. Häufig plottet man $|Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2$ als Funktion des Winkels θ als Polardiagramm wie in Abbildung V.4.



Abbildung V.4: Polardiagramme der des Betragsquadrats der ersten Kugelflächenfunktionen als Funktionen von θ .

VI Zentralpotential und Wasserstoffatom

In diesem Kapitel behandeln wir Zentralpotentiale $V(r), r = |\vec{x}|$, für die $[L_z, H] = [\vec{L}^2, H] = 0$ gilt. Das heißt, ein vollständiger Satz von kommutierenden Observablen ist H, L_z, \vec{L}^2 . Die Eigenfunktionen dieser drei Operatoren müssen dann die Form

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r) \cdot Y_{lm}(\theta,\varphi)$$
(VI.1)

annehmen, wobei die Funktion R(r) aus dem Eigenwertproblem von \hat{H} folgen wird.

VI.1 Kugelkoordinaten für Zentralpotentiale

Wir betrachten Hamiltonoperatoren der Form

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{\vec{p}}^2 + V(r)$$
 mit $r = |\vec{x}|$ (VI.2)

Wir wollen $\vec{p}^2 = -\hbar^2 \vec{\nabla}^2$ nun in Kugelkoordinaten, das heißt mittels \vec{L}^2 und $\frac{\partial}{\partial r}$ ausdrücken:

$$\vec{L}^2 = (\epsilon_{ijk}\hat{x}_j\hat{p}_k)(\epsilon_{ilm}\hat{x}_l\hat{p}_m)$$

mit $\epsilon_{ijk}\epsilon_{ilm} = \delta_{jl}\delta_{km} - \delta_{jm}\delta_{lk}$ folgt:

$$= \hat{x}_{j}\hat{p}_{k}\hat{x}_{j}\hat{p}_{k} - \hat{x}_{j}\hat{p}_{k}\hat{x}_{k}\hat{p}_{j}$$

$$= \hat{\vec{x}}^{2}\hat{\vec{p}}^{2} - i\hbar\hat{\vec{x}}\cdot\hat{\vec{p}} \underbrace{-\hat{x}_{j}\hat{x}_{k}\hat{p}_{k}\hat{p}_{j}}_{=-(\hat{\vec{x}}\cdot\hat{\vec{p}})^{2} - i\hbar\hat{\vec{x}}\cdot\hat{\vec{p}}} + \hat{x}_{j}\hat{p}_{j} \cdot 3i\hbar$$

$$\hat{\vec{L}}^{2} = \hat{\vec{x}}^{2}\hat{\vec{p}}^{2} - (\hat{\vec{x}}\cdot\hat{\vec{p}})^{2} + i\hbar\hat{\vec{x}}\cdot\hat{\vec{p}} \qquad (VI.3)$$

 \Rightarrow

Nun ist gemäß (V.43) und $\vec{x} = r\vec{e}_r$:

$$\hat{\vec{x}} \cdot \hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i} \vec{x} \cdot \vec{\nabla} = \frac{\hbar}{i} r \frac{\partial}{\partial r}$$

$$\hat{\vec{p}}^2 = \frac{1}{r^2} \hat{\vec{L}}^2 - \frac{\hbar^2}{r^2} \left[\left(r \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 + r \frac{\partial}{\partial r} \right]$$

$$\hat{\vec{p}}^2 = \hat{p}_r^2 + \frac{1}{r^2} \hat{\vec{L}}^2$$
(VI.4)

beziehungsweise

Einsetzen in (VI.3) liefert:

wobei $\hat{p}_r := \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right)$ die Radialkomponente des Impulsoperators ist.

Nebenbemerkung:

 $\overline{\hat{p}_r}$ ist ein hermitescher Operator bezüglich des Skalarprodukts

$$(\psi,\varphi) = \int_{0}^{\infty} dr \, r^2 \psi^*(r)\varphi(r) \tag{VI.5}$$

wobei r^2 hier der Maßfaktor aus dem Volumenelement $d^3x=r^2\sin\theta d\varphi d\theta dr$ ist. Beweis:

$$\begin{aligned} (\psi, \hat{p}_r \varphi) &= \int_0^\infty dr \, r^2 \psi^*(r) \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \varphi(r) \\ &= -\int_0^\infty dr \, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \psi^*) \varphi(r) + \frac{\hbar}{i} \int_0^\infty dr \, r \psi^* \varphi \\ &= -\int_0^\infty dr \, \frac{\hbar}{i} [2r\psi^* \varphi + r^2 \psi^* \varphi] + \frac{\hbar}{i} \int_0^\infty dr \, r \psi^* \varphi \\ &= \int_0^\infty dr \, r^2 \left[\frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial r} \psi + \frac{1}{r} \psi \right) \right]^* \varphi = (\hat{p}_r \psi, \varphi) \qquad \Box \quad (\text{VI.6}) \end{aligned}$$

Die fundamentale Kommutatorrelation ist erfüllt:

$$[\hat{r}, \hat{p}_r] = \left[r, \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)\right] = i\hbar$$
(VI.7)

Einsetzen von (VI.4) in $\hat{H}=\frac{1}{2m}\vec{p}^{\,2}+V(r)$ liefert die Eigenwertgleichung:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hat{\vec{L}}^2}{2mr^2} + V(r)\right]\psi(r,\theta,\varphi) = E\cdot\psi(r,\theta,\varphi)$$
(VI.8)

Da $\{\hat{L}_z, \hat{H}, \hat{\vec{L}}\}$ ein vollständiger Satz von Observablen ist, gilt mit dem Separationsansatz

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$$
(VI.9)

die Radialgleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r)\right]R(r) = E \cdot R(r)$$
(VI.10)

Diese Differentialgleichung lässt sich in eine effektiv eindimensionale Schrödingergleichung mit effektivem, l-abhängigem Potential umformen:



Abbildung VI.1: Anziehendes Coulomb-Potential: Möglichkeit von Bindungszuständen, also Zuständen mitE<0!

$$R(r) = \frac{u(r)}{r}$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)R(r) = \frac{1}{r}u'' - \frac{2}{r^2}u' + \frac{2}{r^2}u' = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}u$$

$$\Rightarrow \qquad \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + \underbrace{\frac{\hbar^2l(l+1)}{2mr^2} + V(r)}_{V_{\text{eff}}(r)}\right]u(r) = E \cdot u(r) \qquad (\text{VI.11})$$

$$V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2l(l+1)}{2mr^2}$$

$$\sum_{\text{Zentrifugalterm}}^{h^2l(l+1)}$$

Beispiel: Anziehendes Coulomb-Potential, Abbildung VI.1.

Normierungs- und Randbedingungen für u(r)

i)

$$\infty > \int d^3x \, |\psi(\vec{x})|^2 = \int_0^\infty dr \, r^2 \frac{1}{r^2} |u(r)|^2 \tag{VI.12}$$

Das heißt für die Bindungszustände:

$$\lim_{r \to \infty} |u(r)| \le \frac{a}{r^{\frac{1}{2} + \epsilon}} \tag{VI.13}$$

mit $\epsilon > 0$. Demnach muss u(r) im Unendlichen stärker als $\frac{1}{\sqrt{r}}$ abfallen.

ii) Verhalten für $r \to 0$: u(0) = 0 für $V(r) \neq \delta^{(3)}(\vec{x})$. Da $\vec{\nabla}^2 \frac{u(0)}{r} \sim \delta^{(3)}(\vec{x})u(0)$ führt $u(0) \neq 0$ stets zu δ -Funktion in der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung.



Abbildung VI.2: Effektives eindimensionales Potential zum Zentralpotential

VI.2 Allgemeine Aussagen zu Bindungszuständen in drei Dimensionen

In Kapitel III hatten wir gesehen, dass 1D-symmetrische Potentialprobleme stets einen symmetrischen Bindungszustand besitzen Ein ungerader Zustand existiert nur, falls das Potential eine Mindestgröße besitzt (Vergleiche Potentialtopf und Parameter ξ). (VI.11) für l = 0 entspricht einem eindimensionalen Problem mit

$$V_{\rm 1D}(x) = \begin{cases} V(x) & x > 0\\ \infty & x \le 0 \end{cases}$$
(VI.14)

wie in Abbildung VI.2. Das fortgesetzte Referenzpotential $\tilde{V}_{1D}(x) := V(|\vec{x}|)$ besitzt gerade und ungerade Bindungszustände. Wegen u(0) = 0 sind für das 3D Problem nur die ungeraden Bindungszustände erlaubt! Das heißt, der erste angeregte Zustand des effektiven Potentials $\tilde{V}_{1D}(x)$ entspricht dem Grundzustand des 3D Problems $V(|\vec{x}|)$. Insbesondere existiert dieser Grundzustand nur bei hinreichender Potentialstärke!

Für l > 0 wird das Potential zunehmend abstoßend. Das heißt, sollte $V_{\text{eff}}(|\vec{x}|)$ für l = 0 keinen Bindungszustand besitzen, so erst recht nicht für l > 0.

Diskussion der Grenzfälle

i) $r \to 0$ Für $V(r) \sim \frac{1}{r}$ oder $r^0 = \text{const.}$ ist der Zentrifugalterm gegenüber V(r) - E in (VI.11) dominant:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right]u(r) = 0 \qquad \qquad \text{für } r \to 0 \ (\text{VI.15})$$

Lösung:

$$u(r) = Ar^{l+1} + Br^{-l}$$
 (VI.16)

Der *B*-Term ist wegen der Randbedingung u(r = 0) = 0 verboten, somit folgt:

$$\lim_{r \to \infty} u(r) = r^{l+1}(a_0 + a_1r + a_2r^2 + \dots)$$
(VI.17)

ii) $r \to \infty$

 \Rightarrow

Nun ist für den Coulombfall $V(r) \sim \frac{1}{r}$ das gesamte V_{eff} vernachlässigbar und (VI.11) geht über in die freie Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar}{2m}\frac{d^2}{dr^2}u(r) = Eu(r) \tag{VI.18}$$

Nun definieren wir $\kappa := \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(-E)}$

$$u(r) = ce^{-\kappa r}$$
 für $r \to \infty$ (VI.19)

VI.3 Das Coulomb-Potenzial: Spektrum

Wir spezialisieren die Diskussion nun zum Wasserstoffatom und betrachten ein Elektron im Coulomb-Potenzial

$$V(r) = -\frac{e_0^2 Z}{r}$$

$$e_0: \text{ Elementarladung}$$

$$Z: \text{ Anzahl der Protonen}$$
(VI.20)

Mit Einführung der Parameter

$$\frac{V}{|E|} = -\frac{\rho_0}{\rho}$$

$$\rho = \kappa r = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m|E|}r$$

$$\rho_0 = \frac{e_0^2 Z \kappa}{|E|} = \sqrt{\frac{2m}{|E|}} \frac{Z e_0^2}{\hbar}$$
(VI.21)

wird die radiale Eigenwertgleichung (VI.11) zur kompakten Gleichung

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{\rho_0}{\rho} - 1\right]u(\rho) = 0$$
(VI.22)

Wir machen nun einen Ansatz, der dem asymptotischen Verhalten von u(r) aus (VI.17) und (VI.19) gerecht wird:

$$u(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho} w(\rho) \tag{VI.23}$$

mit der Potenzreihe

 \Rightarrow

$$w(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k \tag{VI.24}$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\rho}u(\rho) &= \left(\frac{l+1}{\rho} - 1\right)u(\rho) + \rho^{l+1}e^{-\rho}w'(\rho) \\ \frac{d^2}{d\rho^2}u(\rho) &= -\frac{l+1}{\rho^2}u(\rho) - \left(\frac{l+1}{\rho} - 1\right)^2u(\rho) + \left(\frac{l+1}{\rho} - 1\right)\rho^{l+1}e^{-\rho}w'(\rho) \\ &+ (l+1)\rho^l e^{-\rho}w'(\rho) - \rho^{l+1}e^{-\rho}w'(\rho) + \rho^{l+1}e^{-\rho}w''(\rho) \\ &= \rho^{l-1}e^{-\rho}\left[-(l+1) + (l+1-\rho)^2 + 2\rho(l+1-\rho)\frac{d}{d\rho} + \frac{d^2}{d\rho^2}\right]w(\rho) \\ &= \rho^{l-1}e^{-\rho}\left[(l+1)^2 + \rho^2 - (\rho+1)(l+1) + 2\rho(l+1-\rho)\frac{d}{d\rho} + \frac{d^2}{d\rho^2}\right]w(\rho) \\ &\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{\rho_0}{\rho} - 1\right]u(\rho) = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{array}{c} -(l+1)^2 + (l+1-\rho)^2 + \rho(\rho_0 - \rho) \\ = -2\rho(l+1) + \rho\rho_0 = \rho(\rho_0 - 2(l+1)) \end{array}$$
(VI.25)

VI Zentralpotential und Wasserstoffatom

Und somit folgt

$$\left[\rho \frac{d^2}{d\rho^2} + 2(l+1-\rho)\frac{d}{d\rho} + (\rho_0 - 2(l+1))\right]w(\rho) = 0$$
(VI.26)

Einsetzen des Potenzreihenansatzes (VI.24) liefert folgende Rekursionsrelation für die unbekannten Koeffizienten a_k :

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_k \left[k(k-1)\rho^{k-1} + 2k(l+1-\rho)\rho^{k-1} + \left(\rho_0 - 2(l+1)\right)\rho^k \right] = 0$$
(VI.27)

Vergleich der Terme in $\mathcal{O}(\rho^k)$:

$$a_{k+1}[k(k+1) + 2(k+1)(l+1)] + [-2k + \rho_0 - 2(l+1)]a_k = 0$$
(VI.28)

 \Rightarrow

 \Rightarrow

$$a_{k+1} = \frac{2(k+l+1) - \rho_0}{(k+1)(k+2l+2)} a_k$$
(VI.29)

Konvergiert diese Reihe? Maßgeblich ist das Verhältnis aufeinanderfolgender Glieder:

$$\lim_{k \to \infty} \frac{a_{k+1}}{a_k} \to \frac{2}{k} \to 0 \tag{VI.30}$$

Dieses asymptotische Verhalten ist das einer Exponentialfunktion:

$$e^{\alpha\rho} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} (\alpha\rho)^k \tag{VI.31}$$

$$\lim_{k \to \infty} \frac{\alpha^{k+1}/(k+1)!}{a^k/k!} = \lim_{k \to \infty} \frac{\alpha}{k+1} \to \frac{\alpha}{k}$$
(VI.32)

Das heißt, asymptotisch verhält sich $w(\rho)$ wie $e^{2\rho}$!

$$\lim_{\rho \to \infty} u(r) = \lim_{\rho \to \infty} \rho^{l+1} e^{-\rho} \cdot e^{2\rho} \sim e^{\rho} \qquad (\text{VI.33})$$

Das Ergebnis ist jedoch problematisch, da eine solche Funktion nicht normierbar ist, es sei denn die Reihe $\sum_k a_k \rho^k$ bricht nach dem *N*-ten Glied ab. Die Forderung der Normierbarkeit liefert uns somit die *Abbruchbedingung* $a_{N+1} = a_{N+2} = \ldots = 0$.

$$a_{N+1} = 0 \quad \Rightarrow \qquad \boxed{\rho_0 = 2(N+l+1)}$$
(VI.34)

mit $N = 0, 1, 2, 3, \dots$

Wir haben eine neue "Quantenzahl" entdeckt! Diese liefert die diskreten Energieeigenwerte des Coulomb-Potentials:

$$E = -\frac{2mZ^2e_0^4}{\hbar^2\rho_0^2} = -\left(\frac{mZ^2e_0^4}{2\hbar^2}\right)\frac{1}{(N+l+1)^2}$$
(VI.35)

mit N: "Radiale Quantenzahl". Mit Einführung der "Hauptquantenzahl" $n \coloneqq N+l+1, n = 1,2,3,\ldots$ folgt

$$E_n = -\left(\frac{mZ^2 e_0^4}{2\hbar^2}\right) \frac{1}{n^2} \tag{VI.36}$$

Wir haben das Spektrum des H-Atoms gefunden.

n = 1	l = 0	(s-Orbital)	m = 0	E_1 (1-fach)
n = 2	l = 0	(s)	m = 0	E_{c} (4-fach)
	l = 1	(p)	m = -1, 0, 1	$\int L_2$ (4-facil)
n = 3	l = 0	(s)	m = 0)
	l = 1	(p)	m = -1, 0, 1	$\begin{cases} E_3 (9-\text{fach}) \end{cases}$
	l=2	(d)	m = -2, -1, 0, 1, 2	
n = 4	l = 0	(s)	m = 0)
	l = 1	(p)	m = -1, 0, 1	E_4 (16-fach)
	l=2	(d)	m = -2, -1, 0, 1, 2	
	l = 3	(f)	m = -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3	J

Tabelle VI.1: Mögliche Werte von l und m in für die ersten Werte von n

Entartung von E_n Für festes n sind l = 0, 1, 2, ..., n - 1 möglich. Für festes l existieren 2l + 1 verschiedene Werte von m. Somit folgt für die Entartung von E_n :

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 2\frac{n(n-1)}{2} + n = n^2$$
(VI.37)

 E_n ist n^2 -fach entartet.

In Tabelle VI.1 sind für die ersten Hauptquantenzahlen die möglichen Drehimpulsquantenzahlen explizit aufgeführt. Durch die Bestimmung von $\rho_0 = 2n$ haben wir mit der Rekursionsrelation (VI.34) und der Normierung vollständige Information über $w(\rho)$ erlangt.

VI.4 Das Coulomb-Potential: Eigenfunktionen

Die Polynome $w_{n,l}(\rho)$ lassen sich über Laguerre-Polynome $L_r(x)$ ausdrücken.

Eigenschaften der Laguerre-Polynome

• Erzeugende Funktion:

$$\frac{1}{1-s}e^{-x\frac{s}{1-s}} = \sum_{r=0}^{\infty} L_r(x)\frac{s^r}{r!}$$
(VI.38)

• Differentialgleichung:

$$xL_r'' + (1-x)L_r' + rL_r = 0 (VI.39)$$

• Assoziierte Laguerre-Polynome $L_r^s(x)$:

$$L_r^s(x) = \frac{d^s}{dx^s} L_r(x) = \frac{d^s}{dx^s} \left(e^x \frac{d^r}{dx^r} e^{-x} x^r \right)$$
(VI.40)

 $L_r^s(x)$ ist ein Polynom vom Grad (r-s) mit (r-s) verschiedenen, positiven Nullstellen.

- VI Zentralpotential und Wasserstoffatom
 - Explizite Form:

$$L_r^s(x) = \sum_{k=0}^{r-s} (-)^{k+s} \frac{(r!)^2}{k!(k+s)!(r-k-s)!} x^k$$
(VI.41)

• Differential gleichung für assoziierte Laguerre-Polynome: Differenziert man (VI.39) s-mal nach x dann ergibt sich

$$xL_r^{s''} + (s+1-x)L_r^{s'} + (r-s)L_r^s = 0$$
(VI.42)

Ein Vergleich mit der Radialgleichung (VI.26) für $\rho_0 = 2n$

$$\left[(2\rho)\frac{d^2}{d(2\rho)^2} + \left((2l+1) + 1 - (2\rho) \right) \frac{d}{d(2\rho)} + (n+l) - (2l+1) \right] w(2\rho) = 0$$
(VI.43)

ergibt:

$$s = 2l + 1, \qquad r = n + l$$

A ist zu bestimmen aus der Normierung.

• Normierung:

$$\int_{0}^{\infty} dx \, x^{s+1} e^{-x} [L_r^s(x)]^2 = \frac{(2r-s+1)(r!)^3}{(r-s)!} \tag{VI.45}$$

Zusammenhang zu $w(\rho)$:

$$w(\rho) = A \cdot L_{n+l}^{2l+1}(2\rho) \qquad \rho = \kappa r \tag{VI.46}$$

A ist zu bestimmen aus der Normierung.

Zusammenfassung Die gebundenen stationären Zustände des COULOMB-POTENIALS werden durch die Quantenzahlen $n = 1, 2, 3, 4, \ldots; l = 0, 1, \ldots, n - 1; m = -l, \ldots, l$ parametrisiert. Sie lauten

$$\psi_{n,l,m}(r,\theta,\varphi,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}tE_n} R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

$$R_{nl} = -\left[\frac{(n-l-1)!(2\kappa)^3}{2n[(n+l)!]^3}\right]^{1/2} (2\kappa r)^l e^{-\kappa r} L_{n+l}^{2l+1}(2\kappa r)$$
(VI.47)

$$\kappa = \frac{mZe_0^2}{\hbar^2 n}$$
 bzw. $\kappa = \frac{Z}{n \cdot a}$

mit $a=\frac{\hbar^2}{me_0^2}=0.5\cdot 10^{-8}\,{\rm cm},$ dem "Bohr'schen Radius"

$$E_n = -\frac{(Ze_0)^2}{2an^2} = -\frac{mc^2}{2}\alpha^2 \frac{Z^2}{n^2}$$
(VI.48)

 $mc^2 = 0.511 \,\mathrm{MeV}$ Ruheenergie des Elektrons $\alpha = \frac{e_0^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137.037}$ "Sommerfeld'sche Feinstrukturkonstante"

$$n = 1 \quad l = 0 \quad (s) \quad R_{10}(r) = 2\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} e^{-\frac{Z}{a}r}$$

$$n = 2 \quad l = 0 \quad (s) \quad R_{20}(r) = 2\left(\frac{Z}{2a}\right)^{3/2} \left(1 - \frac{Zr}{2a}\right) e^{-\frac{Z}{2a}r}$$

$$l = 1 \quad (p) \quad R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2a}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a} e^{-\frac{Z}{2a}r}$$

Tabelle VI.2: Die niedrigsten radialen Wellenfunktionen

Die Bindungsenergie des Grundzustands entspricht der Ionisierungsenergie des H-Atoms (mit Z = 1)

$$E_1(Z=1) = -13.6 \,\mathrm{eV} = -1 \,\mathrm{Rydberg}$$
 (VI.49)

Normierung:

$$\int d^3x \,\psi^*_{nlm}(\vec{x})\psi_{n'l'm'}(\vec{x}) = \delta_{nn'}\delta_{ll'}\delta_{mm'} \tag{VI.50}$$

Bemerkungen:

- i) $R_{nl}(r)$ hängt nicht von der Quantenzahl m ab.
- ii) $|\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi,t)|^2 r^2 dr d\Omega$ gibt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens im Volumenelement $r^2 dr d\Omega$ an. Die radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist gegeben durch $|R_{nl}(r)|^2 r^2 dr$.

Die niedrigsten radialen Wellenfunktionen sind in Tabelle VI.2 angegeben.

Energieniveaus Atomspektren ergeben sich aus Differenzen von Energieeigenwerten.

$$\hbar\omega_{mn} = E_m - E_n = 1 \operatorname{Ry}\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right)$$
(VI.51)

Beweis des "Ritz'schen Kombinationsprinzips" (1905).

Grund der Entartung von E_n Die Eigenwerte E_n sind in l und m hochgradig entartet!

i) Für Zentralpotentiale sind die Energie
eigenwerte stets unabhängig von m. Grund: m wählt die "Quantisierung
sachse" in \vec{e}_z -Richtung, was zum Bruch der Rotationssymmetrie führt.

Beweis:

Für V = V(r) ist $[H, L_i] = 0 \Rightarrow [H, L_{\pm}] = 0$. Sei

$$H\psi_{Elm} = E\psi_{Elm}$$

$$\Rightarrow \qquad \hat{H}(\hat{L}_{+}\psi_{Elm}) = \hat{L}_{+}\hat{H}\psi_{Elm} = E(\hat{L}_{+}\psi_{Elm}) \qquad (\text{VI.52})$$

 $\Rightarrow \psi_{Elm}$ und ψ_{Elm+1} sind entartet.

ii) Die zusätzliche Entartung bezüglich l ist jedoch eine spezifische Eigenschaft des 1/r-Potentials. Der Grund liegt in der höheren Symmetrie!

VI Zentralpotential und Wasserstoffatom

Definition VI.4.1 (Runge-Lenz-Vektor).

$$\hat{\vec{A}} = \frac{1}{2m} (\hat{\vec{p}} \times \hat{\vec{L}} - \hat{\vec{L}} \times \hat{\vec{p}}) - \frac{e_0^2}{r} \hat{\vec{x}}$$
(VI.53)

Der Runge-Lenz-Vektor ist eine weitere Erhaltungsgröße:

$$[\hat{H}, \vec{A}] = 0 \tag{VI.54}$$

Zudem gilt $\hat{\vec{A}} \cdot \hat{\vec{L}} = \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{A}} = 0.$

Klassisch: $\vec{A} = \text{const.}$ gleichbedeutend mit geschlossenen Bahnen

Quantenmechanisch: O(4)-Symmetrie des ¹/*r*-Potentials. Daher lässt sich das Spektrum auch *rein algebraisch* finden!
VII Quantenmechanische Dynamik

VII.1 Axiome der Quantenmechanik

- i) Der Zustand des Systems wird durch den Zustandsvektor $|\psi\rangle$ beschrieben.
- ii) Observablen werden durch hermitesche Operatoren \hat{A} dargestellt. Funktionen von Observablen sind durch Funktionen der Operatoren darzustellen.

Nebenbemerkung:

Diese Vorschrift ist nicht eindeutig wegen des Ordnungsproblems bei nicht kommutierenden Operatoren:

klassisch: $f = x \cdot p_x = p_x \cdot x$ quantenmechanisch: $\hat{f} = \hat{x}\hat{p}_x \neq \hat{p}_x\hat{x}$ "Quantisierungsambiguität"

- iii) Mittelwerte der Observablen im Systemzustand $|\psi\rangle$ sind durch $\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \hat{A} \rangle$ gegeben.
- iv) Die Zeitentwicklung des Zustandsvektors folgt aus der Schrödinger-Gleichung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$$
 (VII.1)

v) Bei einer Messung von \hat{A} mit Messwert a_n geht das System in den Zustand $|n\rangle$ über, wobei $\hat{A}|n\rangle = a_n|n\rangle$ ist.

$$\begin{array}{ccc} |\psi\rangle & \rightarrow & & \hat{A} \\ & & \text{Messung:} & a_n \end{array} \rightarrow & |n\rangle \end{array}$$

Aus (ii) und (iii) folgt

$$|\psi\rangle = \sum_{n} c_n |n\rangle$$
 mit $c_n = \langle n|\psi\rangle$ (VII.2)

dann ist die Wahrscheinlichkeit a_n zu messen durch $w_n = |\langle n | \psi \rangle|^2$ gegeben.

Für Lösungen der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle \tag{VII.3}$$

ergeben sich die stationären Zustände

$$|\psi_n(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}|\psi_n\rangle \tag{VII.4}$$

VII Quantenmechanische Dynamik

die die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung (VII.1) lösen.

$$i\hbar\partial_t |\psi_n(t)\rangle = \hat{H}|\psi_n(t)\rangle$$
 (VII.5)

Sind die $|\psi_n\rangle$ und E_n bekannt, so lässt sich die zeitliche Entwicklung des Systems vollständig angeben: Sei $|\psi\rangle$ für t = 0 Zustand des Systems. Dann ist

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n} \langle \psi_n | \psi \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} | \psi_n \rangle$$
(VII.6)

für alle Zeiten.

Dynamik (Hier: "Schrödinger-Bild"):

- Der Zustandsvektor ist *zeitabhängig*:
- Die Observablen (Ort, Impuls, Energie, Drehimpuls, ...) und ihre Eigenvektoren sind zeitunabhängig. *Ausnahme:* Explizite (von aussen dem System aufgeprägte) Zeitabhängigkeit. Zum Beispiel ein äußeres zeitabhängiges Feld macht den Hamilton-operator explizit zeitabhängig.

 $|\psi(t)\rangle$

$$\frac{d}{dt}\hat{A} = \frac{\partial}{\partial t}\hat{A} \tag{VII.7}$$

Beispiel:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\vec{p}}^2 - \frac{e}{c} \vec{A}(\hat{\vec{x}}, t) \right)^2$$
(VII.8)

A(x,t): Äußeres Vektorpotential mit expliziter Zeitabhängigkeit.

Die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung in verschiedenen Darstellungen Basisunabhängige Form:

$$i\hbar\partial_t |\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle$$
 (VII.9)

i) **Ortsdarstellung** (eindimensional) Ortswellenfunktion:

$$\langle x|\psi(t)\rangle = \psi(x,t)$$
 (VII.10)

 $\langle x | \cdot (\text{VII.3}) \text{ und } \partial_t | x \rangle = 0$ (Ortseigenvektor zeitunabhängig) liefert:

$$i\hbar\partial_t \langle x|\psi(t)\rangle = \langle x|\hat{H}|\psi(t)\rangle$$

= $\int dx' \langle x|\hat{H}|x'\rangle \langle x'|\psi(t)\rangle$
= $\int dx' \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \delta(x-x') + V(x)\delta(x-x') \right] \psi(x',t)$ (VII.11)

Dies ist unsere wohlbekannte Schrödinger-Gleichung für die Wellenfunktion:

$$i\hbar\partial_t\psi(x,t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right]\psi(x,t)$$
(VII.12)

ii) Impulsdarstellung

Nun ist

$$\langle p|\psi(t)\rangle = c_p(t) = \frac{\varphi(p,t)}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$
 (VII.13)

mit $\varphi(p,t)$: Fourier
transformierte von $\psi(x,t)$

Aus $\langle p | \cdot (\text{VII.3}) \text{ und } \partial_t \langle p | = 0 \text{ ergibt sich}$

$$i\hbar\partial_t c_p(t) = \int dp' \langle p|\hat{H}|p'\rangle c_{p'}(t)$$
 (VII.14)

Nun ist (da $\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(\hat{x}))$

$$\langle p|\hat{H}|p'\rangle = \frac{p^2}{2m}\delta(p-p') + \int dx \, dx' \, \langle p|x\rangle \langle x|V(\hat{x})|x'\rangle \langle x'|p'\rangle$$
$$= \frac{p^2}{2m}\delta(p-p') + \int dx \, \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}(p-p')\cdot x}}{2\pi\hbar}V(x)$$
(VII.15)

Definition VII.1.1 (Fouriertransformierte des Potentials).

$$\tilde{V}(q) := \int dx \, e^{-\frac{i}{\hbar}q \cdot x} V(x) \tag{VII.16}$$

Dann folgt die Schrödinger-Gleichung in der Impulsdarstellung:

$$i\hbar\partial_t\varphi(p,t) = \frac{p^2}{2m}\varphi(p,t) + \int dp' \frac{\tilde{V}(p-p')}{2\pi\hbar}\varphi(p',t)$$
(VII.17)

Dies ist eine Integro-Differentialgleichung für $\varphi(p, t)$. Diese lässt sich aber auch in eine reine Differentialgleichung höherer Ordnung umwandeln:

$$e^{-\frac{i}{\hbar}p \cdot x} V(x) = V \cdot \left(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p}\right) e^{-\frac{i}{\hbar}p \cdot x}$$
$$\tilde{V}(q) = V \left(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}\right) \delta(q) \cdot 2\pi\hbar$$
$$i\hbar\partial_t \varphi(p,t) = \frac{p^2}{2m}\varphi(p,t) + V \left(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p}\right)\varphi(p,t)$$
(VII.18)

iii) Darstellung bezüglich eines diskreten Basissystems

Sei ein diskretes System gegeben durch $\{|n\rangle\}_{n\in I}$.

$$\langle n|\psi(t)\rangle = c_n(t)$$

 \Rightarrow

 \Rightarrow

 \Rightarrow

$$i\hbar\partial_t \langle n|\psi(t)\rangle = \sum_{m'} \langle n|\hat{H}|m'\rangle \langle m'|\psi(t)\rangle$$
$$i\hbar\partial_t c_n(t) = \sum_{m'} H_{nm'}c_{m'}(t)$$
(VII.19)

Die Schrödinger-Gleichung hat nun die Form eines linearen Differentialgleichungssystems!

VII.2 Schrödinger-, Heisenberg- und Wechselwirkungsbild

Wir wollen im Folgenden die quantenmechanische Dynamik eines Systems in drei verschiedenen Formalismen—"Bildern"—beschreiben. Die physikalischen Aussagen sind dabei unabhängig von der Wahl des Bildes. Je nach Fragestellung mag das eine über das andere Bild vorteilhafter sein. Im Folgenden setzen wir voraus, dass \hat{H} nicht explizit von der Zeit abhängt.

i) Schrödingerbild

Wir hatten bisher verwendet:

$$i\hbar\partial_t |\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle$$
 (VII.20)

Die Formale Lösung für zeitunabhämgige Hamiltonoperatoren lautet:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|\psi(t=0)\rangle \tag{VII.21}$$

Der Zustandsvektor ist zeitabhängig. Physikalische Observablen sind allenfalls explizit zeitabhängig:

$$\frac{d}{dt}\hat{\vec{x}} = \frac{d}{dt}\hat{\vec{p}} = \frac{d}{dt}\hat{\vec{L}} = 0$$
(VII.22)

$$\frac{d}{dt}\hat{H}(\hat{x},\hat{p},t) = \frac{\partial}{\partial t}\hat{H}(\hat{x},\hat{p},t)$$
(VII.23)

Insbesondere sind dann auch die assoziierten Eigenvektoren zeitunabhängig:

$$\partial_t |\vec{x}\rangle = \partial_t |\vec{p}\rangle = \partial_t |l, m\rangle = 0 \tag{VII.24}$$

ii) Heisenbergbild

Hier folgen die Operatoren Bewegungsgleichungen und $|\psi\rangle$ ist konstant. **Definition VII.2.1** (Operator im Heisenbergbild).

$$\hat{A}_{\rm H} := e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{A}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \tag{VII.25}$$

Dies ist eine unitäre Transformation. Es folgt:

$$\frac{d}{dt}\hat{A}_{\rm H} = \frac{i}{\hbar}\hat{H}\hat{A}_{\rm H} + e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} - \frac{i}{\hbar}\hat{A}_{\rm H}\hat{H}$$

$$= \frac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{A}_{\rm H}] + \frac{\partial\hat{A}_{\rm H}}{\partial t} \tag{VII.26}$$

Betrachten wir nun den letzten Term:

$$e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\frac{\partial}{\partial t}A(\vec{x},\vec{p},\dots,t)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\frac{\partial}{\partial t}\left(\sum_{n}f_{n}(\vec{x},\vec{p},\dots)\cdot\underbrace{t^{n}}_{\uparrow}\right)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$$
explizite Zeitabhängigkeit
$$= e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\sum_{n}f_{n}(\hat{x},\hat{p},\dots)\cdot nt^{n-1}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$$

$$= \sum_{n}f_{n}(\hat{x}_{\mathrm{H}},\hat{p}_{\mathrm{H}},\dots)\cdot nt^{n-1} \quad (\text{einschieben von } 1 = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \cdot e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t})$$

$$= \frac{\partial}{\partial t}\hat{A}_{\mathrm{H}} \qquad (\text{VII.27})$$

Der Zustandsvektor im Heisenbergbild ist definiert durch:

$$|\psi\rangle_{\rm H} := e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\psi(t)\rangle \tag{VII.28}$$

Es folgt:

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle_{\rm H} = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{H}\frac{i}{\hbar}|\psi(t)\rangle + e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\underbrace{\partial_t|\psi(t)\rangle}_{=-\frac{i}{\hbar}\hat{H}|\psi(t)\rangle} = 0$$

Zusammenfassung

Dynamik im Heisenbergbild

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle_{\rm H} = 0$$

$$\frac{d}{dt} \hat{A}_{\rm H}(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_{\rm H}, \hat{A}_{\rm H}(t)] + \frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_{\rm H}(t)$$

$$\hat{H}_{\rm H} = \hat{H}$$
(VII.29)

Dynamik im Schrödingerbild

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

$$\frac{d}{dt} \hat{A} = \frac{\partial}{\partial t} \hat{A}$$
(VII.30)

Zuweilen schreibt man auch $\hat{A}_{\rm S}$ und $|\psi(t)\rangle_{\rm S}$ um den Gegensatz zum Heisenbergbild hervorzuheben.

Wichtig:

Physikalische Resultate sind unabhängig von der Wahl des Bildes:

• Mittelwert eines Operators

$$\langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle = {}_{\mathrm{H}} \langle \psi | \hat{A}_{\mathrm{H}}(t) | \psi \rangle_{\mathrm{H}}$$
(VII.31)

Beweis:

$$|\psi\rangle_{\rm H} = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\psi(t)\rangle \qquad \qquad \hat{A}_{\rm H} = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{A}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$$

$${}_{\mathrm{H}}\langle\psi|\hat{A}_{\mathrm{H}}(t)|\psi\rangle_{\mathrm{H}} = \left(\langle\psi(t)|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\right)\left(e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{A}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\right)\left(e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\psi(t)\rangle\right)$$
$$= \langle\psi(t)|\hat{A}|\psi(t)\rangle \qquad \Box \text{ (VII.32)}$$

Schrödingerbild und Heisenbergbild hängen über eine unitäre Transformation zusammen. Beispiel: Bewegungsgleichungen des harmonischen Oszillators im Heisenbergbild:

$$\hat{H} = \frac{1}{2}m\hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 \qquad \qquad \frac{\partial}{\partial t}\hat{H} = 0$$
$$\hat{H}_{\rm H} = \frac{1}{2m}\hat{p}_{\rm H}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}_{\rm H} \qquad \qquad \frac{\partial}{\partial t}\hat{H}_{\rm H} = 0$$

$$\dot{x}_{\mathrm{H}} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_{\mathrm{H}}, \hat{x}_{\mathrm{H}}] = \frac{1}{m} \hat{p}_{\mathrm{H}}$$

da $[\hat{p}_{\rm H}, \hat{x}_{\rm H}] = -i\hbar = [\hat{p}, \hat{x}]$

$$\dot{p}_{\rm H} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_{\rm H}, \hat{p}_{\rm H}] = -m\omega^2 \hat{x}_{\rm H}$$
(VII.33)

iii) Wechselwirkungs- oder Diracbild

Als Ausgangspunkt für die zeitabhängige Störungstheorie ist eine dritte, im gewissen Sinne hybride quantenmechanische Dynamik nach Dirac von Vorteil. Nun wollen wir im Gegensatz zur vorherigen Diskussion eine explizite Zeitabhängigkeit von \hat{H} erlauben.

Sei

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t) \qquad \text{mit } \frac{\partial}{\partial t} \hat{H}_0 = 0 \ \text{(VII.34)}$$

Definition VII.2.2 (Zustände und Operatoren im Wechselwirkungsbild).

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}} &= e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{0}t}|\psi(t)\rangle\\ \hat{A}_{\mathrm{I}}(t) &= e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{0}t}\hat{A}(t)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{0}t} \end{aligned} \tag{VII.35}$$

Dann folgen die Bewegungsgleichungen:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle_{\rm I} = \hat{V}_{\rm I}(t) |\psi(t)\rangle_{\rm I}$$
$$\frac{d}{dt} \hat{A}_{\rm I}(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_{0,{\rm I}}, \hat{A}_{\rm I}(t)] + \frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_{\rm I}(t) \qquad (\text{VII.36})$$

wobei

$$\hat{V}_{\rm I}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\hat{V}(t)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0}$$

 $\hat{H}_{0,{\rm I}} = \hat{H}_0$

Es sind also sowohl der Zustandsvektor als auch die Operatoren zeitabhängig.

VII.3 Erhaltungssätze der Quantenmechanik

Aus der klassischen Physik wissen wir, dass Symmetrien Erhaltungssätze implizieren (Noether-Theorem). Die gilt auch in der Quantentheorie: Eine Symmetrie bedeutet die Vertauschung der Erhaltungsgröße mit dem Hamiltonoperator. Dies ist völlig transparent im Heisenbergbild:

Sei $\hat{A}_{\rm H}$ nicht explizit zeitabhängig und eine Symmetrie des durch \hat{H} definierten Systems im Sinne von $[\hat{H}, \hat{A}_{\rm H}] = 0$. Dann ist $\hat{A}_{\rm H}$ erhalten:

$$\frac{d}{dt}\hat{A}_{\rm H} = 0 \tag{VII.37}$$

Beispiele:

a) **Energieerhaltung:** $\hat{H}_{\rm H}$ Für zeitunabhängigen Hamiltonoperator gilt:

$$\frac{d}{dt}\hat{H}_{\rm H} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}_{\rm H}, \hat{H}_{\rm H}] = 0 \tag{VII.38}$$

Erhaltungsgröße: \hat{H} Erzeugende der Symmetrie der Zeittranslation: $e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$

b) **Drehimpulserhaltung:** $\hat{\vec{L}}_{H}$ Für ein rotationssymmetrisches System gilt:

$$[\hat{H}_{\rm H}, \vec{L}_{\rm H}] = 0$$

$$\frac{d}{dt}\hat{\vec{L}}_{\rm H} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}_{\rm H}, \hat{\vec{L}}_{\rm H}] = 0$$
 (VII.39)

 \Rightarrow

 \Rightarrow

Erzeugende der Rotation: $e^{rac{i}{\hbar} ec{arphi} \cdot \hat{ec{L}}}$

c) Impulserhaltung: $\hat{\vec{p}}_{\rm H}$

Für ein translationsinvariantes System gilt:

$$[\hat{H}_{\rm H}, \vec{p}_{\rm H}] = 0$$

$$\frac{d}{dt}\hat{\vec{L}}_{\rm H} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}_{\rm H}, \hat{\vec{p}}_{\rm H}] = 0$$
 (VII.40)

Erzeugende der Translation: $e^{rac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \hat{\vec{p}}}$