

# Quantenmechanik

(Sommersemester 2019)

Thorsten Ohl  
Institut für Theoretische Physik und Astrophysik  
Universität Würzburg  
D-97070 Würzburg



Abb.: © Greser & Lenz (2016)

(Verwendung mit freundlicher Genehmigung der Autoren)

git commit: 7898b23

# INHALTSVERZEICHNIS

<b>1</b>	<b>HISTORIE</b>	<b>1</b>
	<i>Vorlesung 01: Fr, 26. 04. 2019</i>	
1.1	<i>Grenzen der klassischen Physik</i> . . . . .	1
1.1.1	<i>Schwarzkörperstrahlung</i> . . . . .	2
1.1.2	<i>Diskrete Atomspektren</i> . . . . .	4
1.1.3	<i>Stabile Atome</i> . . . . .	5
1.1.4	<i>Doppelspaltexperiment</i> . . . . .	5
1.2	<i>Von der klassischen Physik zur Quantenmechanik</i> . . . . .	6
<b>2</b>	<b>QBITS</b>	<b>7</b>
2.1	<i>Stern-Gerlach Experiment für Spin-1/2</i> . . . . .	7
	<i>Vorlesung 02: Mo, 29. 04. 2019</i>	
2.2	<i>Zustandsvektoren</i> . . . . .	9
2.2.1	<i>Hilbertraum</i> . . . . .	10
2.2.2	<i>Ein QBit</i> . . . . .	12
	<i>Vorlesung 03: Fr, 03. 05. 2019</i>	
2.3	<i>Lineare Transformationen und Operatoren</i> . . . . .	16
2.3.1	<i>Selbstadjungierte und unitäre Operatoren, Projektoren</i> . . . . .	18
2.3.2	<i>Eigenwerte, Eigenvektoren, Spektralsatz</i> . . . . .	21
2.3.3	<i>Exponentialfunktion und andere Funktionen</i> . . . . .	24
	<i>Vorlesung 04: Mo, 06. 05. 2019</i>	
2.4	<i>Rotationen</i> . . . . .	25
2.4.1	$\theta = \pm\pi/2$ . . . . .	25
2.4.2	$\theta \neq \pm\pi/2$ . . . . .	29
2.5	<i>Projektoren, Observable und Erwartungswerte</i> . . . . .	31
	<i>Vorlesung 05: Fr, 10. 05. 2019</i>	
	<i>Vorlesung 06: Fr, 17. 05. 2019</i>	
2.6	<i>Bloch-Sphäre</i> . . . . .	37
2.7	<i>Dynamik</i> . . . . .	38
2.7.1	<i>Spinpräzession</i> . . . . .	42
	<i>Vorlesung 07: Mo, 20. 05. 2019</i>	

2.8	<i>Reine und gemischte Zustände</i>	43
2.8.1	<i>Superposition und Mischung</i>	46
2.8.2	<i>Messung</i>	46
2.9	<i>Komplementarität und Unschärfe</i>	47
	<i>Vorlesung 08: Fr, 24. 05. 2019</i>	
2.10	<i>Tensorprodukte und Verschränkung</i>	50
3	<b>ALLGEMEINE FORMULIERUNG DER QUANTENMECHANIK (QM)</b>	53
3.1	<i>Kontinuierliche Observable</i>	53
3.1.1	<i>Dirac <math>\delta</math>-„Funktion“</i>	56
	<i>Vorlesung 09: Mo, 27. 05. 2019</i>	
3.1.2	<i>Eigen„zustände“ des Ortsoperators</i>	59
3.1.3	<i>Differentialoperatoren</i>	60
3.1.4	<i>Translationen und Impuls</i>	62
	<i>Vorlesung 10: Fr, 31. 05. 2019</i>	
3.1.5	<i>Ebene Wellen</i>	66
3.2	<i>Postulate</i>	66
3.2.1	<i>Reine Zustände</i>	66
3.2.2	<i>Bras und Kets</i>	67
3.2.3	<i>Observable</i>	68
3.2.4	<i>Gemischte Zustände</i>	70
	<i>Vorlesung 11: Mo, 03. 06. 2019</i>	
3.2.5	<i>Messung</i>	71
3.2.6	<i>Tensorprodukte von Zustandsräumen</i>	71
3.2.7	<i>Zeitliche Entwicklung</i>	72
4	<b>WELLENFUNKTIONEN IM ORTS- UND IMPULSRAUM</b>	75
4.1	<i>Schrödinger-Gleichung (SG) für freie Teilchen</i>	76
4.1.1	<i>Superposition und Wellenpakete</i>	77
	<i>Vorlesung 12: Fr, 07. 06. 2019</i>	
4.1.2	<i>Unschärferelation</i>	80
4.1.3	<i>Dispersion des Wellenpakets</i>	81
4.2	<i>Kontinuitätsgleichung</i>	81
4.3	<i>Stationäre Lösungen der SG</i>	83
5	<b>EINDIMENSIONALE SYSTEME</b>	85
5.1	<i>Der harmonische Oszillator</i>	85
5.1.1	<i>Ortsraum</i>	85
5.1.2	<i>Erzeuger und Vernichter</i>	86
	<i>Vorlesung 13: Fr, 14. 06. 2019</i>	

5.1.3	<i>Kohärente Zustände</i> . . . . .	91
	Vorlesung 14: Mo, 17. 06. 2019	
5.2	<i>Qualitatives Verhalten der Lösungen der SG</i> . . . . .	94
5.3	<i>Stückweise konstante Potentiale</i> . . . . .	96
5.4	<i>Potentialtopf</i> . . . . .	97
5.4.1	<i>Parität</i> . . . . .	97
	Vorlesung 15: Fr, 21. 06. 2019	
5.4.2	<i><math>E &lt; 0</math>: Gebundene Zustände</i> . . . . .	98
5.4.3	<i><math>E &gt; 0</math>: Streuzustände</i> . . . . .	100
5.4.4	<i>Unendlich tief . . .</i> . . . . .	102
5.4.5	<i><math>\delta</math>-Potential</i> . . . . .	103
5.5	<i>Potentialschwelle</i> . . . . .	104
5.5.1	<i>Tunneleffekt</i> . . . . .	104
5.6	<i>Potentialstufe</i> . . . . .	105
6	<b>DREHIMPULS</b> . . . . .	106
	Vorlesung 16: Mo, 24. 06. 2019	
6.1	<i>Drehungen</i> . . . . .	106
6.2	<i>Drehimpuls-Algebra</i> . . . . .	109
6.2.1	<i>Schiebeoperatoren</i> . . . . .	110
6.2.2	<i>Irreduzible Unterräume</i> . . . . .	112
	Vorlesung 17: Fr, 28. 06. 2019	
6.3	<i>Spin <math>l</math> für kleine <math>l</math></i> . . . . .	113
6.3.1	<i>Spin 0</i> . . . . .	113
6.3.2	<i>Spin 1/2</i> . . . . .	113
6.3.3	<i>Spin 1</i> . . . . .	114
6.4	<i>Drehimpuls im Ortsraum, Kugelflächenfunktionen</i> . . . . .	114
7	<b>ZENTRALPOTENTIALE, WASSERSTOFFATOM</b> . . . . .	118
7.1	<i>Separationsansatz</i> . . . . .	119
	Vorlesung 18: Mo, 01. 07. 2019	
7.1.1	<i>Randbedingungen für <math>r \rightarrow 0</math></i> . . . . .	121
7.1.2	<i>Randbedingungen für <math>r \rightarrow \infty</math></i> . . . . .	121
7.2	<i>Coulomb-Potential</i> . . . . .	122
7.2.1	<i>Gebundene Zustände</i> . . . . .	123
7.2.2	<i>Hauptquantenzahl</i> . . . . .	126
7.2.3	<i>Termschema</i> . . . . .	126
	Vorlesung 19: Fr, 05. 07. 2019	

7.2.4	<i>Wellenfunktionen</i>	127
7.2.5	<i>Entartungen</i>	129
7.3	<i>Streuzustände</i>	130
8	<b>GELADENE TEILCHEN IM ELEKTROMAGNETISCHEN FELD</b>	131
8.1	<i>Vektorpotential</i>	132
8.2	<i>Eichinvarianz</i>	134
	<i>Vorlesung 20: Mo, 08. 07. 2019</i>	
8.3	<i>Wahrscheinlichkeitsstromdichte</i>	136
8.4	<i>Normaler Zeeman-Effekt</i>	136
8.5	<i>Aharonov-Bohm-Effekt*</i>	138
9	<b>SPIN</b>	141
9.1	<i>Zustände und Wellenfunktionen</i>	141
	<i>Vorlesung 21: Fr, 12. 07. 2019</i>	
9.1.1	<i>Spinpräzession</i>	145
9.2	<i>Addition von Drehimpulsen</i>	145
9.2.1	<i>Clebsch-Gordan-Reihe</i>	147
9.2.2	<i>Beispiel: <math>2 \otimes 2 = 3 + 1</math></i>	149
9.3	<i>Spin-Bahn-Kopplung</i>	149
10	<b>NÄHERUNGSMETHODEN</b>	151
	<i>Vorlesung 22: Mo, 15. 07. 2019</i>	
10.1	<i>Zeitunabhängige Störungstheorie</i>	151
10.1.1	<i>Nicht-entartete Störungstheorie</i>	153
10.1.2	<i>Entartete Störungstheorie</i>	155
10.2	<i>Zeitabhängige Störungstheorie</i>	155
10.2.1	<i>Wechselwirkungsbild</i>	156
	<i>Vorlesung 23: Fr, 19. 07. 2019</i>	
10.2.2	<i>Übergangswahrscheinlichkeiten</i>	159
10.2.3	<i>Fermis Goldene Regel</i>	162
10.2.4	<i>Harmonische Störung</i>	162
10.3	<i>Variationsprinzip</i>	164
	<i>Vorlesung 24: Mo, 22. 07. 2019</i>	
10.3.1	<i>Grundzustand</i>	164
10.3.2	<i>Angeregte Zustände</i>	165
10.3.3	<i>Beispiel: Heliumatom</i>	165
10.4	<i>WKB-Methode*</i>	166
10.4.1	<i>Eindimensionale Systeme</i>	168
10.4.2	<i>Anschlußbedingungen</i>	169
10.4.3	<i>Anwendungen</i>	172

---

11 MEHRTEILCHENSYSTEME	174
11.1 Unterscheidbare Teilchen . . . . .	174
11.2 Ununterscheidbare Teilchen . . . . .	175
11.2.1 Tensorprodukte . . . . .	176
11.2.2 Bosonen und Fermionen . . . . .	177
11.3 Pauli-Prinzip . . . . .	178
11.4 Aufbau der Materie . . . . .	179
	Vorlesung 25: Fr, 26. 07. 2019
11.4.1 Helium . . . . .	179
11.4.2 Lithium . . . . .	180
11.4.3 Schalenmodell . . . . .	180
11.4.4 Fermioberfläche . . . . .	181
12 MESSPROZESS UND VERSCHRÄNKUNG	182
12.1 Verschränkung . . . . .	182
12.1.1 Verborgene Parameter . . . . .	183
12.1.2 Bellsche Ungleichung . . . . .	184
12.2 Dekohärenz* . . . . .	185
12.2.1 Schrödingers Katzen und Kätzchen . . . . .	189
A ABKÜRZUNGEN	190

## *Vorbemerkung*

Dieses Manuskript ist mein persönliches Vorlesungsmanuskript, an vielen Stellen nicht ausformuliert und kann jede Menge Fehler enthalten. Es handelt sich hoffentlich um weniger Denk- als Tippfehler, trotzdem kann ich deshalb auch keine Verantwortung für Fehler übernehmen. Zeittranslationsinvarianz ist natürlich auch nicht gegeben ...

Dennoch, oder gerade deshalb, bin ich für alle Korrekturen und Vorschläge dankbar!

## *Organisatorisches*

### *Kontakt*

- Büro: 22.02.009 (Hubland Nord, Emil-Hilb-Weg 22, 2. Stock)
- Sprechstunde: nach Vereinbarung
- Mail: [ohl@physik.uni-wuerzburg.de](mailto:ohl@physik.uni-wuerzburg.de)
- URL: <http://physik.uni-wuerzburg.de/ohl/>

### *Aktuelle Informationen*

Vorlesungs-URL (<https://www.physik.uni-wuerzburg.de/tp2/personen/prof-dr-thorsten-ohl/vorlesungen-und-seminare/quantenmechanik-ss-2019/>)  
eigentlich zu lang: einfach zu

- <http://physik.uni-wuerzburg.de/ohl/>

gehen und auf die Kachel *Quantenmechanik* klicken ...

### *Prüfungszulassung*

1. 50% der Aufgaben angekreuzt, d. h. Bereitschaft zum Vorrechnen
2. *und* 2 Aufgaben (bzw. Teile bei langen Aufgaben) vorgerechnet

### *Übungsgruppen*

- #01: Donnerstag, 12–14 Uhr, SE 6: *David Rodriguez Fernandez*
- #02: Mittwoch, 14–16 Uhr, SE 4: *Adam Büchner*
- #03: Mittwoch, 14–16 Uhr, SE 3: *David Rodriguez Fernandez*
- #04: Donnerstag, 12–14 Uhr, SE 31.00.017: *Robert Franken*
- #05: Donnerstag, 12–14 Uhr, SE 22.00.017: *Raimond Abt*,  
(bevorzugt für Studierende der Nanostrukturtechnik)

### *Übungszettel*

- Mittwochs online, Besprechung Mittwoch und Donnerstag der folgenden Woche.

## Literatur

Das Angebot an Lehrbüchern zur **QM** ist nahezu unüberschaubar. Ein breites zeitliches und stilistisches Spektrum wird von

- Cohen-Tannoudji [CTDL99]
- Dirac<sup>1</sup> [Dir58]
- Feynman [FLS65]
- Landau und Lifschitz [LL88]
- Weinberg [Wei13]
- Sakurai [Sak94]
- Straumann [Str02]
- Susskind [SF14]

abgedeckt. Hier sei insbesondere auf das knappe unkonventionelle Büchlein von Lenny Susskind [SF14] verwiesen. Es deckt den Stoff der Vorlesung *nicht* ab, bietet aber eine sehr klare Erklärung der konzeptionellen Besonderheiten der modernen **QM**.

An der Universität Würzburg hat sich das Manuskript [Bö03] von Manfred Böhm bewährt<sup>2</sup>, das auch von der Fachschaft vertrieben wird. Der Aufbau der Vorlesung weicht von Aufbau in diesem Manuskript ab, aber vieles wird dort leicht aufzufinden sein.

Das vorliegende Manuskript wird jeweils wenige Stunden nach der Vorlesung als PDF File mit dem bis dahin behandelten Material bereitgestellt werden.

---

<sup>1</sup>Diese *Principles of Quantum Mechanics* bitte nicht mit den derzeit günstig zu habenden *Lectures on Quantum Mechanics* verwechseln: letztere behandeln nur Spezialthemen, die in der Vorlesung nicht vorkommen werden!

<sup>2</sup>Leider habe ich trotzdem beim Abgleich mit meinem Manuskript eine Anzahl von Tippfehlern in den Formeln in [Bö03] gefunden.

# — 1 —

## HISTORIE

Vorlesung 01: Fr, 26.04.2019

*Theoretische Physik ist zwar ein ganz schönes Fach, und man kann wohl hier und da in dem einen oder anderen Winkel ein Stäubchen noch auskehren, aber was prinzipiell Neues, das werden Sie nicht finden.*  
[PROF. PHILLIP VON JOLLY (1874)]

Max Planck, an den dieser Rat gerichtet war, hat sich glücklicherweise nicht daran gehalten.

### 1.1 Grenzen der klassischen Physik

Wie man aus dem berühmt-berüchtigten Zitat von Jolly ablesen kann, schien die Welt der klassischen Physik am Ende des 19. Jahrhunderts bestens geordnet. Auf der einen Seite die *klassische Mechanik*<sup>1</sup>, die die Bewegung von Systemen von  $N$  Massenpunkten durch gewöhnliche Differentialgleichungen zweiter Ordnung

$$m_i \frac{d^2 \vec{x}_i}{dt^2}(t) = \vec{F}_i(\vec{x}_1(t), \vec{x}_2(t), \dots, \vec{x}_N(t); t) \quad (1.1a)$$

beschreibt, deren Lösungen eindeutig sind, sofern Anfangsbedingungen für Orte und Geschwindigkeiten

$$\vec{x}_i(t_0) = \vec{x}_i^0 \quad (1.1b)$$

$$\frac{d\vec{x}_i}{dt}(t_0) = \vec{v}_i^0 \quad (1.1c)$$

vorgegeben werden. Die einzigen verbleibenden Probleme waren, die Kräfte

$$\vec{F}_i : \mathbf{R}^{3N+1} \rightarrow \mathbf{R}^3 \quad (1.2)$$

---

<sup>1</sup>Siehe, z. B., [Ohl17].

als Funktion der Koordinaten im konkreten Fall zu bestimmen und das schwierige Anfangswertproblem (1.1) zu lösen.

Dieses Bild wurde vervollständigt durch Newtons Gravitationstheorie und die klassische Elektrodynamik, die durch die partiellen Differentialgleichungen

$$\vec{\nabla} \vec{E}(\vec{x}, t) = \rho(\vec{x}, t) \quad (1.3a)$$

$$\vec{\nabla} \vec{B}(\vec{x}, t) = 0 \quad (1.3b)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E}(\vec{x}, t) + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}(\vec{x}, t) = 0 \quad (1.3c)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B}(\vec{x}, t) - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}(\vec{x}, t) = \frac{1}{c} \vec{j}(\vec{x}, t) \quad (1.3d)$$

beschrieben werden, für deren eindeutige Lösung noch zusätzlich Randbedingungen anzugeben sind.

Im Prinzip sind alle dynamischen Größen in den Newtonschen Bewegungsgleichungen (1.1) und den Maxwell-Gleichungen (1.3) meßbar und es kann aus dem Zustand eines Systems zum Zeitpunkt  $t_0$  der Zustand zu einem beliebigen Zeitpunkt  $t$  in der Zukunft oder Vergangenheit berechnet werden. Für sehr große  $N$  ist dies allerdings aus praktischen Gründen fast nie möglich und es muß zu statistischen Beschreibungen gegriffen werden. Für große  $|t - t_0|$  kann die nichtlineare Abhängigkeit der Lösungen von den nur mit Fehlern meßbaren Anfangsbedingungen auch für kleine  $N$  dazu führen, daß die Vorhersagen praktisch wertlos sind. Das System heißt dann *chaotisch*.

Wir werden sehen, daß die Forderung, daß *alle* in den dynamischen Gleichungen vorkommenden Größen eindeutig meßbar sein sollen, in der Quantenphysik *nicht* erfüllt werden kann. In der klassischen Physik ist der *Zustand* eines Systems durch die Werte der *Observablen* eindeutig festgelegt — in der Quantenphysik nicht. Die klassische Physik ist allerdings eine gute Näherung der mikroskopischen Quantenphysik für die meisten makroskopische System.

### 1.1.1 Schwarzkörperstrahlung

Betrachte elektromagnetische Wellen<sup>2</sup>, die sich im thermischen Gleichgewicht mit einem schwarzen Körper befinden.

Im Inneren eines Würfels mit der Kantenlänge  $a$  sind die Freiheitsgrade des elektromagnetischen Felds die zwei Polarisierungen der am Rand verschwindenden Eigenmoden

$$\text{const.} \cdot e^{-i\omega t + i\vec{k}\vec{x}} \quad (1.4)$$

---

<sup>2</sup>Licht, Infrarotstrahlung, etc.

mit den Wellenzahlen

$$k_i = \frac{2\pi n_i}{a}, \quad (1.5a)$$

wobei  $n_i$  ganzzahlig ist, und zugehörigen Frequenzen<sup>3</sup>

$$\omega = 2\pi\nu = |\vec{k}|c = \frac{2\pi c}{a} \sqrt{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2}. \quad (1.5b)$$

Die Anzahl der Freiheitsgrade im Frequenzintervall  $[\omega, \omega + d\omega]$  ist dann

$$N(\omega)d\omega = 2 \cdot 4\pi \cdot |\vec{n}|^2 d|\vec{n}| = \frac{a^3}{\pi^2 c^3} \omega^2 d\omega. \quad (1.6)$$

Nach dem Gleichverteilungssatz der statistischen Physik sollte die mittlere Energie  $\langle E \rangle$  jedes Freiheitsgrads proportional zur Temperature  $T$  sein

$$\langle E \rangle = k_B T. \quad (1.7)$$

Dann ist die Energiedichte pro Volumen und Frequenzintervall

$$\rho(\omega)d\omega = \frac{\langle E \rangle N(\omega)}{a^3} d\omega = \frac{k_B T \omega^2}{\pi^2 c^3} d\omega, \quad (1.8)$$

die Rayleigh-Jeans Formel, die für kleine  $\omega$  auch empirisch gut belegt ist. Die Energiedichte pro Volumen

$$\int_0^\Omega \rho(\omega) d\omega = \frac{k_B T \Omega^3}{3\pi^2 c^3} \xrightarrow{\Omega \rightarrow \infty} \infty \quad (1.9)$$

divergiert allerdings, was unter dem Namen *UV-Katastrophe* das Gebäude der klassischen theoretischen Physik zum Wanken brachte und Max Planck dazu brachte, die Formel

$$\rho(\omega)d\omega = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^3 d\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} \quad (1.10)$$

als Verbesserung<sup>4</sup> für den ultravioletten Bereich *auszuprobieren*. Heute beschreibt (1.10) das beobachtete Energiespektrum der kosmischen Hintergrundstrahlung mit atemberaubender Präzision.

<sup>3</sup>Es wird sich als sinnvoll erweisen, anstelle der Frequenz  $\nu$  immer die „Kreisfrequenz“  $\omega = 2\pi\nu$  zu verwenden, um später unnötige Faktoren von  $2\pi$  in den Formeln zu vermeiden.

<sup>4</sup>NB:  $e^x - 1 = x + \mathcal{O}(x^2)$ , bzw.  $1/(e^x - 1) = 1/x + \mathcal{O}(x^0)$ .

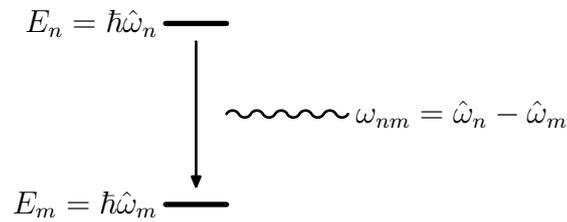


Abbildung 1.1: Abstrahlung eines Photons mit Kreisfrequenz  $\omega_{nm}$  durch atomare Zustandsänderung  $E_n \rightarrow E_m$ .

### 1.1.2 Diskrete Atomspektren

Man beobachtete, daß Atome und Moleküle Licht nur mit diskreten Frequenzen

$$\{\omega_n = 2\pi\nu_n\}_{n=1,2,\dots}$$

absorbieren und emittieren. Dieser Satz von Frequenzen erwies sich darüberhinaus als charakteristisch für Atome und Moleküle. Empirisch fand man außerdem, daß sich alle vorkommenden Frequenzen als Differenzen einer *kleineren* Menge von sogenannten *Termen*  $\{\hat{\omega}_n\}_{n=1,2,\dots}$  schreiben ließen<sup>5</sup>

$$\omega_{nm} = \hat{\omega}_n - \hat{\omega}_m, \quad (1.11)$$

zum Beispiel bei atomarem Wasserstoff

$$\omega_{nm} = \frac{2\pi c}{\lambda_{nm}} = 2\pi c R \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad (1.12)$$

mit der *Rydberg-Konstante*  $R$  und der Lichtgeschwindigkeit im Vakuum  $c$ . Dies legt nahe, die Terme (bis auf eine zu bestimmende Proportionalitätskonstante  $\hbar$ ) als die diskreten Energien

$$\{E_n = \hbar\hat{\omega}_n\}_{n=1,2,\dots}$$

zu interpretieren, zwischen denen ein Atom oder Molekül hin- und herspringen kann.

Eine solche Beschränkung auf diskrete Energien ist in einem klassischen Atommodell mit um einen Kern in Keplerbahnen fliegenden Elektronen *nicht* zu verstehen, weil die Gesamtenergie  $E < 0$  einer gebundenen Bahn durch die Wahl der Anfangsbedingungen kontinuierlich eingestellt werden kann.

<sup>5</sup>Allerdings wurden nicht alle möglichen Differenzen beobachtet.

Im Atommodell von Bohr und Sommerfeld werden ad-hoc Quantisierungsbedingungen an die Keplerellipsen gestellt, z.B. an den Drehimpuls

$$L = n\hbar \quad (n \in \mathbf{N}), \quad (1.13)$$

die in der Tat die Spektren einfacher Atome und Moleküle reproduzieren können. Eine Begründung für diese Quantisierungsbedingungen wird dabei aber nicht gegeben.

### 1.1.3 Stabile Atome

Ohne die Quantisierungsbedingungen kann ein Atommodell mit elektrisch geladenen Elektronen auf Keplerellipsen nicht konsistent sein. Beschleunigte Ladungen strahlen *Bremsstrahlung* ab, die heute z. B. als *Synchrotronstrahlung* in der Untersuchung von Materialien Verwendung findet. Aufgrund der Energieerhaltung müsste also ein Elektron ständig Energie verlieren und schließlich nach wenigen Picosekunden[sic!] in den Kern fallen.

### 1.1.4 Doppelspaltexperiment

Wenn man zwei Lichtstrahlen durch zwei dünne Spalte schickt, beobachtet man ein Interferenzmuster, das verschwindet, sobald einer der Spalte verdeckt wird. Dieses Phänomen kann nicht durch die Addition von Intensitäten, sondern durch *Superposition*

$$I(\vec{x}, t) = |\psi_1(\vec{x}, t) + \psi_2(\vec{x}, t)|^2 = |\psi_1(\vec{x}, t)|^2 + |\psi_2(\vec{x}, t)|^2 + \psi_1^*(\vec{x}, t)\psi_2(\vec{x}, t) + \psi_2^*(\vec{x}, t)\psi_1(\vec{x}, t) \quad (1.14)$$

von Wellen erklärt werden. Betrachte zwei Kugelwellen mit dem Ursprung  $\vec{x}_1$ , bzw.  $\vec{x}_2$

$$\psi_i(\vec{x}, t) = \frac{\sqrt{I_i}}{|\vec{x} - \vec{x}_i|} e^{-i\omega t + ik|\vec{x} - \vec{x}_i| + i\phi_i} \quad (1.15)$$

und wähle Ohne Beschränkung der Allgemeinheit (OBdA) gleiche Intensitäten  $I_1 = I_2 = I_0$

$$I(\vec{x}, t) = \frac{I_0}{|\vec{x} - \vec{x}_1|^2} + \frac{I_0}{|\vec{x} - \vec{x}_2|^2} + \frac{I_0}{|\vec{x} - \vec{x}_1||\vec{x} - \vec{x}_2|} e^{ik|\vec{x} - \vec{x}_2| - ik|\vec{x} - \vec{x}_1| + i(\phi_2 - \phi_1)} + \frac{I_0}{|\vec{x} - \vec{x}_1||\vec{x} - \vec{x}_2|} e^{ik|\vec{x} - \vec{x}_1| - ik|\vec{x} - \vec{x}_2| + i(\phi_1 - \phi_2)}. \quad (1.16)$$

Wenn der Abstand des Schirms von den Spalten viel größer ist als der Abstand der Spalte vom Ursprung des Koordinatensystems, d. h.  $|\vec{x}_i| \ll |\vec{x}| = r$ , dürfen wir entwickeln

$$|\vec{x} - \vec{x}_i| = r - \frac{\vec{x}\vec{x}_i}{r} + \dots \quad (1.17)$$

und finden

$$|\vec{x} - \vec{x}_1| - |\vec{x} - \vec{x}_2| = \frac{\vec{x}(\vec{x}_2 - \vec{x}_1)}{r} + \dots \quad (1.18)$$

Damit vereinfacht sich

$$I(\vec{x}, t) = \frac{2I_0}{r^2} \left( 1 + \cos \left( \frac{k\vec{x}(\vec{x}_2 - \vec{x}_1)}{r} + \phi_1 - \phi_2 \right) \right) + \dots \quad (1.19)$$

und wir erkennen ein Interferenzmuster mit der Wellenlänge

$$\lambda = \frac{r}{k|\vec{x}_2 - \vec{x}_1|}. \quad (1.20)$$

Dieses Experiment diente Thomas Young 1803 zum Nachweis der Wellennatur des sichtbaren Lichts. Im zwanzigsten Jahrhundert wurde dieses Experiment mit Elektronen- und Neutronenstrahlen wiederholt, womit auch der Wellencharakter von Materie bestätigt wurde.

## 1.2 Von der klassischen Physik zur Quantenmechanik

Die **QM** beschreibt Phänomene, die in der klassischen Physik unmöglich sind. Deshalb ist es grundsätzlich *nicht* möglich, die **QM** deduktiv aus der klassischen Physik abzuleiten. Trotzdem muß man sich bei der induktiven Konstruktion der **QM** vergewissern, daß die klassische Physik im fiktiven Grenzfall  $\hbar \rightarrow 0$  für das *Plancksche Wirkungsquantum*

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.0545718 \cdot 10^{-34} \frac{\text{m}^2\text{kg}}{\text{s}} \quad (1.21)$$

aus der **QM** hervorgeht. Durch die stetige Verbesserung der experimentellen Möglichkeiten ist es heute möglich eine Vielzahl von „paradoxen“ Effekten, die die **QM** vorhersagt und die der klassischen Intuition widersprechen zweifelsfrei nachzuweisen.

Die **QM** ist von einer „Lückenbüßerin“, die Schmutzdecke der klassischen Physik verdecken und möglichst bald durch die „richtige“ Theorie abgelöst werden sollte zu einem allgemeingültigen Rahmen der modernen Physik geworden, der bislang *alle* experimentellen Tests bestanden hat.

## —2— QBITS

Wir beginnen mit dem einfachsten Fall, dem Spin des Elektrons. Dieses Beispiel erfordert als mathematisches Werkzeug nur  $2 \times 2$ -Matrizen, beleuchtet aber trotzdem die wichtigsten konzeptionellen Grundlagen der **QM**.

Wegen seiner grundlegenden Bedeutung hat es sich eingebürgert, ein dem Spin des Elektrons äquivalentes System in Analogie zum klassischen *bit* auch als *QBit*, der kleinsten Einheit von Quanteninformation, zu bezeichnen.

Dieses System hat *kein* Analogon in der klassischen Physik und kann nicht als die „Quantisierung“ eines klassischen Systems aufgefasst werden. Erst in den späteren Kapiteln werden wir Systeme betrachten, die durch „Quantisierung“ bekannter klassischer Systeme entstehen: harmonischer Oszillator, Wasserstoffatom (Keplerproblem), etc.

Insbesondere werden wir das Quantensystem zunächst als empirisch gegeben annehmen und erst später die Grenzen der klassischen Beschreibung ausloten.

### 2.1 Stern-Gerlach Experiment für Spin-1/2

Wenn man einen Spinanalysator, z. B. ein inhomogenes Magnetfeld in einem Stern-Gerlach Experiment, entlang der Richtung eines Einheitsvektors  $\vec{n}$  mit  $|\vec{n}| = 1$  ausrichtet, erhält man bei der Messung des Spins des Elektrons<sup>1</sup> eines von nur zwei möglichen Ergebnissen: aufwärts ( $\uparrow$ ) und abwärts ( $\downarrow$ ). Diese Ergebnisse erscheinen mit den Wahrscheinlichkeiten

$$0 \leq p_{\uparrow}(\vec{n}) \leq 1 \quad (2.1a)$$

$$0 \leq p_{\downarrow}(\vec{n}) \leq 1 \quad (2.1b)$$

die

$$p_{\uparrow}(\vec{n}) + p_{\downarrow}(\vec{n}) = 1 \quad (2.1c)$$

---

<sup>1</sup>Oder eines Atoms mit Gesamtspin 1/2.

erfüllen, d. h. man erhält sicher eines der beiden Ergebnisse. Die Werte für diese Wahrscheinlichkeiten hängen davon ab, wie der Spin zuvor präpariert wurde und können ohne weitere Information nicht angegeben, sondern nur gemessen werden. Sofern

$$p_{\uparrow}(\vec{n}) \neq 0 \neq p_{\downarrow}(\vec{n}) \quad (2.2)$$

findet man, daß das Ergebnis einer *einzelnen* Messung nicht deterministisch ist. Die Ergebnisse  $\uparrow$  und  $\downarrow$  erscheinen vielmehr statistisch verteilt.

Wenn man zwei Messungen hintereinander ausführt und der zweite Spinanalysator gegenüber dem ersten gedreht sein kann, wird es interessant: wenn man zunächst den Spin in Richtung  $\vec{n}_1$  als  $\uparrow$  gemessen hat, beobachtet man bei einer weiteren Messung des Spin in Richtung  $\vec{n}_2$  die Ergebnisse  $\uparrow$  und  $\downarrow$  mit den Wahrscheinlichkeiten

$$p_{\uparrow\uparrow}(\vec{n}_2, \vec{n}_1) = \frac{1 + \vec{n}_1 \vec{n}_2}{2} \quad (2.3a)$$

$$p_{\downarrow\uparrow}(\vec{n}_2, \vec{n}_1) = \frac{1 - \vec{n}_1 \vec{n}_2}{2}. \quad (2.3b)$$

Analog beobachtet man die Wahrscheinlichkeiten

$$p_{\uparrow\downarrow}(\vec{n}_2, \vec{n}_1) = \frac{1 - \vec{n}_1 \vec{n}_2}{2} \quad (2.3c)$$

$$p_{\downarrow\downarrow}(\vec{n}_2, \vec{n}_1) = \frac{1 + \vec{n}_1 \vec{n}_2}{2} \quad (2.3d)$$

wenn man zunächst den Spin in Richtung  $\vec{n}_1$  als  $\downarrow$  gemessen hat, aber das folgt mit  $\vec{n} \rightarrow -\vec{n}$  aus den ersten beiden Gleichungen und liefert deshalb keine neue Information.

Vorlesung 02: Mo, 29. 04. 2019

Offensichtlich gilt

$$\forall \vec{n}_1 : p_{\uparrow\uparrow}(\vec{n}_2, \vec{n}_1) + p_{\downarrow\uparrow}(\vec{n}_2, \vec{n}_1) = 1 = p_{\uparrow\downarrow}(\vec{n}_2, \vec{n}_1) + p_{\downarrow\downarrow}(\vec{n}_2, \vec{n}_1), \quad (2.4)$$

d. h. es gibt sicher ein Ergebnis für die zweite Messung, *unabhängig* davon in welcher Richtung der erste Spinanalysator ausrichtet war und wie die erste Messung ausfiel. Das Resultat (2.3) wurde experimentell mit hoher Präzision überprüft, sofern der Spin zwischen den beiden Messungen keiner weiteren Wechselwirkung unterliegt. Deshalb muß es von jeder gültigen Formulierung der **QM** reproduziert werden.

Die Wahrscheinlichkeiten in (2.3) hängen offensichtlich nur vom Winkel  $\theta$

$$\cos \theta = \vec{n}_1 \vec{n}_2 \quad (2.5)$$

ab, um den der Spinanalysator gedreht wurde. Deshalb kann man auch kürzer

$$p_{\uparrow\uparrow}(\theta) = p_{\downarrow\downarrow}(\theta) = \frac{1 + \cos \theta}{2} = \cos^2 \frac{\theta}{2} \quad (2.6a)$$

$$p_{\downarrow\uparrow}(\theta) = p_{\uparrow\downarrow}(\theta) = \frac{1 - \cos \theta}{2} = \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad (2.6b)$$

schreiben. Natürlich gilt weiter  $p_{\uparrow\uparrow}(\theta) + p_{\downarrow\uparrow}(\theta) = 1 = p_{\uparrow\downarrow}(\theta) + p_{\downarrow\downarrow}(\theta)$ . Im Folgenden werden wir insbesondere die Spezialfälle

$$p_{\uparrow\uparrow}(0) = p_{\downarrow\downarrow}(0) = p_{\downarrow\uparrow}(\pi) = p_{\uparrow\downarrow}(\pi) = 1 \quad (2.7a)$$

$$p_{\downarrow\uparrow}(0) = p_{\uparrow\downarrow}(0) = p_{\uparrow\uparrow}(\pi) = p_{\downarrow\downarrow}(\pi) = 0 \quad (2.7b)$$

$$p_{\uparrow\uparrow}(\pi/2) = p_{\downarrow\downarrow}(\pi/2) = p_{\downarrow\uparrow}(\pi/2) = p_{\uparrow\downarrow}(\pi/2) = \frac{1}{2} \quad (2.7c)$$

von (2.6) benötigen.

Wir sehen, daß eine wiederholte Messung in der gleichen Richtung *sicher*, d. h. mit Wahrscheinlichkeit  $p = 1$ , wieder das gleiche Ergebnis liefert. Dementsprechend liefert eine wiederholte Messung mit einem um  $\theta = \pi$  gedrehten Spinanalysator *sicher* das umgekehrte Ergebnis. Wenn wir hingegen den Spinanalysator um  $\theta = \pi/2$  drehen, ist das Ergebnis der zweiten Messung maximal unbestimmt: beide Ergebnisse kommen statistisch verteilt, jeweils mit der gleichen Wahrscheinlichkeit  $p = 1/2$ .

Wenn man den Spinanalysator nicht verdreht, kann man man also sicher sein, daß eine Messung reproduzierbar ist. Wenn man allerdings zuerst in  $z$ -Richtung misst und dann in  $x$ -Richtung, wird das Ergebnis einer anschließenden erneuten Messung in  $z$ -Richtung völlig unbestimmt sein. Eine Messung in  $x$ -Richtung wird also, z. B., den Zustand „ $\uparrow$  in  $z$ -Richtung“ *zerstören* und durch „ $\uparrow$  in  $x$ -Richtung“ oder „ $\downarrow$  in  $x$ -Richtung“ ersetzen. Das steht im Widerspruch zur klassischen Physik, wo jede Messung (im Prinzip) so durchgeführt werden kann, daß sich der Zustand des Systems nicht ändert.

## 2.2 Zustandsvektoren

Nach einer Messung in  $z$ -Richtung kann der Spin in genau zwei Zuständen sein  $|o\rangle$  für „oben“ oder  $|u\rangle$  für „unten“. Wir haben am Beispiel des Doppel-

spaltexperiments gesehen, daß in der Quantenphysik *Interferenz*phänomene eine wichtige Rolle spielen, deshalb müssen wir auch Linearkombinationen

$$|\psi\rangle = \psi_1 |o\rangle + \psi_2 |u\rangle \quad (2.8)$$

mit  $\psi_i \in \mathbf{C}$  als erlaubte Zustände zulassen. Dieses für die QM grundlegende *Superpositionsprinzip* [Dir58] wird nur durch sehr wenige sogenannte *Superauswahlregeln*<sup>2</sup> verletzt, die aber in der QM eines einzelnen Teilchens keine Rolle spielen.

Die Notation  $|\psi\rangle$  für *Zustandsvektoren* wird nach Dirac [Dir58] als „Ket“ bezeichnet. Dies ist ein Wortspiel, das sich erschließt, wenn gleich die konjugierten Zustandsvektoren  $\langle\psi|$  als „Bra“ eingeführt werden, die mit den Kets paarweise „Brackets“  $\langle\phi|\psi\rangle$  bilden können.

### 2.2.1 Hilbertraum

Die mathematische Struktur hinter der QM ist die eines *Vektorraums* mit *sesquilinearem* inneren Produkt, also eines sogenannten *Hilbertraums*  $\mathcal{H}$ . Später werden wir Hilberträume mit vielen, sogar unendlich vielen, Dimensionen kennenlernen und auch zur Beschreibung physikalischer Systeme benötigen. Für die Beschreibung eines Spins genügen aber zwei Dimensionen und wir können viele mathematische Feinheiten ignorieren.

Wir werden weiter unten sehen, daß wir für die Beschreibung der Spins nicht mit reellen Koeffizienten in Linearkombinationen auskommen<sup>3</sup>, deshalb müssen wir einen komplexen Vektorraum  $\mathcal{H}$  betrachten:

$$\begin{aligned} \forall |\psi_i\rangle \in \mathcal{H}, \alpha_i \in \mathbf{C} : \exists_1 |\alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2\rangle \in \mathcal{H} : \\ \alpha_1 |\psi_1\rangle + \alpha_2 |\psi_2\rangle = |\alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2\rangle . \end{aligned} \quad (2.9a)$$

Der Vektorraum wird zum Hilbertraum<sup>4</sup>, wenn ein *sesquilineares* inneres Produkt existiert, also eine Abbildung

$$\begin{aligned} \langle\cdot|\cdot\rangle : \mathcal{H} \times \mathcal{H} \rightarrow \mathbf{C} \\ (|\psi\rangle, |\phi\rangle) \mapsto \langle\psi|\phi\rangle \end{aligned} \quad (2.9b)$$

mit den Eigenschaften  $\forall |\psi_i\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H}, \alpha_i \in \mathbf{C}$ :

$$\langle\phi|\alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2\rangle = \alpha_1 \langle\phi|\psi_1\rangle + \alpha_2 \langle\phi|\psi_2\rangle \quad (2.9c)$$

<sup>2</sup>Z. B. dürfen Zustände verschiedener elektrischer Ladung nicht superponiert werden, ebenso Fermionen und Bosonen.

<sup>3</sup>Ein intuitives Argument dafür ist, daß wir in drei unabhängigen Richtungen messen können, aber immer nur zwei unterscheidbare Zustände finden.

<sup>4</sup>Im Fall von unendlichdimensionalen Hilberträumen müssen wir noch zusätzlich *Vollständigkeit* fordern. Dies werden wir zum gegebenen Zeitpunkt diskutieren.

$$\langle \psi | \phi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle^* \quad (2.9d)$$

$$\langle \psi | \psi \rangle \geq 0 \quad (2.9e)$$

$$\langle \psi | \psi \rangle = 0 \Leftrightarrow |\psi\rangle = 0. \quad (2.9f)$$

Aus der *Linearität* im zweiten Argument (2.9c) folgt mit (2.9d) die *Antilinearität* im ersten Argument

$$\forall |\psi_i\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H}, \alpha_i \in \mathbf{C} : \langle \alpha_1 \psi_1 + \alpha_2 \psi_2 | \phi \rangle = \alpha_1^* \langle \psi_1 | \phi \rangle + \alpha_2^* \langle \psi_2 | \phi \rangle, \quad (2.10)$$

muß also nicht gesondert gefordert werden.

Vektorräume haben eine, nicht eindeutige, *Basis*  $\{|i\rangle\}_{i=1,\dots,N}$  in der beliebige Vektoren *eindeutig* entwickelt werden können

$$\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H} : \exists_1(\psi_1, \dots, \psi_N) \in \mathbf{C}^N : |\psi\rangle = \sum_{i=1}^N \psi_i |i\rangle. \quad (2.11)$$

Die Koeffizienten  $\{\psi_i\}_{i=1,\dots,N}$  werden auch als *Wellenfunktion* bezüglich der Basis  $\{|i\rangle\}_{i=1,\dots,N}$  bezeichnet. Die Zahl  $N = \dim \mathcal{H}$  ist die *Dimension* des Vektorraums  $\mathcal{H}$  und wir können  $\mathcal{H}$  für  $N < \infty$  als äquivalent zu  $\mathbf{C}^N$  betrachten:

$$\mathcal{H} \ni \sum_{i=1}^N \psi_i |i\rangle \cong \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_N \end{pmatrix} \in \mathbf{C}^N. \quad (2.12)$$

In einem Hilbertraum kann die Basis bezüglich des inneren Produktes orthonormiert

$$\langle i | j \rangle = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{für } i = j \\ 0 & \text{für } i \neq j \end{cases} \quad (2.13)$$

gewählt werden. Ab jetzt werden wir immer eine solche *Orthonormalbasis* (*ONB*)<sup>5</sup> wählen. Damit kann das innere Produkt zweier beliebiger Vektoren als

$$\langle \phi | \psi \rangle = \sum_{i=1}^N \phi_i^* \psi_i \quad (2.14)$$

berechnet werden und die Koeffizienten können auch als

$$\psi_i = \langle i | \psi \rangle \quad (2.15)$$

bestimmt werden. Daraus ergibt sich der wichtige Trick „eine *Eins einschieben*“

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^N |i\rangle \psi_i = \sum_{i=1}^N |i\rangle \langle i | \psi \rangle, \quad (2.16)$$

<sup>5</sup>Bzw. eine geeignete Verallgemeinerung für kontinuierliche Indices  $i$  und  $j$ .

d. h. für jede **ONB** wirkt die *Zerlegung der Einheit*

$$\mathbf{1} = \sum_{i=1}^N |i\rangle \langle i| \quad (2.17)$$

wie die identische Abbildung

$$\begin{aligned} \mathbf{1} : \mathcal{H} &\rightarrow \mathcal{H} \\ |\psi\rangle &\mapsto |\psi\rangle \end{aligned} \quad (2.18)$$

und kann überall in Formeln eingefügt werden.

Außerdem findet man für jede lineare Abbildung  $\phi : \mathcal{H} \rightarrow \mathbf{C}$  genau einen Vektor  $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ , sodaß

$$\begin{aligned} \phi : \mathcal{H} &\rightarrow \mathbf{C} \\ |\psi\rangle &\mapsto \phi(|\psi\rangle) = \langle \phi | \psi \rangle \end{aligned} \quad (2.19)$$

gilt<sup>6</sup>. Deshalb betrachten wir diese linearen Abbildungen als *Bra*-Vektoren  $\langle \phi | \in \mathcal{H}^* \cong \mathcal{H}$ . Mit

$$\langle \phi | \psi \rangle = \sum_{i=1}^N \langle \phi | i \rangle \langle i | \psi \rangle = \sum_{i=1}^N \phi_i^* \langle i | \psi \rangle \quad (2.20)$$

können wir jeden Bra-Vektor  $\langle \phi |$

$$\langle \phi | = \sum_{i=1}^N \phi_i^* \langle i | \quad (2.21)$$

in die duale Basis  $\{\langle i | \}_{i=1, \dots, N}$  der Bra-Vektoren mit

$$\langle i | j \rangle = \delta_{ij} \quad (2.22)$$

entwickeln. Im endlichdimensionalen Hilbertraum sind die Kets Spaltenvektoren und die Bras die hermitisch konjugierten Zeilenvektoren.

### 2.2.2 Ein QBit

Im Fall unseres einzelnen Spins können wir als **ONB**, z. B., die Zustände  $|o\rangle$  und  $|u\rangle$ , die der Spin nach der Messung von  $\uparrow$ , bzw.  $\downarrow$ , entlang der  $z$ -Richtung angenommen hat

$$|1\rangle = |o\rangle \quad (2.23a)$$

<sup>6</sup>Das ist das *Darstellungssatz von Riesz*.

$$|2\rangle = |u\rangle \quad (2.23b)$$

wählen. Ein beliebiger normierter Zustandsvektor ist dann

$$|\psi\rangle = \psi_1 |1\rangle + \psi_2 |2\rangle \quad (2.24)$$

mit  $\psi_i \in \mathbf{C}$ . Für die physikalische Interpretation wird die Normierung keine Rolle spielen. Aus diesem Grund wählen wir

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1 \Leftrightarrow |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 = 1. \quad (2.25)$$

In einem allgemeinen Zustand ist die Wahrscheinlichkeit, entlang der  $z$ -Richtung das Ergebnis  $\uparrow$  zu erhalten, umso größer, je „näher“ der Zustandsvektor dem Vektor  $|o\rangle$  ist. Damit die Wahrscheinlichkeiten nicht negativ sind und sich zu 1 addieren, bieten sich die Betragsquadrate der Koeffizienten als Wahrscheinlichkeiten

$$p_{\uparrow}(\vec{e}_3) = |\psi_1|^2 \quad (2.26a)$$

$$p_{\downarrow}(\vec{e}_3) = |\psi_2|^2 \quad (2.26b)$$

an<sup>7</sup>. Wegen  $\psi_i = \langle i|\psi\rangle$  kann man auch

$$\psi_1 = \langle 1|\psi\rangle = \langle o|\psi\rangle \quad (2.28a)$$

$$\psi_2 = \langle 2|\psi\rangle = \langle u|\psi\rangle \quad (2.28b)$$

schreiben und erhält Ausdrücke

$$p_{\uparrow}(\vec{e}_3) = |\langle o|\psi\rangle|^2 \quad (2.29a)$$

$$p_{\downarrow}(\vec{e}_3) = |\langle u|\psi\rangle|^2 \quad (2.29b)$$

die von Wahl der Basis unabhängig sind. Sie hängen nur vom „Überlapp“ des Zustandsvektors  $|\psi\rangle$  mit den Zustandsvektoren  $|o\rangle$  und  $|u\rangle$ , die den Ergebnissen zugeordnet sind, ab.

Wir bemerken, daß eine Phasendrehung des Zustandes

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = e^{i\alpha} |\psi\rangle \quad (2.30)$$

<sup>7</sup>Wenn wir auf die Normierung der Zustandsvektoren verzichten würden, wären die sich zu 1 summierenden Wahrscheinlichkeiten

$$p_{\uparrow}(\vec{e}_3) = \frac{|\psi_1|^2}{|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2} \quad (2.27a)$$

$$p_{\downarrow}(\vec{e}_3) = \frac{|\psi_2|^2}{|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2}. \quad (2.27b)$$

mit  $\alpha \in \mathbf{R}$  die Wahrscheinlichkeiten nicht beeinflusst

$$|\langle n|\psi\rangle|^2 \rightarrow |\langle n|\psi'\rangle|^2 = |e^{i\alpha}\langle n|\psi\rangle|^2 = |\langle n|\psi\rangle|^2. \quad (2.31)$$

Deshalb entspricht der physikalische Zustand strenggenommen nicht einem Zustandsvektor, sondern der Äquivalenzklasse aller normierten Zustandsvektoren, die ich nur um eine Phase unterscheiden. Solche Äquivalenzklassen heißen „*Strahl* im Hilbertraum“. Allerdings ist es gängige Praxis, die Begriffe „Zustand“ und „Zustandsvektor“ synonym zu verwenden, sofern keine Verwirrung aufkommen kann.

Wenn wir den Spinanalysator um  $\pi/2$  in die  $x$ -Richtung drehen<sup>8</sup> (siehe Abb. 2.1), ergeben die Meßergebnisse  $\uparrow$  und  $\downarrow$  Zustände „rechts“  $|r\rangle$  und „links“  $|l\rangle$ , die durch eine Superposition der Basisvektoren  $|1\rangle$  und  $|2\rangle$  darstellbar

$$|r\rangle = r_1 |1\rangle + r_2 |2\rangle \quad (2.32a)$$

$$|l\rangle = l_1 |1\rangle + l_2 |2\rangle. \quad (2.32b)$$

und orthonormiert sein sollen

$$\langle l|l\rangle = \langle r|r\rangle = 1 \quad (2.33a)$$

$$\langle l|r\rangle = 0. \quad (2.33b)$$

Hierbei ergibt sich die Orthogonalität  $\langle l|r\rangle = 0$  aus der Forderung, daß nach einer Messung mit dem Ergebnis  $\uparrow$  in einer zweiten Messung in der gleichen Richtung *nie* das Ergebnis  $\downarrow$  kommen darf<sup>9</sup>.

Wenn wir nach der Messung in  $x$ -Richtung mit einem Spinanalysator in  $z$ -Richtung messen, treten die Resultate  $\uparrow$  und  $\downarrow$  jeweils mit der Wahrscheinlichkeit  $1/2$  ein. Damit ergeben sich für die inneren Produkte die Forderungen

$$|\langle o|l\rangle|^2 = |\langle o|r\rangle|^2 = |\langle u|l\rangle|^2 = |\langle u|r\rangle|^2 = \frac{1}{2} \quad (2.34)$$

und daraus für die Koeffizienten

$$|l_1| = |l_2| = |r_1| = |r_2| = \frac{1}{\sqrt{2}}. \quad (2.35)$$

Eine<sup>10</sup> Lösung ist

$$|r\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |2\rangle \quad (2.36a)$$

<sup>8</sup>Die Herleitung der Zustandsvektoren ist inspiriert von [SF14].

<sup>9</sup>Analog dazu gilt schon  $\langle u|o\rangle = 0$ .

<sup>10</sup>Es gibt viel mehr Paare von Vektoren die die Bedingungen (2.34) erfüllen als (2.36). Wir werden später sehen, warum wir gerade (2.36) ausgewählt haben.

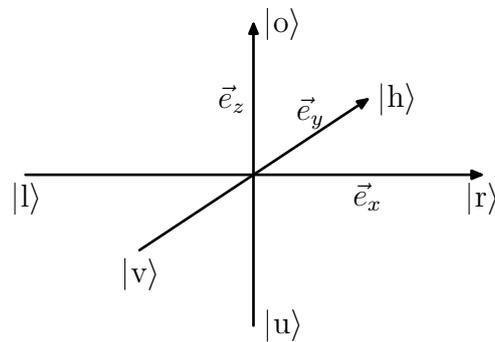


Abbildung 2.1: Einheitsvektoren  $\vec{e}_x = \vec{e}_1$ ,  $\vec{e}_y = \vec{e}_2$ ,  $\vec{e}_z = \vec{e}_3$  und die zugehörigen Zustände für Spinmessungen entlang der Koordinatenachsen.

$$|l\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |2\rangle. \quad (2.36b)$$

Vorlesung 03: Fr, 03.05.2019

Eine Messung in die  $y$ -Richtung (siehe Abb. 2.1) ergibt Zustände „hinten“  $|h\rangle$  oder „vorne“  $|v\rangle$

$$|h\rangle = h_1 |1\rangle + h_2 |2\rangle \quad (2.37a)$$

$$|v\rangle = v_1 |1\rangle + v_2 |2\rangle \quad (2.37b)$$

mit

$$\langle v|v\rangle = \langle h|h\rangle = 1 \quad (2.38a)$$

$$\langle v|h\rangle = 0. \quad (2.38b)$$

Wieder müssen die Ergebnisse von anschließenden Messungen in die beiden anderen Richtungen mit Wahrscheinlichkeit  $1/2$  kommen:

$$|\langle o|v\rangle|^2 = |\langle o|h\rangle|^2 = |\langle u|v\rangle|^2 = |\langle u|h\rangle|^2 = \frac{1}{2} \quad (2.39a)$$

$$|\langle l|v\rangle|^2 = |\langle l|h\rangle|^2 = |\langle r|v\rangle|^2 = |\langle r|h\rangle|^2 = \frac{1}{2} \quad (2.39b)$$

also

$$|v_1| = |v_2| = |h_1| = |h_2| = \frac{1}{\sqrt{2}}. \quad (2.40)$$

Im zweidimensionalen Raum ist es unmöglich, drei reelle Vektoren zu finden, die alle Forderungen an die Wahrscheinlichkeiten erfüllen. Aber es gibt eine Lösung mit komplexen Koeffizienten

$$|h\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}} |2\rangle \quad (2.41a)$$

$$|v\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle - \frac{i}{\sqrt{2}} |2\rangle . \quad (2.41b)$$

Wir würden immer noch alle Bedingungen erfüllen, wenn wir eine der folgenden<sup>11</sup> Permutationen

$$|l\rangle \Leftrightarrow |r\rangle \quad (2.43a)$$

$$|h\rangle \Leftrightarrow |v\rangle \quad (2.43b)$$

$$\{|l\rangle, |r\rangle\} \Leftrightarrow \{|h\rangle, |v\rangle\} \quad (2.43c)$$

der Zustände vornehmen würden. Unsere Wahl ist eine besonders sinnvolle, aber um das zu sehen, müssen wir lernen wie die Zustände zueinander in Beziehung stehen.

### 2.3 Lineare Transformationen und Operatoren

Weil wir mit Zustandsvektoren  $|\psi\rangle$  in Hilberträumen arbeiten, müssen physikalische Transformationen  $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}'$  linear sein

$$\forall |\psi_i\rangle \in \mathcal{H}, \alpha_i \in \mathbf{C} : A(\alpha_1 |\psi_1\rangle + \alpha_2 |\psi_2\rangle) = \alpha_1 A |\psi_1\rangle + \alpha_2 A |\psi_2\rangle . \quad (2.44)$$

Lineare Transformation  $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  des Hilbertraums  $\mathcal{H}$  auf sich selbst werden wir *Operatoren* (auf  $\mathcal{H}$ ) nennen. Für den Operator

$$|\psi'\rangle = A |\psi\rangle \quad (2.45)$$

können wir die Linearität (2.44) und die Existenz einer **ONB** verwenden

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^N \psi_i |i\rangle \quad (2.46a)$$

$$|\psi'\rangle = \sum_{i=1}^N \psi'_i |i\rangle \quad (2.46b)$$

---

<sup>11</sup>Aber *nicht*

$$|l\rangle \Leftrightarrow |h\rangle \quad (2.42)$$

etc.!

mit

$$\psi_i = \langle i | \psi \rangle \quad (2.47a)$$

$$\psi'_i = \langle i | \psi' \rangle, \quad (2.47b)$$

um die Komponenten des transformierten Zustandsvektors zu berechnen

$$\psi'_i = \langle i | \psi' \rangle = \langle i | A | \psi \rangle = \sum_{j=1}^N \langle i | A | j \rangle \langle j | \psi \rangle = \sum_{j=1}^N \langle i | A | j \rangle \psi_j. \quad (2.48)$$

Wir finden also die Wirkung des Operators  $A$  auf die Komponenten eines Zustandsvektors bezüglich einer **ONB** als Matrixmultiplikation

$$\psi'_i = \sum_{j=1}^N A_{ij} \psi_j, \quad (2.49)$$

mit den *Matrixelementen*

$$A_{ij} = \langle i | A | j \rangle \in \mathbf{C}. \quad (2.50)$$

NB: diese Matrixelemente hängen von der Wahl der **ONB** ab, genauso wie die Komponenten eines Zustandsvektors oder die Komponenten eines Vektors im dreidimensionalen Anschauungsraum!

In der umgekehrten Richtung kann man mit der Zerlegung der Einheit (2.17) einen Operator aus seinen Matrixelemente rekonstruieren

$$A = \left( \sum_{i=1}^N |i\rangle \langle i| \right) A \left( \sum_{j=1}^N |j\rangle \langle j| \right) = \sum_{i,j=1}^N |i\rangle \langle i | A | j \rangle \langle j|, \quad (2.51)$$

also

$$A = \sum_{i,j=1}^N |i\rangle A_{ij} \langle j|, \quad (2.52)$$

und sieht, daß das Matrixelement  $A_{ij}$  der „Stärke“ des Übergangs von  $|j\rangle$  nach  $|i\rangle$  in der Anwendung von  $A$  entspricht.

Für alle physikalisch relevanten Operatoren gibt es bevorzugte **ONB**, in denen die Matrixelemente besonders einfach sind. Allerdings sind dies nicht immer die **ONB**, in denen sich ein physikalisches System einfach beschreiben läßt. Die Auflösung dieser Spannung ist das Thema dieser Vorlesung ...

Wenn wir zwei Operatoren  $A$  und  $B$  hintereinander anwenden, finden wir mit der Zerlegung der Einheit (2.17)

$$[AB]_{ij} = \langle i | AB | j \rangle = \sum_{k=1}^N \langle i | A | k \rangle \langle k | B | j \rangle = \sum_{k=1}^N A_{ik} B_{kj} \quad (2.53)$$

das Multiplikationsgesetz für Matrizen.

In unserem zweidimensionalen Beispiel des einzelnen QBit stellt sich die Transformation  $|\psi'\rangle = A|\psi\rangle$  in Komponenten als

$$\begin{pmatrix} \psi'_1 \\ \psi'_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \quad (2.54)$$

dar, bzw. als

$$\psi'_1 = A_{11}\psi_1 + A_{12}\psi_2 \quad (2.55a)$$

$$\psi'_2 = A_{21}\psi_1 + A_{22}\psi_2 \quad (2.55b)$$

mit  $A_{nm} = \langle n|A|m\rangle$ .

### 2.3.1 Selbstdjungierte und unitäre Operatoren, Projektoren

Wir werden in diesem Abschnitt oft die folgende Notation für einen transformierten Zustandsvektor

$$|A\psi\rangle = A|\psi\rangle \quad (2.56)$$

benutzen.

Eine wichtige Klasse von Operatoren sind die *Isometrien*, die die beobachtbaren Matrixelemente, bzw. den beobachtbaren Überlapp von Zustandsvektoren nicht ändern<sup>12</sup>

$$\forall |\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H} : \langle U\psi|U\phi\rangle = \langle \psi|\phi\rangle . \quad (2.57)$$

Diese entsprechen in der klassischen Physik dem Wechsel von Koordinatensystemen, die ebenfalls physikalische Resultate nicht ändern. Eine solche Transformation bildet eine **ONB**

$$\{|i\rangle\}_{i=1,\dots,N} \quad (2.58)$$

auf eine **ONB**

$$\{|i'\rangle = U|i\rangle\}_{i=1,\dots,N} \quad (2.59)$$

ab, weil offensichtlich

$$\langle i'|j'\rangle = \langle i|j\rangle = \delta_{ij} . \quad (2.60)$$

Solche Transformationen wollen wir auch rückgängig machen können und fordern die Existenz eines *inversen* Operators  $U^{-1} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  mit der Eigenschaft

$$U^{-1}U = \mathbf{1} = UU^{-1} . \quad (2.61)$$

<sup>12</sup>Strenggenommen ist nur das Betragsquadrat des Überlapps beobachtbar, aber es gibt ein Theorem von Wigner, das zeigt, daß diese Verallgemeinerung nur im Fall der *Zeitumkehr*  $t \mapsto -t$  etwas wesentlich Neues hinzufügt.

**Weiterführende Bemerkung (nicht Teil der Vorlesung):**

In endlich vielen Dimensionen folgt die Existenz des inversen Operators aus der Isometrie (2.57), aber nicht in unendlichdimensionalen Hilberträumen.

Für die Matrixelemente gilt

$$\sum_{k=1}^N [U^{-1}]_{ik} U_{kj} = \delta_{ij} = \sum_{k=1}^N U_{ik} [U^{-1}]_{kj} \quad (2.62)$$

und die Determinante der Matrix darf nicht verschwinde. Für die  $2 \times 2$ -Matrizen in unserem QBit-Beispiel gibt es eine einfache Formel<sup>13</sup>

$$A^{-1} = \frac{1}{A_{11}A_{22} - A_{12}A_{21}} \begin{pmatrix} A_{22} & -A_{12} \\ -A_{21} & A_{11} \end{pmatrix}, \quad (2.63)$$

die sich leider nicht auf mehr als zwei Dimensionen verallgemeinern lässt.

Invertierbare Isometrien heißen *unitär* und sind eng mit *Symmetrien* verbunden, zum Beispiel dem Wechsel von Koordinatensystemen. Für unser QBit werden die unitären Matrizen durch vier reelle Parameter beschrieben, weil (2.61) vier unabhängigen reellen Bedingungen an die acht reellen Parameter einer komplexen  $2 \times 2$ -Matrix entspricht.

Zu jedem Operator  $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  kann man den *adjungierten Operator*  $A^\dagger : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  mit der Forderung

$$\forall |\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H} : \langle \psi | A^\dagger | \phi \rangle = \langle A\psi | \phi \rangle = \langle \phi | A\psi \rangle^* = \langle \phi | A | \psi \rangle^* \quad (2.64)$$

definieren.

**Weiterführende Bemerkung (nicht Teil der Vorlesung):**

Diese Definition ist in unendlichdimensionalen Hilberträumen in manchen Fällen mit mathematischen Fallstricken versehen, was uns aber zunächst nicht stören soll.

Für die Matrixelemente gilt einfach

$$[A^\dagger]_{ij} = \langle i | A^\dagger | j \rangle = \langle j | A | i \rangle^* = A_{ji}^*, \quad (2.65)$$

also ist dem adjungierten Operator die *hermitisch konjugierte Matrix* (transponiert und komplex konjugiert) zugeordnet. Weil die Gleichung in (2.64) für alle  $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$  gelten soll, kann man in Rechnungen auch

$$\langle \psi | A^\dagger = \langle A\psi | \quad (2.66)$$

<sup>13</sup>NB:  $\det A = A_{11}A_{22} - A_{12}A_{21}$ !

benutzen. Mit dem Begriff des adjungierten Operators kann man die Forderung an unitäre Operatoren auch als

$$\forall |\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H} : \langle U\psi|U\phi\rangle = \langle \psi|U^\dagger U|\phi\rangle = \langle \psi|\phi\rangle \quad (2.67)$$

schreiben, also

$$U^\dagger U = \mathbf{1} = U U^\dagger \quad (2.68)$$

bzw.

$$U^\dagger = U^{-1}. \quad (2.69)$$

Eine zweite wichtige Klasse von Operatoren auf  $\mathcal{H}$  sind die *selbstadjungierten* Operatoren mit

$$A^\dagger = A, \quad (2.70)$$

die wir bald mit physikalischen *Observablen* identifizieren werden. Die zugehörigen Matrizen sind hermitisch

$$A_{ij} = A_{ji}^*. \quad (2.71)$$

Für unser QBit heißt das

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} + ib_{12} \\ a_{12} - ib_{12} & a_{22} \end{pmatrix} \quad (2.72)$$

mit vier reellen Parametern  $a_{11}$ ,  $a_{12}$ ,  $a_{22}$  und  $b_{12}$ .

Schließlich gibt es noch die Klasse der *Projektionsoperatoren*, bzw. *Projektoren*  $P : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ . Diese erfüllen

$$P^2 = P \quad (2.73)$$

und triviale Beispiele sind die identische Abbildung  $\mathbf{1}$  und die Abbildung  $\mathbf{0} : |\psi\rangle \mapsto 0$ . Wenn  $P$  selbstadjungiert ist  $P = P^\dagger$ , ist  $P$  eine *orthogonale Projektion*. Nichttriviale Beispiele sind

$$P_\psi = |\psi\rangle \langle \psi|, \quad (2.74)$$

für einen normierten Zustandsvektor  $|\psi\rangle$ . Wenn  $P_1 P_2 = P_2 P_1 = 0$  gilt (d. h.  $P_1$  und  $P_2$  auf zueinander orthogonale Teilräume projizieren), ist auch die Summe zweier Projektionen wieder eine orthogonale Projektion

$$(P_1 + P_2)^2 = P_1^2 + P_1 P_2 + P_2 P_1 + P_2^2 = P_1 + P_2. \quad (2.75)$$

### 2.3.2 Eigenwerte, Eigenvektoren, Spektralsatz

Jeder Operator  $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  auf einem endlichdimensionalen<sup>14</sup> Hilbertraum  $\mathcal{H}$  hat mindestens einen (nichtverschwindenden) *Eigenvektor*  $|a\rangle \in \mathcal{H}$  mit zugehörigem *Eigenwert*  $a \in \mathbb{C}$

$$A |a\rangle = a |a\rangle . \quad (2.76)$$

Wenn der Operator invertierbar ist, dann gilt

$$|a\rangle = A^{-1} A |a\rangle = A^{-1} a |a\rangle = a A^{-1} |a\rangle , \quad (2.77)$$

also

$$A^{-1} |a\rangle = \frac{1}{a} |a\rangle \quad (2.78)$$

und wir sehen, daß kein Eigenwert eines invertierbaren Operators verschwinden darf.

**OBdA** können wir im Folgenden annehmen, daß  $|a\rangle$  normiert ist:  $\langle a|a\rangle = 1$ . Dann gilt sowohl

$$\langle a|A|a\rangle = a \langle a|a\rangle = a , \quad (2.79)$$

als auch<sup>15</sup>

$$\langle a|A^\dagger|a\rangle = \langle a|A|a\rangle^* = (a \langle a|a\rangle)^* = a^* . \quad (2.82)$$

Deshalb müssen alle Eigenwerte selbstadjungierter Operatoren  $A = A^\dagger$  reell sein.

Für unitäre Operatoren gilt

$$\langle u|u\rangle = \langle Uu|Uu\rangle = \langle u|u^*u|u\rangle = u^*u \langle u|u\rangle \quad (2.83)$$

also  $u^*u = 1$  und alle Eigenwerte von unitären Operatoren liegen in der komplexen Ebene auf dem Einheitskreis.

Seien  $|a_1\rangle$  und  $|a_2\rangle$  zwei Eigenvektoren von  $A$  mit zugehörigen Eigenwerten  $a_1$  und  $a_2$

$$A |a_i\rangle = a_i |a_i\rangle \quad (i \in \{1, 2\}) . \quad (2.84)$$

<sup>14</sup>Die Ausnahmen im unendlichdimensionalen Fall werden für uns nicht wichtig sein.

<sup>15</sup>NB: es gilt *nicht notwendig* auch

$$A^\dagger |a\rangle = a^* |a\rangle , \quad (2.80)$$

d. h.  $|a\rangle$  ist *nicht notwendig* auch ein Eigenvektor zum adjungierten Operator  $A^\dagger$ ! Wir können nur

$$\langle a|A^\dagger = \langle Aa| = a^* \langle a| \quad (2.81)$$

schreiben.

Dann gilt für selbstadjungierte  $A = A^\dagger$

$$a_1 \langle a_1 | a_2 \rangle = a_1^* \langle a_1 | a_2 \rangle = \langle A a_1 | a_2 \rangle = \langle a_1 | A | a_2 \rangle = a_2 \langle a_1 | a_2 \rangle \quad (2.85)$$

also

$$a_1 \neq a_2 \implies \langle a_1 | a_2 \rangle = 0. \quad (2.86)$$

Für unitäre  $A^\dagger A = \mathbf{1} = A A^\dagger$  gilt

$$a_1^* a_2 \langle a_1 | a_2 \rangle = \langle a_1 | A^\dagger A | a_2 \rangle = \langle A a_1 | A a_2 \rangle = \langle a_1 | a_2 \rangle \quad (2.87)$$

also

$$a_1^* a_2 = \frac{a_2}{a_1} \neq 1 \implies \langle a_1 | a_2 \rangle = 0. \quad (2.88)$$

D. h. sowohl bei selbstadjungierten, als auch bei unitären Operatoren sind die Eigenvektoren zu unterschiedlichen Eigenwerten paarweise aufeinander orthogonal.

Man kann außerdem zeigen, daß die Menge aller Eigenvektoren eines selbstadjungierten oder unitären Operators<sup>16</sup> eine Basis bilden, die orthonormiert gewählt werden kann. Im Falle von *entarteten* Eigenwerten, d. h. Eigenvektoren mit dem gleichen Eigenwert müssen dazu die Eigenvektoren von Hand orthogonal gemacht werden<sup>17</sup>. In Formeln heißt das

$$\mathbf{1} = \sum_{i=1}^N |a_i\rangle \langle a_i| \quad (2.90a)$$

$$A |a_i\rangle = a_i |a_i\rangle \quad (i = 1, \dots, N) \quad (2.90b)$$

und daraus folgt

$$A = \sum_{i,j=1}^N |a_i\rangle \underbrace{\langle a_i | A | a_j \rangle}_{= a_i \delta_{ij}} \langle a_j| = \sum_{i=1}^N |a_i\rangle a_i \langle a_i|. \quad (2.91)$$

Wir find also für jeden selbstadjungierten oder unitären Operator  $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  immer eine **ONB** in der dieser Operator *diagonal* ist

$$A = \sum_{i=1}^N |a_i\rangle a_i \langle a_i|. \quad (2.92)$$

<sup>16</sup>Dies gilt sogar für alle sogenannte *normale Operatoren* mit

$$A A^\dagger = A^\dagger A \quad (2.89)$$

von denen selbstadjungierte und unitäre Operatoren Spezialfälle darstellen.

<sup>17</sup>Im Fall von entarteten Eigenvektoren sollte man für die Eigenvektoren  $|i\rangle$  statt  $|a_i\rangle$  schreiben, um Mißverständnisse zu vermeiden, wenn  $a_i = a_j$  für  $i \neq j$ .

Alle interessanten quantenmechanischen Effekte rühren daher, daß diese Basis für verschiedene Operatoren im Allgemeinen unterschiedlich ist.

Wenn wir, z. B., die hermiteschen *Pauli-Matrizen*

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.93a)$$

$$\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (2.93b)$$

$$\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.93c)$$

betrachten, können wir ihnen mit

$$\sigma_k = \sum_{i,j=1}^2 |i\rangle [\sigma_k]_{ij} \langle j| \quad (2.94)$$

zuordnen, also

$$\sigma_1 = |1\rangle \langle 2| + |2\rangle \langle 1| \quad (2.95a)$$

$$\sigma_2 = i |2\rangle \langle 1| - i |1\rangle \langle 2| \quad (2.95b)$$

$$\sigma_3 = |1\rangle \langle 1| - |2\rangle \langle 2|, \quad (2.95c)$$

bzw.

$$\sigma_3 |1\rangle = |1\rangle \quad (2.96a)$$

$$\sigma_3 |2\rangle = -|2\rangle \quad (2.96b)$$

usw. NB: in (2.93) stehen die  $\sigma_i$  für  $2 \times 2$ -Matrizen und in (2.95) werden die gleichen Symbole für die entsprechenden Operatoren  $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  benutzt. In dieser Vorlesung wird darauf verzichtet, solche Unterschiede durch umständliche Notation zu verdeutlichen, sofern aus dem Kontext ersichtlich ist, welche Objekte gemeint sind.

Wir finden als vollständige orthogonale Sätze von Eigenvektoren und Eigenwerte für  $\sigma_1$

$$\sigma_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = + \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.97a)$$

$$\sigma_1 \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad (2.97b)$$

für  $\sigma_2$

$$\sigma_2 \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} = + \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \quad (2.98a)$$

$$\sigma_2 \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \quad (2.98b)$$

und  $\sigma_3$

$$\sigma_3 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = + \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.99a)$$

$$\sigma_3 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} . \quad (2.99b)$$

Die Eigenwerte  $\pm 1$  sind in allen Fällen gleich, aber die Eigenvektoren unterscheiden sich. Wir bemerken, daß die Eigenvektoren von  $\sigma_1$  den Koordinaten der Zustände  $|r\rangle$  und  $|l\rangle$  entsprechen, die von  $\sigma_2$  denen von  $|h\rangle$  und  $|v\rangle$  und schließlich die von  $\sigma_3$  denen von  $|o\rangle$  und  $|u\rangle$ . Es liegt deshalb nahe, die gemessenen Zustände den Eigenvektoren der Operatoren zuzuordnen

$$\sigma_1 |r\rangle = + |r\rangle \quad (2.100a)$$

$$\sigma_1 |l\rangle = - |l\rangle \quad (2.100b)$$

$$\sigma_2 |h\rangle = + |h\rangle \quad (2.100c)$$

$$\sigma_2 |v\rangle = - |v\rangle \quad (2.100d)$$

$$\sigma_3 |o\rangle = + |o\rangle \quad (2.100e)$$

$$\sigma_3 |u\rangle = - |u\rangle . \quad (2.100f)$$

### 2.3.3 Exponentialfunktion und andere Funktionen

Vorlesung 04: Mo, 06. 05. 2019

Wir werden oft Funktionen von Operatoren verwenden müssen. Für Potenzen und Polynome

$$p(A) = \sum_{m=0}^M \alpha_m A^m \quad (2.101)$$

ist die Definition durch Mehrfachausführung

$$A^0 = \mathbf{1} \quad (2.102a)$$

$$A^m = AA^{m-1} = A^{m-1}A \quad (2.102b)$$

und Linearkombination

$$(\alpha_1 A_1 + \alpha_2 A_2) |\psi\rangle = \alpha_1 A_1 |\psi\rangle + \alpha_2 A_2 |\psi\rangle \quad (2.103)$$

offensichtlich. Wenn der Operator in Diagonalgestalt vorliegt

$$A = \sum_{i=1}^N |a_i\rangle a_i \langle a_i| , \quad (2.104)$$

kann man ebenfalls sehr leicht eine beliebige Funktion definieren

$$f(A) = \sum_{i=1}^N |a_i\rangle f(a_i) \langle a_i| , \quad (2.105)$$

sofern die Funktion für *alle* Eigenwerte definiert ist. Z.B. kann man die Funktion  $f : x \rightarrow 1/x$  nur für invertierbare Operatoren definieren, die keinen verschwindenden Eigenwert haben.

Schließlich kann man noch versuchen, Funktionen über Ihre Potenzreihe zu definieren, z. B. die Exponentialfunktion

$$e^A = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} A^n , \quad (2.106)$$

muß sich aber gegebenenfalls Gedanken über die Konvergenz der Reihe machen. Diese ist jedoch bei analytischen Funktionen von endlichdimensionalen Matrizen immer gegeben.

## 2.4 Rotationen

Im vorhergehenden Abschnitt konnten wir die Zustände des QBit nach Messung entlang der Koordinatenachsen als Eigenvektoren der Pauli-Matrizen (2.93) identifizieren. Uns fehlt aber noch die Begründung, warum wir die Zustände genau so den Koordinatenachsen zugeordnet haben und keine der Permutationen in (2.43) vorgenommen haben. Außerdem haben wir noch keine Möglichkeit Messungen zu beschreiben, die nicht entlang einer der Koordinatenachsen durchgeführt werden.

### 2.4.1 $\theta = \pm\pi/2$

Zu diesem Zweck betrachten wir zunächst sechs unitäre  $2 \times 2$ -Matrizen (bzw. die zugeordneten Operatoren  $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ )

$$U_1(\pm\pi/2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & \mp i \\ \mp i & 1 \end{pmatrix} \quad (2.107a)$$

$$U_2(\pm\pi/2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & \mp 1 \\ \pm 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.107b)$$

$$U_3(\pm\pi/2) = \begin{pmatrix} e^{\mp i\pi/4} & 0 \\ 0 & e^{\pm i\pi/4} \end{pmatrix}, \quad (2.107c)$$

mit den leicht zu überprüfenden Eigenschaften

$$U_n^\dagger(\pm\pi/2) = U_n^{-1}(\pm\pi/2) = U_n(\mp\pi/2) \quad (2.108a)$$

$$(U_n(\pm\pi/2))^4 = -\mathbf{1}. \quad (2.108b)$$

Es ist eine einfache Aufgabe die Relationen

$$U_1(\pi/2)U_2(\pm\pi/2)U_1(-\pi/2) = U_3(\pm\pi/2) \quad (2.109a)$$

$$U_2(\pi/2)U_3(\pm\pi/2)U_2(-\pi/2) = U_1(\pm\pi/2) \quad (2.109b)$$

$$U_3(\pi/2)U_1(\pm\pi/2)U_3(-\pi/2) = U_2(\pm\pi/2) \quad (2.109c)$$

durch Multiplikation von  $2 \times 2$ -Matrizen zu überprüfen. Mit (2.108a) ergeben sich aus (2.109a-c) noch die weiteren Relationen

$$U_2(\pi/2)U_1(\pm\pi/2)U_2(-\pi/2) = U_3(\mp\pi/2) \quad (2.109d)$$

$$U_3(\pi/2)U_2(\pm\pi/2)U_3(-\pi/2) = U_1(\mp\pi/2) \quad (2.109e)$$

$$U_1(\pi/2)U_3(\pm\pi/2)U_1(-\pi/2) = U_2(\mp\pi/2) \quad (2.109f)$$

und

$$U_1(-\pi/2)U_2(\pm\pi/2)U_1(\pi/2) = U_3(\mp\pi/2) \quad (2.109g)$$

$$U_2(-\pi/2)U_3(\pm\pi/2)U_2(\pi/2) = U_1(\mp\pi/2) \quad (2.109h)$$

$$U_3(-\pi/2)U_1(\pm\pi/2)U_3(\pi/2) = U_2(\mp\pi/2) \quad (2.109i)$$

$$U_2(-\pi/2)U_1(\pm\pi/2)U_2(\pi/2) = U_3(\pm\pi/2) \quad (2.109j)$$

$$U_3(-\pi/2)U_2(\pm\pi/2)U_3(\pi/2) = U_1(\pm\pi/2) \quad (2.109k)$$

$$U_1(-\pi/2)U_3(\pm\pi/2)U_1(\pi/2) = U_2(\pm\pi/2). \quad (2.109l)$$

Alle Gleichungen (2.109) können auch als

$\forall \theta \in \{-\pi/2, +\pi/2\}$  :

$$U_i(\pm\pi/2)U_j(\theta)U_i(\mp\pi/2) = \delta_{ij}U_j(\theta) + \sum_{k=1}^3 |\epsilon_{ijk}| U_k(\pm\epsilon_{ijk}\theta). \quad (2.110)$$

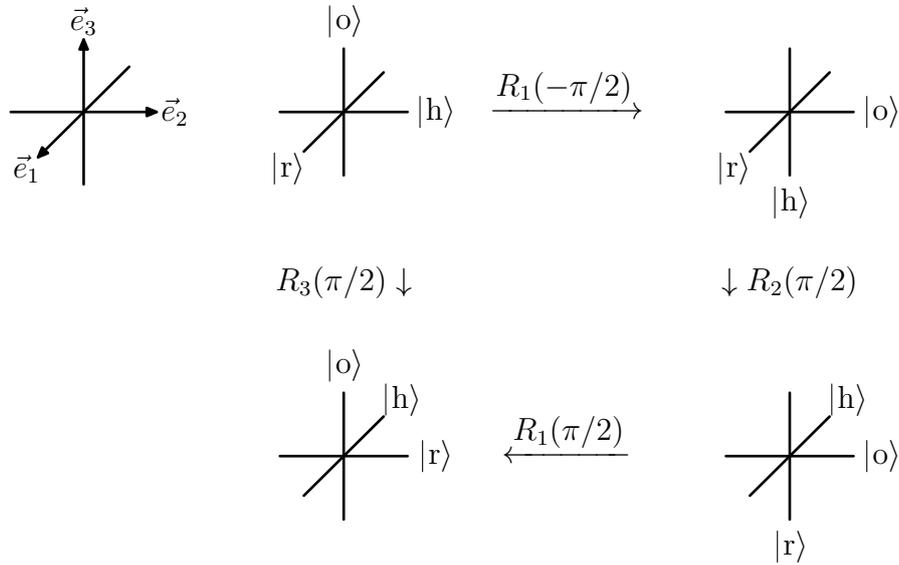


Abbildung 2.2: Äquivalenz der Hintereinanderausführung von drei Rotationen wie in (2.109a). NB: im Gegensatz zur Definition der Eulerwinkel (siehe z. B. [Ohl17]) werden die Rotationsachsen nicht mitrotiert, sondern bleiben raumfest!

zusammengefasst werden<sup>18</sup>, wenn man das total antisymmetrische  $\epsilon$ -Symbol benutzt

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & \text{für } (i, j, k) \text{ gerade Permutation von } (1, 2, 3) \\ -1 & \text{für } (i, j, k) \text{ ungerade Permutation von } (1, 2, 3) \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.111)$$

Die Bedeutung dieser Relationen erschließt sich, wenn man in Abbildung 2.2 zunächst eine Drehung um die  $\vec{e}_1$ -Achse um den Winkel  $-\pi/2$ , dann um die  $\vec{e}_2$ -Achse um den Winkel  $+\pi/2$  und schließlich wieder um die  $\vec{e}_1$ -Achse um den Winkel  $+\pi/2$  durchführt. Das gleiche Ergebnis erhält man, wenn man nur eine Drehung um die  $\vec{e}_3$ -Achse um den Winkel  $+\pi/2$  durchführt. In Formeln heißt das

$$R_1(\pi/2)R_2(\pi/2)R_1(-\pi/2) = R_3(\pi/2), \quad (2.112a)$$

und entspricht exakt dem ersten Fall von (2.109a), wenn man die orthogonalen Drehmatrizen  $R_n(\theta)$  durch die unitären Matrizen  $U_n(\theta)$  ersetzt. Durch

<sup>18</sup>In der Druckfassung des Skripts ist die rechte Seite von (2.110) leider falsch als  $\delta_{ij}U_j(\theta) + (1 - \delta_{ij}) \sum_{k=1}^3 U_k(\pm\epsilon_{ijk}\theta)$  angegeben.

Umkehrung von Pfeilen unter Verwendung von  $(R_n(\pm\pi/2))^{-1} = R_n(\mp\pi/2)$  können aus diesem Diagramm auch

$$R_1(\pi/2)R_2(-\pi/2)R_1(-\pi/2) = R_3(-\pi/2) \quad (2.112b)$$

$$R_1(-\pi/2)R_3(\pi/2)R_1(\pi/2) = R_2(\pi/2) \quad (2.112c)$$

$$R_1(-\pi/2)R_3(-\pi/2)R_1(\pi/2) = R_2(-\pi/2), \quad (2.112d)$$

also die Analoga des zweiten Falls von (2.109a) und der beiden Fälle von (??), abgelesen werden.

Wir finden also, daß sich die Matrix  $U_n(\pm\pi/2)$  *genauso verhält wie* eine Drehung um die Koordinatenachse  $\vec{e}_n$  mit dem Winkel  $\pm\pi/2$ . Die Äquivalenz der anderen Beziehungen in (2.109a) zu Drehungen kann durch entsprechende Überlegungen gezeigt werden. Wenn sich in der Quantenphysik ein Objekt *genauso verhält wie* ein anderes Objekt, können wir die beiden Objekte *nicht* unterscheiden. Wir dürfen also die  $U_n(\pm\pi/2)$  benutzen, um unsere Zustände zu drehen. Wegen der Unitarität der  $U_n(\pm\pi/2)$  ändern sich dabei die Wahrscheinlichkeiten nicht, wenn wir den Spinanalysator genauso drehen wie die Zustände. Tabelle 2.1 zeigt, daß die Operatoren  $U_n(\pm\pi/2)$  auf unsere Zustände wie Rotationen wirken und legitimiert unsere Zuordnung der Zustände zu den Messungen entlang der Koordinatenachse. Die auftretenden Phasen können nicht durch eine geschicktere Multiplikation der Zustände mit Phasenfaktoren eliminiert werden.

Einen Unterschied gibt es aber doch: vier Drehungen um  $\pi/2$  hintereinanderausgeführt ergeben eine Drehung um  $2\pi$  und sollten den Zustand nicht ändern. In Gleichung (2.108b) haben wir bereits gesehen, daß der entsprechende Operator

$$U_n(2\pi) = (U_n(\pi/2))^4 = -\mathbf{1} \quad (2.113)$$

	$ r\rangle$	$ l\rangle$	$ h\rangle$	$ v\rangle$	$ o\rangle$	$ u\rangle$
$U_1(\pi/2)$	$e^{-i\pi/4}  r\rangle$	$e^{i\pi/4}  l\rangle$	$ o\rangle$	$-i  u\rangle$	$ v\rangle$	$-i  h\rangle$
$U_1(-\pi/2)$	$e^{i\pi/4}  r\rangle$	$e^{-i\pi/4}  l\rangle$	$i  u\rangle$	$ o\rangle$	$ h\rangle$	$i  v\rangle$
$U_2(\pi/2)$	$ u\rangle$	$ o\rangle$	$e^{-i\pi/4}  h\rangle$	$e^{i\pi/4}  v\rangle$	$ r\rangle$	$-  l\rangle$
$U_2(-\pi/2)$	$ o\rangle$	$-  u\rangle$	$e^{i\pi/4}  h\rangle$	$e^{-i\pi/4}  v\rangle$	$ l\rangle$	$ r\rangle$
$U_3(\pi/2)$	$e^{-i\pi/4}  h\rangle$	$e^{-i\pi/4}  v\rangle$	$e^{-i\pi/4}  l\rangle$	$e^{-i\pi/4}  r\rangle$	$e^{-i\pi/4}  o\rangle$	$e^{i\pi/4}  u\rangle$
$U_3(-\pi/2)$	$e^{i\pi/4}  v\rangle$	$e^{i\pi/4}  h\rangle$	$e^{i\pi/4}  r\rangle$	$e^{i\pi/4}  l\rangle$	$e^{i\pi/4}  o\rangle$	$e^{-i\pi/4}  u\rangle$

Tabelle 2.1: Drehungen um rechte Winkel  $|\psi'\rangle = U_n(\pm\pi/2) |\psi\rangle$ .

das Vorzeichen der Zustände ändert. Ein solches Verhalten ist in der klassischen Physik nicht möglich, aber in der Quantenphysik. Für ein einzelnes QBit hat es keine beobachtbaren Konsequenzen, weil die Wahrscheinlichkeiten als Betragsquadrate berechnet werden. In Interferenzeffekte mit Neutronen wurde der Vorzeichenwechsel aber experimentell beständig.

### 2.4.2 $\theta \neq \pm\pi/2$

Betrachte die  $2 \times 2$ -Matrizen

$$U_n(\theta) = e^{-i\theta\sigma_n/2}. \quad (2.114)$$

Mit

$$(\sigma_n)^2 = \mathbf{1} \quad (2.115)$$

folgt für jede natürliche Zahl  $m$

$$(\sigma_n)^{2m} = \mathbf{1} \quad (2.116a)$$

$$(\sigma_n)^{2m+1} = \sigma_n \quad (2.116b)$$

und damit kann man die Potenzreihe der Exponentialfunktion aufsummieren

$$U_n(\theta) = \cos \frac{\theta}{2} \cdot \mathbf{1} - i \sin \frac{\theta}{2} \cdot \sigma_n, \quad (2.117)$$

also

$$U_1(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & -i \sin \frac{\theta}{2} \\ -i \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (2.118a)$$

$$U_2(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & -\sin \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (2.118b)$$

$$U_3(\theta) = \begin{pmatrix} e^{-i\theta/2} & 0 \\ 0 & e^{i\theta/2} \end{pmatrix}. \quad (2.118c)$$

Mit

$$\sin \left( \pm \frac{\pi}{4} \right) = \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (2.119a)$$

$$\cos \left( \pm \frac{\pi}{4} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (2.119b)$$

folgt außerdem

$$U_n(\pm\pi/2) = \frac{\mathbf{1} \mp i\sigma_n}{\sqrt{2}}, \quad (2.120)$$

also genau (2.107). Außerdem kann man leicht zeigen, daß

$$U_n(\theta)U_n(\theta') = U_n(\theta + \theta'). \quad (2.121)$$

Folglich eignen sich die  $U_n(\theta)$  als Interpolation der Rotationsoperation zwischen  $\mathbf{1} = U_n(0)$  und  $U_n(\pm\pi/2)$ .

Damit findet man für den Überlapp zwischen dem Zustandsvektor  $|o\rangle$  und dem um die  $\vec{e}_n$ -Achse um den Winkel  $\theta$  gedrehten Zustandsvektor  $U_n(\theta)|o\rangle$

$$\langle o|U_1(\theta)|o\rangle = \langle o|U_2(\theta)|o\rangle = \cos \frac{\theta}{2} \quad (2.122a)$$

$$\langle o|U_3(\theta)|o\rangle = \cos \frac{\theta}{2} - i \sin \frac{\theta}{2} = e^{-i\theta/2} \quad (2.122b)$$

und somit

$$|\langle o|U_1(\theta)|o\rangle|^2 = |\langle o|U_2(\theta)|o\rangle|^2 = \cos^2 \frac{\theta}{2} \quad (2.123a)$$

$$|\langle o|U_3(\theta)|o\rangle|^2 = 1 \quad (2.123b)$$

im Einklang mit den experimentellen Ergebnissen.

Wenn wir die Ausrichtung des Spinanalysators in einer beliebigen Richtung durch eine Einheitsvektor mit den üblichen Kugelkoordinaten

$$\vec{n} = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta) \quad (2.124)$$

beschreiben, können wir diese Ausrichtung aus der Lage  $|o\rangle$ , bzw.  $\vec{e}_3$ , durch die Abfolge einer Rotation um die  $y$ -Achse um den Winkel  $\theta$  und einer anschließenden um  $z$ -Achse um den Winkel  $\phi$  erreichen

$$\begin{aligned} U_3(\phi)U_2(\theta) &= \begin{pmatrix} e^{-i\phi/2} & 0 \\ 0 & e^{i\phi/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & -\sin \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} e^{-i\phi/2} \cos \frac{\theta}{2} & -e^{-i\phi/2} \sin \frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi/2} \sin \frac{\theta}{2} & e^{i\phi/2} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.125)$$

Damit erhalten wir die orthonormalen Zustände  $\uparrow$  und  $\downarrow$  entlang dieser Richtung

$$|\uparrow, \theta, \phi\rangle = U_3(\phi)U_2(\theta)|o\rangle = e^{-i\phi/2} \cos \frac{\theta}{2} |1\rangle + e^{i\phi/2} \sin \frac{\theta}{2} |2\rangle \quad (2.126a)$$

$$|\downarrow, \theta, \phi\rangle = U_3(\phi)U_2(\theta)|u\rangle = -e^{-i\phi/2} \sin \frac{\theta}{2} |1\rangle + e^{i\phi/2} \cos \frac{\theta}{2} |2\rangle \quad (2.126b)$$

mit

$$\langle \uparrow, \theta, \phi | \uparrow, \theta, \phi \rangle = \langle \downarrow, \theta, \phi | \downarrow, \theta, \phi \rangle = 1 \quad (2.127a)$$

$$\langle \uparrow, \theta, \phi | \downarrow, \theta, \phi \rangle = 0. \quad (2.127b)$$

## 2.5 Projektoren, Observable und Erwartungswerte

Vorlesung 05: Fr, 10.05.2019

Die Zustände  $|\uparrow, \theta, \phi\rangle$  und  $|\downarrow, \theta, \phi\rangle$  in (2.126) sind Eigenzustände von Operatoren, die eine einfache physikalische Interpretation haben.

Jeder normierte Zustandsvektor  $|\psi\rangle$  ist ein Eigenvektor des Projektionsoperators

$$P_\psi = |\psi\rangle \langle\psi| \quad (2.128)$$

mit Eigenwert +1:

$$P_\psi |\psi\rangle = |\psi\rangle \langle\psi|\psi\rangle = |\psi\rangle . \quad (2.129)$$

Jeder zu  $|\psi\rangle$  orthogonale Zustandsvektor  $|\phi\rangle$  ist ebenfalls Eigenvektor von  $P_\psi$ , aber zum Eigenwert 0:

$$P_\psi |\phi\rangle = |\psi\rangle \langle\psi|\phi\rangle = 0 . \quad (2.130)$$

Ebenso können wir die Operatoren

$$O_{\psi,\alpha,\beta} = \alpha \mathbf{1} + \beta |\psi\rangle \langle\psi| \quad (2.131)$$

betrachten und finden

$$O_{\psi,\alpha,\beta} |\psi\rangle = (\alpha + \beta) |\psi\rangle \quad (2.132a)$$

$$O_{\psi,\alpha,\beta} |\phi\rangle = \alpha |\phi\rangle \quad (2.132b)$$

daß die Zustandsvektoren Eigenvektoren bleiben und wir die Eigenwerte durch geeignete Wahl von  $\alpha$  und  $\beta$  anpassen können. Z. B. hat

$$O_\psi = 2 |\psi\rangle \langle\psi| - \mathbf{1} \quad (2.133)$$

die Eigenwerte  $\pm 1$ , analog zu den Pauli-Matrizen. In einer **ONB** mit

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^N \psi_i |i\rangle \quad (2.134)$$

gilt

$$P_\psi = \sum_{i,j=1}^N |i\rangle \psi_i \psi_j^* \langle j| , \quad (2.135)$$

also ist die zugeordnete Matrix das äußere Produkt

$$P_\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_N \end{pmatrix} \otimes (\psi_1^* \quad \dots \quad \psi_N^*) = \begin{pmatrix} \psi_1 \psi_1^* & \psi_1 \psi_2^* & \dots & \psi_1 \psi_N^* \\ \psi_2 \psi_1^* & \psi_2 \psi_2^* & \dots & \psi_2 \psi_N^* \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_N \psi_1^* & \psi_N \psi_2^* & \dots & \psi_N \psi_N^* \end{pmatrix} \quad (2.136)$$

mit der Notation

$$[a \otimes b]_{ij} = a_i b_j \quad (2.137)$$

und den Matrixelementen

$$\langle i | P_\psi | j \rangle = \psi_i \psi_j^* . \quad (2.138)$$

Wenn wir darauf verzichten, den Operator und die zugehörige Matrix in unserer ONB  $|1\rangle, |2\rangle$  zu unterscheiden, können wir

$$\begin{aligned} P_{\uparrow, \theta, \phi} &= |\uparrow, \theta, \phi\rangle \langle \uparrow, \theta, \phi| = \begin{pmatrix} e^{-i\phi/2} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi/2} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} e^{i\phi/2} \cos \frac{\theta}{2} & e^{-i\phi/2} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos^2 \frac{\theta}{2} & e^{-i\phi} \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} & \sin^2 \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \cos \theta & e^{-i\phi} \sin \theta \\ e^{i\phi} \sin \theta & 1 - \cos \theta \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \cos \theta & \sin \theta \cos \phi - i \sin \theta \sin \phi \\ \sin \theta \cos \phi + i \sin \theta \sin \phi & 1 - \cos \theta \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} (\mathbf{1} + \sin \theta \cos \phi \sigma_1 + \sin \theta \sin \phi \sigma_2 + \cos \theta \sigma_3) \quad (2.139) \end{aligned}$$

schreiben, wobei, wie schon in (2.6), die Identitäten

$$\cos^2 \frac{\theta}{2} = \frac{1 + \cos \theta}{2} \quad (2.140a)$$

$$\sin^2 \frac{\theta}{2} = \frac{1 - \cos \theta}{2} \quad (2.140b)$$

$$\sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} = \frac{\sin \theta}{2} \quad (2.140c)$$

verwendet wurden. Analog folgt

$$\begin{aligned} P_{\downarrow, \theta, \phi} &= |\downarrow, \theta, \phi\rangle \langle \downarrow, \theta, \phi| = \begin{pmatrix} -e^{-i\phi/2} \sin \frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi/2} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} -e^{i\phi/2} \sin \frac{\theta}{2} & e^{-i\phi/2} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \sin^2 \frac{\theta}{2} & -e^{-i\phi} \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} \\ -e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} & \cos^2 \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 - \cos \theta & -e^{-i\phi} \sin \theta \\ -e^{i\phi} \sin \theta & 1 + \cos \theta \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} (\mathbf{1} - \sin \theta \cos \phi \sigma_1 - \sin \theta \sin \phi \sigma_2 - \cos \theta \sigma_3) . \quad (2.141) \end{aligned}$$

Wenn man die  $2 \times 2$  =Matrix

$$P(\vec{n}) = \frac{1}{2} (\mathbf{1} + \vec{n} \vec{\sigma}) . \quad (2.142)$$

mit dem Einheitsvektor  $\vec{n}$  in Kugelkoordinaten (2.124) ausdrückt, findet man

$$P_{\uparrow, \theta, \phi} = P(\vec{n}) \quad (2.143a)$$

$$P_{\downarrow,\theta,\phi} = P(-\vec{n}). \quad (2.143b)$$

Damit sieht man, daß

$$\Sigma(\vec{n}) = \vec{n}\vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \cos \theta & e^{-i\phi} \sin \theta \\ e^{i\phi} \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \quad (2.144)$$

der Operator ist, dessen Eigenvektoren zu den Eigenwerten  $\pm 1$  die Zustandsvektoren nach einer Messung des Spins in Richtung  $\vec{n}$  sind. Weil die normierten Eigenvektoren eine **ONB** bilden und alle Eigenwerte reell sind, muß der Operator selbstadjungiert sein

$$\Sigma(\vec{n}) = \Sigma^\dagger(\vec{n}), \quad (2.145)$$

was dadurch gewährleistet ist, daß alle Pauli-Matrizen hermitisch

$$\sigma_n = \sigma_n^\dagger \quad (2.146)$$

und die Komponenten von  $\vec{n}$  reell sind.

Aus diesen Überlegungen ergibt sich folgendes allgemeine Bild für die Beschreibung einer Messung in der Quantenphysik

1. Die Zustände eines physikalischen Systems werden durch Vektoren in einem Hilbertraum  $\mathcal{H}$  beschrieben.
2. Jeder möglichen Messung ist ein selbstadjungierter Operator  $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  zugeordnet, den wir auch *Observable* nennen.
3. Jedes mögliche Ergebnis einer Messung ist ein Eigenwert der Observablen.
4. Nach der Messung befindet sich das System in einem Eigenzustand, der zur dem gemessenen Eigenwert<sup>19</sup> gehört. Diesen Vorgang nennt man „*Kollaps der Wellenfunktion*“.
5. Die Wahrscheinlichkeit, den Eigenwert zu messen, ist das Betragsquadrat des Überlapps der Zustände vor und nach der Messung.

Diese pragmatische Beschreibung erlaubt es, Rechnungen durchzuführen und Vorhersagen zu machen, die im Experiment überprüft werden können. Sie verzichtet darauf, zu erklären, wie der Kollaps der Wellenfunktion im Meßprozeß im Detail abläuft. Es wird nur das Ergebniss der Messung beschrieben.

<sup>19</sup>Wenn der Eigenwert *entartet* ist, also mehr als ein Eigenvektor zu ihm gehört, wird der Zustand auf den von diesen Vektoren aufgespannten Unterraum projiziert.

Diese Interpretation der QM wird deshalb auch die „*shut-up-and-calculate-Interpretation*“ genannt.

Als selbstadjungierter Operator kann *jede* Observable in Diagonalgestalt

$$A = \sum_{i=1}^N |a_i\rangle a_i \langle a_i| \quad (2.147a)$$

mit

$$\mathbf{1} = \sum_{i=1}^N |a_i\rangle \langle a_i| \quad (2.147b)$$

gebracht werden. Wenn wir den *Erwartungswert* von  $A$  in einem Zustand  $|\phi\rangle$  berechnen

$$\langle \phi|A|\phi\rangle = \sum_{i=1}^N \langle \phi|a_i\rangle a_i \langle a_i|\phi\rangle = \sum_{i=1}^N a_i |\langle a_i|\phi\rangle|^2 = \sum_{i=1}^N a_i p_i, \quad (2.148)$$

finden wir die Summe der möglichen Ergebnisse einer Messung der Observablen  $A$ , gewichtet mit der Wahrscheinlichkeit ihres Auftretens im Zustand  $|\psi\rangle$ . Also ist der quantenmechanische Erwartungswert gleich dem statistischen Erwartungswert für Messungen der Observable  $A$  in einem System im Zustand  $|\phi\rangle$

$$\langle \phi|A|\phi\rangle = E_\phi(A). \quad (2.149)$$

NB: der Erwartungswert *hängt* nicht davon ab, in welcher Basis er berechnet wird. Wir haben die Eigenbasis der Observablen nur gewählt, um die physikalische Interpretation zu liefern!

Für die Observable  $\mathbf{1}$ , die nur 1 als Eigenwert hat und deshalb bei jeder Messung in jedem Zustand immer das Ergebnis 1 liefert, muß der Erwartungswert auch 1 sein. In der Tat

$$E_\phi(\mathbf{1}) = \langle \phi|\mathbf{1}|\phi\rangle = \langle \phi|\phi\rangle = 1 \quad (2.150)$$

aufgrund der Normierung der Zustandsvektoren.

In Falle unseres QBit finden wir für eine Spinmessung in Richtung  $\vec{n}$  im Zustand  $|o\rangle$  den Erwartungswert

$$E_o(\Sigma(\vec{n})) = \langle o|\vec{n}\vec{\sigma}|o\rangle = \cos\theta, \quad (2.151)$$

im Zustand  $|u\rangle$

$$E_u(\Sigma(\vec{n})) = \langle u|\vec{n}\vec{\sigma}|u\rangle = -\cos\theta \quad (2.152)$$

und im Zustand  $|r\rangle$

$$\begin{aligned}
E_r(\Sigma(\vec{n})) &= \langle r | \vec{n} \vec{\sigma} | r \rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ e^{i\phi} \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{2} (e^{-i\phi} \sin \theta + e^{i\phi} \sin \theta) = \cos \phi \sin \theta = \vec{n} \vec{e}_1, \quad (2.153)
\end{aligned}$$

also immer die Projektion der Richtung auf die dem Zustand entsprechende Koordinatenachse.

Man kann den Erwartungswert auch auf eine andere Art ausdrücken, die im nächsten Abschnitt eine wichtige Verallgemeinerung erlauben wird. Durch Einschließen einer Eins finden wir

$$\begin{aligned}
E_\psi(A) &= \langle \psi | A | \psi \rangle = \sum_{i=1}^N \langle \psi | A | i \rangle \langle i | \psi \rangle = \sum_{i=1}^N \langle i | \psi \rangle \langle \psi | A | i \rangle \\
&= \sum_{i=1}^N \langle i | P_\psi A | i \rangle = \text{tr}(P_\psi A) \quad (2.154)
\end{aligned}$$

mit der *Spur* eines Operators

$$\text{tr}(A) = \sum_{i=1}^N \langle i | A | i \rangle = \sum_{i=1}^N A_{ii}, \quad (2.155)$$

also der Summe der Elemente auf der Diagonalen der Matrix des Operators. Die Spur hängt nicht von der Basis ab in der sie berechnet wird

$$\begin{aligned}
\text{tr}(A) &= \sum_{i=1}^N \langle \psi_i | A | \psi_i \rangle = \sum_{i,j,k=1}^N \langle \psi_i | \phi_j \rangle \langle \phi_j | A | \phi_k \rangle \langle \phi_k | \psi_i \rangle \\
&= \sum_{i,j,k=1}^N \langle \phi_j | A | \phi_k \rangle \langle \phi_k | \psi_i \rangle \langle \psi_i | \phi_j \rangle \\
&= \sum_{j,k=1}^N \langle \phi_j | A | \phi_k \rangle \underbrace{\langle \phi_k | \phi_j \rangle}_{=\delta_{kj}} = \sum_{j=1}^N \langle \phi_j | A | \phi_j \rangle \quad (2.156)
\end{aligned}$$

und man kann sich leicht davon überzeugen, daß man Produkte von Operatoren unter der Spur *zyklisch*<sup>20</sup> vertauschen darf

$$\text{tr}(ABC) = \text{tr}(BCA). \quad (2.157)$$

<sup>20</sup>Aber im Allgemeinen nicht paarweise  $\text{tr}(ABC) \neq \text{tr}(BAC)$ !

Vorlesung 06: Fr, 17.05.2019

Insbesondere gilt also

$$E_\psi(A) = \text{tr}(P_\psi A) = \text{tr}(AP_\psi). \quad (2.158)$$

Außerdem haben wir wieder

$$E_\psi(\mathbf{1}) = \text{tr}(P_\psi) = \sum_{i=1}^N \langle i|\psi\rangle \langle \psi|i\rangle = \sum_{i=1}^N \langle \psi|i\rangle \langle i|\psi\rangle = \langle \psi|\psi\rangle = 1 \quad (2.159)$$

und wir merken uns, daß die Spur einer Projektion auf einen eindimensionalen Unterraum 1 ist.

Für unser QBit haben wir gesehen daß

$$P(\vec{n}) = \frac{1}{2}(\mathbf{1} + \vec{n}\vec{\sigma}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + n_3 & n_1 - in_2 \\ n_1 + in_2 & 1 - n_3 \end{pmatrix} \quad (2.160)$$

der Projektionsoperator auf den Zustand ist in dem das System nach der Messung in Richtung  $\vec{n}$  mit dem Ergebnis  $\uparrow$  befindet. Als Observable für die Messung in Richtung  $\vec{n}'$  haben wir

$$\Sigma(\vec{n}') = \vec{n}'\vec{\sigma} = \begin{pmatrix} n'_3 & n'_1 - in'_2 \\ n'_1 + in'_2 & -n'_3 \end{pmatrix} \quad (2.161)$$

identifiziert. Damit erhalten wir als Erwartungswert

$$\begin{aligned} E_{\uparrow, \vec{n}}(\Sigma(\vec{n}')) &= \text{tr}(\Sigma(\vec{n}')P(\vec{n})) = \\ &= \frac{1}{2} \text{tr} \begin{pmatrix} n'_3(1 + n_3) + (n'_1 - in'_2)(n_1 + in_2) & \dots \\ \dots & (n'_1 + in'_2)(n_1 - in_2) - n'_3(1 - n_3) \end{pmatrix} \\ &= \vec{n}'\vec{n}, \quad (2.162) \end{aligned}$$

also wieder den Cosinus des Winkels zwischen den Richtungen  $\vec{n}$  und  $\vec{n}'$ . Die Berechnung der Spur kann man sich sehr vereinfachen, wenn man ihre Linearität

$$\text{tr}(\alpha_1 A_1 + \alpha_2 A_2) = \alpha_1 \text{tr} A_1 + \alpha_2 \text{tr} A_2 \quad (2.163)$$

ausnutzt, zusammen mit den Relationen

$$\text{tr}(\mathbf{1}) = 2 \quad (2.164a)$$

$$\text{tr}(\sigma_i) = 0 \quad (2.164b)$$

$$\text{tr}(\sigma_i \sigma_j) = 2\delta_{ij}. \quad (2.164c)$$

Damit erhält man wieder

$$\begin{aligned} E_{\uparrow, \vec{n}} \left( \Sigma(\vec{n}') \right) &= \frac{1}{2} \operatorname{tr} \left( (\vec{n}'\vec{\sigma})(\mathbf{1} + \vec{n}\vec{\sigma}) \right) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 n'_i \underbrace{\operatorname{tr}(\sigma_i)}_{=0} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 n'_i n_j \underbrace{\operatorname{tr}(\sigma_i \sigma_j)}_{=2\delta_{ij}} = \vec{n}'\vec{n}. \end{aligned} \quad (2.165)$$

Auf die gleiche Weise finden wir für die Wahrscheinlichkeit, das System im Zustand  $|\phi\rangle$  zu messen, wenn es zuvor per Messung im Zustand  $|\psi\rangle$  präpariert wurde

$$p_\phi = |\langle \phi | \psi \rangle|^2 = \langle \psi | \phi \rangle \langle \phi | \psi \rangle = \langle \phi | P_\psi | \phi \rangle = E_\phi(P_\psi) = \operatorname{tr}(P_\phi P_\psi) = \operatorname{tr}(P_\psi P_\phi), \quad (2.166)$$

also den Erwartungswert des Projektionsoperators auf den Zustand nach der Messung im Zustand vor der Messung. Das ist nicht überraschend, weil diese Wahrscheinlichkeit gerade der Erwartungswert für die Observable ist, die den Wert 1 annimmt, wenn das Ereignis eintritt und 0 sonst.

In unserem QBit ergibt sich damit wieder

$$\begin{aligned} E_{\uparrow, \vec{n}} \left( P(\vec{n}') \right) &= \operatorname{tr} \left( P(\vec{n}') P(\vec{n}) \right) = \frac{1}{4} \operatorname{tr} \left( (\mathbf{1} + \vec{n}'\vec{\sigma})(\mathbf{1} + \vec{n}\vec{\sigma}) \right) \\ &= \frac{1}{2} + \frac{\vec{n}'\vec{n}}{2} = \frac{1}{2} + \frac{\cos \theta}{2} = \cos^2 \frac{\theta}{2}. \end{aligned} \quad (2.167)$$

## 2.6 Bloch-Sphäre

Im vorausgehenden Kapitel haben wir gesehen, daß wir den Zustand eines Quantensystems eindeutig durch den zugehörigen Projektionsoperator

$$P_\psi = |\psi\rangle \langle \psi| \quad (2.168)$$

charakterisieren können, aus dem wir durch Spurbildung die Erwartungswerte von Observablen  $A$  und die Wahrscheinlichkeit von Messergebnissen die als Eigenwerte zu einem Eigenvektor  $|\phi\rangle$  gehören berechnen können

$$E_\psi(A) = \operatorname{tr}(P_\psi A) \quad (2.169a)$$

$$|\langle \phi | \psi \rangle|^2 = \operatorname{tr}(P_\psi P_\phi). \quad (2.169b)$$

Diese Formulierung hat den Vorteil, daß unbeobachtbare Phasendrehungen

$$|\psi\rangle \mapsto |\psi'\rangle = e^{i\alpha} |\psi\rangle \quad (2.170)$$

aus den Formeln verschwinden

$$P_\psi \mapsto P_{\psi'} = |\psi'\rangle \langle \psi'| = e^{i\alpha} |\psi\rangle \langle \psi| e^{-i\alpha} = |\psi\rangle \langle \psi| = P_\psi. \quad (2.171)$$

Der Zustand des QBits ist durch zwei komplexe Zahlen charakterisiert

$$|\psi\rangle = \psi_1 |1\rangle + \psi_2 |2\rangle, \quad (2.172)$$

die als normiert angenommen werden können

$$|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 = 1, \quad (2.173)$$

sodaß drei unabhängige reelle Parameter verbleiben. Eine *globale* Phasendrehung

$$(\psi_1, \psi_2) \mapsto (e^{i\alpha}\psi_1, e^{i\alpha}\psi_2) \quad (2.174)$$

ist nicht beobachtbar, sodaß nur noch zwei unabhängige reelle Parameter verbleiben. Dies entspricht genau den beiden Winkeln  $\theta$  und  $\phi$  mit denen man die Richtung des Einheitsvektors  $\vec{n}$  in

$$P(\vec{n}) = |\uparrow, \vec{n}\rangle \langle \uparrow, \vec{n}| = |\uparrow, \theta, \phi\rangle \langle \uparrow, \theta, \phi| \quad (2.175)$$

festlegen kann. Somit stehen die physikalischen Zustände des QBit in einem eins-zu-eins-Zusammenhang mit den Punkten auf der Oberfläche der Einheitskugel, die in diesem Fall auch „*Bloch-Sphäre*“ genannt wird.

Leider gibt es keine schöne Verallgemeinerung dieser geometrisch anschaulichen Konstruktion für kompliziertere Systeme. . .

## 2.7 Dynamik<sup>21</sup>

Bislang haben wir noch nicht besprochen, wie sich der Zustand eines Quantensystem mit der Zeit ändert

$$|\psi(t_0)\rangle \rightarrow |\psi(t)\rangle, \quad (2.176)$$

wenn keine Messungen durchgeführt werden. Aufgrund der linearen Struktur des Zustandsraums  $\mathcal{H}$  sollte diese Zeitentwicklung durch einen *linearen Zeitentwicklungsoperator*  $U(t, t_0)$  beschrieben werden

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle. \quad (2.177)$$

---

<sup>21</sup>Dieser Abschnitt wurde zur besseren Synchronisation mit den Übungen relativ zum gedruckten Skript vorgezogen.

Weil  $\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle$  der Erwartungswert der Observablen  $\mathbf{1}$  ist, die bei jeder Messung das Ergebnis 1 ergibt,

$$\forall t \geq t_0 : \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = 1 \quad (2.178)$$

gelten. Allgemeiner, damit experimentell unterscheidbare Zustände unterscheidbar bleiben, muß eine **ONB** aus Eigenzuständen einer Observablen  $A$  zu allen Zeiten eine **ONB** bleiben<sup>22</sup>

$$\langle \psi_i(t) | \psi_j(t) \rangle = \langle \psi_i(t_0) | \psi_j(t_0) \rangle = \delta_{ij} . \quad (2.179)$$

D. h.

$$\forall |\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H} : \langle U(t, t_0)\phi | U(t, t_0)\psi \rangle = \langle \phi | U^\dagger(t, t_0)U(t, t_0) | \psi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle \quad (2.180)$$

bzw.  $U(t, t_0)$  ist *unitär*

$$U^\dagger(t, t_0)U(t, t_0) = \mathbf{1} = U(t, t_0)U^\dagger(t, t_0) . \quad (2.181)$$

Wenn das System *autonom* ist, d. h. keinen äußeren Einflüssen ausgesetzt ist, sollte der Zeitentwicklungsoperator  $U(t, t_0)$  nur von der Differenz  $t - t_0$  der Zeiten abhängen. Wir können dann

$$U(t, t_0) = e^{-iH(t-t_0)/\hbar} \quad (2.182)$$

schreiben, wobei uns noch unbestimmte Konstante  $\hbar$  die Freiheit geben wird, die Dimensionen anzupassen. Offensichtlich gelten

$$U^{-1}(t, t_0) = e^{iH(t-t_0)/\hbar} \quad (2.183a)$$

$$U^\dagger(t, t_0) = e^{iH^\dagger(t-t_0)/\hbar} \quad (2.183b)$$

und die Unitarität von  $U(t, t_0)$  impliziert, daß  $H$  selbstadjungiert sein muß

$$H = H^\dagger . \quad (2.184)$$

Außerdem finden wir, daß  $U(t, t_0)$  die Schrödinger-Gleichung erfüllt

$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t, t_0) = HU(t, t_0) \quad (2.185a)$$

$$U(t_0, t_0) = \mathbf{1} , \quad (2.185b)$$

---

<sup>22</sup>Diese Forderung gilt nur für das Gesamtsystem und wird evtl. verletzt, sobald wir, z. B., zulassen, daß ein Atom ein Photon abstrahlt, das anschließend nicht mehr beobachtet wird.

ebenso wie  $|\psi(t)\rangle$

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle . \quad (2.186)$$

Es zeigt sich, daß wenn wir  $\hbar$  als das durch  $2\pi$  geteilte *Plancksche Wirkungsquantum* annehmen

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.0545718 \cdot 10^{-34} \frac{\text{m}^2\text{kg}}{\text{s}} , \quad (2.187)$$

dann ist der *Hamiltonoperator*  $H$  die Observable, die der Energie des Systems entspricht.

Für unser QBit kann die **SG** für den Zustand

$$|\psi(t)\rangle = |1\rangle \langle 1|\psi(t)\rangle + |2\rangle \langle 2|\psi(t)\rangle = \psi_1(t) |1\rangle + \psi_2(t) |2\rangle \quad (2.188)$$

auch als System zweier Gewöhnliche Differentialgleichung (**ODE**)

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \psi_1(t) \\ \psi_2(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1(t) \\ \psi_2(t) \end{pmatrix} , \quad (2.189)$$

bzw.

$$i\hbar \frac{d\psi_1}{dt}(t) = H_{11}\psi_1(t) + H_{12}\psi_2(t) \quad (2.190a)$$

$$i\hbar \frac{d\psi_2}{dt}(t) = H_{21}\psi_1(t) + H_{22}\psi_2(t) , \quad (2.190b)$$

mit

$$H_{11} = \langle 1|H|1\rangle = \langle 1|H|1\rangle^* = H_{11}^* \quad (2.191a)$$

$$H_{22} = \langle 2|H|2\rangle = \langle 2|H|2\rangle^* = H_{22}^* \quad (2.191b)$$

$$H_{21} = \langle 2|H|1\rangle = \langle 1|H|2\rangle^* = H_{12}^* \quad (2.191c)$$

geschrieben werden.

Wenn sich das System in einem Eigenzustand des Hamiltonoperators

$$H |E\rangle = E |E\rangle \quad (2.192)$$

befindet, ist die Lösung der **SG**

$$i\hbar \frac{d}{dt} |E(t)\rangle = H |E(t)\rangle = E |E(t)\rangle \quad (2.193)$$

trivial

$$|E(t)\rangle = e^{-iE(t-t_0)/\hbar} |E(t_0)\rangle \quad (2.194)$$

und Phase  $e^{-iE(t-t_0)/\hbar}$ , die den Zustand des Gesamtsystems multipliziert, ist nicht beobachtbar.

Die zeitliche Änderung des Erwartungswerts einer Observablen  $A$ <sup>23</sup>

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle &= \left( i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \right) A | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | A \left( i\hbar \frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle \right) \\ &= - \langle \psi(t) | HA | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | AH | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t) | [A, H] | \psi(t) \rangle \end{aligned} \quad (2.198)$$

mit dem *Kommutator* zweier Operatoren  $A, B : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$

$$[A, B] = AB - BA \quad (2.199)$$

das *Ehrenfest Theorem*

$$\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle = \left\langle \psi(t) \left| \frac{1}{i\hbar} [A, H] \right| \psi(t) \right\rangle. \quad (2.200)$$

Eine der Konsequenzen ist, daß sich der Erwartungswert einer Observablen dann ändern kann, wenn die Observable *nicht* mit dem Hamiltonoperator vertauscht. Folglich sind die Erwartungswerte von Observablen die mit dem Hamiltonoperator vertauschen *Erhaltungsgrößen*.

Weil der Hamiltonoperator natürlich mit sich selbst vertauscht, sehen wir, daß sein Erwartungswert in einem *beliebigen* Zustand eines autonomen Systems konstant ist

$$\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | H | \psi(t) \rangle = 0. \quad (2.201)$$

*A priori* ist der Hamiltonoperator eines physikalischen Systems *nicht* bekannt und muß iterativ durch Ansetzen eines Modellhamiltonoperators, Lösung der **SG** und Vergleich der Vorhersagen mit experimentellen Resultaten verfeinert werden. Bei der Wahl des richtigen Ansatzes und der Richtung der Verfeinerung helfen Symmetrieprinzipien: Rotationsinvarianz, Ladungserhaltung, etc.

---

<sup>23</sup>NB:

$$\frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle = \frac{1}{i\hbar} H | \psi(t) \rangle \quad (2.195)$$

und deshalb

$$\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | = \langle \psi(t) | H^\dagger \left( \frac{1}{i\hbar} \right)^* = - \langle \psi(t) | H \frac{1}{i\hbar} \quad (2.196)$$

oder

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | = - \langle \psi(t) | H. \quad (2.197)$$

In vielen Fällen kann der richtige Hamiltonoperator auch durch ein *Korrespondenzprinzip* aus der klassischen Theorie geraten werden. Aber man muß bedenken, daß es Systeme ohne klassisches Analogon gibt (z. B. Spin) und daß es Beispiele für *Anomalien* gibt, in denen klassische Symmetrien in der Quantentheorie nicht realisiert werden können.

### 2.7.1 Spinpräzession

Vorlesung 07: Mo, 20. 05. 2019

Mögen sich die Energien der beiden Zustände  $|o\rangle = |1\rangle$  und  $|u\rangle = |2\rangle$  um  $\Delta E$  unterscheiden

$$H = E + \frac{\Delta E}{2}\sigma_3 = \begin{pmatrix} E + \Delta E/2 & 0 \\ 0 & E - \Delta E/2 \end{pmatrix} \quad (2.202)$$

mit

$$H |1\rangle = (E + \Delta E/2) |1\rangle \quad (2.203a)$$

$$H |2\rangle = (E - \Delta E/2) |2\rangle . \quad (2.203b)$$

Wir können  $E = 0$  durch geschickte Wahl des Nullpunkts der Energieskala erreichen. In dieser Basis ist die Lösung der **SG** dann

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi_1(t) = \frac{\Delta E}{2} \psi_1(t) \quad (2.204a)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi_2(t) = -\frac{\Delta E}{2} \psi_2(t) \quad (2.204b)$$

trivial

$$\psi(t) = e^{-i\Delta Et/(2\hbar)} \psi_1 |1\rangle + e^{i\Delta Et/(2\hbar)} \psi_2 |2\rangle \quad (2.205)$$

mit der Wahl  $t_0 = 0$  und  $\psi_i = \psi_i(0)$ . Analog kann man

$$U(t, 0) = e^{-i\Delta Et\sigma_3/(2\hbar)} \quad (2.206)$$

schreiben. Die Zeitentwicklung des Erwartungswerts der Pauli-Matrizen bekommt man am schnellsten aus dem Ehrenfest-Theorem (2.200)

$$\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \sigma_n | \psi(t) \rangle = \frac{\Delta E}{2} \left\langle \psi(t) \left| \frac{1}{i\hbar} [\sigma_n, \sigma_3] \right| \psi(t) \right\rangle . \quad (2.207)$$

also

$$\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \sigma_1 | \psi(t) \rangle = -\frac{\Delta E}{\hbar} \langle \psi(t) | \sigma_2 | \psi(t) \rangle \quad (2.208a)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \sigma_2 | \psi(t) \rangle = \frac{\Delta E}{\hbar} \langle \psi(t) | \sigma_1 | \psi(t) \rangle \quad (2.208b)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \sigma_3 | \psi(t) \rangle = 0 \quad (2.208c)$$

mit der Lösung

$$\langle \psi(t) | \sigma_1 | \psi(t) \rangle = \cos \frac{\Delta E t}{\hbar} \langle \psi | \sigma_1 | \psi \rangle - \sin \frac{\Delta E t}{\hbar} \langle \psi | \sigma_2 | \psi \rangle \quad (2.209a)$$

$$\langle \psi(t) | \sigma_2 | \psi(t) \rangle = \cos \frac{\Delta E t}{\hbar} \langle \psi | \sigma_2 | \psi \rangle + \sin \frac{\Delta E t}{\hbar} \langle \psi | \sigma_1 | \psi \rangle \quad (2.209b)$$

$$\langle \psi(t) | \sigma_3 | \psi(t) \rangle = \langle \psi | \sigma_3 | \psi \rangle . \quad (2.209c)$$

Wir sehen daß die Aufspaltung der Energien entlang der  $z$ -Achse dazu führt, daß der Erwartungswert in dieser Richtung konstant ist und in der Ebene senkrecht dazu mit der Frequenz  $\Delta E/\hbar$  rotiert.

Im Fall des QBits ist der Hamiltonoperator (2.202) bis auf die Wahl des Koordinatensystems schon der allgemeine Fall: der Hamiltonoperator ist selbstadjungiert und es gibt also eine ONB in der er diagonal ist. Wir können dann unser Koordinatensystem so legen, daß die beiden Basiszustände den Zuständen  $|o\rangle$  und  $|u\rangle$  entsprechen.

## 2.8 Reine und gemischte Zustände

Bislang haben wir angenommen, daß sich das Quantensystem nach einer Messung in einem eindeutigen Zustand befindet. Das ist nicht immer so, z. B. weil keine Messung gemacht wurde oder weil das Messergebnis nicht abgelesen wurde. Diese Unbestimmtheit ist eine völlig andere als die irreduzible Unbestimmtheit aus der quantenmechanischen Messung, weil man sie durch eine Messung, bzw. eine genauere Messung, reduzieren und im Prinzip sogar ganz eliminieren könnte.

Man bezeichnet sie als *statistische Mischung* von Zuständen, die einen völlig andere Natur hat als die Superposition der QM. Angenommen, wir wissen, daß sich das System mit der Wahrscheinlichkeit  $p_1$  im Zustand  $|\psi_1\rangle$  befindet und mit der Wahrscheinlichkeit  $p_2 = 1 - p_1$  im Zustand  $|\psi_2\rangle$ . Diese gemischten Zustand nennen wir  $\rho$ . Dann ist der Erwartungswert einer Observablen  $A$  das mit den Wahrscheinlichkeiten gewichtete Mittel der Erwartungswerte in den beiden Zustände

$$\begin{aligned} E_\rho(A) &= p_1 \langle \psi_1 | A | \psi_1 \rangle + p_2 \langle \psi_2 | A | \psi_2 \rangle \\ &= p_1 \text{tr}(A P_1) + p_2 \text{tr}(A P_2) = p_1 E_1(A) + p_2 E_2(A) \end{aligned} \quad (2.210)$$

und die Wahrscheinlichkeit, daß das System nach der Messung im Eigenzustand  $\phi$  der Observable  $A$  sein wird und der zugehörige Eigenvektor gemessen wird ist analog

$$p_\phi = p_1 |\langle \phi | \psi_1 \rangle|^2 + p_2 |\langle \phi | \psi_2 \rangle|^2 = p_1 \text{tr}(P_\phi P_1) + p_2 \text{tr}(P_\phi P_2). \quad (2.211)$$

Beide Resultate für das statistische Gemisch zweier Zustände werden durch die *Dichtematrix*

$$\rho = p_1 P_1 + p_2 P_2 = p_1 |\psi_1\rangle \langle \psi_1| + p_2 |\psi_2\rangle \langle \psi_2| \quad (2.212)$$

mit

$$E_\rho(A) = \text{tr}(\rho A) = \text{tr}(A \rho) \quad (2.213a)$$

$$p_\phi = \text{tr}(\rho P_\phi) = \text{tr}(P_\phi \rho) = \langle \phi | \rho | \phi \rangle \quad (2.213b)$$

beschrieben. Im allgemeinen Fall hat eine Dichtematrix in einer geeigneten **ONB** die Form

$$\rho = \sum_{i=1}^N p_i |i\rangle \langle i| = \rho^\dagger \quad (2.214)$$

mit den Wahrscheinlichkeiten

$$\sum_{i=1}^M p_i = 1 \quad (2.215a)$$

$$p_i \geq 0. \quad (2.215b)$$

Damit gilt

$$\text{tr}(\rho) = \sum_{i=1}^N p_i \underbrace{\text{tr}(|i\rangle \langle i|)}_{=1} = 1. \quad (2.216)$$

Umgekehrt kann jeder selbstadjungierte Operator auf Diagonalgestalt (2.214) gebracht werden, sofern er *positiv* ist, d. h. keine negativen Eigenwerte hat. Damit ist jeder positive selbstadjungierte Operator mit Spur 1 eine Dichtematrix und umgekehrt.

Eine Dichtematrix, die ein Projektor ist

$$\rho^2 = \rho, \quad (2.217)$$

ist ein *reiner Zustand*

$$\rho_\psi = |\psi\rangle \langle \psi| \quad (2.218)$$

und eine Dichtematrix die eine *konvexe Summe* zweier Projektoren ist

$$\rho = p_1 P_1 + p_2 P_2, \quad (2.219)$$

mit  $p_i > 0$ , ist kein Projektor

$$\begin{aligned} \text{tr}(\rho^2) &= \text{tr}((p_1 P_1 + p_2 P_2)^2) = p_1^2 \underbrace{\text{tr}(P_1^2)}_{=P_1} + p_2^2 \underbrace{\text{tr}(P_2^2)}_{=P_2} + 2p_1 p_2 \text{tr}(P_1 P_2) \\ &= p_1^2 + p_2^2 + 2p_1 p_2 \text{tr}(P_1 P_2) = (p_1 + p_2)^2 + 2p_1 p_2 (\text{tr}(P_1 P_2) - 1) \\ &= 1 + 2p_1 p_2 (\text{tr}(P_1 P_2) - 1) \leq 1 \end{aligned} \quad (2.220)$$

wegen

$$\text{tr}(P_1 P_2) = |\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle|^2 \leq \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle \langle \psi_2 | \psi_2 \rangle = 1 \quad (2.221)$$

aufgrund der Cauchy-Schwarz Ungleichung (CSU)<sup>24</sup>

$$\forall |\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H} : |\langle \psi | \phi \rangle|^2 \leq \langle \psi | \psi \rangle \langle \phi | \phi \rangle. \quad (2.223)$$

Für das QBit ist die statistische Mischung zweier reiner Zustände wieder durch einen Vektor charakterisiert

$$\begin{aligned} \rho &= p_1 \frac{1}{2} (\mathbf{1} + \vec{n}_1 \vec{\sigma}) + p_2 \frac{1}{2} (\mathbf{1} + \vec{n}_2 \vec{\sigma}) \\ &= \frac{1}{2} (\mathbf{1} + (p_1 \vec{n}_1 + p_2 \vec{n}_2) \vec{\sigma}) = P(p_1 \vec{n}_1 + p_2 \vec{n}_2) \end{aligned} \quad (2.224)$$

der aber als konvexe Summe von Einheitsvektoren mit  $p_1 + p_2 = 1$  und  $p_i \geq 0$

$$\begin{aligned} |p_1 \vec{n}_1 + p_2 \vec{n}_2|^2 &= p_1^2 \vec{n}_1^2 + 2p_1 p_2 \vec{n}_1 \vec{n}_2 + p_2^2 \vec{n}_2^2 = p_1^2 + p_2^2 + 2p_1 p_2 \vec{n}_1 \vec{n}_2 \\ &= \underbrace{(p_1 + p_2)^2}_{=1} + 2 \underbrace{p_1 p_2}_{\geq 0} \underbrace{(\vec{n}_1 \vec{n}_2 - 1)}_{\leq 0} \leq 1 \end{aligned} \quad (2.225)$$

im Inneren der Einheitskugel liegt, solange wir den trivialen Fall  $\vec{n}_1 = \vec{n}_2$  ausschließen, der dem gleichen reinen Zustand entspräche. Weil  $p_1 \vec{n}_1 + (1 - p_1) \vec{n}_2$  auf der Verbindungslinie der Vektoren  $\vec{n}_1$  und  $\vec{n}_2$  liegt, ist dies auch geometrisch offensichtlich.

<sup>24</sup>Intuitiv ist im Anschauungsraum klar, daß das Skalarprodukt zweier Vektoren nicht größer als das Produkt ihrer Längen sein kann. Der bekannteste formale Beweis verwendet, daß

$$\forall |\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H}, \lambda \in \mathbf{C} : \langle \psi - \lambda \phi | \psi - \lambda \phi \rangle \geq 0 \quad (2.222)$$

und wählt  $\lambda = \langle \phi | \psi \rangle / \langle \phi | \phi \rangle$ .

### 2.8.1 Superposition und Mischung

Betrachten wir wieder die beiden Zustände  $|o\rangle = |1\rangle$  und  $|u\rangle = |2\rangle$  des QBit und superponieren wir sie mit dem gleichen Koeffizienten

$$|r\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |2\rangle \quad (2.226)$$

was zur Dichtematrix

$$\rho_S = |r\rangle \langle r| = \frac{1}{2} (|1\rangle \langle 1| + |1\rangle \langle 2| + |2\rangle \langle 1| + |2\rangle \langle 2|) \quad (2.227a)$$

führt. Eine Mischung mit gleichen Koeffizienten führt hingegen zur Dichtematrix

$$\rho_M = \frac{1}{2} (|1\rangle \langle 1| + |2\rangle \langle 2|) . \quad (2.227b)$$

Die zugehörigen Matrizen sowie Vektoren auf und in der Bloch-Sphäre sind

$$\rho_S = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (\mathbf{1} + \sigma_1) = P(\vec{e}_1) \quad (2.228a)$$

$$\rho_M = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \mathbf{1} = P(\vec{0}) . \quad (2.228b)$$

Somit erhalten wir als die Erwartungswerte für die Observable  $\Sigma(\vec{n}) = \vec{n}\vec{\sigma}$

$$E_S = \text{tr}(\rho_S \Sigma(\vec{n})) = \text{tr}(P(\vec{e}_1) \Sigma(\vec{n})) = \vec{e}_1 \vec{n} = n_1 \quad (2.229a)$$

$$E_M = \text{tr}(\rho_M \Sigma(\vec{n})) = \text{tr}(P(\vec{0}) \Sigma(\vec{n})) = 0 \quad (2.229b)$$

und sehen, daß Superposition und Mischung experimentell unterscheidbar sind, sobald die Richtung der Spinnmessung  $\vec{n}$  nicht in der  $\vec{e}_2$ - $\vec{e}_3$ -Ebene liegt.

### 2.8.2 Messung

Wir haben in den Abschnitten 2.5 und 2.8 gesagt, daß sich ein System im Zustand  $\rho$  nach der Messung der Observable  $A$  mit der Wahrscheinlichkeit

$$p'_\psi = \text{tr}(\rho |\psi\rangle \langle \psi|) = \langle \psi | \rho | \psi \rangle \quad (2.230)$$

in einem Eigenzustand  $\psi$  von  $A$  befindet. Wenn wir die Messung durchführen, aber das Ergebnis ignorieren, ist das System für uns in einer statistischen Mischung  $\rho'$  aller möglichen Ausgänge. Mit

$$A = \sum_{i=1}^N |i\rangle a_i \langle i| \quad (2.231a)$$

und

$$\mathbf{1} = \sum_{i=1}^N |i\rangle \langle i| \quad (2.231b)$$

heißt das

$$\rho' = \sum_{i=1}^N p'_i |i\rangle \langle i| = \sum_{i=1}^N |i\rangle \langle i|\rho|i\rangle \langle i|. \quad (2.232)$$

Falls  $\rho$  in der gleichen **ONB** wie  $A$  diagonal ist

$$\rho = \sum_{i=1}^N p_i |i\rangle \langle i| \quad (2.233)$$

kann man mit

$$\langle i|\rho|j\rangle = \sum_{k=1}^N p_k \underbrace{\langle i|k\rangle}_{=\delta_{ik}} \underbrace{\langle k|j\rangle}_{=\delta_{kj}} = p_i \delta_{ij} \quad (2.234)$$

zeigen, daß

$$\rho' = \sum_{i=1}^N p_i |i\rangle \langle i| = \rho, \quad (2.235)$$

daß sich also der Zustand nicht ändern wird. Wenn das nicht der Fall ist, ändert die Messung den Zustand.

## 2.9 Komplementarität und Unschärfe

In der klassischen Statistik ist die Varianz, d.h. der Erwartungswert der quadratischen Abweichung einzelner Messungen vom Erwartungswert

$$(\Delta A)^2 = V(A) = E((A - E(A))^2) = E(A^2) - (E(A))^2 \quad (2.236)$$

ein Maß für die Schwankungsbreite der Messergebnisse. In einem Quantensystem im Zustand  $|\psi\rangle$  kann man die Observable  $A$  also nicht genauer als

$$(\Delta_\psi A)^2 = \langle \psi|A^2|\psi\rangle - \langle \psi|A|\psi\rangle^2 \quad (2.237)$$

bestimmen. Wenn der Zustand  $|\psi\rangle$  ein Eigenzustand von  $A$  ist

$$A|\psi\rangle = a|\psi\rangle \quad (2.238)$$

gilt

$$\langle \psi|A^n|\psi\rangle = a^n \quad (2.239)$$

und damit

$$(\Delta_\psi A)^2 = 0, \quad (2.240)$$

d. h. die Unschärfe einer Observable verschwindet in zugehörigen Eigenzuständen. Dies entspricht unserer früheren Forderung, daß direkt aufeinanderfolgende Messungen der gleichen Observable zu gleichen Ergebnissen führen, sofern Störeinflüsse auf den Zustand ausgeschlossen werden können.

Die Varianz ist invariant unter Verschiebungen die proportional zur Eins sind

$$\begin{aligned} (\Delta_\psi(A + a\mathbf{1}))^2 &= \langle \psi | (A + a\mathbf{1})^2 | \psi \rangle - \langle \psi | (A + a\mathbf{1}) | \psi \rangle^2 \\ &= \langle \psi | A^2 | \psi \rangle - \langle \psi | A | \psi \rangle^2 = (\Delta_\psi A)^2. \end{aligned} \quad (2.241)$$

Definiere die Observablen

$$A_\psi = A - E_\psi(A)\mathbf{1} \quad (2.242a)$$

$$B_\psi = B - E_\psi(B)\mathbf{1} \quad (2.242b)$$

sodaß

$$E_\psi(A_\psi) = E_\psi(B_\psi) = 0 \quad (2.243)$$

und

$$(\Delta_\psi A)^2 = (\Delta_\psi A_\psi)^2 = \langle \psi | A_\psi^2 | \psi \rangle \quad (2.244a)$$

$$(\Delta_\psi B)^2 = (\Delta_\psi B_\psi)^2 = \langle \psi | B_\psi^2 | \psi \rangle. \quad (2.244b)$$

Für alle selbstadjungierten  $A = A^\dagger$  und  $B = B^\dagger$  gilt

$$\langle \psi | AB | \psi \rangle^* = \langle \psi | (AB)^\dagger | \psi \rangle = \langle \psi | B^\dagger A^\dagger | \psi \rangle = \langle \psi | BA | \psi \rangle \quad (2.245)$$

und deshalb

$$\operatorname{Re} \langle \psi | AB | \psi \rangle = \frac{1}{2} \langle \psi | AB | \psi \rangle + \frac{1}{2} \langle \psi | AB | \psi \rangle^* = \frac{1}{2} \langle \psi | AB + BA | \psi \rangle \quad (2.246a)$$

$$\operatorname{Im} \langle \psi | AB | \psi \rangle = \frac{1}{2i} \langle \psi | AB | \psi \rangle - \frac{1}{2i} \langle \psi | AB | \psi \rangle^* = \frac{1}{2i} \langle \psi | [A, B] | \psi \rangle \quad (2.246b)$$

mit dem *Kommutator*

$$[A, B] = AB - BA, \quad (2.247)$$

also

$$|\langle \psi | AB | \psi \rangle|^2 = \frac{1}{4} |\langle \psi | [A, B] | \psi \rangle|^2 + \frac{1}{4} |\langle \psi | AB + BA | \psi \rangle|^2. \quad (2.248)$$

Aus der CSU  $|\langle \psi | \phi \rangle|^2 \leq \langle \psi | \psi \rangle \langle \phi | \phi \rangle$  schließen wir damit

$$\begin{aligned} (\Delta_\psi A)^2 (\Delta_\psi B)^2 &= \langle \psi | A_\psi^2 | \psi \rangle \langle \psi | B_\psi^2 | \psi \rangle = \langle A_\psi \psi | A_\psi \psi \rangle \langle B_\psi \psi | B_\psi \psi \rangle \\ &\geq |\langle A_\psi \psi | B_\psi \psi \rangle|^2 = |\langle \psi | A_\psi B_\psi | \psi \rangle|^2 \\ &= \frac{1}{4} |\langle \psi | A_\psi B_\psi - B_\psi A_\psi | \psi \rangle|^2 + \frac{1}{4} \underbrace{|\langle \psi | A_\psi B_\psi + B_\psi A_\psi | \psi \rangle|^2}_{\geq 0} \\ &\geq \frac{1}{4} |\langle \psi | [A_\psi, B_\psi] | \psi \rangle|^2 = \frac{1}{4} |\langle \psi | [A, B] | \psi \rangle|^2, \quad (2.249) \end{aligned}$$

weil wegen  $\mathbf{1}A = A\mathbf{1}$

$$[A + a\mathbf{1}, B + b\mathbf{1}] = [A, B] \quad (2.250)$$

für den Kommutator gilt.

Damit haben wir eine untere Schranke für das Produkt der Unschärfe für die Messungen von Paaren von Observablen, eine sogenannte *Unschärferelation*

$$(\Delta_\psi A)(\Delta_\psi B) \geq \frac{1}{2} |\langle \psi | [A, B] | \psi \rangle| \quad (2.251)$$

gefunden. Observable, die nicht miteinander vertauschen, sind in diesem Sinn *komplementär*.

Vorlesung 08: Fr, 24. 05. 2019

Wenn  $|\psi\rangle$  Eigenzustand von  $A$  ist, verschwindet die Unschärfe  $\Delta_\psi A = 0$ . Dies ist aber wegen

$$\langle \psi | [A, B] | \psi \rangle = \langle \psi | AB | \psi \rangle - \langle \psi | BA | \psi \rangle = a \langle \psi | B | \psi \rangle - a \langle \psi | B | \psi \rangle = 0 \quad (2.252)$$

mit der Unschärferelation (2.251) kompatibel.

Wenn wir als Beispiel wieder die Pauli-Matrizen betrachten, finden wir die Vertauschungsrelationen

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} \sigma_k \quad (2.253)$$

und können damit z. B. die Unschärferelation

$$(\Delta_\psi \sigma_1)(\Delta_\psi \sigma_2) \geq |\langle \psi | \sigma_3 | \psi \rangle| = |E_\psi(\sigma_3)| \quad (2.254)$$

herleiten. Mit anderen Worten: wenn der Erwartungswert in einer Richtung nicht verschwindet, ist die Messung in den beiden dazu senkrechten Richtungen nicht mit beliebiger Genauigkeit möglich

$$E_\psi(\sigma_3) \neq 0 \Rightarrow \Delta_\psi \sigma_1 > 0 \wedge \Delta_\psi \sigma_2 > 0. \quad (2.255)$$

Im Spezialfall, daß zwei Observable eine *gemeinsame* Eigenbasis besitzen

$$A = \sum_{i=1}^N |i\rangle a_i \langle i| \quad (2.256a)$$

$$B = \sum_{i=1}^N |i\rangle b_i \langle i| \quad (2.256b)$$

finden wir

$$AB = \sum_{i,j=1}^N |i\rangle a_i \underbrace{\langle i|j\rangle}_{=\delta_{ij}} b_j \langle j| = \sum_{i=1}^N |i\rangle a_i b_i \langle i| \quad (2.257)$$

und

$$[A, B] = \sum_{i=1}^N |i\rangle \underbrace{(a_i b_i - b_i a_i)}_{=0} \langle i| = 0. \quad (2.258)$$

Für solche Operatoren finden wir keine Unschärferelation. Umgekehrt kann man zeigen, daß alle Paare von *vertauschenden* diagonalisierbaren Operatoren eine *gemeinsame* Eigenbasis haben.

Später werden wir das extreme Beispiel von Ort  $X_i$  und Impuls  $P_i$  mit

$$[X_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij}\mathbf{1} \quad (2.259)$$

kennenlernen, in dem der Erwartungswert des Kommutators in keinem Zustand verschwindet. Daraus folgt die *Heisenbergsche Unschärferelation*

$$(\Delta_\psi X_i)(\Delta_\psi P_j) \geq \frac{\hbar}{2}\delta_{ij}, \quad (2.260)$$

d. h. in *keinem* Zustand ist die simultane Messung von Ort und Impuls mit beliebiger Genauigkeit möglich. Insbesondere gilt, daß in einem Zustand, in dem der Ort beliebig genau gemessen werden kann, die Unsicherheit im Impuls divergiert und umgekehrt

$$\Delta_\psi X_i \rightarrow 0 \Rightarrow \Delta_\psi P_i \rightarrow \infty \quad (2.261a)$$

$$\Delta_\psi P_i \rightarrow 0 \Rightarrow \Delta_\psi X_i \rightarrow \infty. \quad (2.261b)$$

## 2.10 Tensorprodukte und Verschränkung

Wenn wir zwei Systeme mit den Zustandsräumen  $\mathcal{H}_1$  und  $\mathcal{H}_2$  kombinieren, erhalten wir als gemeinsamen Zustandsraum das *Tensorprodukt*

$$\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \quad (2.262)$$

mit der **ONB**

$$\{|i, j\rangle = |1; i\rangle \otimes |2; j\rangle\}_{i=1, \dots, \dim \mathcal{H}_1; j=1, \dots, \dim \mathcal{H}_2} , \quad (2.263)$$

weil das System 2 alle Zustände einnehmen kann, unabhängig davon, in welchen Zustand sich das System 1 befindet und umgekehrt. Offensichtlich gilt

$$\dim(\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2) = \dim(\mathcal{H}_1) \dim(\mathcal{H}_2) . \quad (2.264)$$

Operatoren im Tensorprodukt werden als Linearkombinationen von

$$\begin{aligned} (A_1 \otimes A_2) : \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 &\rightarrow \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \\ |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle &\mapsto (A_1 \otimes A_2)(|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle) = A_1 |\psi_1\rangle \otimes A_2 |\psi_2\rangle \end{aligned} \quad (2.265)$$

definiert.

Das Tensorprodukt muß man<sup>25</sup> von der direkten Summe

$$\mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2 \quad (2.266)$$

mit der **ONB** unterscheiden

$$\{|1; i\rangle\}_{i=1, \dots, \dim \mathcal{H}_1} \cup \{|2; j\rangle\}_{j=1, \dots, \dim \mathcal{H}_2} . \quad (2.267)$$

Hier gilt

$$\forall i, j : \quad \mathcal{H}_1 \ni |1; i\rangle \neq |2; j\rangle \in \mathcal{H}_2 \quad (2.268)$$

weil die beiden Zustandsräume nichts miteinander zu tun haben. Hier gilt

$$\dim(\mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2) = \dim(\mathcal{H}_1) + \dim(\mathcal{H}_2) . \quad (2.269)$$

Die direkte Summe beschreibt den Fall, daß ein System Zustände in zwei Hilberträumen annehmen kann und das Tensorprodukt, den Fall, daß zwei Systeme kombiniert werden.

Die spannensten Quanteneffekte sind die, bei denen sich zwei ansonsten unabhängige Systeme in einem *verschränkten* Quantenzustand befinden, so daß der Kollaps der Wellenfunktion durch eine Messung in einem System den Quantenzustand des anderen Systems beeinflusst, *ohne* daß Information fließt. Ein Beispiel sind zwei QBits im normierten Zustand

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1, 2\rangle - |2, 1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1; 1\rangle \otimes |2; 2\rangle - |1; 2\rangle \otimes |2; 1\rangle) . \quad (2.270)$$

<sup>25</sup>... auch wenn es für zwei QBits wegen  $2 \cdot 2 = 2 + 2$  zunächst schwerfällt ...

Eine Messung des zweiten QBit ohne Messung des ersten QBit liefert mit gleicher Wahrscheinlichkeit die Ergebnisse  $\uparrow$  und  $\downarrow$ :

$$p_{2,\uparrow} = \underbrace{\left| \left( \langle 1; 1 | \otimes \langle 2; 1 | \right) | \psi \rangle \right|^2}_{=0} + \underbrace{\left| \left( \langle 1; 2 | \otimes \langle 2; 1 | \right) | \psi \rangle \right|^2}_{=\frac{1}{2} |\langle 1; 2 | 1; 2 \rangle|^2 |\langle 2; 1 | 2; 1 \rangle|^2} = \frac{1}{2}. \quad (2.271)$$

Eine Messung des ersten QBit entlang der  $z$ -Achse mit dem Ergebnis  $\uparrow$  hinterlässt das System im Zustand

$$|\psi'\rangle = |1, 2\rangle = |1; 1\rangle \otimes |2; 2\rangle \quad (2.272)$$

und eine anschließende Messung des zweiten QBit entlang der  $z$ -Achse wird danach *nie* das Ergebnis  $\uparrow$  liefern.

$$p'_{2,\uparrow} = \underbrace{\left| \left( \langle 1; 1 | \otimes \langle 2; 1 | \right) | \psi' \rangle \right|^2}_{=0} + \underbrace{\left| \left( \langle 1; 2 | \otimes \langle 2; 1 | \right) | \psi' \rangle \right|^2}_{=0} = 0. \quad (2.273)$$

Hierbei spielt es keine Rolle, ob die beiden QBits noch in kausalem Konrakt stehen. Die Vorhersage solcher Fernwirkungseffekte haben Albert Einstein dazu gebracht, die Quantenmechanik zu verwerfen. Ihre Existenz wurden aber inzwischen experimentell zweifelsfrei nachgewiesen.

## —3—

## ALLGEMEINE FORMULIERUNG DER QM

Bislang haben wir nur von Systemen gesprochen, deren Zustandsraum ein *endlichdimensionaler* Hilbertraum ist. Meistens haben wir uns sogar auf den zweidimensionalen Zustandsraum des QBit konzentriert.

3.1 *Kontinuierliche Observable*

Es zeigt sich aber, daß dies nicht immer genügt. Betrachten wir ein Teilchen (z. B. ein Elektron), das sich entlang einer Richtung (z. B. in einem sehr dünnen Draht) zwischen  $x = a$  und  $x = b > a$  bewegen kann. Die möglichen Meßergebnisse für die Position des Teilchens sind dann *alle*<sup>1</sup> reellen Zahlen

$$x \in [a, b] \subset \mathbf{R}. \quad (3.1)$$

Ein geeigneter Hilbertraum  $\mathcal{H}$ , der die Zustände des Teilchens beschreiben kann, ist der Raum  $L^2([a, b], dx)$  der *quadratintegrablen* komplexwertigen Funktionen

$$\begin{aligned} \psi &: [a, b] \rightarrow \mathbf{C} \\ x &\mapsto \psi(x) \end{aligned} \quad (3.2a)$$

mit

$$\|\psi\|^2 = \int_a^b dx |\psi(x)|^2 < \infty. \quad (3.2b)$$

Wenn wir Zustandsvektoren  $|\psi\rangle$  durch *Wellenfunktionen*  $\psi : [a, b] \rightarrow \mathbf{C}$  beschreiben, finden wir, daß

$$\langle \phi | \psi \rangle = \int_a^b dx \phi^*(x) \psi(x) \quad (3.3)$$

---

<sup>1</sup>Es gibt keine experimentellen Beobachtungen, die die Ergebnisse von Ortsmessungen auf ganzzahlige oder rationale Vielfache einer fundamentalen Länge einschränken würden. Zwar kann man jede reelle Zahl beliebig genau mit rationalen Zahlen approximieren, aber reelle Zahlen haben sich als die einfachere Alternative erwiesen.

alle Anforderungen erfüllt, um  $\mathcal{H} = L^2([a, b], dx)$  zu einem Hilbertraum zu machen. Für kontinuierliche Observable ist es nicht möglich, die Wahrscheinlichkeit für ein einzelnes Meßergebnis anzugeben. Man kann nur *Wahrscheinlichkeiten* dafür angeben, daß der Meßwert in einem *Interval* liegt und daraus eine *Wahrscheinlichkeitsdichte* ableiten.

Ausgehend von der Wahrscheinlichkeit  $p_i = |\psi_i|^2$  für Meßergebnisse diskreter Observabler, bietet sich als Wahrscheinlichkeit, das Teilchen im Intervall  $[x, y] \subseteq [a, b]$  anzutreffen

$$p(x \in [x', y']) = \int_{x'}^{y'} d\xi |\psi(\xi)|^2 \quad (3.4)$$

an, sofern  $\psi$  auf eins normiert ist,  $\|\psi\|^2 = 1$ , bzw.

$$p(x \in [a, b]) = \int_a^b dx |\psi(x)|^2 = 1. \quad (3.5)$$

Dann kann man

$$p(x) = |\psi(x)|^2 \quad (3.6)$$

als *Wahrscheinlichkeitsdichte* interpretiert werden und

$$p(x)dx = |\psi(x)|^2 dx \quad (3.7)$$

als die *Wahrscheinlichkeit*, das Teilchen im infinitesimalen Intervall  $[x, x+dx]$  anzutreffen,

Damit diese Wahrscheinlichkeitsinterpretation konsistent ist, muß ein geeigneter *Ortsoperator*

$$\begin{aligned} X : L^2([a, b], dx) &\rightarrow L^2([a, b], dx) \\ \psi &\mapsto X\psi \end{aligned} \quad (3.8)$$

als Erwartungswert

$$E_\psi(X) = \langle \psi | X | \psi \rangle = \int_a^b dx x p(x) = \int_a^b dx x |\psi(x)|^2 = \int_a^b dx \psi^*(x) x \psi(x) \quad (3.9)$$

liefern. Das funktioniert, wenn man als Ergebnis der Anwendung des Ortsoperators  $X$  auf die Wellenfunktion  $\psi$  die neue Wellenfunktion  $X\psi$  mit

$$\begin{aligned} X\psi : [a, b] &\rightarrow \mathbf{C} \\ x &\mapsto (X\psi)(x) = x\psi(x) \end{aligned} \quad (3.10)$$

definiert.

**Weiterführende Bemerkung (nicht Teil der Vorlesung):**

Daß  $X\psi$  wieder quadratintegrabel ist, ist übrigens nicht-trivial, wenn das Intervall  $[a, b]$  unendlich groß gemacht wird.

Man kann sich übrigens leicht davon überzeugen, daß der Erwartungswert im zulässigen Intervall liegt

$$a \leq \langle \psi | X | \psi \rangle \leq b. \quad (3.11)$$

Wenn wir die Wirkung des adjungierten Ortsoperators  $X^\dagger$  berechnen, sehen wir wegen  $x^* = x \in \mathbf{R}$

$$\begin{aligned} \langle \phi | X^\dagger | \psi \rangle &= \langle \phi | X^\dagger \psi \rangle = \langle X \phi | \psi \rangle = \int_a^b dx (X \phi)^*(x) \psi(x) \\ &= \int_a^b dx (x \phi(x))^* \psi(x) = \int_a^b dx x \phi^*(x) \psi(x) = \int_a^b dx \phi^*(x) x \psi(x) \\ &= \int_a^b dx \phi^*(x) (X \psi)(x) = \langle \phi | X \psi \rangle = \langle \phi | X | \psi \rangle, \end{aligned} \quad (3.12)$$

daß  $X = X^\dagger$  selbstadjungiert ist.

**Weiterführende Bemerkung (nicht Teil der Vorlesung):**

Wenn man es mathematisch genau nimmt, tauchen an dieser und ähnlichen Stellen subtile Fragen nach den Definitionsbereichen von  $X$  und  $X^\dagger$  auf, die wir in dieser Vorlesung ignorieren wollen. In der Quantenmechanik mit endlich vielen Freiheitsgraden spielen diese Fragen nur an sehr wenigen Stellen eine wichtige Rolle und der Aufwand für eine mathematisch untadelige Beschreibung ist zu hoch.

Wir erwarten also eine **ONB** von Eigenzuständen

$$X |x\rangle = x |x\rangle \quad (3.13)$$

mit

$$X = \int_a^b dx |x\rangle x \langle x| \quad (3.14a)$$

$$\mathbf{1} = \int_a^b dx |x\rangle \langle x|. \quad (3.14b)$$

Natürlich müssen wir

$$\mathbf{1}^2 = \mathbf{1} \quad (3.15)$$

fordern, also

$$\int_a^b dx dy |x\rangle \langle x|y\rangle \langle y| \stackrel{!}{=} \int_a^b dx |x\rangle \langle x| \quad (3.16)$$

und damit eigentlich

$$\langle x|y\rangle = \begin{cases} 0 & \text{für } x \neq y \\ ? & \text{für } x = y, \end{cases} \quad (3.17)$$

ohne daß wir  $\langle x|x\rangle$  präzise machen können. In der entsprechenden Formel für den diskreten Fall hatte das Kronecker- $\delta$

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{für } i \neq j \\ 1 & \text{für } i = j \end{cases} \quad (3.18)$$

die richtigen Eigenschaften. Dies hilft hier nicht, weil die Änderung des Funktionswerts  $f(y)$  an einer isolierten Stelle  $y = x$  ein Integral  $\int dy f(y)$  nicht ändert.

### 3.1.1 Dirac $\delta$ -„Funktion“

Vorlesung 09: Mo, 27.05.2019

Die entscheidende Eigenschaft des Kronecker- $\delta$  für diskrete Indizes

$$\forall f \in \mathbf{R}^N : \sum_{j=1}^N \langle i|j\rangle f_j = \sum_{j=1}^N \delta_{ij} f_j = f_i \quad (3.19)$$

läßt sich leicht auf kontinuierliche Variable verallgemeinern

$$\forall f \in C([a, b]) : \int_a^b dy \langle x|y\rangle f(y) = \int_a^b dy \delta(x - y) f(y) = f(x). \quad (3.20)$$

Allerdings läßt sich diese Forderung *nicht* mit einer „normalen“ Funktion erfüllen. Damit das Ergebnis *nur* von  $f(x)$  abhängen kann, muß  $\delta(x - y)$  für  $|x - y| > \epsilon$  mit beliebig kleinem  $\epsilon > 0$  verschwinden. Aus dem Mittelwertsatz der Integralrechnung

$$\forall f \in C([x, y]) : \exists z \in (x, y) : \int_x^y d\xi f(\xi) = (y - x) f(z), \quad (3.21)$$

folgt dann aber

$$\forall \epsilon > 0, f, \delta \in C([x - \epsilon, x + \epsilon]) : \exists \xi, |\xi - x| < \epsilon :$$

$$\int_{x-\epsilon}^{x+\epsilon} dy \delta(x - y) f(y) = 2\epsilon \delta(x - \xi) f(\xi) \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} 0. \quad (3.22)$$

Man kann aber die  $\delta$ -„Funktion“ als  $\delta$ -Distribution definieren, d. h. als lineare Abbildung von den glatten Funktionen auf die reellen Zahlen

$$\begin{aligned} \delta_* : C^\infty(\mathbf{R}) &\rightarrow \mathbf{R} \\ f &\mapsto \delta_*(f) = f(0) \end{aligned} \quad (3.23)$$

die der Auswertung der Funktion an der Stelle 0 entspricht. Man kann lineare Funktionale auf geeigneten Funktionenräumen  $\mathcal{V}$

$$\begin{aligned} f_* : \mathcal{V} &\rightarrow \mathbf{R} \\ g &\mapsto f_*(g) \end{aligned} \quad (3.24)$$

nach dem *Darstellungssatz von Riesz* immer als

$$f_*(g) = \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x)g(x) \quad (3.25)$$

mit einer geeigneten Dichtefunktion  $f : \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}$  schreiben. Analog kann man für die  $\delta$ -Distribution auf den glatten Funktionen  $C^\infty(\mathbf{R})$  eine Dichte  $\delta$  über die Forderung

$$\forall f \in C^\infty(\mathbf{R}) : \delta_*(f) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x)f(x) = f(0) \quad (3.26)$$

definieren. Man kann diese Dichte auch über einen Grenzprozeß

$$\delta(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \eta_\epsilon(x) \quad (3.27)$$

definieren, bei dem die Funktionen  $\{\eta_\epsilon\}_{\epsilon>0}$  die Forderungen

$$\forall \epsilon > 0 : \int_{-\infty}^{\infty} dx \eta_\epsilon(x) = 1 \quad (3.28a)$$

$$\forall x \neq 0 : \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \eta_\epsilon(x) = 0 \quad (3.28b)$$

erfüllen und der Grenzübergang  $\epsilon \rightarrow 0$  erst *am Ende* der Rechnung, insbesondere *nach* dem Integral über das Argument von  $\eta_\epsilon$ , zu nehmen ist. Zwei konkrete Beispiele für  $\eta_\epsilon$  sind

$$\eta_\epsilon^1(x) = \frac{1}{\pi} \frac{\epsilon}{x^2 + \epsilon^2} \quad (3.29a)$$

$$\eta_\epsilon^2(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\epsilon}} e^{-\frac{x^2}{2\epsilon^2}}. \quad (3.29b)$$

Offensichtlich existieren die Grenzwerte nicht als Funktionen

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \eta_\epsilon^1(0) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\pi\epsilon} = \infty \quad (3.30a)$$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \eta_\epsilon^2(0) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\sqrt{2\pi\epsilon}} = \infty, \quad (3.30b)$$

Mit der Fouriertransformation der Gaußfunktion<sup>2</sup> finden wir übrigens

$$\eta_\epsilon^2(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\epsilon}} e^{-\frac{x^2}{2\epsilon^2}} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{-\frac{\epsilon^2 k^2}{2} + ikx} \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{ikx}, \quad (3.32)$$

also

$$\delta(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{ikx}. \quad (3.33)$$

Mit der Kettenregel, bzw. der Substitutionsregel

$$dx |g'(x)| = dx \left| \frac{dg}{dx} \right| = dg \quad (3.34)$$

findet man leicht

$$\forall f, g \in C^\infty(\mathbf{R}) : \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(g(x)) f(x) = \sum_{\bar{x}: g(\bar{x})=0} \frac{f(\bar{x})}{|g'(\bar{x})|} \quad (3.35)$$

mit der Ableitung

$$g'(x) = \frac{dg}{dx}(x), \quad (3.36)$$

wobei die Summe über alle Nullstellen  $\bar{x}$  von  $g$  geht und nur definiert ist, wenn  $g'(\bar{x})$  für keine Nullstelle verschwindet. Mit der Produktregel, bzw. der partiellen Integration

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) g'(x) = - \int_{-\infty}^{\infty} dx f'(x) g(x) + \lim_{x \rightarrow \infty} f(x) g(x) - \lim_{x \rightarrow -\infty} f(x) g(x) \quad (3.37)$$

kann man Ableitungen der  $\delta$ -Funktion

$$\forall f \in C^\infty(\mathbf{R}) : \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta'(x) f(x) = - \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x) f'(x) = -f'(0) = \delta'(f) \quad (3.38)$$

definieren, sofern die Funktion  $f$  hinreichend schnell abfällt, bzw. am Rand verschwindet.

<sup>2</sup>Masterformel

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-\frac{(k-b)^2}{2a^2} + ikx} = \sqrt{2\pi} a e^{-\frac{a^2 x^2}{2} + ibx} \quad (3.31)$$

(siehe. Übung) mit  $a = 1/\epsilon$  und  $b = 0$  verwenden.

### 3.1.2 Eigen,,zustände“ des Ortsoperators

Mit

$$\langle x|y\rangle = \delta(x-y) \quad (3.39)$$

erhält man also, wie gewünscht,

$$\mathbf{1}^2 = \int_a^b dx dy |x\rangle \langle x|y\rangle \langle y| = \int_a^b dx dy |x\rangle \delta(x-y) \langle y| = \int_a^b dx |x\rangle \langle x| = \mathbf{1}, \quad (3.40)$$

und mit der *Wellenfunktion im Ortsraum*

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle \quad (3.41)$$

nach Einschreiben einer Einheit auch

$$\langle \phi|\psi\rangle = \int_a^b dx \langle \phi|x\rangle \langle x|\psi\rangle = \int_a^b dx \phi^*(x)\psi(x) \quad (3.42)$$

und

$$|\psi\rangle = \int_a^b dx |x\rangle \langle x|\psi\rangle = \int_a^b dx \psi(x) |x\rangle. \quad (3.43)$$

Auf der anderen Seite sind die Eigenzustände nicht normiert

$$\langle x|x\rangle = \delta(0) \neq 1 \quad (3.44)$$

und weil  $\delta(0)$  nicht definiert ist, auch *nicht normierbar*. Solange man die Ortseigenzustände  $|x\rangle$  aber nur in der Form

$$f(X) = \int dx |x\rangle f(x) \langle x| \quad (3.45)$$

verwendet, also insbesondere für die Zerlegung der Einheit

$$\mathbf{1} = \int dx |x\rangle \langle x|, \quad (3.46a)$$

die Zerlegung des Ortsoperators

$$X = \int dx |x\rangle x \langle x| \quad (3.46b)$$

und für Projektionen auf Intervalle  $[a', b'] \subseteq [a, b]$

$$P_{a',b'} = \int_{a'}^{b'} dx |x\rangle \langle x| \quad (3.46c)$$

gibt es keine Probleme. Sobald aber in einer Formel  $\langle x|x \rangle$  vorkommt, ist etwas schiefgelaufen ...

Die Verwendung von Ortseigenzuständen ist nicht unbedingt erforderlich, vereinfacht aber viele Rechnungen ungemein. Linearkombinationen der Ortseigenzustände

$$|\psi\rangle = \int_a^b dx \psi(x) |x\rangle \quad (3.47)$$

werden auch als *Wellenpakete* bezeichnet und sind wegen

$$\begin{aligned} \langle \phi|\psi \rangle &= \int_a^b dx dy \phi^*(x) \langle x|y \rangle \psi(y) \\ &= \int_a^b dx dy \phi^*(x) \delta(x-y) \psi(y) = \int_a^b dx \phi^*(x) \psi(x) \end{aligned} \quad (3.48)$$

für quadratintegrale Wellenfunktionen normierbar.

### 3.1.3 Differentialoperatoren

Eine besondere Klasse von linearen Operatoren auf dem Hilbertraum  $\mathcal{H} = L^2([a, b], dx)$  der Wellenfunktionen im Ortsraum sind *Differentialoperatoren*, z. B.

$$\begin{aligned} D : L^2([a, b], dx) &\rightarrow L^2([a, b], dx) \\ \psi &\mapsto D\psi \end{aligned} \quad (3.49a)$$

mit

$$\begin{aligned} D\psi : [a, b] &\rightarrow \mathbf{R} \\ x &\mapsto (D\psi)(x) = \frac{d\psi}{dx}(x). \end{aligned} \quad (3.49b)$$

**Weiterführende Bemerkung (nicht Teil der Vorlesung):**

Für beliebige quadratintegrale Funktionen  $\psi$  ist übrigens nicht gewährleistet, daß  $D\psi$  quadratintegral ist. Aber über diese Feinheiten können wir meistens hinwegsehen.

Auch hier können wir den adjungierten Operator  $D^\dagger$  berechnen, wenn wir fordern, daß alle Wellenfunktionen  $\psi$  am Rand verschwinden  $\psi(a) = \psi(b) = 0$  oder periodische Randbedingungen  $\psi(a) = \psi(b)$  erfüllen

$$\begin{aligned} \langle \phi|D^\dagger|\psi \rangle &= \langle \phi|D^\dagger\psi \rangle = \langle D\phi|\psi \rangle = \int_a^b dx \left( \frac{d\phi}{dx}(x) \right)^* \psi(x) \\ &= \underbrace{\phi^*(b)\psi(b) - \phi^*(a)\psi(a)}_{=0} - \int_a^b dx \phi^*(x) \left( \frac{d\psi}{dx}(x) \right) \end{aligned}$$

$$= - \int_a^b dx \phi^*(x)(D\psi)(x) = - \langle \phi | D\psi \rangle = - \langle \phi | D | \psi \rangle, \quad (3.50)$$

also

$$D = -D^\dagger. \quad (3.51)$$

Mit

$$\begin{aligned} \langle \phi | (-iD)^\dagger | \psi \rangle &= \langle \phi | (-iD)^\dagger \psi \rangle = \langle -iD\phi | \psi \rangle = i \langle D\phi | \psi \rangle \\ &= -i \langle \phi | D\psi \rangle = \langle \phi | (-iD)\psi \rangle = \langle \phi | (-iD) | \psi \rangle \end{aligned} \quad (3.52)$$

folgt daraus, daß der Differentialoperator  $-iD$  selbstadjungiert ist<sup>3</sup>

$$(-iD)^\dagger = -iD. \quad (3.53)$$

Die Eigenzustände  $|k\rangle$  des Operators  $-iD$  erfüllen die Eigenwertgleichung

$$(-iD) |k\rangle = k |k\rangle \quad (3.54)$$

und die zugehörigen Wellenfunktionen

$$\psi_k(x) = \langle x | k \rangle \quad (3.55)$$

die **ODE**

$$(-iD)\psi_k(x) = \frac{1}{i} \frac{d\psi_k}{dx}(x) = k\psi_k(x) \quad (3.56)$$

mit den Lösungen

$$\psi_k(x) = N_k e^{ikx}. \quad (3.57)$$

Wenn wir zusätzlich periodische Randbedingungen

$$\psi_k(a) = \psi_k(b) \quad (3.58)$$

stellen, finden wir die diskrete Werte für  $k$

$$k_n = \frac{2n\pi}{b-a} \quad (\text{mit } n \in \mathbf{Z}). \quad (3.59)$$

Mit der Normierungsbedingung

$$1 = \langle k | k \rangle = \int_a^b dx \langle k | x \rangle \langle x | k \rangle = \int_a^b dx |\psi_k(x)|^2$$

---

<sup>3</sup>Der Differentialoperator  $iD$  ist ebenfalls selbstadjungiert, aber  $-iD$  hat eine direkte physikalische Interpretation.

$$= \int_a^b dx |N_k e^{ikx}|^2 = \int_a^b dx |N_k|^2 = (b-a) |N_k|^2 \quad (3.60)$$

finden wir

$$\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{b-a}} e^{ikx} \quad (3.61)$$

und die *konstante* Wahrscheinlichkeitsdichte

$$p_k(x) = |\psi_k(x)|^2 = \frac{1}{b-a}. \quad (3.62)$$

Solange das Intervall  $[a, b]$  endlich ist, sind die Eigenfunktionen von  $-iD$  also normierbar.

Weil  $-iD$  selbstadjungiert ist, müssen die Eigenzustände eine **ONB** bilden

$$\mathbf{1} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} |k_n\rangle \langle k_n|. \quad (3.63)$$

In der Tat erkennen wir in

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \langle x|k_n\rangle \langle k_n|\psi\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{ik_n x} \frac{1}{b-a} \int_a^b dy e^{-ik_n y} \psi(y) \quad (3.64)$$

die Entwicklung der periodischen Funktion  $\psi(x)$  in eine Fourierreihe

$$\psi(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \psi_n e^{ik_n x} \quad (3.65)$$

mit den Koeffizienten

$$\psi_n = \frac{1}{b-a} \int_a^b dy e^{-ik_n y} \psi(y). \quad (3.66)$$

### 3.1.4 Translationen und Impuls

Vorlesung 10: Fr, 31. 05. 2019

Wir können Ortseigenzustände<sup>4</sup> mit einem unitäre Operator  $U(a)$  um  $a$  verschieben

$$|x+a\rangle = U(a) |x\rangle. \quad (3.68)$$

---

<sup>4</sup>NB:

$$X|x\rangle = x|x\rangle \quad (3.67a)$$

$$X|x+a\rangle = (x+a)|x+a\rangle \quad (3.67b)$$

Dabei muß  $U(a)$

$$U^\dagger(a) = U^{-1}(a) = U(-a) \quad (3.69)$$

erfüllen. Durch Einschleiben einer Eins erhalten wir

$$U(a) = \int dx U(a) |x\rangle \langle x| = \int dx |x+a\rangle \langle x| = \int dx |x\rangle \langle x-a|, \quad (3.70)$$

was auch intuitiv einer Verschiebung entspricht. Für die Wellenfunktion eines normierbaren Zustands finden wir

$$\langle x|U(a)\psi\rangle = \langle U^\dagger(a)x|\psi\rangle = \langle U(-a)x|\psi\rangle = \langle x-a|\psi\rangle = \psi(x-a), \quad (3.71)$$

was man auch aus

$$U(a)|\psi\rangle = \int dx |x\rangle \langle x-a|\psi\rangle = \int dx |x\rangle \psi(x-a) \quad (3.72)$$

folgern kann. Weil die Translation eines Ortseigenzustands wieder einen Ortseigenzustand liefert<sup>5</sup>

$$\begin{aligned} XU(a)|x\rangle &= X|x+a\rangle = (x+a)|x+a\rangle \\ &= U(a)(x+a)|x\rangle = U(a)(X+a)|x\rangle \end{aligned} \quad (3.73)$$

erhalten wir

$$XU(a) \stackrel{!}{=} U(a)(X+a) \quad (3.74)$$

bzw.

$$U(-a)XU(a) \stackrel{!}{=} X+a. \quad (3.75)$$

Mit einem selbstadjungierten Impulsoperator  $P = P^\dagger$ , der

$$[X, P] = XP - PX = i\hbar\mathbf{1} \quad (3.76)$$

erfüllt, wobei der Faktor  $\hbar$  die richtige Dimension liefert, können wir den unitären Translationsoperator auch als

$$U(a) = e^{-iaP/\hbar} \quad (3.77)$$

mit dem Impuls  $P$  als *Generator* schreiben. Dazu benutzen wir die Hausdorff-Formel<sup>6</sup>

$$e^A B e^{-A} = e^{[A, \cdot]} B = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} ([A, \cdot])^n B = B + [A, B] + \frac{1}{2!} [A, [A, B]] + \dots \quad (3.84)$$

<sup>5</sup>Die nachfolgende Herleitung des Impulsoperators ist inspiriert von [Wei13].

<sup>6</sup>Beweis: Multiplikation von links und rechts

$$L_A B = AB \quad (3.78a)$$

und finden

$$\begin{aligned} U(-a)XU(a) &= e^{iaP/\hbar} X e^{-iaP/\hbar} \\ &= X + \frac{ia}{\hbar} \underbrace{[P, X]}_{=-i\hbar} + \frac{(ia)^2}{2\hbar^2} \underbrace{[P, [P, X]]}_{=0} + \dots = X + a. \end{aligned} \quad (3.85)$$

Daß  $P$  wirklich als Impuls interpretiert werden kann, sieht man mit dem Hamiltonoperator für ein freies Teilchen

$$H = \frac{1}{2m} P^2 \quad (3.86)$$

der aus der Korrespondenz zur kinetischen Energie eines klassischen Teilchens

$$T = \frac{m}{2} \dot{x}^2 = \frac{p^2}{2m} \quad (3.87)$$

mit

$$p = m\dot{x} \quad (3.88)$$

motiviert werden kann. Dann gilt

$$\begin{aligned} [H, X] &= \frac{1}{2m} (P^2 X - X P^2) = \frac{1}{2m} (PPX - PXP + PXP - XPP) \\ &= \frac{1}{2m} (P[P, X] + [P, X]P) = -\frac{i\hbar}{m} P \end{aligned} \quad (3.89)$$

---


$$R_A B = B A \quad (3.78b)$$

mit

$$[A, B] = L_A B - R_A B = (L_A - R_A) B \quad (3.79)$$

und

$$L_A R_B = R_B L_A \quad (3.80)$$

sowie

$$e^{L_A} e^{R_B} = e^{L_A + R_B} = e^{R_B} e^{L_A} \quad (3.81)$$

führt zu

$$e^A B = e^{L_A} B \quad (3.82a)$$

$$B e^{-A} = e^{R_{-A}} B = e^{-R_A} B \quad (3.82b)$$

und schließlich

$$e^A B e^{-A} = e^{-R_A} e^{L_A} B = e^{L_A - R_A} B = e^{[A, \cdot]} B. \quad (3.83)$$

und wir können mit dem Ehrenfest Theorem (2.200) die Zeitabhängigkeit der Erwartungswerte von Ort

$$\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | X | \psi(t) \rangle = \left\langle \psi(t) \left| \frac{i}{\hbar} [H, X] \right| \psi(t) \right\rangle = \frac{1}{m} \langle \psi(t) | P | \psi(t) \rangle \quad (3.90)$$

und Impuls

$$\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | P | \psi(t) \rangle = \left\langle \psi(t) \left| \frac{i}{\hbar} [H, P] \right| \psi(t) \right\rangle = 0 \quad (3.91)$$

berechnen. Offensichtlich gilt damit

$$E_{\psi(t)}(P) = m \frac{d}{dt} (E_{\psi(t)}(X)) = \text{const.}, \quad (3.92)$$

ebenso wie in der klassischen Physik.

Wenn wir die Wellenfunktion des translatierten Zustands nach  $a$  entwickeln

$$\langle x | U(a) | \psi \rangle = \psi(x - a) = \psi(x) - a \frac{d}{dx} \psi(x) + \mathcal{O}(a^2) \quad (3.93)$$

und das Ergebnis mit der Entwicklung von  $U(a)$

$$\langle x | U(a) | \psi \rangle = \left\langle x \left| \mathbf{1} - \frac{ia}{\hbar} P + \mathcal{O}(a^2) \right| \psi \right\rangle = \psi(x) - \frac{ia}{\hbar} \langle x | P | \psi \rangle + \mathcal{O}(a^2) \quad (3.94)$$

vergleichen, finden wir für den Term linear in  $a$

$$(P\psi)(x) = \langle x | P | \psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi(x) = (-i\hbar D\psi)(x) \quad (3.95)$$

also, bis auf den Faktor  $\hbar$ , den oben betrachteten selbstadjungierte Differentialoperator. In der Tat folgt mit der Produktregel

$$\begin{aligned} ([X, P]\psi)(x) &= (X(P\psi))(x) - (P(X\psi))(x) = x \left( \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi(x) \right) - \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} (x\psi(x)) \\ &= x \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi(x) - x \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi(x) - \frac{\hbar}{i} \psi(x) = i\hbar \psi(x) \end{aligned} \quad (3.96)$$

wieder die richtige *Vertauschungsrelation*

$$[X, P] = i\hbar \mathbf{1} \quad (3.97)$$

und daraus wie in Abschnitt 2.9 die Heisenbergsche *Unschärferelation*

$$(\Delta_{\psi} X)(\Delta_{\psi} P) \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (3.98)$$

Wir haben in diesem Abschnitt *nicht* versucht, den Impulsoperator der **QM** aus der klassischen Physik „herzuleiten“. Vielmehr haben wir zunächst einen selbstadjungierten Operator  $P$  konstruiert, von dem wir *a posteriori* zeigen konnten, daß sich sein Erwartungswert wie ein klassischer Impuls verhält. Nur der Ansatz für den Zusammenhang von Translations- und Impulsoperator  $U(a) = e^{-iaP}$  war geleitet vom Zusammenhang von Translationsinvarianz und Impulserhaltung im *Noether-Theorem* der klassischen Physik, daß die Erhaltungsgrößen als Generatoren von Symmetrien identifiziert. Wir werden später in Kapitel 6 einen ähnlichen Zusammenhang von Drehungen und Drehimpuls finden.

### 3.1.5 Ebene Wellen

Wenn wir Eigenzustände des Impulsoperators auf der ganzen reellen Achse betrachten

$$P |p\rangle = p |p\rangle \quad (3.99)$$

finden wir erneut kontinuierliche Eigenwerte  $p \in \mathbf{R}$  und nicht normierbare Eigenzustände

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ixp/\hbar} \quad (3.100)$$

mit

$$\langle p|q\rangle = \int dx \langle p|x\rangle \langle x|q\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dx e^{ix(q-p)/\hbar} = \delta(p-q) \quad (3.101)$$

und

$$\mathbf{1} = \int dp |p\rangle \langle p| . \quad (3.102)$$

## 3.2 Postulate

An dieser Stelle können wir die Postulate der **QM**, die wir im Kapitel 2 am Beispiel eines QBit entwickelt haben, zusammenfassen und allgemein formulieren.

### 3.2.1 Reine Zustände

Die *reinen* Zustände eines quantenmechanischen Systems werden durch Vektoren in einem Hilbertraum  $\mathcal{H}$  beschrieben. Ein Hilbertraum ist ein Vektorraum  $\mathcal{H}$  mit einem sesquilinearen inneren Produkt

$$\begin{aligned} \langle \cdot | \cdot \rangle : \mathcal{H} \times \mathcal{H} &\rightarrow \mathbf{C} \\ (|\psi\rangle, |\phi\rangle) &\mapsto \langle \psi | \phi \rangle \end{aligned} \quad (2.9b)$$

mit  $\forall |\psi_i\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H}, \alpha_i \in \mathbf{C}$ :

$$\langle \phi | \alpha_1 \psi_1 + \alpha_2 \psi_2 \rangle = \alpha_1 \langle \phi | \psi_1 \rangle + \alpha_2 \langle \phi | \psi_2 \rangle \quad (2.9c)$$

$$\langle \alpha_1 \psi_1 + \alpha_2 \psi_2 | \phi \rangle = \alpha_1^* \langle \psi_1 | \phi \rangle + \alpha_2^* \langle \psi_2 | \phi \rangle \quad (2.9c')$$

$$\langle \psi | \phi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle^* \quad (2.9d)$$

$$\langle \psi | \psi \rangle \geq 0 \quad (2.9e)$$

$$\langle \psi | \psi \rangle = 0 \Leftrightarrow |\psi\rangle = 0, \quad (2.9f)$$

der außerdem *vollständig* ist bzgl. der *Norm*

$$\begin{aligned} \|\cdot\| : \mathcal{H} &\rightarrow \mathbf{R}_+ \\ |\psi\rangle &\mapsto \|\psi\rangle\| = \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle}, \end{aligned} \quad (3.103)$$

d. h. in dem alle *Cauchy-Folgen* einen Grenzwert *in*  $\mathcal{H}$  haben

**Weiterführende Bemerkung (nicht Teil der Vorlesung):**

Die Vollständigkeit ist trivial für endlichdimensionale  $\mathcal{H}$ , zwingt uns aber im Beispiel  $\mathcal{H} = L^2([a, b], dx)$  der quadratintegriblen Funktionen dazu, nicht nur glatte Funktionen zuzulassen. Ein bekanntes Beispiel ist die Approximation eines nicht stetigen Rechtecksignals durch seine Fourierreihe. Differentialoperatoren werden dann auf dichten Untermengen glatter Funktionen definiert und stetig fortgesetzt.

Alle Vektoren die sich nur um einen konstanten Faktor unterscheiden beschreiben den gleichen physikalischen Zustand. Sofern nicht anders angegeben, werden wir deshalb die Zustandsvektoren normieren

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1 \quad (3.104)$$

und berücksichtigen, daß in Superpositionen

$$|\alpha_1 \psi_1 + \alpha_2 \psi_2\rangle = \alpha_1 |\psi_1\rangle + \alpha_2 |\psi_2\rangle \quad (3.105)$$

mit

$$\sqrt{|\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2} = 1 \quad (3.106)$$

nur die *relative* Phase zwischen  $\alpha_1$  und  $\alpha_2$  beobachtbar ist.

### 3.2.2 Bras und Kets

Die Zustandsvektoren werden auch als *Ket*-Vektoren  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  bezeichnet Die linearen Abbildungen  $\phi$  vom Raum der Kets in die komplexen Zahlen bilden selbst einen Vektorraum

$$(\alpha_1 \phi_1 + \alpha_2 \phi_2)(|\psi\rangle) = \alpha_1 \phi_1(|\psi\rangle) + \alpha_2 \phi_2(|\psi\rangle) \quad (3.107)$$

und für jede lineare Abbildung  $\phi : \mathcal{H} \rightarrow \mathbf{C}$  gibt es genau einen Vektor  $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$  mit

$$\begin{aligned} \phi : \mathcal{H} &\rightarrow \mathbf{C} \\ |\psi\rangle &\mapsto \phi(|\psi\rangle) = \langle\phi|\psi\rangle . \end{aligned} \quad (3.108)$$

Deshalb betrachten wir diese linearen Abbildungen als *Bra*-Vektoren  $\langle\phi| \in \mathcal{H}^* \cong \mathcal{H}$ . Wegen der Antilinearität (2.9c') des inneren Produkts im ersten Argument haben wir

$$\langle\alpha_1\phi_1 + \alpha_2\phi_2| = \alpha_1^* \langle\phi_1| + \alpha_2^* \langle\phi_2| . \quad (3.109)$$

### 3.2.3 Observable

Die physikalischen *Observablen*, also die Größen die gemessen werden können, werden durch selbstadjungierte Operatoren

$$A = A^\dagger : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} \quad (3.110)$$

beschrieben. Dabei ist der zu  $A$  adjungierte Operator  $A^\dagger$  durch die Forderung

$$\forall \psi, \phi \in \mathcal{H} : \langle\psi|A^\dagger|\phi\rangle = \langle A\psi|\phi\rangle = \langle\phi|A\psi\rangle^* = \langle\phi|A|\psi\rangle^* \quad (3.111)$$

definiert.

Jeder selbstadjungierte Operator hat einen vollständigen Satz von Eigenvektoren  $|n\rangle$

$$A |n\rangle = a_n |n\rangle \quad (3.112)$$

mit *reellen* Eigenwerten  $a_n \in \sigma_A \subseteq \mathbf{R}$ . Die Menge  $\sigma_A$  aller Eigenwerte des Operators  $A$  heißt das *Spektrum* von  $A$ . Die Eigenwerten können *entartet* sein, d. h. es kann mehr als einen Eigenvektor zum gleichen Eigenwert geben. Im Fall von Eigenwerten  $a_n$  mit diskretem Index  $n \in \mathbf{N}$  sind die Eigenvektoren normierbar und können als **ONB**

$$\langle n|m\rangle = \delta_{nm} \quad (3.113)$$

mit

$$\mathbf{1} = \sum_n |n\rangle \langle n| \quad (3.114)$$

gewählt werden und der Operator  $A$  hat in dieser Basis die Diagonalgestalt

$$A = \sum_n |n\rangle a_n \langle n| \quad (3.115)$$

Im Fall von Eigenwerten  $a(\nu)$  mit kontinuierlichem Parameter  $\nu \in \mathbf{R}$  sind die Eigenvektoren nicht normierbar und werden „auf  $\delta$ -Funktion normiert“

$$\langle \nu | \mu \rangle = \delta(\nu - \mu) \quad (3.116)$$

mit

$$\mathbf{1} = \int_{\sigma_A} d\nu |\nu\rangle \langle \nu| \quad (3.117)$$

und der Diagonalgestalt

$$A = \int_{\sigma_A} d\nu |\nu\rangle a(\nu) \langle \nu|. \quad (3.118)$$

Dann, *und nur dann*, wenn zwei selbstadjungierte Operatoren  $A$  und  $B$  vertauschen

$$[A, B] = AB - BA = 0 \quad (3.119)$$

besitzen sie eine *gemeinsame* vollständige Eigenbasis  $\{|n, m\rangle\}_{n=1,2,\dots; m=1,2,\dots}$

$$A |n, m\rangle = a_n |n, m\rangle \quad (3.120a)$$

$$B |n, m\rangle = b_m |n, m\rangle. \quad (3.120b)$$

Um physikalische Zustände zu charakterisieren, muß man einen *vollständigen Satz von vertauschenden Observablen* suchen, deren Eigenwerte als *Quantenzahlen* den Zustand eindeutig festlegen können, wenn die Eigenwerte einer Observablen entartet sind. Die Zerlegung der Eins und die Diagonalgestalt der Operatoren haben dann die Form

$$\mathbf{1} = \sum_{n,m} |n, m\rangle \langle n, m| \quad (3.121a)$$

$$A = \sum_{n,m} |n, m\rangle a_n \langle n, m| \quad (3.121b)$$

$$B = \sum_{n,m} |n, m\rangle b_m \langle n, m|. \quad (3.121c)$$

Der Fall von nicht-vertauschenden Observablen ist der interessante Fall, in dem die Phänomene der **QM** von der klassischen Physik abweichen.

Im allgemeinen Fall<sup>7</sup> kommt es vor, daß die Eigenwerte eines selbstadjungierten Operators sowohl diskrete, als auch kontinuierliche Werte annehmen können

$$A = \sum_n |n\rangle a_n \langle n| + \int_{\sigma_A} d\nu |\nu\rangle a(\nu) \langle \nu| = \int_n |n\rangle a_n \langle n| \quad (3.122a)$$

<sup>7</sup>Z. B. beim Wasserstoffatom sind die negativen Eigenwerte des Hamiltonoperators diskret und die positiven kontinuierlich.

$$\mathbf{1} = \sum_n |n\rangle \langle n| + \int_{\sigma_A} d\nu |\nu\rangle \langle \nu| = \int_{\sigma_A} |n\rangle \langle n| \quad (3.122b)$$

mit  $a_n \in \sigma_A$  und  $a(\nu) \in \sigma_A$

$$A |n\rangle = a_n |n\rangle \quad (3.123a)$$

$$A |\nu\rangle = a(\nu) |\nu\rangle \quad (3.123b)$$

sowie

$$\langle n|m\rangle = \delta_{nm} \quad (3.124a)$$

$$\langle \nu|\mu\rangle = \delta(\nu - \mu) \quad (3.124b)$$

$$\langle \nu|n\rangle = 0. \quad (3.124c)$$

### 3.2.4 Gemischte Zustände

Wenn sich das System mit Wahrscheinlichkeit  $p_n \geq 0$  in einem der eins normierten Zustände  $\{|n\rangle\}$  befindet, dann wird es durch die *Dichtematrix*

$$\rho = \sum_n p_n |n\rangle \langle n| \quad (3.125)$$

mit

$$\text{tr } \rho = \sum_n p_n = 1 \quad (3.126)$$

beschrieben und der Erwartungswert der Observablen  $A$  ist

$$E_\rho(A) = \text{tr}(\rho A) = \sum_n p_n \langle n|A|n\rangle. \quad (3.127)$$

#### Zusatzmaterial (nicht Teil der Vorlesung):

Glücklicherweise sind alle Eigenvektoren von selbstadjungierten Operatoren  $\rho$  mit  $\text{tr } \rho = 1$  normierbar<sup>8</sup>, sodaß wir der Versuchung widerstehen können und müssen, „Dichtematrizen“ der Form

$$\tilde{\rho} = \int d\nu p(\nu) |\nu\rangle \langle \nu|$$

mit  $\langle \nu|\mu\rangle = \delta(\nu - \mu)$  zu definieren. In der Tat führt der Versuch, eine Spur zu berechnen, zu Unsinn

$$\text{tr } \tilde{\rho} = \int d\nu d\mu p(\nu) \langle \mu|\nu\rangle \langle \nu|\mu\rangle = \int d\nu p(\nu) \langle \nu|\nu\rangle = \text{„}\delta(0)\text{“}.$$

### 3.2.5 Messung

Die möglichen Ergebnisse für die Messung einer Observablen  $A$  sind *nur* ihre Eigenwerte  $a \in \sigma_A$ . Nach einer Messung mit dem Ergebnis  $a$  befindet sich das System in einem Eigenzustand  $|a\rangle$  zum Eigenwert  $a$ , bzw. in einer Superposition solcher Eigenzustände, falls  $a$  entartet ist. Diesen Übergang bezeichnet man als *Kollaps der Wellenfunktion*. Wenn sich das System vor der Messung im reinen Zustand  $|\psi\rangle$  befand, ist die *Wahrscheinlichkeit*,  $a$  zu messen

$$p_a = |\langle a|\psi\rangle|^2 \quad (3.128)$$

falls  $\langle a|a\rangle = 1$ . Falls  $|a\rangle$  nicht normierbar ist, sondern  $\langle a|a'\rangle = \delta(a - a')$  gilt, ist

$$p(a) = |\langle a|\psi\rangle|^2 \quad (3.129)$$

die entsprechende *Wahrscheinlichkeitsdichte* am Wert  $a$ . Der Erwartungswert für wiederholte Messungen der Observablen  $A$  ist im reinen Zustand  $|\psi\rangle$

$$E_\psi(A) = \langle \psi|A|\psi\rangle \quad (3.130)$$

und im gemischten Zustand  $\rho$

$$E_\rho(A) = \text{tr}(\rho A). \quad (3.131)$$

Wenn man eine Messung von  $A$  im Zustand  $|\psi\rangle$  durchführt, aber das Ergebnis ignoriert, ist das System nach der Messung im gemischten Zustand

$$\rho' = \sum_n |\langle n|\psi\rangle|^2 |n\rangle \langle n|. \quad (3.132)$$

Diese Dichtematrix ist in der Eigenbasis von  $A$  diagonal. Durch die Messung verschwinden die *außerdiagonalen* Anteile von

$$|\psi\rangle \langle \psi| = \sum_{n,m} \langle \psi|m\rangle \langle n|\psi\rangle |n\rangle \langle m|. \quad (3.133)$$

Dies ist der *Kollaps der Wellenfunktion*.

### 3.2.6 Tensorprodukte von Zustandsräumen

Wenn wir zwei Systeme zusammenführen, die durch Zustandsvektoren in den Hilberträumen  $\mathcal{H}_1$  und  $\mathcal{H}_2$  beschrieben werden, wird das Gesamtsystem durch Zustandsvektoren im Tensorprodukt

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \quad (3.134)$$

beschrieben. Wichtiges Beispiel sind die quadratintegralen Funktionen auf den Intervallen  $[a_1, b_1]$  und  $[a_2, b_2]$ . Deren Tensorprodukt sind die quadratintegralen Funktionen auf dem Produkt  $[a_1, b_1] \times [a_2, b_2]$

$$L^2([a_1, b_1], dx_1) \otimes L^2([a_2, b_2], dx_2) = L^2([a_1, b_1] \times [a_2, b_2], dx_1 dx_2). \quad (3.135)$$

Insbesondere sind die entsprechenden Wellenfunktionen

$$\psi(x_1, x_2) = \langle x_1, x_2 | \psi \rangle = (\langle x_1 | \otimes \langle x_2 |) | \psi \rangle \quad (3.136)$$

nicht nur faktorisierte Funktionen der Form

$$\psi(x_1)\psi(x_2) = \langle x_1 | \psi \rangle \langle x_2 | \psi \rangle \quad (3.137)$$

sondern *alle* quadratintegralen Funktionen. Diese können aber durch Reihen von faktorisierten Funktionen approximiert werden.

### 3.2.7 Zeitliche Entwicklung

#### Schrödingerbild

Solange daß System nicht durch eine Messung gestört wird, ändern sich sein reiner Zustand gemäß der *Schrödinger-Gleichung*

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle \quad (3.138)$$

mit einem geeigneten selbstadjungierten *Hamiltonoperator*  $H(t) = H^\dagger(t) : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ . In einem autonomen System ist der Hamiltonoperator konstant  $H(t) = H$ , aber in vielen Experimenten wird das System von außen gesteuert. In einem autonomen System kann man die *stationäre Schrödingergleichung*

$$H |n\rangle = E_n |n\rangle \quad (3.139)$$

lösen und die Zustände  $|\psi\rangle$  in die Energieeigenzustände entwickeln

$$|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n | \psi \rangle = \sum_n \psi_n |n\rangle, \quad (3.140)$$

deren Zeitabhängigkeit dann

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n |n\rangle \quad (3.141)$$

ist. Die Eigenwerte  $E_n \in \sigma_H$  sind die möglichen stationären Energieniveaus, die das System einnehmen kann.

Der „richtige“ Hamiltonoperator muß experimentell bestimmt werden. Dazu macht man einen Ansatz, der durch Symmetrieüberlegungen, Konsistenzbetrachtungen und Dimensionsanalyse geleitet ist und von Korrespondenzen zu einem klassischen System inspiriert werden kann. Die daraus resultierenden Vorhersagen für Messungen werden mit dem Experiment verglichen. Damit werden freie Parameter bestimmt, gegebenenfalls der Ansatz verbessert und die Prozedur iteriert.

Das innere Produkt von zwei Zuständen, deren zeitliche Entwicklung vom gleichen Hamiltonoperator beschrieben wird, ändert sich nicht

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \phi(t) \rangle &= \left\langle \psi(t) \left| \frac{1}{i\hbar} H(t) \phi(t) \right. \right\rangle + \left\langle \frac{1}{i\hbar} H(t) \psi(t) \left| \phi(t) \right. \right\rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | H(t) \phi(t) \rangle - \frac{1}{i\hbar} \langle H(t) \psi(t) | \phi(t) \rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | H(t) | \phi(t) \rangle - \frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | H^\dagger(t) | \phi(t) \rangle = 0. \end{aligned} \quad (3.142)$$

Die zeitliche Änderung des Erwartungswerts einer Observablen  $A$  wird durch das *Ehrenfest Theorem*

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} E_{\psi(t)}(A) &= \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle \\ &= \left\langle \psi(t) \left| \frac{1}{i\hbar} [A, H] \right| \psi(t) \right\rangle = E_{\psi(t)} \left( \frac{1}{i\hbar} [A, H] \right) \end{aligned} \quad (2.200)$$

beschrieben. Im Falle eines gemischten Zustands finden wir

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho(t) = [H(t), \rho(t)] \quad (3.143)$$

und die analoge Formel

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} E_{\rho(t)}(A) &= \frac{d}{dt} \text{tr}(\rho(t)A) = \text{tr} \left( \frac{1}{i\hbar} [H, \rho(t)] A \right) \\ &= \text{tr} \left( \rho(t) \frac{1}{i\hbar} [A, H] \right) = E_{\rho(t)} \left( \frac{1}{i\hbar} [A, H] \right). \end{aligned} \quad (3.144)$$

#### Heisenbergbild

Es ist nicht nötig, die zeitliche Entwicklung eines Systems durch eine Änderung seines Zustandsvektors zu beschreiben. Man kann stattdessen die Observablen zeitabhängig

$$A(t) = U^\dagger(t, t_0) A(t_0) U(t, t_0) \quad (3.145)$$

machen, die dann die Differentialgleichung

$$\frac{dA}{dt}(t) = \frac{i}{\hbar} [H(t), A(t)] \quad (3.146)$$

erfüllen und Anfangsbedingungen bei  $t_0$

$$A(t_0) = A. \quad (3.147)$$

Wenn dann die ein zeitunabhängiger Zustandsvektor

$$|\psi\rangle = |\psi(t_0)\rangle \quad (3.148)$$

gewählt wird, erhält man die gleichen Matrixelemente wie im Schrödingerbild

$$\begin{aligned} \langle \psi | A(t) | \phi \rangle &= \langle \psi(t_0) | A(t) | \phi(t_0) \rangle = \langle \psi(t_0) | U^\dagger(t, t_0) A(t_0) U^\dagger(t, t_0) | \phi(t_0) \rangle = \\ &\langle U(t, t_0) \psi(t_0) | A(t_0) | U(t, t_0) \phi(t_0) \rangle = \langle \psi(t) | A(t_0) | \phi(t) \rangle = \langle \psi(t) | A | \phi(t) \rangle. \end{aligned} \quad (3.149)$$

In der zeitabhängigen Störungstheorie (siehe Abschnitt 10.2) wird es sinnvoll sein, einen Teil des Hamiltonoperators für die Zeitentwicklung der Observablen und den Rest für die Zeitentwicklung der Zustandsvektoren zu verwenden.

## —4—

WELLENFUNKTIONEN IM ORTS- UND  
IMPULSRAUM

Wenn wir Teilchen im Anschauungsraum  $\mathbf{R}^3$  oder einer Teilmenge davon betrachten, können wir wieder Ortseigenzustände

$$\vec{X} |\vec{x}\rangle = \vec{x} |\vec{x}\rangle, \quad (4.1)$$

oder komponentenweise

$$X_i |\vec{x}\rangle = x_i |\vec{x}\rangle, \quad (4.2)$$

diesmal mit

$$\langle \vec{x} | \vec{y} \rangle = \delta^3(\vec{x} - \vec{y}) = \delta(x_1 - y_1) \delta(x_2 - y_2) \delta(x_3 - y_3) \quad (4.3)$$

eingeführen. In (4.2) haben wir benutzt, daß die Komponenten des Orts gleichzeitig bestimmt werden können und die Observablen deshalb vertauschen müssen

$$[X_i, X_j] = 0. \quad (4.4)$$

Damit können wir jeden Zustand  $|\psi(t)\rangle \in L^2(\mathbf{R}^3, d^3x)$  eine Wellenfunktion

$$\psi(\vec{x}, t) = \langle \vec{x} | \psi(t) \rangle \quad (4.5)$$

zuordnen und das Skalarprodukt kann als

$$\langle \phi(t) | \psi(t) \rangle = \int d^3x \langle \phi(t) | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | \psi(t) \rangle = \int d^3x \phi^*(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t) \quad (4.6)$$

geschrieben werden. Wir können die Argumente aus Abschnitt 3.1.4 für Translationen in jede Richtung wiederholen und finden *Impulsoperatoren*  $\vec{P}$  mit kanonischen Vertauschungsrelationen

$$[X_i, P_j] = i\hbar \delta_{ij} \quad (4.7)$$

und

$$(\vec{P}\psi)(\vec{x}, t) = \langle \vec{x} | \vec{P} | \psi(t) \rangle = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \langle \vec{x} | \psi(t) \rangle = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \psi(\vec{x}, t) \quad (4.8)$$

bzw.

$$(P_i \psi)(t) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x_i}(\vec{x}, t). \quad (4.9)$$

Die **SG** für den Zustand  $|\psi(t)\rangle$

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle \quad (4.10)$$

bedeutet die Wellenfunktionen

$$0 = \left\langle \vec{x} \left| i\hbar \frac{d}{dt} - H \right| \psi(t) \right\rangle = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(\vec{x}, t) - (H\psi)(\vec{x}, t) \quad (4.11)$$

also

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(\vec{x}, t) = (H\psi)(\vec{x}, t). \quad (4.12)$$

#### 4.1 **SG** für freie Teilchen

Als Hamiltonoperator für ein freies Teilchen bietet sich die kinetische Energie

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m} \quad (4.13)$$

an und damit

$$(H\psi)(\vec{x}, t) = \frac{1}{2m} \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \left( \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \psi(\vec{x}, t) \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{x}, t) \quad (4.14)$$

mit dem *Laplace-Operator*

$$\Delta = \vec{\nabla} \vec{\nabla} = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}. \quad (4.15)$$

Weil Hamiltonoperator und alle Komponenten des Impulsoperators vertauschen

$$\left[ H, \vec{P} \right] = 0, \quad (4.16)$$

sollten als Eigenzustände des Hamiltonoperators auch Eigenzustände  $|\vec{k}, t\rangle$  des Impulsoperators

$$\vec{P} |\vec{k}, t\rangle = \hbar \vec{k} |\vec{k}, t\rangle \quad (4.17)$$

gewählt werden können. Als Lösungsansatz bieten sich also ebene Wellen  $|\vec{k}, t\rangle$  mit Wellenfunktion

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{x}, t) = \langle \vec{x} | \vec{k}, t \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{-i\omega(\vec{k})t + i\vec{k}\vec{x}}, \quad (4.18)$$

Dispersionsrelation  $\omega(\vec{k})$  und Normierung

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}, t | \vec{k}', t \rangle &= \int d^3x \psi_{\vec{k}}^*(\vec{x}, t) \psi_{\vec{k}'}(\vec{x}, t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3x e^{-i(\omega(\vec{k}) - \omega(\vec{k}'))t + i(\vec{k} - \vec{k}')\vec{x}} \\ &= \delta^3(\vec{k} - \vec{k}') e^{-i(\omega(\vec{k}) - \omega(\vec{k}'))t} = \delta^3(\vec{k} - \vec{k}') \end{aligned} \quad (4.19)$$

an. Die **SG**

$$0 = i\hbar \frac{\partial \psi_{\vec{k}}}{\partial t}(\vec{x}, t) - (H \psi_{\vec{k}})(\vec{x}, t) = \hbar\omega(\vec{k})\psi_{\vec{k}}(\vec{x}, t) - \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \psi_{\vec{k}}(\vec{x}, t) \quad (4.20)$$

ergibt für die Dispersionsrelation

$$\omega(\vec{k}) = \frac{\hbar \vec{k}^2}{2m}. \quad (4.21)$$

Insbesondere finden wir

$$E(\vec{k}) = \hbar\omega(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \geq 0, \quad (4.22)$$

also

$$\sigma_H = [0, \infty) \subset \mathbf{R}. \quad (4.23)$$

D. h. es gibt keine normierbaren Eigenzustände und diskrete Eigenwerten, sondern nur nicht normierbare Eigenzustände und kontinuierliche Eigenwerte.

#### 4.1.1 Superposition und Wellenpakete

Aufgrund der Linearität der **SG** ist die Superposition zweier Lösungen mit *konstanten* Koeffizienten

$$|\psi(t)\rangle = \alpha_1 |\psi_1(t)\rangle + \alpha_2 |\psi_2(t)\rangle \quad (4.24a)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_i(t)\rangle = H |\psi_i(t)\rangle \quad (4.24b)$$

wieder eine Lösung

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle &= \alpha_1 i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_1(t)\rangle + \alpha_2 i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_2(t)\rangle \\ &= \alpha_1 H |\psi_1(t)\rangle + \alpha_2 H |\psi_2(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle. \end{aligned} \quad (4.25)$$

Damit ist auch jedes *Wellenpaket*

$$|\psi(t)\rangle = \int d^3k \hat{\psi}(\vec{k}) |\vec{k}, t\rangle \quad (4.26)$$

wieder eine Lösung mit der Wellenfunktion im Ortsraum

$$\psi(\vec{x}, t) = \langle \vec{x} | \psi(t) \rangle = \int d^3k \hat{\psi}(\vec{k}) \langle \vec{x} | \vec{k}, t \rangle = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}} \hat{\psi}(\vec{k}) e^{-i\omega(\vec{k})t + i\vec{k}\vec{x}} \quad (4.27)$$

Vorlesung 12: Fr, 07. 06. 2019

mit innerem Produkt und Normierung

$$\langle \psi_1(t) | \psi_2(t) \rangle = \int d^3k_1 d^3k_2 \hat{\psi}_1^*(\vec{k}_1) \langle \vec{k}_1, t | \vec{k}_2, t \rangle \hat{\psi}_2(\vec{k}_2) = \int d^3k \hat{\psi}_1^*(\vec{k}) \hat{\psi}_2(\vec{k}). \quad (4.28)$$

Ein typisches Beispiel ist ein Gaußsches Wellenpaket mit isotroper Breite  $a$  und Schwerpunkt  $\vec{k}_0$  im Impulsraum

$$\hat{\psi}_{\vec{k}_0, a}(\vec{k}) = \frac{1}{(2\pi a^2)^{3/4}} e^{-\frac{(\vec{k}-\vec{k}_0)^2}{4a^2}}. \quad (4.29)$$

Wegen der Produktform der Wellenfunktion

$$e^{-\frac{(\vec{k}-\vec{k}_0)^2}{4a^2}} = e^{-\frac{1}{4a^2} \sum_{i=1}^3 (k_i - k_{0,i})^2} = \prod_{i=1}^3 e^{-\frac{1}{4a^2} (k_i - k_{0,i})^2} \quad (4.30)$$

kann man bei Gaußschen Wellenpaketen die Dimensionen unabhängig voneinander behandeln. Zunächst können wir die Normierung, Lage des Schwerpunkts und Breite mit der allgemeinen Formel für Gaußsche Integrale<sup>1</sup> überprüfen

<sup>1</sup>Gaußverteilungen mit Potenzen:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-\frac{(k-b)^2}{2a^2}} = 1 \quad (4.31a)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \int_{-\infty}^{\infty} dk k e^{-\frac{(k-b)^2}{2a^2}} = b \quad (4.31b)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \int_{-\infty}^{\infty} dk k^2 e^{-\frac{(k-b)^2}{2a^2}} = a^2 + b^2, \quad (4.31c)$$

(dies folgt z. B. aus (3.31) mit Ableitungen nach  $x$  und  $x \rightarrow 0$ .)

$$\begin{aligned} \langle \psi_{\vec{k}_0,a}(t) | \psi_{\vec{k}_0,a}(t) \rangle &= \int d^3k \left| \hat{\psi}_{\vec{k}_0,a}(\vec{k}) \right|^2 \\ &= \frac{1}{(2\pi a^2)^{3/2}} \int d^3k e^{-\frac{(\vec{k}-\vec{k}_0)^2}{2a^2}} = \prod_{i=1}^3 \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \int dk_i e^{-\frac{(k_i-k_{0,i})^2}{2a^2}} = 1 \end{aligned} \quad (4.32a)$$

$$\langle k_i \rangle = \int d^3k k_i \left| \hat{\psi}_{\vec{k}_0,a}(\vec{k}) \right|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \int dk_i k_i e^{-\frac{(k_i-k_{0,i})^2}{2a^2}} = k_{0,i} \quad (4.32b)$$

$$\begin{aligned} \langle (k_i - \langle k_i \rangle)^2 \rangle &= \langle k_i^2 \rangle - \langle k_i \rangle^2 = \int d^3k k_i^2 \left| \hat{\psi}_{\vec{k}_0,a}(\vec{k}) \right|^2 - k_{0,i}^2 \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \int dk_i k_i^2 e^{-\frac{(k_i-k_{0,i})^2}{2a^2}} - k_{0,i}^2 = a^2 \end{aligned} \quad (4.32c)$$

Die zugehörige Wellenfunktion im Ortsraum in einer Dimension

$$\begin{aligned} \psi_{k_0,a}(x, t) &= \int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} \hat{\psi}_{k_0,a}(k) e^{-i\omega(k)t + ikx} \\ &= \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2\pi a}}} \int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(k-k_0)^2}{4a^2}} e^{-i\omega(k)t + ikx} \\ &= \left( \frac{2a^2/\pi}{1 + 4\hbar^2 a^4 t^2 / m^2} \right)^{1/4} e^{-a^2 \frac{(x - \hbar k_0 t / m)^2}{1 + 2i\hbar a^2 t / m} + ik_0(x - \hbar k_0 t / m)} e^{i \frac{\hbar k_0^2 t}{2m} - i \frac{1}{2} \arctan \frac{2\hbar a^2 t}{m}} \end{aligned} \quad (4.33)$$

ist als Fouriertransformation (3.31) einer Gaußverteilung wieder eine Gaußverteilung. Die Terme  $x - \hbar k_0 t / m$  wurden dabei zum leichteren Vergleich mit der Wellenfunktion bei  $t = 0$

$$\psi_{k_0,a}(x, 0) = \left( \frac{2a^2}{\pi} \right)^{1/4} e^{-a^2 x^2 + ik_0 x} \quad (4.34)$$

zusammengefasst. Die Wahrscheinlichkeitsdichte im Ortsraum am Punkt  $x$

$$|\psi_{k_0,a}(x, t)|^2 = \left( \frac{2a^2/\pi}{1 + 4\hbar^2 a^4 t^2 / m^2} \right)^{1/2} e^{-\frac{2a^2}{1 + 4\hbar^2 a^4 t^2 / m^2} (x - \hbar k_0 t / m)^2} \quad (4.35)$$

ist eine Gaußverteilung mit der Breite

$$\Delta x(t) = \frac{1}{2a} \sqrt{1 + \frac{4\hbar^2 a^4 t^2}{m^2}} \quad (4.36a)$$

die ihren Schwerpunkt an der mit der Geschwindigkeit  $v = \hbar k_0 / m$  gleichförmig bewegten Stelle

$$x_0(t) = \frac{\hbar k_0}{m} t \quad (4.36b)$$

hat. Weil die Dimensionen auch im nicht-isotropen Fall

$$\hat{\psi}_{\vec{k}_0, \vec{a}}(\vec{k}) = \prod_{i=1}^3 \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2\pi}a_i}} e^{-\frac{(k_i - k_{0,i})^2}{4a_i^2}} \quad (4.37)$$

unabhängig voneinander behandelt werden können, finden wir für die Breiten in jeder Richtung

$$\Delta x_i(t) = \frac{1}{2a_i} \sqrt{1 + \frac{4\hbar^2 a_i^4 t^2}{m^2}} \quad (4.38a)$$

und den gleichförmig bewegten Schwerpunkt

$$\vec{x}_0(t) = \frac{\hbar \vec{k}_0}{m} t. \quad (4.38b)$$

#### 4.1.2 Unschärferelation

Weil der Ort im Ortsraum und der Impuls im Impulsraum per Multiplikation wirken, können wir die Erwartungswerte und Schwankungsquadrate sofort aus den Gaußverteilungen ablesen

$$\langle \psi_{\vec{k}_0, \vec{a}}(t) | X_i | \psi_{\vec{k}_0, \vec{a}}(t) \rangle = \frac{\hbar k_{0,i}}{m} t \quad (4.39a)$$

$$\Delta X_i = \frac{1}{2a_i} \sqrt{1 + \frac{4\hbar^2 a_i^4 t^2}{m^2}} \quad (4.39b)$$

$$\langle \psi_{\vec{k}_0, \vec{a}}(t) | P_i | \psi_{\vec{k}_0, \vec{a}}(t) \rangle = \hbar k_{0,i} \quad (4.39c)$$

$$\Delta P_i = \hbar a_i \quad (4.39d)$$

also

$$\Delta X_i \Delta P_j = \frac{\hbar a_j}{2 a_i} \sqrt{1 + \frac{4\hbar^2 a_i^4 t^2}{m^2}} \geq \frac{\hbar a_j}{2 a_i}. \quad (4.40)$$

Man kann also für hinreichend kleine  $|t|$ , bei nicht isotroper Breite mit

$$a_j < \frac{a_i}{\sqrt{1 + \frac{4\hbar^2 a_i^4 t^2}{m^2}}} \quad (4.41)$$

für  $i \neq j$  auch

$$(\Delta X_i)(\Delta P_j) < \frac{\hbar}{2} \quad (4.42)$$

erreichen, aber in jedem Fall gilt

$$(\Delta X_i)(\Delta P_i) \geq \frac{\hbar}{2} \quad (4.43)$$

im Einklang mit der Heisenbergschen Unschärferelation. Diese wird für  $t = 0$  minimiert

$$\Delta X_i \Delta P_i = \frac{\hbar}{2}. \quad (4.44)$$

### 4.1.3 Dispersion des Wellenpakets

Es fällt aber auf, daß die Breite des Wellenpakets im Ortsraum nicht konstant ist. Vielmehr zerfließt es in der Zukunft nachdem es sich in der Vergangenheit kontrahiert hat. Die Tatsache, daß das Wellenpaket seine minimale Ausdehnung zum Zeitpunkt  $t = 0$  annimmt, liegt an der Wahl der relativen Phasen der Impulseigenzustände. Man kann durch Multiplikation der ebenen Wellen mit  $e^{i\omega(\vec{k})t_0}$  auch jeden anderen Zeitpunkt  $t_0$  wählen. Wie durch die Rechnung gezeigt, tritt dieser Effekt auch ohne Wechselwirkungen auf.

## 4.2 Kontinuitätsgleichung

Nach der Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Wellenfunktion

$$\psi(\vec{x}, t) = \langle \vec{x} | \psi(t) \rangle \quad (4.45)$$

ist die *Wahrscheinlichkeitsdichte* am Ort  $\vec{x}$  zur Zeit  $t$

$$\rho(\vec{x}, t) = \psi^*(\vec{x}, t)\psi(\vec{x}, t). \quad (4.46)$$

Wir können eine *Wahrscheinlichkeitsstromdichte*

$$\vec{j}(\vec{x}, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi^*(\vec{x}, t) \vec{\nabla} \psi(\vec{x}, t) - \psi(\vec{x}, t) \vec{\nabla} \psi^*(\vec{x}, t) \right) \quad (4.47)$$

definieren, deren Integral nach partieller Integration<sup>2</sup>

$$\begin{aligned} \int d^3x \vec{j}(\vec{x}, t) &= \int d^3x \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi^*(\vec{x}, t) \vec{\nabla} \psi(\vec{x}, t) - \vec{\nabla} \psi^*(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t) \right) \\ &= \frac{1}{m} \int d^3x \psi^*(\vec{x}, t) \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \psi(\vec{x}, t) = \frac{1}{m} \langle \psi(t) | \vec{P} | \psi(t) \rangle = \frac{1}{m} E_{\psi(t)}(\vec{P}) \end{aligned} \quad (4.48)$$

als Erwartungswert der Geschwindigkeit  $\vec{v} = \vec{P}/m$  interpretiert werden kann. Die Aufteilung der Gradienten in (4.47) ist so gewählt, daß die *Kontinuitätsgleichung*

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}(\vec{x}, t) + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{x}, t) = 0 \quad (4.49)$$

gilt:

<sup>2</sup>Die Randterme müssen verschwinden, damit  $|\psi(t)\rangle$  normierbar ist.

Die Änderung der Wahrscheinlichkeitsdichte in einem Volumenelement ist gleich dem negativen Fluß des Wahrscheinlichkeitsstroms aus diesem Volumenelement heraus.

Um (4.49) zu zeigen, berechnen wir die zeitliche Änderung der Wahrscheinlichkeitsdichte mit der Produktregel und der **SG**

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t}(\vec{x}, t) &= \frac{\partial \psi^*}{\partial t}(\vec{x}, t)\psi(\vec{x}, t) + \psi^*(\vec{x}, t)\frac{\partial \psi}{\partial t}(\vec{x}, t) \\ &= -\frac{1}{i\hbar}(H\psi)^*(\vec{x}, t)\psi(\vec{x}, t) + \frac{1}{i\hbar}\psi^*(\vec{x}, t)H\psi(\vec{x}, t).\end{aligned}\quad (4.50)$$

Wenn der Hamiltonoperator als

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{x}, t)\quad (4.51)$$

mit  $V^*(\vec{x}, t) = V(\vec{x}, t)$  geschrieben werden kann, folgt

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t}(\vec{x}, t) &= \frac{\hbar}{2mi}\Delta\psi^*(\vec{x}, t)\psi(\vec{x}, t) - \frac{1}{i\hbar}V(\vec{x}, t)\psi^*(\vec{x}, t)\psi(\vec{x}, t) \\ &\quad - \frac{\hbar}{2mi}\psi^*(\vec{x}, t)\Delta\psi(\vec{x}, t) + \frac{1}{i\hbar}\psi^*(\vec{x}, t)V(\vec{x}, t)\psi(\vec{x}, t) \\ &= \frac{\hbar}{2mi}(\Delta\psi^*(\vec{x}, t)\psi(\vec{x}, t) - \psi^*(\vec{x}, t)\Delta\psi(\vec{x}, t)).\end{aligned}\quad (4.52)$$

Andererseits ist die Divergenz der Wahrscheinlichkeitsstromdichte

$$\begin{aligned}\vec{\nabla}\vec{j}(\vec{x}, t) &= \frac{\hbar}{2mi}\left(\vec{\nabla}\psi^*(\vec{x}, t)\vec{\nabla}\psi(\vec{x}, t) + \psi^*(\vec{x}, t)\Delta\psi(\vec{x}, t) \right. \\ &\quad \left. - \vec{\nabla}\psi(\vec{x}, t)\vec{\nabla}\psi^*(\vec{x}, t) - \psi(\vec{x}, t)\Delta\psi^*(\vec{x}, t)\right) \\ &= \frac{\hbar}{2mi}(\psi^*(\vec{x}, t)\Delta\psi(\vec{x}, t) - \psi(\vec{x}, t)\Delta\psi^*(\vec{x}, t)) = -\frac{\partial \rho}{\partial t}(\vec{x}, t).\end{aligned}\quad (4.53)$$

Wenn wir die Wahrscheinlichkeit in einem Volumen  $V$  berechnen

$$p_V(t) = \int_V d^3x \rho(\vec{x}, t) \xrightarrow{V \rightarrow \mathbf{R}^3} 1\quad (4.54)$$

folgt für die zeitliche Änderung

$$\begin{aligned}\frac{dp_V}{dt}(t) &= \int_V d^3x \frac{\partial \rho}{\partial t}(\vec{x}, t) = - \int_V d^3x \vec{\nabla}\vec{j}(\vec{x}, t) \\ &\stackrel{\text{Satz von Gauß}}{=} - \int_{\partial V} d^2\vec{\sigma}(\vec{x}) \vec{j}(\vec{x}, t) \xrightarrow{V \rightarrow \mathbf{R}^3} 0\end{aligned}\quad (4.55)$$

wobei im letzten Schritt ausgenutzt wurde, daß  $\psi(\vec{x}, t)$  für  $|\vec{x}| \rightarrow \infty$  schnell genug verschwinden muß, damit  $|\psi(t)\rangle$  normierbar bleibt. Damit ist die Gesamtwahrscheinlichkeit

$$p_{\mathbf{R}^3}(t) = 1 = \text{const.} \quad (4.56)$$

wie erwartet konstant.

### 4.3 Stationäre Lösungen der SG

Wenn man Eigenvektoren  $|E\rangle$  des Hamiltonoperators  $H$  mit Eigenwert  $E$

$$H |E\rangle = E |E\rangle \quad (4.57)$$

betrachtet, findet man besonders einfache Lösungen der SG

$$|E, t\rangle = e^{-iEt/\hbar} |E\rangle, \quad (4.58)$$

weil

$$i\hbar \frac{d}{dt} |E, t\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} e^{-iEt/\hbar} |E\rangle = e^{-iEt/\hbar} E |E\rangle = e^{-iEt/\hbar} H |E\rangle = H |E, t\rangle. \quad (4.59)$$

Wir haben gefordert, daß der Hamiltonoperator selbstadjungiert  $H = H^\dagger$  ist. Deshalb gibt es eine vollständige Basis von Eigenvektoren

$$H |E_n\rangle = E_n |E_n\rangle \quad (4.60a)$$

$$H |E\rangle = E |E\rangle \quad (4.60b)$$

in die jeder Zustand mit

$$\psi_n = \langle E_n | \psi \rangle \quad (4.60c)$$

$$\psi(E) = \langle E | \psi \rangle \quad (4.60d)$$

entwickelt werden kann<sup>3</sup>

$$|\psi\rangle = \sum_n \psi_n |E_n\rangle + \int_{\sigma_H} dE \psi(E) |E\rangle = \sum_n \psi_n |E_n\rangle. \quad (4.60e)$$

Dann ist

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n |E_n\rangle + \int_{\sigma_H} dE e^{-iEt/\hbar} \psi(E) |E\rangle = \sum_n e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n |E_n\rangle \quad (4.61)$$

<sup>3</sup>Etwaige entartete Zustände müssen mit Summen über weitere Quantenzahlen berücksichtigt werden.

eine Lösung der SG mit

$$|\psi(0)\rangle = |\psi\rangle . \quad (4.62)$$

Deshalb werden wir im Folgenden vorwiegend an den Lösungen der *stationären Schrödingergleichung*

$$H |E\rangle = E |E\rangle \quad (4.63)$$

interessiert sein. Wenn der Hamiltonoperator als

$$H = \frac{1}{2m} \vec{P}^2 + V(\vec{X}) \quad (4.64)$$

mit einem geeigneten Potential geschrieben werden kann, wirkt er im Ortsraum als

$$(H\psi)(\vec{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi(\vec{x}, t) + V(\vec{x})\psi(\vec{x}, t) \quad (4.65)$$

und wir finden als stationäre SG die *partielle Differentialgleichung*

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi(\vec{x}) + V(\vec{x})\psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x}), \quad (4.66)$$

die mit geeigneten Randbedingungen zu lösen ist.

## —5—

## EINDIMENSIONALE SYSTEME

5.1 *Der harmonische Oszillator*

Das Potential für einen harmonischen Oszillator mit Masse  $m$  und Frequenz  $\omega$  ist

$$V(x) = \frac{m\omega^2}{2}x^2 \quad (5.1)$$

und damit der Hamiltonoperator

$$H = \frac{1}{2m}P^2 + \frac{m\omega^2}{2}X^2. \quad (5.2)$$

5.1.1 *Ortsraum*

Weil der Hamiltonoperator für den harmonischen Oszillator ausgedrückt in Ort und Impuls besonders einfach ist, bietet es sich an, die stationäre **SG** als Differentialgleichung für die Ortsraumwellenfunktionen

$$(H\psi)(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2}(x) + \frac{m\omega^2}{2}x^2\psi(x) = E\psi(x) \quad (5.3)$$

mit der Normierbarkeitsbedingung

$$\langle\psi|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 < \infty \quad (5.4)$$

auszudrücken. Diese Gleichung kann mit einem Potenzreihenansatz gelöst werden, der auf Produkte von Hermite-Polynomen mit einer Gauß-Funktion führt und, z. B., in der Vorlesung Mathematik 4 diskutiert wird.

## 5.1.2 Erzeuger und Vernichter

Vorlesung 13: Fr, 14.06.2019

Eine elegante Lösung beruht auf der Beobachtung, daß der Hamiltonoperator auch in der Form

$$H = \hbar\omega \left( a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \quad (5.5)$$

mit den zueinander aber *nicht* selbstadjungierten Operatoren

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( X + \frac{i}{m\omega} P \right) \quad (5.6a)$$

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( X - \frac{i}{m\omega} P \right) \quad (5.6b)$$

geschrieben werden kann. In der Tat erhält man

$$\begin{aligned} a^\dagger a &= \frac{m\omega}{2\hbar} \left( X - \frac{i}{m\omega} P \right) \left( X + \frac{i}{m\omega} P \right) \\ &= \frac{m\omega}{2\hbar} \left( X^2 + \frac{i}{m\omega} (XP - PX) + \frac{1}{m^2\omega^2} P^2 \right) \\ &= \frac{m\omega^2}{2\hbar\omega} X^2 - \frac{1}{2} + \frac{1}{2m\hbar\omega} P^2 = \frac{1}{\hbar\omega} H - \frac{1}{2}. \end{aligned} \quad (5.7)$$

Ort  $X$  und Impuls  $P$  können mit

$$X = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^\dagger) \quad (5.8a)$$

$$P = -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (a - a^\dagger) \quad (5.8b)$$

aus  $a$  und  $a^\dagger$  rekonstruiert werden. Im folgenden werden wir auch den selbstadjungierten Operator

$$N = a^\dagger a = N^\dagger \quad (5.9)$$

verwenden, der mit dem Hamiltonoperator über

$$H = \hbar\omega \left( N + \frac{1}{2} \right) \quad (5.10)$$

zusammenhängt.

### Kommutator-Algebra

In der **QM** muß man häufig *Kommutatoren* von Observablen

$$[A, B] = AB - BA \quad (5.11)$$

ausrechnen. Weil viele Observablen als Funktion von Ort  $X$  und Impuls  $P$  ausgedrückt werden, muß man oft Kommutatoren wie, z. B.,

$$[X^2, P^2] = X^2 P^2 - P^2 X^2$$

berechnen. Dies ist am leichtesten, wenn man die Antisymmetrie, Linearität, *Leibnitz-Regel* (oder *Produkt-Regel*) und *Jacobi-Identität* für Kommutatoren ( $b_i \in \mathbf{C}$ )

$$[A, B] = -[B, A] \quad (5.12a)$$

$$[A, b_1 B_1 + b_2 B_2] = b_1 [A, B_1] + b_2 [A, B_2] \quad (5.12b)$$

$$[A, BC] = B[A, C] + [A, B]C \quad (5.12c)$$

$$[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0 \quad (5.12d)$$

ausnutzt, um alle Kommutatoren auf die kanonischen Vertauschungsrelationen

$$[X, P] = i\hbar \quad (5.13)$$

zurückzuführen. Antisymmetrie und Linearität sind offensichtlich, die Jacobi-Identität ist eine Übungsaufgabe und die Leibnitz-Regel ergibt sich aus

$$[A, BC] = ABC - BCA = ABC - BAC + BAC - BCA = [A, B]C + B[A, C]. \quad (5.14)$$

Die Kommutatoren von  $a$ ,  $a^\dagger$ ,  $N$  und  $H$  ergeben sich so als

$$\begin{aligned} [a, a^\dagger] &= \frac{m\omega}{2\hbar} \left[ X + \frac{i}{m\omega} P, X + \frac{i}{m\omega} P \right] = \frac{m\omega}{2\hbar} \left( -\frac{i}{m\omega} \underbrace{[X, P]}_{=i\hbar} + \frac{i}{m\omega} \underbrace{[P, X]}_{=-i\hbar} \right) \\ &= \frac{m\omega}{2\hbar} \frac{2\hbar}{m\omega} = 1 \end{aligned} \quad (5.15a)$$

$$[N, a] = [a^\dagger a, a] = a^\dagger \underbrace{[a, a]}_{=0} + \underbrace{[a^\dagger, a]}_{=-1} a = -a \quad (5.15b)$$

$$[N, a^\dagger] = [a^\dagger a, a^\dagger] = a^\dagger \underbrace{[a, a^\dagger]}_{=1} + \underbrace{[a^\dagger, a^\dagger]}_{=0} a = a^\dagger \quad (5.15c)$$

und weil diese Algebra so wichtig ist, noch einmal zusammengefasst

$$[a, a^\dagger] = 1 \quad (5.16a)$$

$$[N, a] = -a \quad (5.16b)$$

$$[N, a^\dagger] = a^\dagger \quad (5.16c)$$

und für den Hamiltonoperator

$$[H, a] = -\hbar\omega a \quad (5.17a)$$

$$[H, a^\dagger] = \hbar\omega a^\dagger. \quad (5.17b)$$

### Spektrum

Angenommen, wir haben einen Eigenvektor  $|n\rangle$  mit zugehörigem Eigenwert  $E_n$  gefunden

$$H |n\rangle = E_n |n\rangle, \quad (5.18)$$

dann ist auch  $|an\rangle = a |n\rangle$  wieder ein Eigenvektor

$$\begin{aligned} H |an\rangle &= Ha |n\rangle = aH |n\rangle + [H, a] |n\rangle = aE_n |n\rangle - \hbar\omega a |n\rangle \\ &= E_n a |n\rangle - \hbar\omega a |n\rangle = (E_n - \hbar\omega) |an\rangle \end{aligned} \quad (5.19)$$

aber mit Eigenwert  $E_n - \hbar\omega$ . Daraus könnte man schließen, daß es Eigenzustände  $|a^k n\rangle = a^k |n\rangle$  mit beliebig niedrigem Eigenwert geben sollte

$$H |a^k n\rangle = (E_n - k\hbar\omega) |a^k n\rangle, \quad (5.20)$$

was aber wegen

$$E_n = \langle n|H|n\rangle = \hbar\omega \langle n|a^\dagger a|n\rangle + \frac{\hbar\omega}{2} = \hbar\omega \underbrace{\langle an|an\rangle}_{\geq 0} + \frac{\hbar\omega}{2} \geq \frac{\hbar\omega}{2} \quad (5.21)$$

unmöglich ist. Der einzige Ausweg aus diesem Widerspruch ist, daß die Anwendung des *Vernichtungsoperators*  $a$  irgendwann den Nullvektor ergibt

$$\exists k \in \mathbf{N} \quad |a^k n\rangle = 0. \quad (5.22)$$

Es muß also einen Zustand niedrigster Energie, den *Grundzustand*  $|\psi_0\rangle$  geben

$$\exists |\psi_0\rangle \in \mathcal{H} : a |\psi_0\rangle = 0. \quad (5.23)$$

Die Wellenfunktion dieses Zustandsvektors im Ortsraum muß

$$\langle x|a|\psi_0\rangle = (a\psi_0)(x) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( x\psi_0(x) + \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d\psi_0}{dx}(x) \right) = 0, \quad (5.24)$$

bzw.

$$\frac{d\psi_0}{dx}(x) = -\frac{m\omega}{\hbar}x\psi_0(x) \quad (5.25)$$

erfüllen. Die bis auf eine Phase eindeutige normierte Lösung<sup>1</sup> dieser Differentialgleichung ist

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{\hbar}\frac{x^2}{2}}. \quad (5.27)$$

Also ist der Grundzustand  $|\psi_0\rangle$  *eindeutig*.

Wir konstruieren den Hilbertraum  $\mathcal{H}$  für den harmonischen Oszillator aus einer **ONB**  $\{|n\rangle\}_{n=0,1,2,\dots}$  aus Eigenvektoren des selbstadjungierten *Anzahloperators*  $N$

$$N|n\rangle = n|n\rangle \quad (5.28a)$$

$$\langle n|m\rangle = \delta_{nm}. \quad (5.28b)$$

mit

$$|0\rangle = |\psi_0\rangle. \quad (5.29)$$

Aus

$$Na|n\rangle = aN|n\rangle + [N, a]|n\rangle = an|n\rangle - a|n\rangle = (n-1)a|n\rangle \quad (5.30a)$$

$$Na^\dagger|n\rangle = a^\dagger N|n\rangle + [N, a^\dagger]|n\rangle = a^\dagger n|n\rangle + a^\dagger|n\rangle = (n+1)a^\dagger|n\rangle \quad (5.30b)$$

$$(5.30c)$$

schließen wir, unter der Voraussetzung daß keine Entartung vorliegt,

$$a|n\rangle \propto |n-1\rangle \quad (5.31a)$$

$$a^\dagger|n\rangle \propto |n+1\rangle. \quad (5.31b)$$

Und mit

$$\langle n|a^\dagger a|n\rangle = \langle n|N|n\rangle = n\langle n|n\rangle = n \quad (5.32a)$$

$$\langle n|aa^\dagger|n\rangle = \langle n|a^\dagger a + [a, a^\dagger]|n\rangle = \langle n|N+1|n\rangle = (n+1)\langle n|n\rangle = n+1 \quad (5.32b)$$

finden wir

$$|n+1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n+1}}a^\dagger|n\rangle \quad (5.33a)$$

---

<sup>1</sup>Trennung der Veränderlichen

$$\ln \psi_0(x) = -\frac{m\omega}{2\hbar}x^2 + \text{const.} \quad (5.26)$$

$$|n-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} a |n\rangle, \quad (5.33b)$$

also, daß jeder der angeregten Zustände  $|n\rangle$  durch  $n$ -fache Anwendung des *Erzeugungsooperators* auf den Grundzustand  $|0\rangle = |\psi_0\rangle$  gewonnen werden kann

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |0\rangle. \quad (5.34)$$

Die Eigenenergien des harmonischen Oszillators sind somit

$$\left\{ E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) \right\}_{n=0,1,2,\dots} \quad (5.35)$$

mit der Grundzustandsenergie

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} > 0. \quad (5.36)$$

#### Vollständigkeit

Die Wellenfunktionen der angeregten Zustände erhält man durch Differenzieren

$$\begin{aligned} \psi_n(x) = \langle x|n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle x|(a^\dagger)^n|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left( \frac{m\omega}{2\hbar} \right)^{n/2} \left( x - \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dx} \right)^n \psi_0(x) \\ &= \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \end{aligned} \quad (5.37)$$

mit den *Hermite-Polynomen*

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}, \quad (5.38)$$

z. B.

$$H_0(x) = 1 \quad (5.39a)$$

$$H_1(x) = 2x \quad (5.39b)$$

$$H_2(x) = 4x^2 - 2, \quad (5.39c)$$

wobei  $H_n$  genau  $n$  Nullstellen hat! Man kann zeigen, daß die Wellenfunktionen  $\psi_n : \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{C}$  eine Basis des Hilbertraums  $L^2(\mathbf{R}, dx)$  bilden, also insbesondere vollständig sind.

### Erwartungswerte und Unschärfe

Die Erwartungswerte von Ort und Impuls verschwinden in jedem der Energieeigenzustände  $|n\rangle$

$$\langle n|X|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle n|(a + a^\dagger)|n\rangle = 0 \quad (5.40a)$$

$$\langle n|P|n\rangle = -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \langle n|(a - a^\dagger)|n\rangle = 0. \quad (5.40b)$$

Also sind die Erwartungswerte der Quadrate (vgl. Übung)

$$\langle n|X^2|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle n|(a + a^\dagger)^2|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}(2n + 1) \quad (5.40c)$$

$$\langle n|P^2|n\rangle = -\frac{\hbar m\omega}{2} \langle n|(a - a^\dagger)^2|n\rangle = \frac{\hbar m\omega}{2}(2n + 1) \quad (5.40d)$$

gleich dem Quadrat der Unschärfen

$$\Delta_n X = \sqrt{2n + 1} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \quad (5.41a)$$

$$\Delta_n P = \sqrt{2n + 1} \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}. \quad (5.41b)$$

Das Produkt der Unschärfen

$$(\Delta_n X)(\Delta_n P) = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \geq \frac{\hbar}{2} \quad (5.42)$$

minimiert die Heisenbergsche Unschärferelation im Grundzustand  $|0\rangle$  und liegt sonst darüber.

### 5.1.3 Kohärente Zustände

Man kann nach Eigenzuständen des Vernichtungsoperators  $a$

$$a|z\rangle = z|z\rangle \quad (5.43)$$

mit nichtverschwindenden Eigenwerten  $z \in \mathbf{C}$  suchen. Weil  $a$  nicht selbst-adjungiert ist, müssen die Eigenwerte nicht reell sein und die Eigenzustände müssen keine Basis bilden. Sie sind trotzdem interessant, weil

$$\langle z|X|z\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle z|(a + a^\dagger)|z\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(z + z^*) = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \operatorname{Re} z \quad (5.44a)$$

$$\langle z|P|z\rangle = -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \langle z|(a - a^\dagger)|z\rangle = -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(z - z^*) = \sqrt{2\hbar m\omega} \operatorname{Im} z \quad (5.44b)$$

und (vgl. Übung)

$$\langle z|X^2|z\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle z|(a + a^\dagger)^2|z\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} (1 + (z + z^*)^2) \quad (5.44c)$$

$$\langle z|P^2|z\rangle = -\frac{\hbar m\omega}{2} \langle z|(a - a^\dagger)^2|z\rangle = \frac{\hbar m\omega}{2} (1 + (z - z^*)^2) \quad (5.44d)$$

Vorlesung 14: Mo, 17. 06. 2019

zu Unschärfen führen, die unabhängig von  $z$  sind

$$(\Delta_z X)^2 = \langle z|X^2|z\rangle - \langle z|X|z\rangle^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} \quad (5.45a)$$

$$(\Delta_z P)^2 = \langle z|P^2|z\rangle - \langle z|P|z\rangle^2 = \frac{\hbar m\omega}{2} \quad (5.45b)$$

und deren Produkt die Heisenbergsche Unschärferelation minimiert

$$(\Delta_n X) (\Delta_n P) = \frac{\hbar}{2}. \quad (5.46)$$

Die Zustände

$$\begin{aligned} |z\rangle &= e^{-|z|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = e^{-|z|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n (a^\dagger)^n}{n!} |0\rangle \\ &= e^{-|z|^2/2} e^{za^\dagger} |0\rangle = e^{za^\dagger - z^*a} |0\rangle \end{aligned} \quad (5.47)$$

sind wegen

$$\begin{aligned} a|z\rangle &= e^{-|z|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} \underbrace{a|n\rangle}_{=\sqrt{n}|n-1\rangle} = ze^{-|z|^2/2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^{n-1}}{\sqrt{(n-1)!}} |n-1\rangle \\ &= ze^{-|z|^2/2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{\sqrt{k!}} |k\rangle = z|z\rangle \end{aligned} \quad (5.48)$$

Eigenzustände von  $a$  und wegen

$$\langle z|z\rangle = e^{-|z|^2} \sum_{k,l=0}^{\infty} \frac{z^{*k} z^l}{\sqrt{k!l!}} \langle k|l\rangle = e^{-|z|^2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{|z|^{2k}}{k!} = 1 \quad (5.49)$$

auch normiert. Wenn wir für die Zeitabhängigkeit

$$|z, t\rangle = e^{-i\omega t/2} |e^{-i\omega t} z\rangle = e^{-|z|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-i\omega t(n+1/2)} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \quad (5.50)$$

ansetzen, finden wir

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} |z, t\rangle &= e^{-|z|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} i\hbar \frac{d}{dt} e^{-i\omega t(n+1/2)} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \\ &= e^{-|z|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) e^{-i\omega t(n+1/2)} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \\ &= e^{-|z|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} H e^{-i\omega t(n+1/2)} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = H |z, t\rangle \end{aligned} \quad (5.51)$$

eine Lösung der **SG**

$$i\hbar \frac{d}{dt} |z, t\rangle = H |z, t\rangle \quad (5.52a)$$

$$|z, 0\rangle = |z\rangle \quad (5.52b)$$

und die harmonische Bewegung der Erwartungswerte

$$\langle z, t|X|z, t\rangle = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \operatorname{Re}(e^{-i\omega t} z) = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} |z| \cos(\omega t + \phi) \quad (5.53a)$$

$$\langle z, t|P|z, t\rangle = \sqrt{2\hbar m\omega} \operatorname{Im}(e^{-i\omega t} z) = -\sqrt{2\hbar m\omega} |z| \sin(\omega t + \phi) \quad (5.53b)$$

mit  $z = |z|e^{-i\phi}$  und den klassischen Bewegungsgleichungen

$$\frac{d}{dt} \langle z, t|X|z, t\rangle = -\sqrt{\frac{2\hbar\omega}{m}} |z| \sin(\omega t + \phi) = \frac{1}{m} \langle z, t|P|z, t\rangle \quad (5.54a)$$

$$\frac{d}{dt} \langle z, t|P|z, t\rangle = -\sqrt{2\hbar m\omega^3} |z| \cos(\omega t + \phi) = -m\omega^2 \langle z, t|X|z, t\rangle. \quad (5.54b)$$

Diese sogenannten *kohärenten Zustände* sind also die Zustände, die dem klassischen Verhalten am nächsten kommen, weil sie die Unschärfe minimieren und die Erwartungswerte von Ort und Impuls die klassischen Bewegungsgleichungen erfüllen. Der Erwartungswert der Energie

$$\langle z, t|H|z, t\rangle = \hbar\omega \left( \langle z, t|a^\dagger a|z, t\rangle + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left( |z|^2 + \frac{1}{2} \right) \geq \frac{\hbar\omega}{2} \quad (5.55)$$

verschwindet aber auch in den kohärenten Zuständen nie. Die kohärenten Zustände bilden keine Basis. Es gibt nicht einmal ein Paar kohärenter Zustände mit verschwindendem Überlapp

$$\begin{aligned} \langle z_1 | z_2 \rangle &= e^{-|z_1|^2/2 - |z_2|^2/2} \sum_{k,l=0}^{\infty} \frac{z_1^{*k} z_2^l}{\sqrt{k!l!}} \langle k | l \rangle = e^{-|z_1|^2/2 - |z_2|^2/2} \sum_k \frac{(z_1^* z_2)^k}{k!} \\ &= e^{-|z_1|^2/2 - |z_2|^2/2} e^{z_1^* z_2} = e^{-|z_1 - z_2|^2/2} > 0. \end{aligned} \quad (5.56)$$

## 5.2 Qualitatives Verhalten der Lösungen der SG

Es sollte aufgefallen sein, daß *alle* Eigenwerte des Hamiltonoperators für den harmonischen Oszillator diskret und damit die zugehörigen Eigenfunktionen normierbar sind.

Dieses Verhalten kann man verstehen, wenn man den allgemeinsten Hamiltonoperator in einer Dimension betrachtet, dessen Wechselwirkung durch ein Potential  $V : \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}$  beschrieben werden kann<sup>2</sup>

$$H = \frac{1}{2m} P^2 + V(X). \quad (5.57)$$

Im Ortsraum ist die stationäre SG wieder eine Differentialgleichung

$$(H\psi)(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2}(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (5.58)$$

bzw.

$$\psi''(x) = \frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E)\psi(x). \quad (5.59)$$

Daraus lesen wir, abhängig vom Energieeigenwert  $E$ , qualitativ unterschiedliches Verhalten in drei Bereichen ab

- $V(x) < E$ : die Krümmung  $\psi''$  hat das umgekehrte Vorzeichen der Wellenfunktion  $\psi$ , d. h. die Wellenfunktion ist *oszillatorisch*,
- $V(x) = E$ : die Krümmung  $\psi''$  der Wellenfunktion verschwindet,
- $V(x) > E$ : die Krümmung  $\psi''$  hat das gleiche Vorzeichen wie die Wellenfunktion  $\psi$ , d. h. der Betrag der Wellenfunktion fällt entweder ab oder wächst immer stärker an.

<sup>2</sup>Äußere Magnetfelder fallen nicht darunter und werden erst in Kapitel 8.1 betrachtet werden.

Angenommen es gäbe es ein  $\bar{x}$  mit

$$\forall x > \bar{x} : V(x) > E, \quad (5.60)$$

dann wächst der Betrag der Wellenfunktion für  $x > \bar{x}$  entweder immer weiter an oder er fällt ab. Für eine Normierung auf  $\delta$ -Funktion

$$\langle \psi_E | \psi_{E'} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_E^*(x) \psi_{E'}(x) = \delta(E - E') \quad (5.61)$$

muß der Betrag der Wellenfunktion asymptotisch für  $x \rightarrow \pm\infty$  annähernd konstant bleiben und für normierbare Wellenfunktionen

$$\langle \psi_n | \psi_{n'} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_n^*(x) \psi_{n'}(x) = \delta_{nn'} \quad (5.62)$$

hinreichend schnell abfallen. Somit kann es für Potentiale die für  $x \rightarrow \pm\infty$  über alle Grenzen wachsen *nur* normierbare Energieeigenzustände mit diskreten Energieeigenwerten geben. Dies entspricht in der klassischen Physik dem Fall, daß es nur gebundene Bahnen gibt, die in einer Potentialmulde gefangen sind. Wir nennen solche Zustände *gebundene Zustände*.

Umgekehrt, angenommen es gäbe ein

$$V_{\max} = \max_{x \in \mathbf{R}} V(x), \quad (5.63)$$

dann sind die Wellenfunktionen aller Energieeigenzustände mit  $E > V_{\max}$  überall oszillatorisch und müssen auf  $\delta$ -Funktion normiert sein. Dies entspricht in der klassischen Physik der Fall, daß der Massenpunkt den Bereich des Potentials verlassen kann. Wir nennen diese Zustände *Streuzustände*.  
Wenn

$$V_{\infty} = \lim_{x \rightarrow \pm\infty} V(x) \quad (5.64)$$

existiert, erwarten wir Streuzustände für  $E > V_{\infty}$  auch dann, wenn  $E < V_{\max}$ .

Im Fall des Wasserstoffatoms mit

$$V(\vec{x}) = -\frac{\alpha}{|\vec{x}|} \quad (5.65)$$

und  $\alpha > 0$  werden wir also für  $E < 0$  gebundene Zustände und für  $E > 0$  Streuzustände erwarten.

### 5.3 Stückweise konstante Potentiale

Angenommen, das Potential ist auf dem Intervall  $[a, b] \subseteq \mathbf{R}$  konstant,  $V(x) = V_0$ , dann ist die stationäre SG auf diesem Intervall

$$\psi''(x) = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \psi(x) \quad (5.66)$$

besonders einfach zu lösen

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_+ e^{ikx} + \psi_- e^{-ikx} & \text{für } E > V_0, \text{ mit } k = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar \\ \psi_0 + \psi_1 x & \text{für } E = V_0 \\ \psi_+ e^{\kappa x} + \psi_- e^{-\kappa x} & \text{für } E < V_0, \text{ mit } \kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar \end{cases}. \quad (5.67)$$

Im „klassisch erlaubten Bereich“  $T = E - V > 0$  finden wir ebene Wellen  $e^{\pm ikx}$  und im „klassisch verbotenen Bereich“  $T = E - V < 0$  finden wir exponentielle Abfall oder Anstieg  $e^{\pm \kappa x}$ . Die Wellen- und die Halbwertslänge ist jeweils imgekehrt proportional zu  $\sqrt{|E - V|}$ . Insbesondere wird die Halbwertslänge umso kürzer, umso weiter die Energie den klassisch erlaubten Bereich verlässt.

Wir müssen uns aber noch Gedanken über die Randbedingungen machen. Angenommen, das Potential ist auf den Intervallen  $[a, b]$  und  $[b, c]$  konstant

$$V(x) = \begin{cases} V_- & \text{für } x \in [a, b] \\ V_+ & \text{für } x \in [b, c], \end{cases} \quad (5.68)$$

dann wissen wir zunächst, daß die Wellenfunktion  $\psi$  stetig

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \psi(b + \epsilon) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \psi(b - \epsilon) \quad (5.69)$$

sein muß, damit der Impulsoperator

$$(P\psi)(x) = \frac{\hbar}{i} \psi'(x) \quad (5.70)$$

definiert sein kann. Aus der SG folgt dann

$$(\psi'(b + \epsilon) - \psi'(b - \epsilon)) = \int_{b-\epsilon}^{b+\epsilon} dx \psi''(x) = \int_{b-\epsilon}^{b+\epsilon} dx \frac{2m(V(x) - E)}{\hbar^2} \psi(x) \quad (5.71)$$

und damit aus

$$|\psi'(b + \epsilon) - \psi'(b - \epsilon)| \leq 2\epsilon \max_{x \in [b-\epsilon, b+\epsilon]} \left| \frac{2m(V(x) - E)}{\hbar^2} \psi(x) \right| \quad (5.72)$$

die Stetigkeit von  $\psi'$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \psi'(b + \epsilon) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \psi'(b - \epsilon) \quad (5.73)$$

für in einer Umgebung von  $b$  beschränkte  $\psi$  und  $V$ .

## 5.4 Potentialtopf

Betrachten wir einen symmetrischen Potentialtopf

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{für } x \in [-a, a] \\ 0 & \text{für } x \notin [-a, a] \end{cases} \quad (5.74)$$

mit  $V_0 < 0$ . Mit den Abkürzungen

$$k = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} \quad (5.75a)$$

$$\kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \quad (5.75b)$$

finden wir für  $0 > E > V_0$  die Lösungen

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1 e^{\kappa x} + \psi_2 e^{-\kappa x} & \text{für } x < -a \\ \psi_3 e^{ikx} + \psi_4 e^{-ikx} & \text{für } -a < x < a \\ \psi_5 e^{\kappa x} + \psi_6 e^{-\kappa x} & \text{für } a < x \end{cases}, \quad (5.76)$$

wobei die sechs komplexen Konstanten  $\psi_{1,\dots,6} \in \mathbf{C}$  noch durch Rand- und Anschlußbedingungen festgelegt werden müssen.

Für  $E < V_0$  finden wir keine Lösungen, weil exponentiell ansteigende und abfallende Lösungen nicht so zusammengesetzt werden können, daß sie für  $|x| \rightarrow \infty$  abfallen, ohne einen Knick einzuführen. Für  $E > 0$  sind die Lösungen in allen drei Bereichen oszillatorisch.

### 5.4.1 Parität

Der *Paritätsoperator*  $\mathbf{P} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  mit

$$\mathbf{P} |x\rangle = \lambda^* | -x\rangle \quad (5.77)$$

und geeigneter Wahl der Phase  $\lambda \in \mathbf{C}$  mit  $|\lambda| = 1$  beschreibt eine Raumspiegelung. Er dreht das Vorzeichen des Arguments der Wellenfunktion

$$\langle x | \mathbf{P} | \psi \rangle = \lambda \langle -x | \psi \rangle \quad (5.78)$$

d. h.

$$(\mathbf{P}\psi)(x) = \lambda \psi(-x) \quad (5.79)$$

und vertauscht mit unserem Hamiltonoperator

$$(\mathbf{P}H\psi)(x) = (H\mathbf{P}\psi)(x) \quad (5.80)$$

weil das Potential symmetrisch unter  $x \mapsto -x$  ist und sich die zweite Ableitung ebenfalls nicht ändert

$$[H, \mathbf{P}] = 0. \quad (5.81)$$

Deshalb können wir nach gemeinsamen Eigenvektoren von  $H$  und  $\mathbf{P}$  suchen.

Vorlesung 15: Fr, 21.06.2019

Weil eine doppelte Raumspiegelung den Zustand nicht ändert

$$\mathbf{P}^2 = \mathbf{1} \quad (5.82)$$

sind die erlaubten Eigenwerte die Quadratwurzeln von 1, also  $\{-1, +1\}$ . Die zugehörigen, entarteten, Eigenvektoren sind die symmetrischen und antisymmetrischen Wellenfunktionen, die wir im folgenden also unabhängig voneinander betrachten dürfen, um uns die Suche nach Lösungen zu vereinfachen.

#### 5.4.2 $E < 0$ : Gebundene Zustände

Wir finden für  $0 > E > V_0$  symmetrische

$$\psi_S(x) = \begin{cases} \phi_+ e^{\kappa x} + \chi_+ e^{-\kappa x} & \text{für } x < -a \\ \psi_+ \cos(kx) & \text{für } -a < x < a \\ \chi_+ e^{\kappa x} + \phi_+ e^{-\kappa x} & \text{für } a < x \end{cases} \quad (5.83)$$

und anti-symmetrische

$$\psi_A(x) = \begin{cases} -\phi_- e^{\kappa x} - \chi_- e^{-\kappa x} & \text{für } x < -a \\ \psi_- \sin(kx) & \text{für } -a < x < a \\ \chi_- e^{\kappa x} + \phi_- e^{-\kappa x} & \text{für } a < x \end{cases} \quad (5.84)$$

Lösungen. Die Forderung nach Normierbarkeit verbietet in beiden Fällen exponentielles Anwachsen für  $x \rightarrow \pm\infty$ , also

$$\chi_{\pm} = 0. \quad (5.85)$$

Die Aufteilung in symmetrische und antisymmetrische Lösungen erlaubt uns, alle Koeffizienten *reell* zu wählen, weil die Anschlußbedingungen für die erste Ableitung von Sinus und Cosinus keine Faktoren  $i$  enthalten.

*Symmetrische Wellenfunktionen* ( $\mathbf{P} = \mathbf{1}$ )

Damit erhalten wir im symmetrischen Fall als Anschlußbedingungen ( $\epsilon \rightarrow 0+$  impliziert)

$$\phi_+ e^{\kappa(-a)} = \psi_S(-a - \epsilon) = \psi_S(-a + \epsilon) = \psi_+ \cos(k(-a)) \quad (5.86a)$$

$$\kappa \phi_+ e^{\kappa(-a)} = \psi'_S(-a - \epsilon) = \psi'_S(-a + \epsilon) = -k \psi_+ \sin(k(-a)) \quad (5.86b)$$

$$\phi_+ e^{-\kappa a} = \psi_S(a + \epsilon) = \psi_S(a - \epsilon) = \psi_+ \cos(ka) \quad (5.86c)$$

$$-\kappa \phi_+ e^{-\kappa a} = \psi'_S(a + \epsilon) = \psi'_S(a - \epsilon) = -k \psi_+ \sin(ka), \quad (5.86d)$$

wovon nur

$$\phi_+ e^{\kappa(-a)} = \psi_+ \cos(k(-a)) \quad (5.87a)$$

$$\kappa \phi_+ e^{\kappa(-a)} = -k \psi_+ \sin(k(-a)) \quad (5.87b)$$

unabhängig sind Insbesondere muß

$$\kappa \cos(ka) = k \sin(ka) \quad (5.88)$$

gelten. Mit

$$\frac{\kappa}{k} = \sqrt{\frac{-E}{E - V_0}} = \sqrt{\frac{-V_0 - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}}{\frac{\hbar^2 k^2}{2m}}} = \sqrt{\frac{-2mV_0 - \hbar^2 k^2}{\hbar^2 k^2}} = \sqrt{\frac{-2mV_0}{\hbar^2 k^2} - 1} \quad (5.89)$$

erhält man als Gleichung in  $k$

$$\tan(ka) = \sqrt{\frac{-2mV_0}{\hbar^2 k^2} - 1}. \quad (5.90)$$

Für diese Gleichung gibt es keine analytische Lösung, aber man kann die Lösungen leicht graphisch diskutieren, wie in Abbildung 5.1 gezeigt.

Die rechte Seite ist streng monoton fallend, hat eine Nullstelle bei  $k_0 = \frac{\sqrt{-2mV_0}}{\hbar}$  und divergiert bei  $k = 0$ . Deshalb schneiden sich die rechte Seite und die linke Seite mindestens einmal. Wenn  $-V_0$  hinreichend groß ist und damit  $k_0 \geq n\pi/a$ , schneiden sich rechte und linke Seite  $n + 1$ -mal. Dies ist auch physikalisch sinnvoll: je tiefer und breiter der Potentialtopf ist, desto mehr gebundene Zustände existieren.

Die Berechnung des Normierungsfaktors ist eine Übungsaufgabe.

*Antisymmetrische Wellenfunktionen* ( $\mathbf{P} = -\mathbf{1}$ )

Die antisymmetrischen Lösungen werden in der Übung behandelt.

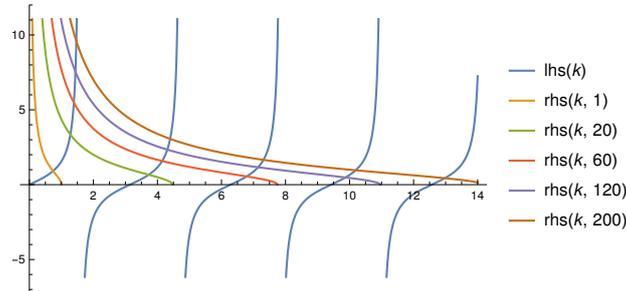


Abbildung 5.1: Graphische Lösung der Eigenwertgleichung (5.90) mit  $a = 1$  und  $-2mV_0/\hbar^2 = 1, 20, 60, 120, 200$ .

### 5.4.3 $E > 0$ : Streuzustände

Wieder symmetrische

$$\psi_S(x) = \begin{cases} \phi_+ \cos(k'x + \delta) & \text{für } x < -a \\ \psi_+ \cos(kx) & \text{für } -a < x < a \\ \phi_+ \cos(k'x - \delta) & \text{für } a < x \end{cases} \quad (5.91)$$

und anti-symmetrische

$$\psi_A(x) = \begin{cases} \phi_- \sin(k'x + \delta) & \text{für } x < -a \\ \psi_- \sin(kx) & \text{für } -a < x < a \\ \phi_- \sin(k'x - \delta) & \text{für } a < x \end{cases} \quad (5.92)$$

Lösungen mit

$$k' = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \quad (5.93)$$

Diesmal gibt es keine Bedingung aus dem exponentiellen Abfall und alle  $k' > 0$  ergeben eine Lösung. Aufgrund von  $k > k'$  für  $V_0 < 0$ , ist die Wellenlänge im Bereich den Potentialtopfs verkürzt und die Anschlußbedingungen erzwingen eine entsprechende *Phasenverschiebung*  $\delta > 0$ , die die Wellenfunktion in den Potentialtopf hineinzieht.

Für die physikalische Interpretation als Streuung von einlaufenden Wellen sind diese (anti-)symmetrischen Lösungen aber ungeeignet. Wenn wir die Wahrscheinlichkeitsstromdichte (4.47) für eine reelle Wellenfunktion, z. B.

$$\psi(x) = \phi \cos(kx + \delta) \quad (5.94)$$

berechnen, finden wir

$$\begin{aligned} j(x, t) &= \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi^*(\vec{x}, t) \frac{\partial \psi}{\partial x}(\vec{x}, t) - \psi(\vec{x}, t) \frac{\partial \psi^*}{\partial x}(\vec{x}, t) \right) \\ &= \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi(\vec{x}, t) \frac{\partial \psi}{\partial x}(\vec{x}, t) - \psi(\vec{x}, t) \frac{\partial \psi}{\partial x}(\vec{x}, t) \right) = 0. \end{aligned} \quad (5.95)$$

In der allgemeinen komplexen Form

$$\psi(x) = \phi_+ e^{ikx} + \phi_- e^{-ikx} \quad (5.96)$$

erhalten wir stattdessen

$$\begin{aligned} j(x, t) &= \frac{\hbar}{2mi} \sum_{\lambda, \lambda' = -, +} \phi_\lambda^* \phi_{\lambda'} \left( e^{-\lambda ikx} \frac{d e^{\lambda' ikx}}{dx} - e^{\lambda' ikx} \frac{d e^{-\lambda ikx}}{dx} \right) \\ &= \frac{\hbar k}{2m} \sum_{\lambda, \lambda' = -, +} \phi_\lambda^* \phi_{\lambda'} \underbrace{(\lambda + \lambda')}_{=2\lambda\delta_{\lambda, \lambda'}} e^{(\lambda' - \lambda) ikx} = \frac{\hbar k}{m} (|\phi_+|^2 - |\phi_-|^2) \end{aligned} \quad (5.97)$$

und wir können den Wahrscheinlichkeitsstrom mit  $|\phi_+| > |\phi_-|$  nach rechts und mit  $|\phi_+| < |\phi_-|$  nach links fließen lassen.

Deshalb machen wir den Ansatz

$$\psi(x) = \begin{cases} \phi_+ e^{ik'x} + \phi_- e^{-ik'x} & \text{für } x < -a \\ \psi_+ e^{ikx} + \psi_- e^{-ikx} & \text{für } -a < x < a \\ \chi_+ e^{ik'x} + \chi_- e^{-ik'x} & \text{für } a < x \end{cases} \quad (5.98)$$

Wenn wir die Situation beschreiben wollen, daß ein Teilchenstrom von links auf den Potentialtopf zufließt und teilweise reflektiert wird, müssen wir  $\chi_- = 0$  wählen, sodaß der Wahrscheinlichkeitsstrom auf der rechten Seite nur nach rechts, weg vom Potentialtopf fließt. Daraus kann man mit den beiden Anschlußbedingungen bei  $x = a$  die Koeffizienten  $\psi_\pm$  als lineare Funktion von  $\chi_+$  bestimmen. Aus den Anschlußbedingungen bei  $x = -a$  folgen dann die Koeffizienten  $\phi_\pm$  als lineare Funktion von  $\psi_\pm$ , bzw. als lineare Funktion von  $\chi_+$ . Das Endergebnis ergibt sich schließlich durch die Normierungsbedingung

$$\langle E_1 | E_2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_1^*(x) \psi_2(x) = \delta(E_1 - E_2). \quad (5.99)$$

Die Verhältnisse des reflektierten und transmittierten Wahrscheinlichkeitsstroms zum einlaufenden Wahrscheinlichkeitsstrom sind von der Normierung unabhängig und heißen *Reflexionskoeffizient* und *Transmissionskoeffizient*. Im Fall des Potentialtopfs findet man

$$R = \frac{|\phi_-|^2}{|\phi_+|^2} \quad (5.100a)$$

$$T = \frac{|\chi_+|^2}{|\phi_+|^2}. \quad (5.100b)$$

NB: wenn das Potential vor und hinter dem Potentialtopf nicht den gleichen Wert hat, steht im Transmissionskoeffizient noch der Quotient der Impulse  $\hbar k$ .

#### 5.4.4 Unendlich tief ...

Im Grenzfall eines unendlich tiefen Potentialtopfs empfiehlt es sich, den Nullpunkt der Energieskala an den Fuß des Topfes zu legen

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x \in [-a, a] \\ V_0 \rightarrow +\infty & \text{für } x \notin [-a, a] \end{cases}. \quad (5.101)$$

Mit den Abkürzungen

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (5.102a)$$

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \rightarrow \infty \quad (5.102b)$$

für Wellenzahl  $k$  im Intervall  $[-a, a]$  und exponentiellen Abfall  $\kappa$  außerhalb finden wir die symmetrischen

$$\psi_S(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < -a \\ \psi_+ \cos(kx) & \text{für } -a < x < a \\ 0 & \text{für } a < x \end{cases}. \quad (5.103)$$

und antisymmetrischen Lösungen

$$\psi_A(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < -a \\ \psi_- \sin(kx) & \text{für } -a < x < a \\ 0 & \text{für } a < x \end{cases}, \quad (5.104)$$

mit den Randbedingungen

$$\psi_{S/A}(\pm a) = 0, \quad (5.105)$$

die physikalisch sinnvoll sind, weil das wachsende Potential die Wellenfunktion immer weiter aus dem klassisch verbotenen Bereich drückt. In diesem Fall sind die Wellenfunktionen stetig, aber die Ableitungen am Rand unstetig. Dies ist mit (5.72) verträglich, weil  $V$  nicht beschränkt ist.

Die Bestimmung von Eigenwerten und Eigenvektoren ist in diesem Fall eine Übungsaufgabe.

### 5.4.5 $\delta$ -Potential

Ein weiteres exakt lösbares Problem ist das  $\delta$ -Potential mit

$$V(x) = V_0\delta(x), \quad (5.106)$$

das als Grenzfall des Potentialtopfes mit  $|V_0| \rightarrow \infty$ ,  $a \rightarrow 0$  mit  $V_0a = \text{const}$  angesehen werden kann. Als Anschlußbedingung bei  $x = 0$  ergibt sich diesmal aus der **SG**

$$\begin{aligned} (\psi'(+\epsilon) - \psi'(-\epsilon)) &= \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} dx \psi''(x) \\ &= \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} dx \frac{2m(V_0\delta(x) - E)}{\hbar^2} \psi(x) = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \psi(0) + \mathcal{O}(\epsilon). \end{aligned} \quad (5.107)$$

Im Fall eines anziehenden Potentials mit  $V_0 < 0$  gibt es *genau eine* normierbare Lösung der **SG** mit  $E < 0$ : die Wellenfunktion hat die Gestalt

$$\psi(x) = \sqrt{\kappa} e^{-\kappa|x|} \quad (5.108)$$

mit

$$\kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}. \quad (5.109)$$

Die Anschlußbedingung

$$-\kappa\psi(+\epsilon) - \kappa\psi(-\epsilon) = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \psi(0) + \mathcal{O}(\epsilon) \quad (5.110)$$

hat nur eine Lösung

$$\kappa = -\frac{mV_0}{\hbar^2}, \quad (5.111)$$

bzw.

$$E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} = -\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}. \quad (5.112)$$

In Fall eines abstoßendes Potentials  $V_0 > 0$  gibt es keine normierbare Lösung der **SG**. Für beliebiges  $V_0$  und jedes  $E > 0$  gibt es jeweils eine nicht normierbare Streulösung.

## 5.5 Potentialschwelle

Für eine symmetrischen Potentialschwelle

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{für } x \in [-a, a] \\ 0 & \text{für } x \notin [-a, a] \end{cases} \quad (5.113)$$

mit  $V_0 > 0$  gibt es keine normierbaren Lösungen mit  $E < 0$ . Für  $E > V_0$  erhalten wir wieder Streulösungen.

Für  $0 < E < V_0$  finden wir mit den Abkürzungen

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad (5.114a)$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (5.114b)$$

Lösungen der Form

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1 e^{ikx} + \psi_2 e^{-ikx} & \text{für } x < -a \\ \psi_3 e^{\kappa x} + \psi_4 e^{-\kappa x} & \text{für } -a < x < a \\ \psi_5 e^{ikx} + \psi_6 e^{-ikx} & \text{für } a < x \end{cases}, \quad (5.115)$$

die außerhalb der Potentialschwelle oszillieren und innerhalb eine Überlagerung von exponentiellem Abstieg und Abfall aufweisen. Die Koeffizienten  $\psi_{1,2,5,6}$  werden durch Randbedingungen wie, z. B., einlaufender und auslaufender Wahrscheinlichkeitsfluß bis auf eine Phase und einen Normierungsfaktor festgelegt. Anschließend erhält man die Koeffizienten  $\psi_{3,4}$  durch die Anschlußbedingungen und kann schließlich den Normierungsfaktor festlegen.

### 5.5.1 Tunneleffekt

Eine Wellenfunktion der Form

$$\psi \Big|_{x \in [-a, a]}(x) = \psi_3 e^{\kappa x} + \psi_4 e^{-\kappa x} \quad (5.116)$$

kann an höchstens einer Stelle  $x_0 \in [-a, a]$  verschwinden. Darüberhinaus dürfen nichtverschwindende  $\psi$  und  $\psi'$  nicht an der gleichen Stelle verschwinden. Deshalb erzwingen die Anschlußbedingungen für eine von links einlaufende Welle bei  $x = +a$ , daß mindestens einer der Koeffizienten  $\psi_{3,4}$  nicht verschwindet. Somit gibt es für alle  $V_0 < \infty$  eine nichtverschwindende Wahrscheinlichkeit, daß die Welle durch den klassisch verbotenen Bereich der Potentialschwelle hindurchtunnelt.

## 5.6 Potentialstufe

Als letztes Beispiel betrachten wir die Potentialstufe

$$V(x) = V_0 \Theta(x) = \begin{cases} V_0 & \text{für } x > 0 \\ 0 & \text{für } x < 0 \end{cases} \quad (5.117)$$

mit  $V_0 > 0$ . Für  $E < 0$  gibt es keine Lösungen.

Für  $0 < E < V_0$  finden wir mit den Abkürzungen

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad (5.118a)$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (5.118b)$$

Lösungen der Form

$$\psi(x) = \begin{cases} \phi_+ e^{ikx} + \phi_- e^{-ikx} & \text{für } x < 0 \\ \chi_+ e^{-\kappa x} & \text{für } x > 0 \end{cases}, \quad (5.119)$$

die einer reflektierten Welle im Bereich  $x < 0$  und einem exponentiellen Abfall im Bereich  $x > 0$  entsprechen.

Für  $E > V_0$  erhalten wir wieder Streulösungen

$$\psi(x) = \begin{cases} \phi_+ e^{ikx} + \phi_- e^{-ikx} & \text{für } x < 0 \\ \chi_+ e^{ik'x} + \chi_- e^{-ik'x} & \text{für } x > 0 \end{cases} \quad (5.120)$$

mit

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (5.121a)$$

$$k' = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}. \quad (5.121b)$$

Wenn wir im Bereich  $x > 0$  nur einen auslaufenden Wahrscheinlichkeitsstrom beschreiben wollen, müssen wir  $\chi_- = 0$  wählen und  $\phi_{\pm}$  aus den Anschlußbedingungen bei  $x = 0$  berechnen

$$\phi_{\pm} = \frac{1}{2} \left( 1 \pm \frac{k'}{k} \right) \chi_+ \quad (5.122)$$

Wir erhalten dann als *Reflexionskoeffizient* und *Transmissionskoeffizient*

$$R = \frac{|\phi_-|^2}{|\phi_+|^2} = \left( \frac{k - k'}{k + k'} \right)^2 \quad (5.123a)$$

$$T = \frac{k' |\chi_+|^2}{k |\phi_+|^2} = \frac{4kk'}{(k + k')^2} = 1 - R. \quad (5.123b)$$

## —6—

## DREHIMPULS

Vorlesung 16: Mo, 24. 06. 2019

Die Wechselwirkungen von Teilchen im dreidimensionalen Anschauungsraum hängen oft nur vom Abstand der Teilchen und nicht von ihrer Orientierung im Raum ab, vgl., z. B., das Coulomb-Potential

$$V(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \frac{q_1 q_2 e^2}{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|}. \quad (6.1)$$

Diese Symmetrie kann man ausnutzen, um die **SG** stark zu vereinfachen.

## 6.1 Drehungen

In den Übungen haben wir schon gesehen, daß eine Drehung um die  $\vec{\theta}$ -Achse

$$\vec{x} \rightarrow \vec{x}' = R(\vec{\theta})\vec{x} \quad (6.2)$$

mit den orthogonalen reellen *Drehmatrizen*

$$R(\vec{\theta}) = e^{-i\vec{\theta}\vec{\tau}} = \mathbf{1} - i\vec{\theta}\vec{\tau} + \mathcal{O}(\theta^2) \quad (6.3)$$

und den selbstadjungierten Matrizen

$$\tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_3 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (6.4)$$

mit Matrixelementen

$$[\tau_i]_{jk} = -i\epsilon_{ijk} \quad (6.5)$$

realisiert wird. Für die so parametrisierten Drehmatrizen gilt

$$\left(R(\vec{\theta})\right)^{-1} = R(-\vec{\theta}) = \left(R(\vec{\theta})\right)^T. \quad (6.6)$$

Der unitäre *Drehoperator*  $U(\theta)$  wirkt auf Ortseigenzustände wie

$$|\vec{x}\rangle \rightarrow |\vec{x}'\rangle = |R(\vec{\theta})\vec{x}\rangle = U(\vec{\theta}) |\vec{x}\rangle \quad (6.7)$$

wobei

$$\vec{X} |\vec{x}\rangle = \vec{x} |\vec{x}\rangle \quad (6.8a)$$

$$\vec{X} |\vec{x}'\rangle = \vec{x}' |\vec{x}'\rangle \quad (6.8b)$$

also muß

$$\vec{X}U(\theta) |\vec{x}\rangle = (R(\theta)\vec{x})U(\theta) |\vec{x}\rangle = U(\theta)(R(\theta)\vec{x}) |\vec{x}\rangle = U(\theta)(R(\theta)\vec{X}) |\vec{x}\rangle \quad (6.9)$$

bzw.

$$U^{-1}(\theta)\vec{X}U(\theta) = R(\theta)\vec{X} \quad (6.10)$$

gelten. Analog folgt aus der Hintereinanderausführung von Translationen und Rotationen

$$U^{-1}(\theta)\vec{P}U(\theta) = R(\theta)\vec{P}. \quad (6.11)$$

Das Argument der Wellenfunktionen transformiert sich mit der inversen Drehung

$$\psi'(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \psi' \rangle = \langle \vec{x} | U | \psi \rangle = \langle U^\dagger \vec{x} | \psi \rangle = \langle R^{-1} \vec{x} | \psi \rangle = \psi(R^{-1} \vec{x}). \quad (6.12)$$

Wie schon im Fall der Translationen, schreiben wir den unitären Rotationsoperator als Exponentialfunktion

$$U(\vec{\theta}) = e^{-i\vec{\theta}\vec{L}/\hbar} = \mathbf{1} - \frac{i}{\hbar}\vec{\theta}\vec{L} + \mathcal{O}(\theta^2) \quad (6.13)$$

mit selbstadjungierten  $L_i = L_i^\dagger$ . Damit ist

$$\left(U(\vec{\theta})\right)^{-1} = U(-\vec{\theta}) = \left(U(\vec{\theta})\right)^\dagger \quad (6.14)$$

gewährleistet. Einerseits gilt nun

$$U^{-1}(\theta)\vec{X}U(\theta) = \vec{X} + \frac{i}{\hbar}(\vec{\theta}\vec{L})\vec{X} - \frac{i}{\hbar}\vec{X}(\vec{\theta}\vec{L}) + \mathcal{O}(\theta^2) \quad (6.15a)$$

und andererseits

$$R(\theta)\vec{X} = \vec{X} - i(\vec{\theta}\vec{\tau})\vec{X} + \mathcal{O}(\theta^2). \quad (6.15b)$$

Daraus folgt per Koeffizientenvergleich in  $\theta_i$

$$L_i\vec{X} - \vec{X}L_i = -\hbar\tau_i\vec{X} \quad (6.16)$$

bzw.

$$[L_i, X_j] = -\hbar \sum_{k=1}^3 [\tau_i]_{jk} X_k = i\hbar \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} X_k. \quad (6.17a)$$

Mithilfe der Hausdorff-Formel (3.84) kann man sich davon überzeugen, daß damit die Forderung (6.10) in *allen* Ordnungen erfüllt ist. Mit dem gleichen Argument folgt für die Komponenten des Impulses

$$[L_i, P_j] = i\hbar \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} P_k. \quad (6.17b)$$

Die Forderungen (6.17) werden vom selbstadjungierten<sup>1</sup> Drehimpuls-Operator

$$\vec{L} = \vec{X} \times \vec{P} \quad (6.18)$$

bzw.

$$L_i = \sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} X_j P_k = L_i^\dagger \quad (6.19)$$

erfüllt. In der Tat

$$\begin{aligned} [L_i, X_l] &= \sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} [X_j P_k, X_l] = \sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} X_j \underbrace{[P_k, X_l]}_{=-i\hbar\delta_{kl}} \\ &= -i\hbar \sum_{j=1}^3 \epsilon_{ijl} X_j = i\hbar \sum_{j=1}^3 \epsilon_{ilj} X_j \end{aligned} \quad (6.20a)$$

und

$$[L_i, P_l] = \sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} [X_j P_k, P_l] = \sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} \underbrace{[X_j, P_l]}_{=i\hbar\delta_{jl}} P_k = i\hbar \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} P_j. \quad (6.20b)$$

Aus der Antisymmetrie von  $\epsilon_{ijk}$  folgen

$$\begin{aligned} [L_i, \vec{X}^2] &= \sum_{j=1}^3 [L_i, X_j^2] = \sum_{j=1}^3 ([L_i, X_j] X_j + X_j [L_i, X_j]) \\ &= 2i\hbar \sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} X_j X_k = 0 \end{aligned} \quad (6.21a)$$

---

<sup>1</sup>NB:  $(X_j P_k)^\dagger = P_k^\dagger X_j^\dagger = P_k X_j = X_j P_k$  dann und nur dann, wenn  $j \neq k$ .

und

$$[L_i, \vec{P}^2] = 0. \quad (6.21b)$$

Also vertauschen die Komponenten des Drehimpulses mit allen Hamiltonoperatoren der Form

$$H = \frac{1}{2m} \vec{P}^2 + V(\vec{X}^2). \quad (6.22)$$

Deshalb können wir nach gemeinsamen Eigenvektoren von Hamiltonoperator und Komponenten des Drehimpulses suchen und die Matrixelemente der Drehimpulskomponenten sind konstant

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \vec{L} | \phi(t) \rangle &= \langle \psi(t) | \vec{L} H | \phi(t) \rangle - \langle \psi(t) | H \vec{L} | \phi(t) \rangle \\ &= \langle \psi(t) | [\vec{L}, H] | \phi(t) \rangle = 0. \end{aligned} \quad (6.23)$$

## 6.2 Drehimpuls-Algebra

Weil sich der Drehimpuls unter Drehungen wie ein Vektor verhält, also genauso wie Ort und Impuls, erwarten wir

$$[L_i, L_j] = i\hbar \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} L_k, \quad (6.24)$$

was auch leicht zu überprüfen ist. Daraus sehen wir, daß die drei Komponenten  $L_{1,2,3}$  des Drehimpulses keine gemeinsame Eigenbasis haben können.

Das „Betragquadrat“ des Drehimpulses

$$\vec{L}^2 = \sum_{k=1}^3 L_k^2 \quad (6.25)$$

ändert sich aber unter einer Drehung nicht

$$\begin{aligned} [L_i, \vec{L}^2] &= \sum_{k=1}^3 [L_i, L_k^2] = \sum_{k=1}^3 ([L_i, L_k] L_k + L_k [L_i, L_k]) \\ &= i\hbar \sum_{k,l=1}^3 \epsilon_{ikl} (L_l L_k + L_k L_l) = 0, \end{aligned} \quad (6.26)$$

und wir können eine Basis aus gemeinsamen Eigenvektoren von  $\vec{L}^2$  und *einem* der  $\{L_i\}_{i=1,2,3}$  finden. Es ist üblich, dafür  $L_3$  auszuwählen

$$\vec{L}^2 |l, m\rangle = \hbar^2 \alpha_l |l, m\rangle \quad (6.27a)$$

$$L_3 |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle . \quad (6.27b)$$

Die Potenzen von  $\hbar$  haben wir extrahiert, damit  $l$  und  $m$  dimensionslos sind. In (6.27a) haben wir uns die Freiheit gewahrt, nicht den Eigenwert von  $\vec{L}^2$  selbst zur Benennung des Eigenzustands zu benutzen, um später einfachere Formeln zu erhalten.

### 6.2.1 Schiebeoperatoren

Bevor wir die Eigenvektoren konkret ausrechnen, können wir die möglichen Eigenwerte bestimmen. Die *nicht* selbstadjungierten *Schiebeoperatoren*

$$L_{\pm} = L_1 \pm iL_2 = L_{\mp}^{\dagger} \quad (6.28)$$

erfüllen

$$\left[ \vec{L}^2, L_{\pm} \right] = 0 \quad (6.29a)$$

$$\left[ L_3, L_{\pm} \right] = \left[ L_3, L_1 \right] \pm i \left[ L_3, L_2 \right] = i\hbar L_2 \pm \hbar L_1 = \pm \hbar (L_1 \pm iL_2) = \pm \hbar L_{\pm} \quad (6.29b)$$

$$\left[ L_{\pm}, L_{\mp} \right] = \left[ L_1 \pm iL_2, L_1 \mp iL_2 \right] = \pm i \left[ L_2, L_1 \right] \mp i \left[ L_1, L_2 \right] = \pm 2\hbar L_3 . \quad (6.29c)$$

Damit folgt

$$\begin{aligned} L_3 L_{\pm} |l, m\rangle &= \left[ L_3, L_{\pm} \right] |l, m\rangle + L_{\pm} L_3 |l, m\rangle \\ &= \pm \hbar L_{\pm} |l, m\rangle + L_{\pm} \hbar m |l, m\rangle = \hbar (m \pm 1) L_{\pm} |l, m\rangle , \end{aligned} \quad (6.30)$$

also schieben  $L_{\pm}$  den Eigenwert von  $L_3$  um  $\pm 1$

$$L_{\pm} |l, m\rangle = \hbar c_{l,m,\pm} |l, m \pm 1\rangle , \quad (6.31)$$

wobei der Normierungsfaktor  $c_{l,m,\pm}$  noch zu bestimmen ist. Aus

$$L_{\pm} L_{\mp} = (L_1 \pm iL_2) (L_1 \mp iL_2) = L_1^2 + L_2^2 \pm iL_2 L_1 \mp iL_1 L_2 = \vec{L}^2 - L_3^2 \pm \hbar L_3 \quad (6.32)$$

folgt aber sofort

$$\begin{aligned} \hbar^2 |c_{l,m,\pm}|^2 &= \hbar^2 |c_{l,m,\pm}|^2 \langle l, m \pm 1 | l, m \pm 1 \rangle \\ &= \|L_{\pm} |l, m\rangle\|^2 = \langle l, m | L_{\pm}^{\dagger} L_{\pm} |l, m\rangle \\ &= \langle l, m | L_{\mp} L_{\pm} |l, m\rangle = \langle l, m | \left( \vec{L}^2 - L_3^2 \mp \hbar L_3 \right) |l, m\rangle \\ &= \langle l, m | (\hbar^2 \alpha_l - \hbar^2 m^2 \mp \hbar^2 m) |l, m\rangle = \hbar^2 (\alpha_l - m(m \pm 1)) \end{aligned} \quad (6.33)$$

bzw.

$$|c_{l,m,\pm}| = \sqrt{\alpha_l - m(m \pm 1)}. \quad (6.34)$$

Man kann zeigen, daß nur die Fälle physikalisch relevant sind, in denen die  $\{|l, m\rangle\}_{m \in M(l)}$  bei festgehaltenem  $l$  eine *endliche* Menge sind<sup>2</sup>. Es muß deshalb Zustandsvektoren  $|l, m_{\pm}\rangle$  mit maximalen und minimalen  $m$  geben, auf die die Anwendung der Schiebeoperatoren keine neuen Zustandsvektoren ergibt

$$L_+ |l, m_+\rangle = 0 \quad (6.35a)$$

$$L_- |l, m_-\rangle = 0. \quad (6.35b)$$

Dabei dürfen die  $m_{\pm}$  von  $l$  abhängen. D. h.

$$|c_{l,m_{\pm},\pm}|^2 = \alpha_l - m_{\pm}(m_{\pm} \pm 1) = 0, \quad (6.36)$$

also

$$0 = m_+^2 + m_+ - m_-^2 + m_- = (m_+ + m_-)(m_+ - m_- + 1). \quad (6.37)$$

Weil wir wissen, daß

$$m_+ - m_- \in \mathbf{N}_0 \quad (6.38)$$

gilt, ist  $m_+ - m_- + 1 > 0$ , also

$$m_+ = -m_- \in \frac{1}{2}\mathbf{N}_0 \quad (6.39)$$

und weiter

$$\alpha_l = m_+(m_+ + 1) = m_-(m_- - 1) = |m_-|(|m_-| + 1). \quad (6.40)$$

Daraus schließen wir

$$\alpha_l = l(l + 1) \quad \text{mit } 2l \in \mathbf{N}_0 \quad (6.41a)$$

und weil  $|m| \leq |m_{\pm}| = l$

$$m \in \{-l, -l + 1, \dots, l - 1, l\}. \quad (6.41b)$$

---

<sup>2</sup>Mathematisch: „jede irreduzible unitäre Darstellung einer kompakten Lie-Gruppe ist endlichdimensional“.

### 6.2.2 Irreduzible Unterräume

Somit kennen wir *alle zulässigen* gemeinsamen Eigenwerte von  $\vec{L}^2$  und  $L_3$

$$\vec{L}^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle \quad \text{mit } 2l \in \mathbf{N}_0 \quad (6.42a)$$

$$L_3 |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle \quad \text{mit } m \in \{-l, -l+1, \dots, l-1, l\}. \quad (6.42b)$$

Und aus

$$L_{\pm} |l, m\rangle = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} |l, m \pm 1\rangle. \quad (6.43)$$

können wir mit

$$L_1 = \frac{1}{2} (L_+ + L_-) \quad (6.44a)$$

$$L_2 = \frac{1}{2i} (L_+ - L_-) \quad (6.44b)$$

die Wirkung aller Komponenten des Drehimpulses bestimmen.

Vorlesung 17: Fr, 28. 06. 2019

Weil  $\alpha_l \neq \alpha_{l'}$  für  $l \neq l'$  wissen wir, daß Vektoren mit verschiedenem  $l$  orthogonal sind

$$\langle l, m | l', m' \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'}. \quad (6.45)$$

Die  $2l + 1$  Vektoren

$$\{|l, m\rangle\}_{m=-l, -l+1, \dots, l-1, l} \quad (6.46)$$

spannen somit einen  $2l + 1$ -dimensionalen Unterraum  $\mathcal{H}_l \subseteq \mathcal{H}$  des Hilbertraums auf

$$|\psi\rangle = \sum_{m=-l}^l \psi_m |l, m\rangle \in \mathcal{H}_l, \quad (6.47)$$

der invariant unter der Wirkung der Komponenten des Drehimpulses ist

$$L_i : \mathcal{H}_l \rightarrow \mathcal{H}_l. \quad (6.48)$$

Aufgrund der Wirkung der Schiebeoperatoren gibt es keinen echten Unterraum  $\mathcal{H}'_l \subset \mathcal{H}_l$  der ebenfalls invariant wäre. Man sagt, die  $\mathcal{H}_l$  sind *irreduzibel*. Der ganze Hilbertraum kann als eine *direkte Summe* der irreduziblen Unterräume geschrieben werden

$$\mathcal{H} = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathcal{H}_{\frac{n}{2}} = \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_{\frac{1}{2}} \oplus \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_{\frac{3}{2}} \oplus \dots \quad (6.49)$$

und die Matrixelemente der Drehimpulsoperatoren sind

$$\langle l, m | \vec{L}^2 | l', m' \rangle = \hbar^2 l(l+1) \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (6.50a)$$

$$\langle l, m | L_{\pm} | l', m' \rangle = \hbar \sqrt{l(l+1) - m'(m' \pm 1)} \delta_{ll'} \delta_{m, m' \pm 1} \quad (6.50b)$$

$$\langle l, m | L_3 | l', m' \rangle = \hbar m \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (6.50c)$$

$$\langle l, m | L_1 | l', m' \rangle = \frac{1}{2} (\langle l, m | L_+ | l', m' \rangle + \langle l, m | L_- | l', m' \rangle) \quad (6.50d)$$

$$\langle l, m | L_2 | l', m' \rangle = \frac{1}{2i} (\langle l, m | L_+ | l', m' \rangle - \langle l, m | L_- | l', m' \rangle) \quad (6.50e)$$

### 6.3 Spin $l$ für kleine $l$

Für kleine  $l$  können wir alles ausschreiben.

#### 6.3.1 Spin 0

Der Fall  $l = 0$  entspricht dem rotationsinvarianten eindimensionalen Hilbertraum

$$\mathcal{H}_0 = \{e^{i\phi} |0, 0\rangle : \phi \in [0, 2)\} \quad (6.51)$$

in dem alle Komponenten des Drehimpulses verschwinden.

$$L_i |0, 0\rangle = 0 \quad (6.52)$$

#### 6.3.2 Spin 1/2

Der Fall  $l = 1/2$  ist wieder das QBit

$$\mathcal{H}_{1/2} = \{\psi_+ |1/2, 1/2\rangle + \psi_- |1/2, -1/2\rangle : |\psi_+|^2 + |\psi_-|^2 = 1\} \quad (6.53)$$

mit den Matrixelementen

$$\langle 1/2, m | L_{\pm} | 1/2, m' \rangle = \hbar \sqrt{3/4 - m'(m' \pm 1)} \delta_{m, m' \pm 1} \quad (6.54a)$$

$$\langle 1/2, m | L_3 | 1/2, m' \rangle = \hbar m \delta_{mm'} \quad (6.54b)$$

$$\langle 1/2, m | \vec{L}^2 | 1/2, m' \rangle = \frac{3\hbar^2}{4} \delta_{mm'}, \quad (6.54c)$$

die wie auch in Matrixform schreiben können

$$\langle 1/2, m | L_+ | 1/2, m' \rangle = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (6.55a)$$

$$\langle 1/2, m | L_- | 1/2, m' \rangle = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (6.55b)$$

$$\langle 1/2, m | L_1 | 1/2, m' \rangle = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_1 \quad (6.55c)$$

$$\langle 1/2, m | L_2 | 1/2, m' \rangle = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_2 \quad (6.55d)$$

$$\langle 1/2, m | L_3 | 1/2, m' \rangle = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_3 \quad (6.55e)$$

$$\langle 1/2, m | \vec{L}^2 | 1/2, m' \rangle = \frac{3\hbar^2}{4} \mathbf{1} \quad (6.55f)$$

um die Paulimatrizen wiederzuentdecken.

### 6.3.3 Spin 1

Der Fall  $l = 1$  ist Gegenstand einer Übungsaufgabe.

## 6.4 Drehimpuls im Ortsraum, Kugelflächenfunktionen

Für die Ortsraumwellenfunktionen wirkt der Impuls als Gradient

$$(\vec{P}\psi)(\vec{x}) = -i\hbar \vec{\nabla} \psi(\vec{x}) \quad (6.56)$$

und der Drehimpuls ist damit

$$(\vec{L}\psi)(\vec{x}) = -i\hbar (\vec{x} \times \vec{\nabla}) \psi(\vec{x}). \quad (6.57)$$

Für die folgende Diskussion sind kartesische Koordinaten weniger geeignet als Kugelkoordinaten

$$\vec{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r \sin \theta \cos \phi \\ r \sin \theta \sin \phi \\ r \cos \theta \end{pmatrix} \quad (6.58)$$

und man findet, daß die Abhängigkeit von  $r$  aus den Drehimpulsoperatoren herausfällt

$$L_1 = i\hbar \left( \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} + \sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \quad (6.59a)$$

$$L_2 = i\hbar \left( \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} - \cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \quad (6.59b)$$

$$L_3 = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (6.59c)$$

$$L_{\pm} = \hbar e^{\pm i\phi} \left( \pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad (6.59d)$$

$$\vec{L}^2 = -\hbar^2 \left( \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right). \quad (6.59e)$$

Mit den Eigenzuständen zu den Winkeln

$$\Theta |\theta, \phi\rangle = \theta |\theta, \phi\rangle \quad (6.60a)$$

$$\Phi |\theta, \phi\rangle = \phi |\theta, \phi\rangle \quad (6.60b)$$

können wir Wellenfunktionen definieren

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \langle \theta, \phi | l, m \rangle. \quad (6.61)$$

Mit

$$L_3 Y_{lm}(\theta, \phi) = -i\hbar \frac{\partial Y_{lm}}{\partial \phi}(\theta, \phi) = \hbar m Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (6.62)$$

finden wir die Abhängigkeit von  $\phi$

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = e^{im\phi} f_{lm}(\theta). \quad (6.63)$$

Weil der Operator  $L_3$  eine Observable, also selbstadjungiert, sein soll, müssen die Wellenfunktionen  $Y_{lm}$  in  $\phi$  periodisch sein

$$Y_{lm}(\theta, 2\pi) = Y_{lm}(\theta, 0), \quad (6.64)$$

damit die Randterme in der partiellen Integration verschwinden. Also muß

$$e^{im2\pi} = 1 \quad (6.65)$$

gelten und es sind nur ganzzahlige Werte von  $l$  und  $m$  erlaubt. Halbzahlige Werte können nicht durch Ortsraumwellenfunktionen realisiert werden, sondern nur durch  $2l + 1$ -dimensionale Spinoren.

Die normierten Lösungen der Eigenwertgleichungen

$$\frac{1}{\hbar} L_3 Y_{lm} = -i \frac{\partial Y_{lm}}{\partial \phi} = m Y_{lm} \quad (6.66a)$$

$$\frac{1}{\hbar^2} \vec{L}^2 Y_{lm} = -\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial Y_{lm}}{\partial \theta} \right) - \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y_{lm}}{\partial \phi^2} = l(l+1) Y_{lm} \quad (6.66b)$$

mit ganzzahligen  $l$  und  $m$  sind die *Kugelflächenfunktionen*

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi} \quad (6.67a)$$

mit  $-l \leq m \leq l$  und den *assozierten Legendre-Polynomen*

$$P_l^m(z) = \frac{(-1)^m}{2^l l!} (1-z^2)^{m/2} \frac{d^{l+m}}{dz^{l+m}} (z^2-1)^l. \quad (6.67b)$$

Sie bilden natürlich eine **ONB**

$$\int_{-1}^1 d \cos \theta \int_0^{2\pi} d\phi Y_{lm}^*(\theta, \phi) Y_{l'm'}(\theta, \phi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (6.68a)$$

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\theta, \phi) Y_{lm}^*(\theta', \phi') = \delta(\cos \theta - \cos \theta') \delta(\phi - \phi') \quad (6.68b)$$

und die Summe der Betragsquadrate über alle  $m$  bei festem  $l$  ist unabhängig von den Winkeln (Theorem von Ünsold)

$$\sum_{m=-l}^l |Y_{lm}(\theta, \phi)|^2 = \frac{2l+1}{4\pi}. \quad (6.69)$$

Eine wichtige Eigenschaft der Kugelflächenfunktionen ist, daß sie Eigenfunktionen des Paritätsoperators

$$\langle \vec{x} | \mathbf{P} | \psi \rangle = \langle -\vec{x} | \psi \rangle, \quad (6.70)$$

bzw. in Kugelkoordinaten

$$\langle r, \theta, \phi | \mathbf{P} | \psi \rangle = \langle r, \pi - \theta, \phi + \pi | \psi \rangle, \quad (6.71)$$

sind. Ort und Impuls sind ungerade

$$\mathbf{P}^{-1} \vec{X} \mathbf{P} = -\vec{X} \quad (6.72a)$$

$$\mathbf{P}^{-1} \vec{P} \mathbf{P} = -\vec{P} \quad (6.72b)$$

und der Drehimpulsoperator gerade

$$\mathbf{P}^{-1} \vec{L} \mathbf{P} = \vec{L} \quad (6.72c)$$

unter der Parität. Aus der Definition (6.67) können wir

$$Y_{lm}(\pi - \theta, \phi + \pi) = (-1)^l Y_{lm}(\theta, \phi), \quad (6.73)$$

ablesen, also

$$\forall l, m \in \mathbf{Z} : \mathbf{P} |l, m\rangle = (-1)^l |l, m\rangle . \quad (6.74)$$

Weil die Schiebeoperatoren  $L_{\pm}$  unter Parität gerade sind, müssen alle  $|l, m\rangle$  mit gleichem  $l$  die gleiche Parität haben.

Für jeden unter der Parität ungeraden Operator  $O$ , also z. B. Ort oder Impuls gilt

$$\langle l, m | O | l', m' \rangle = - \langle l, m | \mathbf{P}^{-1} O \mathbf{P} | l', m' \rangle = (-1)^{1+l+l'} \langle l, m | O | l', m' \rangle , \quad (6.75)$$

also

$$l + l' \in 2\mathbf{Z} : \langle l, m | O | l', m' \rangle = 0 \quad (6.76)$$

und analog

$$l + l' \in 2\mathbf{Z} + 1 : \langle l, m | E | l', m' \rangle = 0 \quad (6.77)$$

für jeden geraden Operator  $E$ . Diese Eigenschaft führt zu *Auswahlregeln* für die erlaubten Übergänge zwischen Atomorbitalen.

## —7—

ZENTRALPOTENTIALE,  
WASSERSTOFFATOM

Der Hamiltonoperator für ein Zentralpotential hat die Form<sup>1</sup>

$$H = \frac{1}{2\mu} \vec{P}^2 + V(r) \quad (7.1)$$

mit  $r = \sqrt{\vec{X}^2}$ . In Kugelkoordinaten kann der Laplace-Operator  $\Delta$  als

$$\begin{aligned} \Delta\psi &= \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_i^2} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \\ &= \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r\psi) \qquad \qquad \qquad = -\frac{1}{r^2 \hbar^2} \vec{L}^2 \psi \end{aligned} \quad (7.2)$$

geschrieben werden und der Hamiltonoperator erhält eine sehr einfache Gestalt

$$H\psi = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta\psi + V(r)\psi = -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{2\mu r^2} \vec{L}^2 \psi + V(r)\psi \quad (7.3)$$

die von den Winkelkoordinaten  $\theta, \phi$  nur über  $\vec{L}^2$  abhängt.

<sup>1</sup>Wir haben für die Masse  $\mu$  geschrieben. Sowohl um Verwechslungen mit der magnetischen Quantenzahl  $m$  in  $|l, m\rangle$  und  $Y_{lm}$  zu vermeiden, als auch um daran zu erinnern, daß der bei einem Zweikörperproblem an dieser Stelle die reduzierte Masse  $1/\mu = 1/m_1 + 1/m_2$  auftaucht.

## 7.1 Separationsansatz

Weil wir bereits eine **ONB** aus Eigenfunktionen von  $\vec{L}^2$  gefunden haben, bietet sich eine Entwicklung nach Kugelflächenfunktionen

$$\psi(r, \theta, \phi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l R_{lm}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (7.4)$$

an

Vorlesung 18: Mo, 01. 07. 2019

und die stationäre **SG**

$$\begin{aligned} H \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l R_{lm} Y_{lm} = \\ \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial R_{lm}}{\partial r} \right) Y_{lm} + \underbrace{\frac{1}{2\mu r^2} R_{lm} \vec{L}^2 Y_{lm}}_{= \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} R_{lm} Y_{lm}} + V(r) R_{lm} Y_{lm} \right) \\ \stackrel{!}{=} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l E R_{lm} Y_{lm} \quad (7.5) \end{aligned}$$

hat die Form

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial R_{lm}}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} R_{lm} + (V(r) - E) R_{lm} \right) Y_{lm} = 0. \quad (7.6)$$

Weil die Kugelflächenfunktionen eine **ONB** bilden, muß jeder Term in der Summe die Differentialgleichung in der Klammer unabhängig von den anderen lösen. Dies rechtfertigt den *Separationsansatz*

$$\psi_{lm}(r, \theta, \phi) = R_{lm}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (7.7)$$

und wir erhalten die *radiale Schrödingergleichung* für jedes Paar  $(l, m)$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR_{lm}}{dr} \right) (r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} R_{lm}(r) + V(r) R_{lm}(r) = E R_{lm}(r). \quad (7.8)$$

Diese Gleichung ist unabhängig von  $m$ , also werden auch die Lösungen  $R_{lm}$  von  $m$  unabhängig sein. Darüberhinaus erweist es sich als geschickt, für  $R_{lm}$  den Ansatz

$$R_{lm}(r) = \frac{u_l(r)}{r} \quad (7.9)$$

zu machen:

1. Die Normierungsbedingung

$$1 = \int_0^\infty dr r^2 |R_{lm}(r)|^2 \quad (7.10)$$

vereinfacht sich zu

$$1 = \int_0^\infty dr |u_l(r)|^2 \quad (7.11)$$

2. der Differentialoperator vereinfacht sich

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR_{lm}}{dr} \right) = \frac{1}{r} \frac{d^2 u_l}{dr^2}. \quad (7.12)$$

Die radiale **SG** hat schließlich die Gestalt einer eindimensionalen **SG**

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 u_l}{dr^2}(r) + \left( V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \right) u_l(r) = E u_l(r) \quad (7.13)$$

mit *effektivem Potential*

$$V_{\text{eff.}}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}, \quad (7.14)$$

das alle Drehimpulseffekte (die Zentripedalkraft der klassischen Physik) beinhaltet. Die Randbedingungen an  $u_l$  rühren einerseits von der Normierbarkeit für diskrete Energieeigenwerte  $E_n$

$$\int_0^\infty dr |u_{n,l}(r)|^2 = 1 \quad (7.15a)$$

und für kontinuierliche Energieeigenwerte  $E$

$$\int_0^\infty dr u_{E,l}^*(r) u_{E',l}(r) = \delta(E - E'), \quad (7.15b)$$

andererseits muß  $\langle \psi | H | \psi \rangle$  wohldefiniert sein, sodaß die Funktion

$$r \mapsto \frac{\hbar^2}{2\mu} \left| \frac{du_{n,l}}{dr}(r) \right|^2 + V_{\text{eff.}}(r) |u_{n,l}(r)|^2 \quad (7.16)$$

für  $r \rightarrow \infty$  hinreichend schnell abfallen muß, aber auch auf  $[0, \infty)$  keine nicht-integriblen Singularitäten haben darf. Für  $l > 0$  ist hier der untere Rand  $r \rightarrow 0$  gefährlich!

### 7.1.1 Randbedingungen für $r \rightarrow 0$

In realistischen Anwendungen kommen nur Potentiale vor, die für  $r \rightarrow 0$  langsamer als  $1/r^2$  anwachsen. Deshalb dominiert dort für  $l > 0$  der Zentrifugalterm

$$V_{\text{eff.}}(r) - E \xrightarrow{r \rightarrow 0} \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \quad (7.17)$$

und wir können die Differentialgleichung

$$\frac{d^2 u_l}{dr^2}(r) = \frac{l(l+1)}{r^2} u_l(r) \quad (7.18)$$

als Näherung im Bereich  $r \rightarrow 0$  betrachten. Aus dem Ansatz

$$u_l(r) = c_l r^{\lambda_l} \quad (7.19)$$

folgen mit

$$\frac{d^2 u_l}{dr^2}(r) = \lambda_l(\lambda_l - 1) c_l r^{\lambda_l - 2} = \frac{l(l+1)}{r^2} c_l r^{\lambda_l} \quad (7.20)$$

bzw.

$$\lambda_l = \frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4} + l(l+1)} = \frac{1}{2} \pm \left( l + \frac{1}{2} \right) \quad (7.21)$$

die zweiparametrische Schar von Lösungen

$$u_l(r) = c_l r^{l+1} + c'_l r^{-l}. \quad (7.22)$$

Die Integrabilität am unteren Rand erzwingt dann

$$c'_l = 0. \quad (7.23)$$

Für  $l = 0$  können keine allgemeinen Aussagen getroffen werden, weil der Zentrifugalterm dann das Potential nicht dominiert.

### 7.1.2 Randbedingungen für $r \rightarrow \infty$

Mit Ausnahme der starken Wechselwirkung zwischen Quarks und dem als Modellsystem beliebten harmonischen Oszillator, fällt in realistischen Anwendungen die Wechselwirkungsstärke für hinreichend große  $r$  ab. Wir können dann den Nullpunkt der Energieskala so wählen, daß

$$\lim_{r \rightarrow \infty} V(r) = 0 \quad (7.24)$$

und die radiale **SG** hat für  $r \rightarrow \infty$  die asymptotische Form

$$\frac{d^2 u_l}{dr^2}(r) = -\frac{2\mu E}{\hbar^2} u_l(r), \quad (7.25)$$

deren Lösungsverhalten vom Vorzeichen von  $E$  abhängt.

$$E < 0$$

Ein Exponentialansatz führt direkt auf eine normierbare Lösung für einen gebundenen Zustand

$$u_l(r) \propto e^{-\kappa r} \quad (7.26)$$

mit  $\kappa = \sqrt{-2\mu E}/\hbar > 0$ , wobei die zweite Lösung mit  $\kappa < 0$  aufgrund der Normierbarkeitsbedingung verworfen werden muß.

$$E > 0$$

Der gleiche Exponentialansatz führt auf nicht normierbare Streulösungen

$$u_l(r) = c_{l,+} e^{ikr} + c_{l,-} e^{-ikr} \quad (7.27)$$

mit  $k = \sqrt{2\mu E}/\hbar > 0$ .

## 7.2 Coulomb-Potential

Das Potential für die Wechselwirkung eines Elektrons mit Ladung  $-e$  mit einem Kern mit Ladung  $+Ze$  ist in geeigneten Einheiten

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi} \frac{1}{r} \quad (7.28)$$

mit der dimensionslosen *Feinstrukturkonstanten*

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\hbar c} \approx \frac{1}{137}. \quad (7.29)$$

Wir müssen also die Differentialgleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 u_l}{dr^2}(r) + \left( \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} - \frac{Ze^2}{4\pi} \frac{1}{r} - E \right) u_l(r) = 0 \quad (7.30)$$

bzw.

$$-\frac{d^2 u_l}{dr^2}(r) + \left( \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{\mu Ze^2}{2\pi\hbar^2} \frac{1}{r} - \frac{2\mu E}{\hbar^2} \right) u_l(r) = 0 \quad (7.31)$$

lösen. Wir konzentrieren uns auf den Fall  $E < 0$ , der nach obigen Überlegungen zu normierbaren gebundenen Zuständen führen sollte.

### 7.2.1 Gebundene Zustände

Der exponentiellen Abfall für  $r \rightarrow \infty$  definiert eine charakteristische inverse Länge

$$\kappa = \frac{\sqrt{-2\mu E}}{\hbar} > 0 \quad (7.32)$$

mit der wir

$$u_l(r) = f_l(2\kappa r) = f_l(\rho) \quad (7.33a)$$

und

$$\frac{du_l}{dr}(r) = 2\kappa f_l'(2\kappa r) \quad (7.33b)$$

$$\frac{d^2u_l}{dr^2}(r) = 4\kappa^2 f_l''(2\kappa r) \quad (7.33c)$$

schreiben können. Somit ist die Differentialgleichung für  $u_l$  äquivalent zur Differentialgleichung

$$-4\kappa^2 f_l''(2\kappa r) + \left( \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{\mu Z e^2}{2\pi\hbar^2 r} - \frac{2\mu E}{\hbar^2} \right) f_l(2\kappa r) = 0, \quad (7.34)$$

bzw.

$$-f_l''(\rho) + \left( \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{\mu Z e^2}{4\pi\hbar^2\kappa\rho} - \frac{2\mu E}{(2\hbar\kappa)^2} \right) f_l(\rho) = 0 \quad (7.35)$$

für  $f_l$ . Aus der Wechselwirkungsstärke und der Eigenenergie können wir den dimensionslosen Parameter

$$\nu = \frac{\mu Z e^2}{4\pi\hbar^2\kappa} = \frac{Z e^2}{4\pi\hbar} \sqrt{-\frac{\mu}{2E}} \quad (7.36)$$

formen, mit dem die Differentialgleichung kompakt als

$$f_l''(\rho) - \left( \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{\nu}{\rho} + \frac{1}{4} \right) f_l(\rho) = 0 \quad (7.37)$$

geschrieben werden kann. Um das richtige asymptotischen Verhalten zu erhalten, machen wir den Ansatz

$$f_l(\rho) = \underbrace{\rho^{l+1}}_{\rho \rightarrow 0} g_l(\rho) \underbrace{e^{-\rho/2}}_{\rho \rightarrow \infty} \quad (7.38)$$

und fordern, daß  $g_l(\rho)$  für  $\rho \rightarrow \infty$  kein exponentielles Verhalten haben darf und daß  $g_l(\rho)$  für  $\rho \rightarrow \infty$  gegen eine Konstante geht, die wir zunächst als 1

wählen können und später aus der Normierungsbedingung festgelegt wird. Mit der Produktregel folgt

$$f_i''(\rho) = \left( g_i''(\rho) + \left( \frac{2(l+1)}{\rho} - 1 \right) g_i'(\rho) + \left( \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{l+1}{\rho} + \frac{1}{4} \right) g_i(\rho) \right) \rho^{l+1} e^{-\rho/2} \quad (7.39)$$

und die Differentialgleichung wird zu

$$\left( -g_i''(\rho) - \left( \frac{2(l+1)}{\rho} - 1 \right) g_i'(\rho) + \frac{l+1-\nu}{\rho} g_i(\rho) \right) \underbrace{\rho^{l+1} e^{-\rho/2}}_{>0} = 0, \quad (7.40)$$

bzw.

$$\rho g_i''(\rho) + (2l+2-\rho) g_i'(\rho) - (l+1-\nu) g_i(\rho) = 0 \quad (7.41)$$

nach Division durch  $\rho^l e^{-\rho/2}$ . Dies ist eine *Kummersche Differentialgleichung*

$$z \frac{d^2 w}{dz^2}(z) + (b-z) \frac{dw}{dz}(z) - aw(z) = 0 \quad (7.42)$$

mit Parametern

$$a = l+1-\nu \quad (7.43a)$$

$$b = 2l+2 \geq 2. \quad (7.43b)$$

Die Kummersche Differentialgleichung (DGL) (7.42) kann mit Potenzreihenansatz und Koeffizientenvergleich explizit gelöst werden. Aufgrund der Randbedingungen für  $\rho \rightarrow 0$  und  $\rho \rightarrow \infty$  sind nur Polynome zulässige Lösungen. Dies führt über Abbruchbedingungen an die Potenzreihe zu Bedingungen an  $a$  und  $b$ , bzw.  $\nu$ .

Man kann aber auch das geballte Wissen der Mathematiker des 19. Jhr. nutzen und findet in der einschlägigen Literatur, daß die allgemeinen Lösungen der Kummerschen DGL (7.42) die *konfluent hypergeometrische Funktionen*

$$M(a, b, z) = {}_1F_1(a, b, z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n}{(b)_n} z^n \quad (7.44a)$$

$$U(a, b, z) = \frac{\pi}{\sin(\pi b)} \left( \frac{M(a, b, z)}{\Gamma(1+a-b)\Gamma(b)} - z^{1-b} \frac{M(1+a-b, 2-b, z)}{\Gamma(a)\Gamma(2-b)} \right) \quad (7.44b)$$

mit

$$(a)_0 = 1 \quad (7.45a)$$

$$(a)_n = a(a+1)(a+2)\cdots(a+n-1) \quad (7.45b)$$

sind. In der Nähe von  $z = 0$  haben die Lösungen die Entwicklung<sup>2</sup>

$$M(a, b, z) = 1 + \frac{a}{b}z + \mathcal{O}(z^2) \quad (7.46a)$$

$$U(a, b, z) = \begin{cases} \frac{\Gamma(b-1)}{\Gamma(a)}z^{1-b} + \mathcal{O}(|z|^{\operatorname{Re} b - 2}) & \text{für } \operatorname{Re} b \geq 2 \wedge b \neq 2 \\ \frac{\Gamma(b-1)}{\Gamma(a)}z^{1-b} + \mathcal{O}(|\ln z|) & \text{für } b = 2 \\ \dots & \text{für } \operatorname{Re} b < 2 \end{cases} \quad (7.46b)$$

und wir können wegen  $b \geq 0$  die Lösung  $U(a, b, z)$  ausschließen, weil sie der bereits in Abschnitt 7.1.1 verworfenen asymptotischen Lösung entspricht<sup>3</sup>

Für  $|z| \rightarrow \infty$  finden wir das asymptotische Verhalten

$$M(a, b, z) = \Gamma(b) \left( \frac{e^z z^{a-b}}{\Gamma(a)} + \frac{(-z)^{-a}}{\Gamma(b-a)} \right) \quad (7.47a)$$

$$U(a, b, z) = \dots, \quad (7.47b)$$

wobei der exponentielle Anstieg für  $z \rightarrow \infty$  nicht mit der Randbedingung für  $\rho \rightarrow \infty$  verträglich ist. Wir schliessen daraus, daß

$$\frac{1}{\Gamma(a)} \stackrel{!}{=} 0, \quad (7.48)$$

bzw.

$$a = l + 1 - \nu = -n' = 0, -1, -2, -3, \dots \quad (7.49)$$

Dies sind genau die Werte, für die die Potenzreihe (7.46a) abbricht, weil

$$(a)_{1-a} = a(a+1)\dots(a+(1-a)-1) = 0 \quad (7.50)$$

und  $M(-n', b, z)$  ist ein Polynom in  $z$  vom Grad  $n'$ .

<sup>2</sup>Die Spezialfälle der Entwicklung von  $U(a, b, z)$  für  $\operatorname{Re} b < 2$  benötigen wir nicht!

<sup>3</sup>Dieses Argument gilt strenggenommen nur für  $1/\Gamma(a) \neq 0$ , aber für  $1/\Gamma(a) = 0$  unterscheiden sich  $U$  und  $M$  als Funktion von  $z$  nur durch einen Normierungsfaktor.

### 7.2.2 Hauptquantenzahl

Weil  $l, -n' \in \mathbf{N}_0$ , ist die *Hauptquantenzahl*

$$n = \nu = n' + l + 1 \in \mathbf{N} \quad (7.51)$$

und wir finden die Quantisierungsbedingung

$$\frac{Ze^2}{4\pi\hbar} \sqrt{-\frac{\mu}{2E_n}} = \nu = n \in \mathbf{N} \quad (7.52)$$

bzw.

$$E_n = - \left( Z \frac{e^2}{4\pi\hbar} \right)^2 \frac{\mu}{2n^2} = - \frac{Z^2}{n^2} \frac{\mu}{m_e} \underbrace{\left( \frac{e^2}{4\pi\hbar} \right)^2 \frac{m_e}{2}}_{= 1 \text{ Ry} \approx 13.6 \text{ eV}} \quad (7.53a)$$

mit

$$n \in \mathbf{N} \quad (7.53b)$$

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1. \quad (7.53c)$$

$m_e$  die Masse des Elektrons und  $\mu = m_e(1 + \mathcal{O}(m_e/m_{\text{Kern}}))$  die reduzierte Masse.

$$(7.54)$$

### 7.2.3 Termschema

Vorlesung 19: Fr, 05.07.2019

Die möglichen Zustände sind in Abbildung 7.1 zusammengefasst. Dabei wurde die übliche spektroskopische Notation aus Hauptquantenzahl und einem Buchstaben ( $s, p, d, f, \dots$ ) für die Drehimpulsquantenzahl  $l$  verwendet.

Wenn der Hamiltonoperator die vollständige Beschreibung der Welt wäre, wären alle Zustände stabil. Weil es aber weitere Wechselwirkungen, insbesondere mit dem elektromagnetischen Feld, gibt, können diese Übergänge zwischen den Zuständen vermitteln und die Energiedifferenzen  $E_n - E_m$  erscheinen als Spektrallinien.

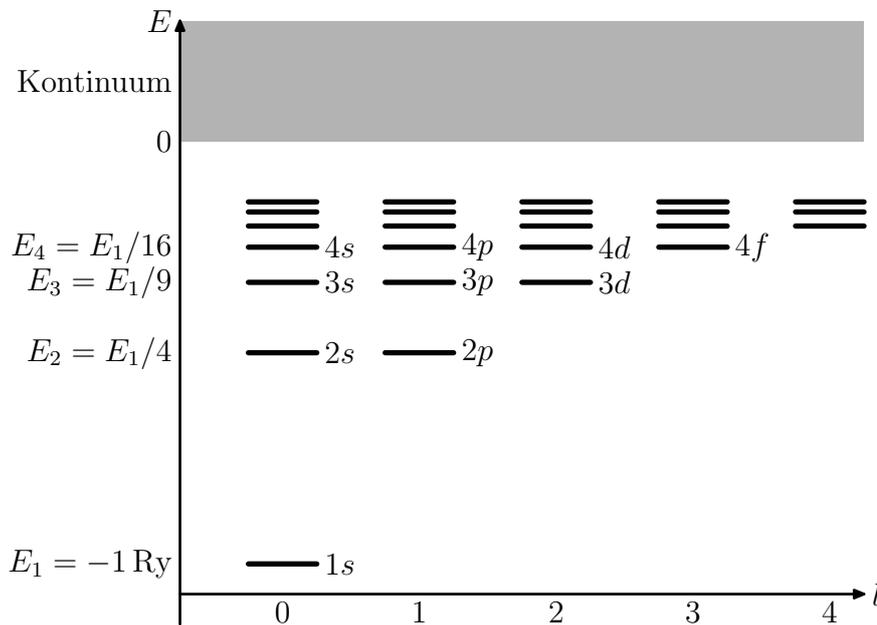


Abbildung 7.1: Termschema für ein Wasserstoffatom. Die Energieskala ist nicht maßstäblich!

### 7.2.4 Wellenfunktionen

$$g_{n,l}(\rho) = M(l + 1 - n, 2l + 2, \rho) = {}_1F_1(l + 1 - n, 2l + 2, \rho) = \frac{(n - l - 1)!}{(2l + 2)_{n-l-1}} L_{n-l-1}^{(2l+1)}(\rho) \quad (7.55)$$

mit den assoziierten Laguerre-Polynomen

$$L_n^{(\alpha)}(z) = \frac{e^z z^{-\alpha}}{n!} \frac{d^n}{dz^n} (e^{-z} z^{n+\alpha}), \quad (7.56)$$

die die Orthogonalitätsrelation

$$\int_0^\infty dx e^{-x} x^\alpha L_n^{(\alpha)}(x) L_m^{(\alpha)}(x) = \delta_{nm} \frac{\Gamma(n + \alpha + 1)}{n!} \quad (7.57)$$

erfüllen. Damit wird die radiale Wellenfunktion

$$R_{n,l}(r) = \frac{u_{n,l}(r)}{r} = \frac{f_{n,l}(2\kappa_n r)}{r}$$

$$= N_{n,l} \frac{(n-l-1)! (2\kappa_n r)^{l+1}}{(2l+2)_{n-l-1} r} L_{n-l-1}^{(2l+1)}(2\kappa_n r) e^{-\kappa_n r}. \quad (7.58)$$

Weil der Normierungsfaktor  $N_{n,l}$  ohnehin noch bestimmt werden muß, können wir auch kurz

$$R_{n,l}(r) = N'_{n,l} r^l L_{n-l-1}^{(2l+1)}(2\kappa_n r) e^{-\kappa_n r} \quad (7.59)$$

schreiben. Die Orthogonalitätsrelation (7.57) stellt sicher, daß

$$\int_0^\infty dr r^2 R_{n,l}(r) R_{n',l}(r) = \delta_{nn'} \quad (7.60)$$

und mit der Orthogonalitätsrelation (6.68a) für die Kugelflächenfunktionen

$$\int_0^\infty r^2 dr \int d\Omega (R_{n,l}(r) Y_{lm}(\theta, \phi))^* R_{n',l'}(r) Y_{l'm'}(\theta, \phi) = \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{mm'}. \quad (7.61)$$

Man könnte sogar auf die explizite Lösung der vollen Differentialgleichung verzichten und argumentieren, daß die  $g_{n,l}(\rho)$  aufgrund der asymptotischen Differentialgleichung bei  $r \rightarrow 0$  und  $r \rightarrow \infty$  Polynome sein müssen, die aufgrund der Selbstadjungiertheit des Hamiltonoperators zu orthogonalen Wellenfunktionen führen müssen. Dies sind genau die assoziierten Laguerre-Polynome.

Die radiale Wellenfunktion des niedrigsten Zustand ist

$$R_{1,0}(r) = N'_{1,0} \underbrace{L_0^{(1)}(2\kappa_1 r)}_{=1} e^{-\kappa_1 r} = 2\kappa_1^{3/2} e^{-\kappa_1 r} = \frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-r/a_0} \quad (7.62)$$

und die zugehörige Wahrscheinlichkeitsdichte

$$r^2 |R_{1,0}(r)|^2 = \frac{4}{a_0^3} r^2 e^{-2r/a_0} \quad (7.63)$$

hat ihr Maximum am *Bohr Radius*<sup>4</sup>

$$a_0 = \frac{1}{\kappa_1} = \frac{\hbar}{\sqrt{-2\mu E_1}} = \frac{4\pi\hbar^2}{Ze^2} \frac{1}{\mu}. \quad (7.64)$$

Für maximalen Drehimpuls  $l = n - 1$  finden wir, daß die radiale Wellenfunktion

$$R_{n,n-1}(r) \propto r^{n-1} \underbrace{L_0^{(n)}(2\kappa_n r)}_{=1} e^{-\kappa_n r} = r^{n-1} e^{-\kappa_n r} \quad (7.65)$$

keine Nullstellen mit  $r > 0$  hat. Im Allgemeinen gibt es  $n - l - 1$  Nullstellen für  $r > 0$  und eine bei  $r = 0$  für  $l > 0$ .

<sup>4</sup>Der Bohr Radius wird für  $Z = 1$  und  $\mu = m_e$  definiert.

### 7.2.5 Entartungen

Für jedes  $l$  gibt es  $2l + 1$  entartete Zustände mit magnetischer Quantenzahl  $m = -l, \dots, l$ . Damit gibt es zu jeder Energie  $E_n$  insgesamt<sup>5</sup>

$$\sum_{l=0}^{n-1} 2l + 1 = n^2 \quad (7.66)$$

entartete Zustände. Die  $2l + 1$ fache Entartung für jede Drehimpulsquantenzahl kann man leicht aus der Drehimpulserhaltung

$$[H, \vec{L}] = 0 \quad (7.67)$$

verstehen, weil damit auch die Schiebeoperatoren  $L_{\pm}$  erhalten sind

$$[H, L_{\pm}] = 0, \quad (7.68)$$

die Zustände mit verschiedenem  $m$  verknüpfen

$$\begin{aligned} H |n, l, m \pm 1\rangle &= \frac{1}{\hbar\sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)}} H L_{\pm} |n, l, m\rangle \\ &= \frac{1}{\hbar\sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)}} L_{\pm} H |n, l, m\rangle \\ &= \frac{1}{\hbar\sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)}} L_{\pm} E_n |n, l, m\rangle = E_n |n, l, m \pm 1\rangle. \end{aligned} \quad (7.69)$$

Deshalb liegt es nahe, daß es eine weitere Symmetrie, bzw. Erhaltungsgröße, gibt, die die Entartung zu verschiedenen  $l$  erklärt. Diese existiert hängt mit dem *Runge-Lenz-Vektor*

$$\vec{R} = \frac{\vec{P} \times \vec{L} - \vec{L} \times \vec{P}}{2m} - \frac{Ze^2}{4\pi} \frac{\vec{X}}{|\vec{X}|} \quad (7.70)$$

(vgl. Abschnitt 4.2.5 von [Ohl17]) zusammen, dessen Komponenten ebenfalls erhalten sind

$$[H, \vec{R}] = 0. \quad (7.71)$$

Wolfgang Pauli hat die Kommutatorrelationen von  $H$ ,  $\vec{L}$  und  $\vec{R}$  benutzt, um das Wasserstoffspektrum rein algebraisch herzuleiten (siehe, z. B., Abschnitt 4.8 von [Wei13]).

<sup>5</sup>Induktion:  $n^2 + (2n + 1) = (n + 1)^2$ .

### 7.3 *Streuzustände*

Für  $E > 0$  gibt es ein Kontinuum von nichtnormierbaren Eigenzuständen, die für  $r \rightarrow \infty$  nicht abfallen sondern oszillieren. Je nach Wahl der Randbedingungen entsprechen Sie einlaufenden oder auslaufenden Wellen oder einer Superposition, die die Streuung von Elektronen an einem Kern beschreibt.

## —8—

## GELADENE TEILCHEN IM ELEKTROMAGNETISCHEN FELD

Empirisch findet man als Bewegungsgleichung für ein Teilchen mit Ladung  $q$  und Masse  $m$  im elektromagnetischen Feld

$$\frac{d\vec{p}}{dt}(t) = m \frac{d^2\vec{x}}{dt^2}(t) = q\vec{E}(\vec{x}(t), t) + \frac{q}{c} \frac{d\vec{x}}{dt}(t) \times \vec{B}(\vec{x}(t), t). \quad (8.1)$$

Weil in der Elektrostatik

$$\vec{\nabla} \times E(\vec{x}(t), t) = 0 \quad (8.2)$$

gilt, kann man ein Potential  $\phi$  einführen

$$E(\vec{x}, t) = -\vec{\nabla}\phi(\vec{x}) \quad (8.3)$$

Mit

$$\left[ P_i, \phi(\vec{X}) \right] = \sum_{j=1}^3 [P_i, X_j] \frac{\partial \phi}{\partial X_j}(\vec{X}) = -i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial X_i}(\vec{X}) = i\hbar E_i(\vec{X}) \quad (8.4)$$

folgt für

$$H(\vec{P}, \vec{X}) = \frac{1}{2m} \vec{P}^2 + q\phi(\vec{X}) \quad (8.5)$$

aus dem Ehrenfest Theorem (2.200)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \vec{P} | \psi(t) \rangle &= \left\langle \psi(t) \left| \frac{1}{i\hbar} [\vec{P}, H(\vec{P}, \vec{X})] \right| \psi(t) \right\rangle \\ &= \left\langle \psi(t) \left| \frac{1}{i\hbar} [\vec{P}, q\phi(\vec{X})] \right| \psi(t) \right\rangle = q \left\langle \psi(t) \left| \vec{E}(\vec{X}) \right| \psi(t) \right\rangle, \end{aligned} \quad (8.6)$$

was wir uns schon bei der Beschreibung des Wasserstoffatoms zunutze gemacht haben.

## 8.1 Vektorpotential

Für das Magnetfeld  $\vec{B}$  kann man kein *skalares* Potential einführen, aber die homogenen Maxwell-Gleichungen<sup>1</sup>

$$\vec{\nabla} \times \vec{E}(\vec{x}, t) + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}(\vec{x}, t) = 0 \quad (8.7a)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B}(\vec{x}, t) = 0 \quad (8.7b)$$

werden durch Potentiale  $(\phi, \vec{A})$  mit

$$\vec{E}(\vec{x}, t) = -\vec{\nabla}\phi(\vec{x}, t) - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}(\vec{x}, t) \quad (8.8a)$$

$$\vec{B}(\vec{x}, t) = \vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{x}, t) \quad (8.8b)$$

gelöst. Allerdings gilt damit wegen  $\vec{E} \neq -\vec{\nabla}\phi$  auch (8.6) nicht mehr. Als physikalisch richtiger Ansatz<sup>2</sup> erweist sich

$$H(\vec{P}, \vec{X}, t) = \frac{1}{2m} \vec{\Pi}^2(\vec{P}, \vec{X}, t) + q\phi(\vec{X}, t) \quad (8.9a)$$

mit dem *kinetischen Impuls*

$$\vec{\Pi}(\vec{P}, \vec{X}, t) = \vec{P} - \frac{q}{c} \vec{A}(\vec{X}, t). \quad (8.9b)$$

Der Kommutator der Komponenten des kinetischen Impulses

$$\begin{aligned} [\Pi_i(\vec{P}, \vec{X}, t), \Pi_j(\vec{P}, \vec{X}, t)] &= -\frac{q}{c} [P_i, A_j(\vec{X}, t)] - \frac{q}{c} [A_i(\vec{X}, t), P_j] \\ &= -\frac{q}{c} \sum_{k=1}^3 \underbrace{[P_i, X_k]}_{=i\hbar\delta_{ik}} \frac{\partial A_j}{\partial x_k}(\vec{X}, t) - \frac{q}{c} \sum_{k=1}^3 \frac{\partial A_i}{\partial x_k}(\vec{X}, t) \underbrace{[X_k, P_j]}_{=i\hbar\delta_{kj}} \\ &= i\hbar \frac{q}{c} \left( \frac{\partial A_j}{\partial x_i}(\vec{X}, t) - \frac{\partial A_i}{\partial x_j}(\vec{X}, t) \right) \quad (8.10) \end{aligned}$$

<sup>1</sup>Ich nutze hier das Einheitensystem vom Heaviside-Lorentz, das die Anzahl der Faktoren  $\mu$ ,  $\epsilon$  und  $4\pi$  in den Maxwell-Gleichungen minimiert.

<sup>2</sup>Eine systematische Herleitung der sogenannten *minimalen Kopplung*  $\vec{P} \rightarrow \vec{P} - (q/c)\vec{A}$  aus dem Prinzip der *Eichinvarianz* sprengt den Rahmen dieser Vorlesung und wird in den Vorlesungen zur *Quantenfeldtheorie* [Ohl18, Ohl16] ausführlich diskutiert. Es stellt die Grundlage für die theoretische Beschreibung aller fundamentalen Wechselwirkungen, mit Ausnahme der Gravitation, dar.

verschwindet nicht, wenn das Magnetfeld

$$B_i(\vec{X}, t) = \sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} \frac{\partial A_k}{\partial x_j}(\vec{X}, t), \quad (8.11)$$

für das

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^3 \epsilon_{ijk} B_i(\vec{X}, t) &= \sum_{j',k'=1}^3 \underbrace{\sum_{i=1}^3 \epsilon_{ijk} \epsilon_{ij'k'}}_{= \delta_{jj'} \delta_{kk'} - \delta_{jk'} \delta_{kj'}} \frac{\partial A_{k'}}{\partial x_{j'}}(\vec{X}, t) \\ &= \frac{\partial A_k}{\partial x_j}(\vec{X}, t) - \frac{\partial A_j}{\partial x_k}(\vec{X}, t) \end{aligned} \quad (8.12)$$

gilt, nicht verschwindet

$$\left[ \Pi_i(\vec{P}, \vec{X}, t), \Pi_j(\vec{P}, \vec{X}, t) \right] = i\hbar \frac{q}{c} \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} B_k(\vec{X}, t). \quad (8.13a)$$

Andererseits sind die Vertauschungsrelationen von Ort und kinetischem Impuls die gleichen

$$\left[ X_i, \Pi_j(\vec{P}, \vec{X}, t) \right] = [X_i, P_j] = i\hbar \delta_{ij}, \quad (8.13b)$$

wie die von Ort und kanonischem Impuls. Damit

$$[X_i, H] = \sum_{j=1}^3 \underbrace{[X_i, \Pi_j]}_{=i\hbar\delta_{ij}} \underbrace{\frac{\partial H}{\partial \Pi_j}}_{=\frac{1}{m}\Pi_j} = \frac{i\hbar}{m} \Pi_i \quad (8.14)$$

und

$$\begin{aligned} [\Pi_i, H] &= \frac{1}{2m} \sum_{j=1}^3 [\Pi_i, \Pi_j^2] + q [\Pi_i, \phi] \\ &= \frac{1}{2m} \sum_{j=1}^3 [\Pi_i, \Pi_j] \Pi_j + \frac{1}{2m} \sum_{j=1}^3 \Pi_j [\Pi_i, \Pi_j] + q [P_i, \phi(\vec{X}, t)] \\ &= \frac{i\hbar q}{2mc} \sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} B_k \Pi_j + \frac{i\hbar q}{2mc} \sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} \Pi_j B_k + q \sum_{j=1}^3 [P_i, X_j] \frac{\partial \phi}{\partial x_j}(\vec{X}, t) \end{aligned}$$

$$= \frac{i\hbar q}{2mc} \sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} (B_k \Pi_j + \Pi_j B_k) - i\hbar q \frac{\partial \phi}{\partial x_i}(\vec{X}, t) \quad (8.15)$$

bzw. als Vektoren zusammengefasst

$$[\vec{\Pi}, H] = \frac{i\hbar q}{2mc} (\vec{\Pi} \times \vec{B} - \vec{B} \times \vec{\Pi}) + i\hbar q \vec{E} + i\hbar \frac{q}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}. \quad (8.16)$$

Die explizite Abhängigkeit einer Observable  $O(t)$  von einem externen Zeitparameter, muß sowohl im Heisenbergbild

$$\frac{dO}{dt}(t) = \frac{1}{i\hbar} [O(t), H(t)] + \frac{\partial O}{\partial t}(t), \quad (8.17)$$

als auch im Ehrenfest Theorem (2.200) im Schrödingerbild

$$\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | O(t) | \psi(t) \rangle = \left\langle \psi(t) \left| \frac{1}{i\hbar} [O(t), H(t)] \right| \psi(t) \right\rangle + \left\langle \psi(t) \left| \frac{\partial O}{\partial t}(t) \right| \psi(t) \right\rangle \quad (8.18)$$

durch einen Zusatzterm berücksichtigt werden. Damit ergibt sich

$$\frac{d\vec{X}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\vec{X}, H] = \frac{1}{m} \vec{\Pi} \quad (8.19a)$$

$$\frac{d\vec{\Pi}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\vec{\Pi}, H] + \frac{\partial \vec{\Pi}}{\partial t} = \frac{q}{2mc} (\vec{\Pi} \times \vec{B} - \vec{B} \times \vec{\Pi}) + q\vec{E} \quad (8.19b)$$

bzw.

$$\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \vec{X} | \psi(t) \rangle = \frac{1}{m} \langle \psi(t) | \vec{\Pi} | \psi(t) \rangle \quad (8.20a)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \vec{\Pi} | \psi(t) \rangle = \frac{q}{2mc} \langle \psi(t) | (\vec{\Pi} \times \vec{B} - \vec{B} \times \vec{\Pi}) | \psi(t) \rangle + q \langle \psi(t) | \vec{E} | \psi(t) \rangle, \quad (8.20b)$$

was als eine quantenmechanische Analogie der Lorentz-Kraft (8.1) mit  $\vec{\Pi}/m$  als Geschwindigkeit verstanden werden kann.

## 8.2 Eichinvarianz

Eine Merkwürdigkeit der Potentiale  $(\phi, \vec{A})$  ist, daß sie *nicht* eindeutig sind. Die gemeinsamen *Eichtransformationen* der Potentiale

$$\begin{pmatrix} \phi(\vec{x}, t) \\ \vec{A}(\vec{x}, t) \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} \phi'(\vec{x}, t) \\ \vec{A}'(\vec{x}, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi(\vec{x}, t) \\ \vec{A}(\vec{x}, t) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -\frac{1}{c} \frac{\partial \omega}{\partial t}(\vec{x}, t) \\ \nabla \omega(\vec{x}, t) \end{pmatrix} \quad (8.21)$$

ändern weder das elektrische

$$\begin{aligned}\vec{E}' &= -\vec{\nabla}\phi' - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}'}{\partial t} = -\vec{\nabla}\phi + \frac{1}{c} \vec{\nabla} \frac{\partial \omega}{\partial t} - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} - \frac{1}{c} \underbrace{\frac{\partial \vec{\nabla}\omega}{\partial t}}_{=\vec{\nabla} \frac{\partial \omega}{\partial t}} \\ &= -\vec{\nabla}\phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = \vec{E}\end{aligned}\quad (8.22a)$$

noch das Magnetfeld

$$\vec{B}' = \vec{\nabla} \times \vec{A}' = \vec{\nabla} \times \vec{A} + \underbrace{\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \omega}_{=0} = \vec{\nabla} \times \vec{A} = \vec{B}. \quad (8.22b)$$

Allerdings ändert sich der kinetische Impuls

$$\vec{\Pi}' = \vec{P} - \frac{q}{c} \vec{A}' = \vec{P} - \frac{q}{c} \vec{A} - \frac{q}{c} \vec{\nabla} \omega = \vec{\Pi} - \frac{q}{c} \vec{\nabla} \omega \quad (8.23)$$

Vorlesung 20: Mo, 08. 07. 2019

genau so, daß eine *ortsabhängige* Phasendrehung

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = U(\vec{X}, t) |\psi\rangle = e^{i \frac{q}{\hbar c} \omega(\vec{X}, t)} |\psi\rangle \quad (8.24)$$

mit

$$\begin{aligned}\psi(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \psi \rangle &\rightarrow \psi'(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \psi' \rangle = \langle \vec{x} | e^{i \frac{q}{\hbar c} \omega(\vec{X}, t)} |\psi\rangle \\ &= e^{i \frac{q}{\hbar c} \omega(\vec{x}, t)} \langle \vec{x} | \psi \rangle = e^{i \frac{q}{\hbar c} \omega(\vec{x}, t)} \psi(\vec{x})\end{aligned}\quad (8.25)$$

auch auf Zustände der Form  $\vec{\Pi} |\psi\rangle$  wie eine ortsabhängige Phasendrehung wirkt

$$\begin{aligned}\vec{\Pi}' |\psi'\rangle &= \vec{\Pi}' U(\vec{X}, t) |\psi\rangle = e^{i \frac{q}{\hbar c} \omega(\vec{X}, t)} \underbrace{e^{-i \frac{q}{\hbar c} \omega(\vec{X}, t)} \vec{\Pi}' e^{i \frac{q}{\hbar c} \omega(\vec{X}, t)}}_{=\vec{\Pi}' - i \frac{q}{\hbar c} [\omega(\vec{X}, t), \vec{\Pi}'] + \dots} |\psi\rangle \\ &= e^{i \frac{q}{\hbar c} \omega(\vec{X}, t)} \left( \vec{\Pi}' + \frac{q}{c} \vec{\nabla} \omega(\vec{X}, t) \right) |\psi\rangle = U(\vec{X}, t) \vec{\Pi} |\psi\rangle\end{aligned}\quad (8.26)$$

und somit fast<sup>3</sup> immer unbeobachtbar bleibt. Weil einerseits

$$H' |\psi'\rangle = \frac{1}{2m} \vec{\Pi}'^2 |\psi'\rangle + q\phi'(\vec{X}, t) |\psi'\rangle$$

---

<sup>3</sup>Siehe Abschnitt 8.5!

$$\begin{aligned}
&= U(\vec{X}, t) \frac{1}{2m} \vec{\Pi}^2 |\psi\rangle + qU(\vec{X}, t) \phi'(\vec{X}, t) |\psi'\rangle \\
&= U(\vec{X}, t) H |\psi\rangle - U(\vec{X}, t) \frac{q}{c} \frac{\partial \omega}{\partial t}(\vec{X}, t) |\psi\rangle \quad (8.27)
\end{aligned}$$

und andererseits

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{d}{dt} |\psi'\rangle &= i\hbar \frac{d}{dt} U(\vec{X}, t) |\psi\rangle = U(\vec{X}, t) i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle + \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(\vec{X}, t) \right) |\psi\rangle \\
&= U(\vec{X}, t) i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle - U(\vec{X}, t) \frac{q}{c} \frac{\partial \omega}{\partial t}(\vec{X}, t) |\psi\rangle \quad (8.28)
\end{aligned}$$

gilt, finden wir

$$\left( i\hbar \frac{d}{dt} - H' \right) |\psi'\rangle = U(\vec{X}, t) \left( i\hbar \frac{d}{dt} - H \right) |\psi\rangle \quad (8.29)$$

daß Lösungen der **SG** mit  $H$  in Lösungen der **SG** mit  $H'$  transformiert werden.

### 8.3 Wahrscheinlichkeitsstromdichte

In der Wahrscheinlichkeitsstromdichte (4.47) muß in der Gegenwart von magnetischen Feldern ebenfalls die Ersetzung

$$\vec{\nabla} = \frac{i}{\hbar} \vec{P} \rightarrow \frac{i}{\hbar} \vec{\Pi} = \vec{\nabla} - \frac{iq}{\hbar c} \vec{A}(\vec{x}) \quad (8.30)$$

gemacht werden

$$\vec{j}(\vec{x}, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi^*(\vec{x}, t) \vec{\nabla} \psi(\vec{x}, t) - \psi(\vec{x}, t) \vec{\nabla} \psi^*(\vec{x}, t) \right) - \frac{q}{mc} \vec{A}(\vec{x}) |\psi(\vec{x}, t)|^2 \quad (8.31)$$

damit die Kontinuitätsgleichung (4.49) gilt.

### 8.4 Normaler Zeeman-Effekt

Ein *homogenes* Magnetfeld  $\vec{B}$  kann mit dem Vektorpotential

$$\vec{A}(\vec{x}) = \frac{1}{2} \vec{B} \times \vec{x} \quad (8.32)$$

beschrieben werden. Der Hamiltonoperator nimmt dann die Form

$$H = \frac{1}{2m} \vec{\Pi}^2 = \frac{1}{2m} \left( \vec{P}^2 - \frac{q}{c} \underbrace{(\vec{A}\vec{P} + \vec{P}\vec{A})}_{= \vec{B}\vec{L}} + \frac{q^2}{c^2} \vec{A}\vec{A} \right) \quad (8.33)$$

an, wobei benutzt wurde, daß im *paramagnetischen* Term

$$\vec{A}\vec{P} = \frac{1}{2} (\vec{B} \times \vec{X}) \vec{P} = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} B_j X_k P_i = \frac{1}{2} \vec{B} (\vec{X} \times \vec{P}) = \frac{1}{2} \vec{B}\vec{L} = \vec{P}\vec{A} \quad (8.34)$$

wegen der Kreuzprodukte keine Paare von nicht-vertauschenden Orten und Impulsen auftauchen. Der *diamagnetische* Term

$$\vec{A}\vec{A} = \frac{1}{4} \sum_{i,j,k,l,m=1}^3 \epsilon_{ijk} \epsilon_{ilm} B_j X_k B_l X_m = \frac{1}{4} \left( \vec{B}^2 \vec{X}^2 - (\vec{B}\vec{X})^2 \right) \quad (8.35)$$

kann bei moderaten Magnetfeldern wegen des Vorfaktors  $(q/c)^2$  vernachlässigt werden. Wenn die übrigen Wechselwirkungen nicht von der Richtung abhängen, können wir das Koordinatensystem so legen, daß

$$\vec{B} = \vec{e}_3 B_3 \quad (8.36)$$

und damit

$$H = \frac{1}{2\mu} \vec{\Pi}^2 + V(|\vec{X}|) = \underbrace{\frac{1}{2\mu} \vec{P}^2 + V(|\vec{X}|)}_{= H_0} - \underbrace{\frac{q}{2\mu c} B_3 L_3}_{= H_I} . \quad (8.37)$$

Weil weiter

$$[H_0, L_3] = [H_I, L_3] = 0 \quad (8.38a)$$

$$[H_0, \vec{L}^2] = [H_I, \vec{L}^2] = 0 \quad (8.38b)$$

$$[H_0, H_I] = 0 \quad (8.38c)$$

$$(8.38d)$$

gilt, können wir wieder Eigenfunktionen der Form

$$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = \langle r, \theta, \phi | n, l, m \rangle = R_{n,l,m}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (8.39)$$

finden. Aus

$$H_0 |n, l, m\rangle = E_n^{(0)} |n, l, m\rangle \quad (8.40)$$

folgt

$$H |n, l, m\rangle = H_0 |n, l, m\rangle - \frac{qB_3}{2\mu c} L_3 |n, l, m\rangle$$

$$= E_n^{(0)} |n, l, m\rangle - \frac{qB_3}{2\mu c} m |n, l, m\rangle = \underbrace{\left( E_n^{(0)} - \frac{\hbar q B_3}{2\mu c} m \right)}_{= E_{n,m}} |n, l, m\rangle \quad (8.41)$$

wobei  $E_{n,m}$  anders als  $E_n^{(0)}$  nicht mehr nur von  $n$ , sondern auch von der magnetischen Quantenzahl  $m$  abhängt. Die  $2l+1$ -fache Entartung für jedes  $l$  wird also in äquidistante Multiplets aufgebrochen.

## 8.5 Aharonov-Bohm-Effekt<sup>4</sup>

Betrachte die Funktion

$$\omega_C(\vec{x}, t) = \int_C d\vec{\xi} \vec{A}(\vec{\xi}, t) \quad (8.42)$$

mit dem Integral entlang einer beliebigen glatten Kurve  $C$ , die an einem frei wählbaren Punkt  $\vec{x}_0$  beginnt und im Punkt  $\vec{x}$  endet. Dann gilt

$$\vec{\nabla} \omega_C(\vec{x}, t) = \vec{A}(\vec{x}, t) \quad (8.43)$$

unabhängig von  $C$  und damit

$$\left( \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{q}{c} \vec{A}(\vec{x}, t) \right) \left( e^{i \frac{q}{\hbar c} \omega_C(\vec{x}, t)} f(\vec{x}) \right) = e^{i \frac{q}{\hbar c} \omega_C(\vec{x}, t)} \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} f(\vec{x}). \quad (8.44)$$

Wenn man die Rechnung, die zu (8.29) führt, wiederholt, findet man formal, daß

$$\psi(\vec{x}, t) = e^{i \frac{q}{\hbar c} \int_C d\vec{\xi} \vec{A}(\vec{\xi}, t)} \psi_0(\vec{x}, t) \quad (8.45)$$

die SG mit Vektorpotential  $\vec{A}(\vec{x}, t)$  löst, wenn der Zustand mit Wellenfunktion  $\psi_0(\vec{x}, t)$  die SG ohne Vektorpotential löst.

Die Lösung der SG mit Vektorpotential unterscheidet sich also anscheinend von der Lösung ohne Vektorpotential nur durch eine (eichabhängige) Phase

$$\phi_C(\vec{x}, t) = \frac{q}{\hbar c} \int_C d\vec{\xi} \vec{A}(\vec{\xi}, t). \quad (8.46)$$

Allerdings darf man dabei die Abhängigkeit dieser Phase von der Kurve  $C$  nicht ignorieren. Damit die Wellenfunktion eindeutig ist, muß diese Phase für eine *geschlossene* Kurve  $C$  ein Vielfaches von  $2\pi$  sein

$$\frac{q}{\hbar c} \int_{\partial D} d\vec{\xi} \vec{A}(\vec{\xi}, t) \in 2\pi \mathbf{Z}, \quad (8.47)$$

<sup>4</sup>Im Sommersemester 2019 aus Zeitgründen übersprungen.

wobei die geschlossene Kurve  $C = \partial D$  als Rand einer dazwischen aufgespannten Fläche  $D$  geschrieben wurde.

Mit dem Satz von Stokes folgt dann

$$\begin{aligned} \frac{2\pi\hbar c}{q} \mathbf{Z} \ni \int_{\partial D} d\vec{\xi} \vec{A}(\vec{\xi}, t) &= \int_D d^2\vec{\sigma}(x) (\vec{\nabla} \times \vec{A})(\vec{x}, t) \\ &= \int_D d^2\vec{\sigma}(x) \vec{B}(\vec{x}, t) = \Phi(D) \end{aligned} \quad (8.48)$$

eine Quantisierungsbedingung für den *magnetischen Fluß*  $\Phi(D)$  durch die Fläche  $D$ . Weil die Fläche  $D$  und damit der Fluß in einem einfach zusammenhängenden Gebiet kontinuierlich auf einen Punkt zusammengezogen werden kann, ist nur die Lösung

$$\forall D : \Phi(D) = 0, \quad (8.49)$$

bzw.

$$\forall \vec{x} : \vec{B}(\vec{x}, t) = 0, \quad (8.50)$$

erlaubt. Dieses Resultat bedeutet aber *nicht*, daß es keine Lösungen der **SG** für  $\vec{B} \neq 0$  gibt, sondern nur, daß die Lösung (8.46) nur für  $\vec{\nabla} \times \vec{A} = \vec{B} = 0$  unabhängig von der Wahl der Kurve  $C$  und damit wohldefiniert ist.

Die Situation ist anders, wenn das Gebiet, in dem die Wellenfunktion nicht verschwindet, mehrfach zusammenhängend ist, also zum Beispiel ein (unendlich langer) Zylinder herausgeschnitten ist. Dann gibt es Kurven, die nicht auf einen Punkt zusammengezogen werden können. Die Wellenfunktionen (8.46) sind Lösungen der **SG**, wenn weiter  $\vec{B}(\vec{x}, t) = 0$  für  $\psi(\vec{x}, t) \neq 0$ , aber in einem Gebiet  $D$  mit  $\psi(\vec{x}, t) = 0$  ist ein quantisierter magnetischer Fluß

$$\Phi(D) \in \frac{2\pi\hbar c}{q} \mathbf{Z} \quad (8.51)$$

erlaubt, ohne die Eindeutigkeit der Wellenfunktion zu verletzen. Diese *Flußquantisierung* wird in supraleitenden Systemen beobachtet.

In einem Doppelspalt-Experiment kann man die Strahlen auf den beiden Seiten eines Zylinders, in dem sich ein Magnetfeld befindet, vorbeiführen und wenn das Magnetfeld außerhalb des Zylinders verschwindet, die Lösungen (8.46) verwenden. Dabei seien  $C_L$  und  $C_R$  zwei Kurven mit gemeinsamen Anfangspunkt für den linken, bzw. rechten Strahl. Der durch das Vektorpotential hervorgerufene Phasenunterschied, wenn die Strahlen sich wieder treffen,

$$\delta\phi = \frac{q}{\hbar c} \int_{C_R} d\vec{\xi} \vec{A}(\vec{\xi}, t) - \frac{q}{\hbar c} \int_{C_L} d\vec{\xi} \vec{A}(\vec{\xi}, t) = \frac{q}{\hbar c} \int_{C_R - C_L} d\vec{\xi} \vec{A}(\vec{\xi}, t) = \frac{q}{\hbar c} \Phi(D) \quad (8.52)$$

ist eichinvariant und vom Magnetfeld abhängig. Diese Abhängigkeit ist im Interferenzmuster erkennbar, wenn man die Superposition der Strahlen hinter dem Zylinder auf einem Schirm betrachtet. Obwohl die beiden Strahlen nie<sup>5</sup> in einem Bereich sind, in dem das Magnetfeld spürbar ist, kann eine Wirkung des Magnetfelds im Interferenzmuster beobachtet werden.

Dieser *Aharonov-Bohm-Effekt* wurde experimentell nachgewiesen und ist eines der Phänomene in der eine nicht-triviale *Topologie* des Raumes zu Quanteneffekten führt, die in der klassischen Physik unmöglich sind.

---

<sup>5</sup>Im Experiment ist es schwierig sicherzustellen, daß das Magnetfeld im Zylinder bleibt und die Wellenfunktion nicht in den Zylinder eindringt.

## —9— SPIN

Im Abschnitt 6.4 hatten halbzahlige Spins für den Bahndrehimpuls verworfen, weil die Wellenfunktionen sonst bei Drehung um  $2\pi$  das Vorzeichen wechseln würden. Trotzdem sind in der Natur Systeme mit halbzahligem Spin realisiert und in Kapitel 2 hatten wir die entsprechenden experimentellen Ergebnisse zur Motivation den quantenmechanischen Formalismus mit Zuständen und Observablen in Hilberträumen benutzt.

Wir sind also gezwungen, die Existenz von inneren Spin-Freiheitsgraden zu akzeptieren, die für Spin  $s$  durch Vektoren in einem abstrakten  $2s + 1$ -dimensionalen Hilbertraum beschrieben werden. Dabei findet man, daß es auch ganzzahlige Spins gibt, die man als inneren Freiheitsgrad vom ganzzahligen Bahndrehimpuls unterscheiden muß. Empirisch findet man, daß Elementarteilchen Spin 0 (Higgs), Spin 1/2 (Elektronen und Quarks) und Spin 1 (Photonen und andere Eichbosonen) haben. Zusammengesetzte Systeme (Mesonen, Baryonen, Atome, Moleküle) können beliebigen Spin haben.

### *9.1 Zustände und Wellenfunktionen*

Der Hilbertraum  $\mathcal{H}$  für ein Teilchen mit Spin  $s$  ist also das Tensorprodukt

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^{\text{Bahn}} \otimes \mathcal{H}^{(s)} \quad (9.1)$$

wobei der Spin-Anteil durch einen endlichdimensionalen Hilbertraum und der Bahn-Anteil durch quadratintegrale Wellenfunktionen

$$\mathcal{H}^{(s)} \cong \mathbf{C}^{2s+1} \quad (9.2a)$$

$$\mathcal{H}^{\text{Bahn}} \cong L^2(\mathbf{R}^3, d^3x) \quad (9.2b)$$

beschrieben wird. Die Vektoren  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  entsprechen vektorwertigen Funktionen<sup>1</sup>

$$\psi : \mathbf{R}^3 \rightarrow \mathbf{C}^{2s+1}$$

$$\vec{x} \mapsto \psi(\vec{x}) = \begin{pmatrix} \psi_s(x) \\ \psi_{s-1}(x) \\ \vdots \\ \psi_{-s+1}(x) \\ \psi_{-s}(x) \end{pmatrix} \quad (9.5)$$

mit dem inneren Produkt

$$\langle \psi | \phi \rangle = \int d^3x \sum_{m=-s}^s \psi_m^*(\vec{x}) \phi_m(\vec{x}). \quad (9.6)$$

Natürlich beschreiben nicht beliebige Wellenfunktionen in einem Hilbertraum  $\mathcal{H}_{\text{Bahn}}^{\otimes(2s+1)}$  einen Zustand für Spin  $s$ , sondern nur diejenigen, die sich unter Drehungen wie

$$|\psi\rangle \mapsto |\psi'\rangle = \left( U^{\text{Bahn}}(\vec{\theta}) \otimes U^{(s)}(\vec{\theta}) \right) |\psi\rangle = U(\vec{\theta}) |\psi\rangle \quad (9.7)$$

transformieren, d. h. für die Zustände, die als Produkt geschrieben können

$$|\psi\rangle = |\psi; \text{Bahn}\rangle \otimes |\psi; s\rangle \mapsto |\psi'\rangle = U^{\text{Bahn}}(\vec{\theta}) |\psi; \text{Bahn}\rangle \otimes U^{(s)}(\vec{\theta}) |\psi; s\rangle \quad (9.8)$$

und für allgemeine Zustände als die entsprechenden Linearkombinationen. Dabei ist wie schon in (6.13)

$$U^{\text{Bahn}}(\vec{\theta}) = e^{-i\vec{\theta}\vec{L}/\hbar} \quad (9.9)$$

und

$$U^{(s)}(\vec{\theta}) = e^{-i\vec{\theta}\vec{S}/\hbar} \quad (9.10)$$

<sup>1</sup>Mathematisch ist es äquivalent, von „Vektoren von Funktionen“

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} |\psi_s\rangle \\ |\psi_{s-1}\rangle \\ \vdots \\ |\psi_{-s+1}\rangle \\ |\psi_{-s}\rangle \end{pmatrix} \in (\mathcal{H}^{\text{Bahn}})^{\otimes(2s+1)} \quad (9.3)$$

mit

$$\langle \psi | \phi \rangle = \sum_{m=-s}^s \langle \psi_m | \phi_m \rangle \quad (9.4)$$

zu sprechen, aber „vektorwertige Funktionen“ ergibt die bessere physikalische Intuition.

die zugehörige unitäre  $(2s + 1) \times (2s + 1)$ -Matrix mit den Matrixelementen von  $\vec{S}$  aus (6.50) für  $\vec{L}$  mit  $l = s$  und insbesondere für Spin 1/2 die  $2 \times 2$ -Matrizen  $\vec{S} = \hbar\vec{\sigma}/2$ , also

$$U^{(1/2)}(\vec{\theta}) = e^{-i\vec{\theta}\vec{\sigma}/2} \quad (9.11)$$

mit den Pauli-Matrizen  $\vec{\sigma}$ .

Wir können nicht-normierbare Basiszustände

$$|\vec{x}, s, m\rangle = |\vec{x}\rangle \otimes |s, m\rangle \quad (9.12)$$

mit

$$\langle \vec{x}, s, m | \vec{x}', s', m' \rangle = \delta^3(\vec{x} - \vec{x}') \delta_{ss'} \delta_{mm'} \quad (9.13a)$$

$$\vec{X} |\vec{x}, s, m\rangle = \vec{x} |\vec{x}, s, m\rangle \quad (9.13b)$$

$$\vec{S}^2 |\vec{x}, s, m\rangle = \hbar^2 s(s + 1) |\vec{x}, s, m\rangle \quad (9.13c)$$

$$S_3 |\vec{x}, s, m\rangle = \hbar m |\vec{x}, s, m\rangle \quad (9.13d)$$

definieren. Diese transformieren sich wie

$$\begin{aligned} |\vec{x}, s, m\rangle &\mapsto U |\vec{x}, s, m\rangle = U^{\text{Bahn}} |\vec{x}\rangle \otimes U^{(s)} |s, m\rangle \\ &= |R\vec{x}\rangle \otimes \sum_{m'=-s}^s U_{mm'}^{(s)} |s, m'\rangle = \sum_{m'=-s}^s U_{mm'}^{(s)} |R\vec{x}, s, m'\rangle \end{aligned} \quad (9.14)$$

wobei  $R$  die in (6.3) definierte orthogonale  $3 \times 3$ -Drehmatrix ist. Der Parameter  $\vec{\theta}$  wurde zu besserer Lesbarkeit unterdrückt.

Vorlesung 21: Fr, 12. 07. 2019

Damit können wir Wellenfunktionen

$$\psi_m(\vec{x}) = \langle \vec{x}, s, m | \psi \rangle \quad (9.15)$$

definieren und den Zustand als

$$|\psi\rangle = \sum_{m=-s}^m \int d^3x \psi_m(\vec{x}) |\vec{x}, s, m\rangle \quad (9.16)$$

schreiben. Das Transformationsverhalten der Wellenfunktionen unter Drehungen ergibt sich damit als

$$\psi_m(\vec{x}) = \langle \vec{x}, s, m | \psi \rangle \mapsto \langle \vec{x}, s, m | U | \psi \rangle = \langle \psi | U^\dagger | \vec{x}, s, m \rangle^* =$$

$$\begin{aligned}
\left( \sum_{m'=-s}^s [U^{(s)\dagger}]_{mm'} \langle \psi | R^{-1} \vec{x}, s, m' \rangle \right)^* &= \sum_{m'=-s}^s [U^{(s)T}]_{mm'} \langle \psi | R^{-1} \vec{x}, s, m' \rangle^* \\
&= \sum_{m'=-s}^s U_{m'm}^{(s)} \langle R^{-1} \vec{x}, s, m' | \psi \rangle = \sum_{m'=-s}^s \psi_{m'}(R^{-1} \vec{x}) U_{m'm}^{(s)} \quad (9.17)
\end{aligned}$$

bzw.

$$\psi_m(\vec{x}) \mapsto (U\psi)_m(\vec{x}) = \sum_{m'=-s}^s \psi_{m'}(R^{-1} \vec{x}) U_{m'm}^{(s)}. \quad (9.18)$$

Zur Kontrolle der Rechnung kann man sich leicht von der Gruppeneigenschaft

$$\begin{aligned}
(U_1 U_2 \psi)_m(\vec{x}) &= \sum_{m'=-s}^s (U_2 \psi)_{m'}(R_1^{-1} \vec{x}) U_{1,m'm}^{(s)} \\
&= \sum_{m',m''=-s}^s \psi_{m''}(R_2^{-1} R_1^{-1} \vec{x}) U_{1,m''m'}^{(s)} U_{2,m'm}^{(s)} \\
&= \sum_{m''=-s}^s \psi_{m''}((R_1 R_2)^{-1} \vec{x}) (U_1^{(s)} U_2^{(s)})_{m''m} \quad (9.19)
\end{aligned}$$

überzeugen.

Die Drehungen des Gesamtsystems werden vom Gesamtdrehimpuls  $\vec{J}$  erzeugt. Dieser muß sowohl den Bahn- als auch den Spin-Anteil drehen

$$e^{-i\vec{\theta}\vec{J}/\hbar} = U(\vec{\theta}) = U^{\text{Bahn}}(\vec{\theta}) \otimes U^{(s)}(\vec{\theta}) = e^{-i\vec{\theta}\vec{L}/\hbar} \otimes e^{-i\vec{\theta}\vec{S}/\hbar}. \quad (9.20)$$

Wenn wir beide Seiten in  $\vec{\theta}$  entwickeln

$$\begin{aligned}
\mathbf{1} - \frac{i}{\hbar} \vec{\theta} \vec{J} + \mathcal{O}(\theta^2) &= \left( \mathbf{1} - \frac{i}{\hbar} \vec{\theta} \vec{L} + \mathcal{O}(\theta^2) \right) \otimes \left( \mathbf{1} - \frac{i}{\hbar} \vec{\theta} \vec{S} + \mathcal{O}(\theta^2) \right) \\
&= \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} - \frac{i}{\hbar} \vec{\theta} \vec{L} \otimes \mathbf{1} - \mathbf{1} \otimes \frac{i}{\hbar} \vec{\theta} \vec{S} + \mathcal{O}(\theta^2) \quad (9.21)
\end{aligned}$$

finden wir durch Koeffizientenvergleich

$$\vec{J} = \vec{L} \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \vec{S}. \quad (9.22)$$

Diese Formel wird in der Literatur oft als

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad (9.23)$$

abgekürzt, wobei impliziert wird, daß  $\vec{L}$  nur auf die Ortsabhängigkeit wirkt und  $\vec{S}$  nur auf die Spin-Komponenten. Insbesondere vertauschen alle Komponenten von Bahndrehimpuls und Spin

$$[L_i, S_j] = 0 \quad (9.24)$$

weil sie in verschiedenen Räumen wirken

$$(L_i \otimes \mathbf{1})(\mathbf{1} \otimes S_j) = (L_i \otimes S_j) = (\mathbf{1} \otimes S_j)(L_i \otimes \mathbf{1}) . \quad (9.25)$$

Man überzeugt sich damit leicht davon, daß die Komponenten des Gesamtdrehimpulses wieder die gleichen Vertauschungsrelationen

$$[J_i, J_j] = i \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} J_k \quad (9.26)$$

haben.

### 9.1.1 Spinpräzession

Man findet empirisch, daß der Spin ebenso wie der Bahndrehimpuls an ein äußeres Magnetfeld koppelt. A priori gibt es keinen Grund, daß die Kopplungsstärke gleich groß ist oder auch nur das gleiche Vorzeichen hat. Daher müssen wir einen beliebigen reellen  $g$ -Faktor zulassen

$$H_I = -\frac{q}{2\mu c} \vec{B} \vec{L} \rightarrow -\frac{q}{2\mu c} \vec{B} (\vec{L} + g\vec{S}) . \quad (9.27)$$

In der Tat findet man für Elektronen  $g = 2$ , was erst durch die relativistische Beschreibung mit der Dirac-Gleichung erklärt wird.

Der Hamiltonoperator für einen lokalisierten Spin im homogenen Magnetfeld ist also

$$H = E_0 \mathbf{1} - \frac{gq\hbar}{4\mu c} \vec{B} \vec{\sigma} \quad (9.28)$$

und führt, wie schon in Abschnitt 2.7.1 sowie in den Übungen diskutiert, zu einer Präzession des Spins um die Richtung des Magnetfelds.

## 9.2 Addition von Drehimpulsen

In rotationsinvarianten System vertauscht der Hamiltonoperator mit dem Gesamtdrehimpuls und nicht notwendig mit dem Bahndrehimpuls oder dem Spin:

$$[H, \vec{J}] = 0 \quad (9.29)$$

aber

$$[H, \vec{L}] \neq 0 \neq [H, \vec{S}] . \quad (9.30)$$

Deshalb werden wir gemeinsame Eigenzustände von Hamiltonoperator und Gesamtdrehimpuls finden, aber die Eigenzustände von Bahndrehimpuls und

Spin sind im Allgemeinen keine Eigenzustände des Hamiltonoperators, also auch keine Lösungen der stationären SG.

In praktischen Anwendungen muß man nicht nur einen Spin und einen Bahndrehimpuls addieren, sondern, z. B. bei Atomen mit mehr als einem Elektron, auch zwei oder mehr Spins. Wir betrachten also sofort den allgemeinen Fall der Addition von Drehimpulsen  $l_1$  und  $l_2$ , die beide halb oder ganzzahlige Werte haben können. Die  $2l_i+1$ -dimensionalen Hilberträume  $\mathcal{H}^{(l_i)}$ , die die Teilsysteme beschreiben, werden also von Vektoren  $\{|l_i, m_i\rangle\}_{m_i=-l_i, -l_i+1, \dots, l_i}$  aufgespannt, die Eigenvektoren der Drehimpulse der Teilsysteme

$$\left(\vec{L}^{(i)}\right)^2 |l_i, m_i\rangle = \hbar^2 l_i(l_i + 1) |l_i, m_i\rangle \quad (9.31a)$$

$$L_3^{(i)} |l_i, m_i\rangle = \hbar m_i |l_i, m_i\rangle \quad (9.31b)$$

sind. Wir suchen im Hilbertraum des zusammengesetzten Systems

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(l_1)} \otimes \mathcal{H}^{(l_2)} \quad (9.32)$$

nach „Eigenzuständen des Gesamtdrehimpulses“

$$\vec{L} = \vec{L}^{(1)} \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \vec{L}^{(2)} \quad (9.33)$$

d. h. nach gemeinsamen Eigenzuständen  $|l, m\rangle$  von  $\vec{L}^2$  und  $L_3$

$$\vec{L}^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l + 1) |l, m\rangle \quad (9.34a)$$

$$L_3 |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle . \quad (9.34b)$$

Eine Basis des Hilbertraums des Gesamtsystems bilden die  $(2l_1 + 1)(2l_2 + 1)$  Vektoren

$$\{|l_1, m_1; l_2, m_2\rangle = |l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle\}_{m_i=-l_i, -l_i+1, \dots, l_i} \quad (9.35)$$

und wir können

$$|l, m\rangle = \sum_{m_1=-l_1}^{l_1} \sum_{m_2=-l_2}^{l_2} |l_1, m_1; l_2, m_2\rangle \langle l_1, m_1; l_2, m_2 | l, m\rangle \quad (9.36)$$

schreiben. Die *Clebsch-Gordan-Koeffizienten*  $\langle l_1, m_1; l_2, m_2 | l, m\rangle$  sind tabelliert. Die Lektüre der einschlägigen Tabellen verlangt aber das Verständnis der Phasenkonvention der Autoren und zumindest in einfachen Systemen ist es leichter, die Koeffizienten auszurechnen, als sie aus der Tabelle abzulesen

...

### 9.2.1 Clebsch-Gordan-Reihe

Die 3-Komponente des Gesamtdrehimpulses ist

$$L_3 = L_3^{(1)} \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes L_3^{(2)} \quad (9.37)$$

und ihre Wirkung ist in der Basis (9.35) trivial

$$L_3 |l_1, m_1; l_2; m_2\rangle = \hbar(m_1 + m_2) |l_1, m_1; l_2; m_2\rangle . \quad (9.38)$$

Daraus schließen wir, daß jeder Zustand  $|l, m\rangle$  eine Superposition von Zuständen  $|l_1, m_1; l_2; m_2\rangle$  mit  $m_1 + m_2 = m$  ist. Die Schiebeoperatoren für den Gesamtdrehimpuls sind

$$L_{\pm} = L_{\pm}^{(1)} \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes L_{\pm}^{(2)} \quad (9.39)$$

und ihre Wirkung ist in der Basis (9.35) beinahe ebenso leicht auszurechnen. Der Zustand  $|l_1, l_1; l_2; l_2\rangle$  wird von *beiden*  $L_+^{(i)}$  vernichtet und deshalb auch von  $L_+$

$$L_+ |l_1, l_1; l_2; l_2\rangle = 0 . \quad (9.40)$$

Also muß  $|l_1, l_1; l_2; l_2\rangle$  eine Superposition von Zuständen sein, bei denen die 3-Komponente des Gesamtdrehimpuls maximal ist

$$|l_1, l_1; l_2; l_2\rangle = \sum_l c_{l, l_1, l_2} |l, l\rangle . \quad (9.41)$$

Weil aber gleichzeitig

$$L_3 |l_1, l_1; l_2; l_2\rangle = \hbar(l_1 + l_2) |l_1, l_1; l_2; l_2\rangle \quad (9.42)$$

gilt, muß bis auf eine frei wählbare Phase

$$|l_1, l_1; l_2; l_2\rangle = |l_1 + l_2, l_1 + l_2\rangle \quad (9.43)$$

gelten. Durch wiederholte Anwendung von  $L_-$  finden wir die ersten  $2(l_1 + l_2) + 1$  Eigenzustände

$$\left\{ \begin{aligned} &|l_1 + l_2, l_1 + l_2\rangle = |l_1, l_1; l_2; l_2\rangle, \\ &|l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 1\rangle \propto L_- |l_1 + l_2, l_1 + l_2\rangle, \\ &\dots, \\ &|l_1 + l_2, -l_1 - l_2\rangle \propto L_- |l_1 + l_2, -l_1 - l_2 + 1\rangle \propto |l_1, -l_1; l_2; -l_2\rangle \end{aligned} \right\} . \quad (9.44)$$

Die Anwendung der Formel (6.43) für die Wirkung von  $L_{\pm}^{(1)}$ ,  $L_{\pm}^{(2)}$  und  $L_{\pm}$

$$\begin{aligned} & \hbar\sqrt{(l_1 + l_2)(l_1 + l_2 + 1) - (l_1 + l_2)(l_1 + l_2 - 1)} |l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 1\rangle \\ &= L_- |l_1 + l_2, l_1 + l_2\rangle = L_- |l_1, l_1; l_2, l_2\rangle \\ &= \hbar\sqrt{l_1(l_1 + 1) - l_1(l_1 - 1)} |l_1, l_1 - 1; l_2, l_2\rangle \\ & \quad + \hbar\sqrt{l_2(l_2 + 1) - l_2(l_2 - 1)} |l_1, l_1; l_2, l_2 - 1\rangle \quad (9.45) \end{aligned}$$

führt auf

$$|l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 1\rangle = \sqrt{\frac{l_1}{l_1 + l_2}} |l_1, l_1 - 1; l_2, l_2\rangle + \sqrt{\frac{l_2}{l_1 + l_2}} |l_1, l_1; l_2, l_2 - 1\rangle . \quad (9.46)$$

Die erneute Anwendung von  $L_-$  führt im allgemeinen Fall zu immer komplizierteren Ergebnissen. In der Praxis, wenn mindestens eines der  $l_i$  klein ist, bleiben die Rechnungen aber überschaubar<sup>2</sup>.

Offensichtlich gibt es einen weiteren Zustand  $|\psi\rangle$  mit  $m = l_1 + l_2 - 1$ , der auf  $|l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 1\rangle$  orthogonal steht. Weil es keinen Zustand mit  $m > l_1 + l_2$  gibt, kann es auch keinen Zustand mit  $l > l_1 + l_2$  geben. Deshalb muß, bis auf eine frei wählbare Phase,

$$|\psi\rangle = |l_1 + l_2 - 1, l_1 + l_2 - 1\rangle \quad (9.47)$$

sein. Durch  $2(l_1 + l_2 - 1)$ -fache Anwendung von  $L_-$  finden wir die  $2(l_1 + l_2) - 1$  Zustände mit  $l = l_1 + l_2 - 1$ . Falls  $l_2 = 1/2$ , haben wir so schon alle

$$2(l_1 + 1/2) + 1 + 2(l_1 - 1/2) + 1 = (2l_1 + 1)2 = (2l_1 + 1)(2l_2 + 1) \quad (9.48)$$

Zustände gefunden. Falls nicht, gibt es einen dritten Zustand mit  $m = l_1 + l_2 - 2$  der auf  $|l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 2\rangle$  und  $|l_1 + l_2 - 1, l_1 + l_2 - 2\rangle$  orthogonal steht und bis auf eine Phase,  $|l_1 + l_2 - 2, l_1 + l_2 - 2\rangle$  sein muß.

Aufgrund von

$$\sum_{l=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2} (2l + 1) = (2l_1 + 1)(2l_2 + 1), \quad (9.49)$$

wie man leicht durch doppelte Induktion nachweisen kann, endet dieser Prozess bei  $l = |l_1 - l_2|$  und wir finden die *Clebsch-Gordan-Reihe*

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(l_1)} \otimes \mathcal{H}^{(l_2)} = \bigoplus_{l=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2} \mathcal{H}^{(l)} \quad (9.50)$$

für die Zerlegung des Hilbertraums des Gesamtsystems in Unterräume mit festem Gesamtspin.

---

<sup>2</sup>... und klausurrelevant ...

### 9.2.2 Beispiel: $\mathbf{2} \otimes \mathbf{2} = \mathbf{3} + \mathbf{1}$

Der einfachste Fall ist die Kopplung zweier Spins mit  $l_1 = l_2 = 1/2$ , wie sie, z. B., für die Hyperfeinstrukturwechselwirkung von Elektron und Proton im Wasserstoffatom benötigt wird. Die Clebsch-Gordan-Reihe (9.50) ergibt

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1/2)} \otimes \mathcal{H}^{(1/2)} = \mathcal{H}^{(1)} \oplus \mathcal{H}^{(0)}, \quad (9.51)$$

also ein Triplett mit Spin 1 und ein Singulett mit Spin 0. Wir beginnen die Konstruktion der Drehimpuls-Eigenbasis im  $\mathcal{H}^{(1)}$  mit dem Zustand mit dem maximalen Eigenwert von  $L_3$

$$|1, 1\rangle = |1/2, 1/2\rangle \otimes |1/2, 1/2\rangle = |1/2, 1/2; 1/2, 1/2\rangle. \quad (9.52a)$$

Durch einmalige Anwendung von  $L_-$  auf beiden Seiten erhalten wir die *symmetrische* Kombination

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |1/2, -1/2; 1/2, 1/2\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |1/2, 1/2; 1/2, -1/2\rangle \quad (9.52b)$$

und durch erneute Anwendung von  $L_-$  auf beiden Seiten den dritten Zustand

$$|1, -1\rangle = |1/2, -1/2; 1/2, -1/2\rangle. \quad (9.52c)$$

Wenn, wie in diesem Fall,  $l_1 = l_2 = l$ , dann wirkt  $L_-$  im Produkt  $\mathcal{H}^{(l)} \otimes \mathcal{H}^{(l)}$  immer symmetrisch und weil der Ausgangszustand  $|l, l\rangle \otimes |l, l\rangle$  ebenfalls symmetrisch ist, müssen *alle* Zustände mit maximalem Gesamtdrehimpuls  $2l$  symmetrisch sein.

Der verbleibende Zustand  $|0, 0\rangle$  ist der Zustand mit  $m = 0$ , der auf  $|1, 0\rangle$  orthogonal steht

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |1/2, -1/2; 1/2, 1/2\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |1/2, 1/2; 1/2, -1/2\rangle. \quad (9.53)$$

Er ist antisymmetrisch unter Austausch der Komponenten.

## 9.3 Spin-Bahn-Kopplung

In der Beschreibung des Elektrons im Wasserstoffatom muß der Spin-Freiheitsgrad berücksichtigt werden. Die korrekte relativistische Beschreibung mit der Diracgleichung enthüllt einen *Spin-Bahn-Kopplungsterm*

$$H_{\text{SB}} = \frac{e}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{d\phi}{dr}(r) \vec{L} \vec{S} \quad (9.54)$$

der als Kopplung des Elektronenspins  $\vec{S}$  an das von der Bahn des Elektrons induzierte Magnetfeld  $\vec{B} \propto \vec{L}$  interpretiert werden kann. Die Komponenten von Spin  $\vec{S}$  und Bahndrehimpuls  $\vec{L}$  vertauschen *nicht* mit  $H_{\text{SB}}$  und  $|n, l, m\rangle \otimes |s, m_s\rangle$  sind keine Eigenzustände des Gesamthamiltonoperators. Wenn wir aber

$$\vec{L}\vec{S} = \frac{1}{2} \left( (\vec{L} + \vec{S})^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2 \right) = \frac{1}{2} \left( \vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2 \right) \quad (9.55)$$

mit dem Gesamtdrehimpuls  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$  schreiben, sehen wird, daß  $\vec{J}^2$ ,  $J_3$ ,  $\vec{L}^2$  und  $\vec{S}^2$  miteinander vertauschende Observable sind, die miteinander und mit dem Hamiltonoperator vertauschen, also *erhaltene Quantenzahlen*, bzw. „*gute Quantenzahlen*“, sind:

$$\vec{L}\vec{S} |j, m\rangle = \frac{\hbar^2}{2} (j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)) |j, m\rangle . \quad (9.56)$$

Mit den Näherungsmethoden aus dem nächsten Kapitel können wir den Einfluß der Spin-Bahn-Kopplung auf das Wasserstoffspektrum berechnen.

## —10—

## NÄHERUNGSMETHODEN

Vorlesung 22: Mo, 15.07.2019

Leider kann nur eine verschwindende Minderheit der physikalisch interessanten Hamiltonoperatoren diagonalisiert werden, d. h. man kann durch analytische Rechnung keinen vollständigen Satz von Eigenvektoren konstruieren, obwohl mathematische Theoreme dessen Existenz garantieren.

Einen Ausweg bietet die Suche nach näherungsweise Lösungen der **SG** oder der stationären **SG**. Hierbei identifiziert man einen kleinen Parameter und entwickelt die Lösungen nach diesem Parameter.

### 10.1 Zeitunabhängige Störungstheorie

Eine wichtige Methode zerlegt den Gesamthamiltonoperator

$$H = H_0 + \lambda H_I \quad (10.1)$$

in einen „freien“ Hamiltonoperator  $H_0$  und eine „kleine“ Störung  $\lambda H_I$ , deren Stärke im Prinzip<sup>1</sup> durch den reellen Parameter  $\lambda$  gesteuert werden kann. Die Zerlegung wird so durchgeführt, daß die Eigenwerte und Eigenvektoren von  $H_0$  vollständig bekannt sind

$$H_0 |n; 0\rangle = E_n^{(0)} |n; 0\rangle \quad (10.2a)$$

$$\langle n; 0 | m; 0 \rangle = \delta_{nm} \quad (10.2b)$$

$$\sum_n |n; 0\rangle \langle n; 0| = \mathbf{1} . \quad (10.2c)$$

Daß es nicht immer leicht oder auch nur möglich ist, ein analytisch diagonalisierbares  $H_0$  zu finden bei dem  $\lambda H_I$  „klein ist“, liegt auf der Hand ...

---

<sup>1</sup>Es ist nicht erforderlich, daß der Parameter  $\lambda$  im Experiment manipuliert werden kann!

Es gilt nun die volle **SG**

$$H |n\rangle = (H_0 + \lambda H_I) |n\rangle = E_n |n\rangle \quad (10.3)$$

zu lösen, indem man die „gestörten“ Eigenwerte und Eigenvektoren in Potenzen von  $\lambda$  entwickelt

$$E_n = \sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i E_n^{(i)} = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \mathcal{O}(\lambda^3) \quad (10.4a)$$

$$|n\rangle = \sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i |n; i\rangle = |n; 0\rangle + \lambda |n; 1\rangle + \lambda^2 |n; 2\rangle + \mathcal{O}(\lambda^3). \quad (10.4b)$$

Es erweist sich als sinnvoll, den gestörten Zustand  $|n\rangle$  *nicht* mit  $\langle n|n\rangle = 1$  zu normieren, sondern stattdessen

$$\langle n; 0|n; i\rangle = \delta_{0i} \quad (10.4c)$$

zu fordern, was zu

$$\langle n; 0|n\rangle = 1 \quad (10.5)$$

äquivalent ist. Falls der normierte Zustand  $|n\rangle$  benötigt wird, kann man die Normierung nachträglich durchführen. Ein Koeffizientenvergleich der Potenzen von  $\lambda$  in (10.3) führt auf

$$\lambda^0 : \quad H_0 |n; 0\rangle = E_n^{(0)} |n; 0\rangle \quad (10.6a)$$

$$\lambda^1 : \quad H_0 |n; 1\rangle + H_I |n; 0\rangle = E_n^{(0)} |n; 1\rangle + E_n^{(1)} |n; 0\rangle \quad (10.6b)$$

$$\lambda^2 : \quad H_0 |n; 2\rangle + H_I |n; 1\rangle = E_n^{(0)} |n; 2\rangle + E_n^{(1)} |n; 1\rangle + E_n^{(2)} |n; 0\rangle \quad (10.6c)$$

...

$$\lambda^k : \quad H_0 |n; k\rangle + H_I |n; k-1\rangle = \sum_{l=0}^k E_n^{(l)} |n; k-l\rangle \quad (10.6d)$$

...

Unter den Gleichungen (10.6) liefert (10.6a) keine neue Information. Das Skalarprodukt der Gleichung (10.6b) mit  $\langle m; 0|$  liefert

$$\underbrace{\langle m; 0|H_0|n; 1\rangle}_{=E_m^{(0)}\langle m; 0|n; 1\rangle} + \langle m; 0|H_I|n; 0\rangle = E_n^{(0)} \langle m; 0|n; 1\rangle + E_n^{(1)} \langle m; 0|n; 0\rangle, \quad (10.7)$$

also

$$(E_m^{(0)} - E_n^{(0)}) \langle m; 0|n; 1\rangle + \langle m; 0|H_I|n; 0\rangle = E_n^{(1)} \langle m; 0|n; 0\rangle. \quad (10.8)$$

### 10.1.1 Nicht-entartete Störungstheorie

Zunächst beschränken wir uns auf den Fall, daß alle  $E_n^{(0)}$  unterschiedlich sind

$$\forall n \neq m : E_n^{(0)} \neq E_m^{(0)}. \quad (10.9)$$

Das ist zwar nicht der allgemeine Fall, aber eine Entartung erfordert besondere Maßnahmen, die für das erste Verständnis hinderlich sind.

Aus Spezialfall  $m = n$  von (10.8) man man direkt die Änderung der Energie in erster Ordnung ablesen

$$E_n^{(1)} = \langle n; 0 | H_I | n; 0 \rangle. \quad (10.10)$$

Die Fälle  $m \neq n$

$$(E_m^{(0)} - E_n^{(0)}) \langle m; 0 | n; 1 \rangle + \langle m; 0 | H_I | n; 0 \rangle = 0 \quad (10.11)$$

führen hingegen auf

$$\langle m; 0 | n; 1 \rangle = - \frac{\langle m; 0 | H_I | n; 0 \rangle}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \quad (\text{für } m \neq n) \quad (10.12)$$

und nach Einschreiben einer Zerlegung der Eins die Änderung des Eigenvektors

$$\begin{aligned} |n; 1\rangle &= \sum_m |m; 0\rangle \langle m; 0 | n; 1 \rangle = |n; 0\rangle \underbrace{\langle n; 0 | n; 1 \rangle}_{=0} + \sum_{m \neq n} |m; 0\rangle \langle m; 0 | n; 1 \rangle \\ &= - \sum_{m \neq n} |m; 0\rangle \frac{\langle m; 0 | H_I | n; 0 \rangle}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}}, \quad (10.13) \end{aligned}$$

sofern die Summe konvergiert, die Matrixelemente  $\langle m; 0 | H_I | n; 0 \rangle$  also für  $m \rightarrow \infty$  hinreichend schnell abfallen.

Wenn wir uns in zweiter Ordnung auf die Änderung des Eigenwerts beschränken, genügt es das Skalarprodukt der Gleichung (10.6c) mit  $\langle n; 0 |$  zu berechnen

$$\begin{aligned} &\overbrace{\langle n; 0 | H_0 | n; 2 \rangle}^{=E_n^{(0)} \langle n; 0 | n; 2 \rangle = 0} + \langle n; 0 | H_I | n; 1 \rangle \\ &= E_n^{(0)} \underbrace{\langle n; 0 | n; 2 \rangle}_{=0} + E_n^{(1)} \underbrace{\langle n; 0 | n; 1 \rangle}_{=0} + E_n^{(2)} \underbrace{\langle n; 0 | n; 0 \rangle}_{=1}, \quad (10.14) \end{aligned}$$

also

$$\begin{aligned}
E_n^{(2)} = \langle n; 0 | H_I | n; 1 \rangle &= - \sum_{m \neq n} \langle n; 0 | H_I | m; 0 \rangle \frac{\langle m; 0 | H_I | n; 0 \rangle}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \\
&= - \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m; 0 | H_I | n; 0 \rangle|^2}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}}. \quad (10.15)
\end{aligned}$$

sofern die Summe konvergiert. Wenn  $|0; 0\rangle$  der ungestörte Zustand mit der niedrigsten Energie ist, also

$$\forall n \neq 0 : E_n^{(0)} > E_0^{(0)}, \quad (10.16)$$

haben alle Terme in (10.15) das gleiche Vorzeichen und wir finden

$$E_0^{(2)} < 0. \quad (10.17)$$

Die Energie des Grundzustandes wird also in zweiter Ordnung *immer* abgesenkt. Zusammengefasst haben wir gefunden

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda \langle n; 0 | H_I | n; 0 \rangle - \lambda^2 \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m; 0 | H_I | n; 0 \rangle|^2}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} + \mathcal{O}(\lambda^3) \quad (10.18a)$$

$$|n\rangle = |n; 0\rangle - \lambda \sum_{m \neq n} |m; 0\rangle \frac{\langle m; 0 | H_I | n; 0 \rangle}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} + \mathcal{O}(\lambda^2) \quad (10.18b)$$

und die Berechnung höherer Ordnungen erweist sich anschließend als Fleißaufgabe.

Bei der Begründung der Störungstheorie wurde angenommen, daß die Störung  $\lambda H_I$  in einem geeigneten Sinn „klein“ ist. In den Gleichung (10.18) fällt aber auf, daß beinahe entartete Zustände mit  $|E_m^{(0)} - E_n^{(0)}| \rightarrow 0$  zu *beliebig* großen Störungen führen, die die Güte der Approximation in Frage stellen können. Neben der Stärke der Kopplung zwischen zwei ungestörten Zuständen  $\lambda \langle m; 0 | H_I | n; 0 \rangle$ , spielt die Separation ihrer ungestörten Energien eine ebenso wichtige Rolle.

**Zusatzmaterial (nicht Teil der Vorlesung):**

Man darf übrigens nicht erwarten, daß die Störungsreihe einen endlichen Konvergenzradius in  $\lambda$  hat. Im allgemeinen ist die Störungsreihe eine asymptotische Reihe in  $\lambda$ , die nicht konvergiert, deren erste Terme aber oft eine gute numerische Approximation liefern können. Ein extremes Negativ Beispiel sind Funktionen der Form

$$f(z) = e^{-\frac{1}{z}}, \quad (10.19)$$

deren Taylorentwicklung um  $z = 0$  verschwindet, die aber selbst nicht verschwindet.

### 10.1.2 Entartete Störungstheorie

Bei der Weiterverarbeitung von (10.8) hatten wir vorausgesetzt, daß alle ungestörten Energien  $E_n^{(0)}$  verschieden sind. In der Tat tauchen in (10.18) Terme der Form

$$\frac{\langle m; 0 | H_I | n; 0 \rangle}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \quad (10.20)$$

auf, die für  $E_m^{(0)} = E_n^{(0)}$  nicht definiert sind. Die Lösung dieses Problems besteht darin, von einer Basis  $\{|n; 0\rangle\}_{n=0,1,\dots}$  der entarteten ungestörten Zustände mit

$$\langle m; 0 | H_I | n; 0 \rangle \neq 0 \quad (10.21)$$

zu einer Basis  $\{|n; 0'\rangle\}_{n=0,1,\dots}$  zu wechseln, in der

$$\langle m; 0' | H_I | n; 0' \rangle \propto \delta_{mn} \quad (10.22)$$

gilt. D. h., man diagonalisiert den Hamiltonoperator in jedem entarteten Unterraum. Wenn die entarteten Unterräume klein genug sind oder der Hamiltonoperator in dem Unterraum besonders symmetrisch ist, kann<sup>2</sup> dies analytisch ohne weitere Näherungen gelingen. Anschließend kann man statt (10.18) die Formeln<sup>3</sup>

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda \langle n; 0 | H_I | n; 0 \rangle - \lambda^2 \sum_{m: E_m^{(0)} \neq E_n^{(0)}} \frac{|\langle m; 0 | H_I | n; 0 \rangle|^2}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} + \mathcal{O}(\lambda^3) \quad (10.23a)$$

$$|n\rangle = |n; 0\rangle - \lambda \sum_{m: E_m^{(0)} \neq E_n^{(0)}} |m; 0\rangle \frac{\langle m; 0 | H_I | n; 0 \rangle}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} + \mathcal{O}(\lambda^2) \quad (10.23b)$$

benutzen, in denen nur über mit dem ungestörten Zustand nicht entartete Zustände summiert wird, weil die Matrixelemente der Störung für entartete Zustände verschwinden.

## 10.2 Zeitabhängige Störungstheorie

Wir zerlegen wieder den Gesamthamiltonoperator

$$H(t) = H_0 + \lambda H_I(t) \quad (10.24)$$

<sup>2</sup>... aber muß nicht!

<sup>3</sup>Herzlichen Dank an Stefan Beyl für den Vorschlag, die Formeln (10.23) auszuschreiben und nicht nur auf (10.18) zu verweisen.

in einen freien Hamiltonoperator  $H_0$  und eine kleine Störung  $\lambda H_I(t)$ , die diesmal zeitabhängig sein darf. Die Zerlegung wird wieder so durchgeführt, daß die Eigenwerte und Eigenvektoren von  $H_0$  vollständig bekannt sind<sup>4</sup>

$$H_0 |n\rangle = E_n |n\rangle \quad (10.25a)$$

$$\langle n|m\rangle = \delta_{nm} \quad (10.25b)$$

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = \mathbf{1}. \quad (10.25c)$$

Die Zeitabhängigkeit von  $H_I(t)$  kann dabei sowohl durch die Kopplung an ein externes klassisches System als auch durch den Wechsel in das Wechselwirkungsbild entstehen.

### 10.2.1 Wechselwirkungsbild

In Abschnitt 3.2.7 hatten wir angedeutet, daß man neben dem

- *Schrödingerbild* mit

- konstanten Observablen  $A_S$  und

- zeitabhängigen Zuständen  $|\psi_S(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$

und dem

- *Heisenbergbild* mit

- zeitabhängigen Observablen  $A_H(t) = U^\dagger(t, t_0) A_H(t_0) U(t, t_0)$  und

- konstanten Zuständen  $|\psi_H\rangle$

auch noch das

- *Wechselwirkungsbild* mit

- zeitabhängigen Observablen  $A_W(t)$  und

- zeitabhängigen Zuständen  $|\psi_W(t)\rangle$

verwendet. Im Schrödinger- und Heisenbergbild ist der Zeitentwicklungsoperator eine Lösung der **SG**

$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t, t_0) = H(t) U(t, t_0) \quad (10.26a)$$

$$U(t_0, t_0) = \mathbf{1}, \quad (10.26b)$$

<sup>4</sup>Diesmal können wir auf die Indices 0 verzichten.

die im Fall eines konstanten  $H$  geschlossen als

$$U(t, t_0) = e^{-iH(t-t_0)/\hbar} \quad (10.27)$$

geschrieben werden kann. Im Wechselwirkungsbild wird nur der freie Teil  $H_0$  des Hamiltonoperators in die Observablen absorbiert

$$A_W(t) = e^{iH_0(t-t_0)/\hbar} A_W(t_0) e^{-iH_0(t-t_0)/\hbar}, \quad (10.28a)$$

während die Wechselwirkung  $\lambda H_I(t)$  die zeitliche Änderung der Zustände beschreibt

$$|\psi_W(t)\rangle = U_W(t, t_0) |\psi_W(t_0)\rangle \quad (10.28b)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} U_W(t, t_0) = \lambda H_{I,W}(t) U_W(t, t_0) \quad (10.28c)$$

$$U_W(t_0, t_0) = \mathbf{1}. \quad (10.28d)$$

Hier ist wichtig, daß der Hamiltonoperator in (10.28c) im Wechselwirkungsbild

$$H_{I,W}(t) = e^{iH_0(t-t_0)/\hbar} H_I(t_0) e^{-iH_0(t-t_0)/\hbar} \quad (10.29)$$

ausgewertet wird. Dies ist wegen

$$e^{iH_0(t-t_0)/\hbar} A^n e^{-iH_0(t-t_0)/\hbar} = \left( e^{iH_0(t-t_0)/\hbar} A e^{-iH_0(t-t_0)/\hbar} \right)^n \quad (10.30)$$

automatisch gewährleistet, wenn  $H_I(t)$  ein Polynom oder eine Potenzreihe in Ort und Impuls ist und diese im Wechselwirkungsbild geschrieben werden.

Um zu sehen, daß die Vorhersagen im Wechselwirkungsbild mit dem Schrödingerbild übereinstimmen, bemerken wir, daß der Zeitentwicklungsoperator im Wechselwirkungsbild

$$U_W(t, t_0) = e^{iH_0(t-t_0)/\hbar} U(t, t_0) \quad (10.31)$$

die SG (10.28c) löst:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} U_W(t, t_0) &= e^{iH_0(t-t_0)/\hbar} (H - H_0) U(t, t_0) = \lambda e^{iH_0(t-t_0)/\hbar} H_I(t) U(t, t_0) \\ &= \lambda e^{iH_0(t-t_0)/\hbar} H_I(t) e^{-iH_0(t-t_0)/\hbar} e^{iH_0(t-t_0)/\hbar} U(t, t_0) = \lambda H_{I,W}(t) U_W(t, t_0). \end{aligned} \quad (10.32)$$

Wenn die Bilder bei  $t = t_0$  aneinander angeschlossen werden

$$A_W(t_0) = A_S = A \quad (10.33a)$$

$$\psi_W(t_0) = \psi_S(t_0) = \psi \quad (10.33b)$$

und wir der Kürze halber  $t_0 = 0$  wählen, stimmen alle Matrixelemente überein:

$$\begin{aligned} \langle \psi_S(t) | A_S | \phi_S(t) \rangle &= \langle \psi | U^\dagger(t, 0) A U(t, 0) | \phi \rangle \\ &= \langle \psi | U^\dagger(t, 0) e^{-iH_0 t/\hbar} e^{iH_0 t/\hbar} A_W(0) e^{-iH_0 t/\hbar} e^{iH_0 t/\hbar} U(t, 0) | \phi \rangle \\ &= \langle \psi | U_W^\dagger(t, 0) A_W(t) U_W(t, 0) | \phi \rangle = \langle \psi_W(t) | A_W(t) | \phi_W(t) \rangle . \end{aligned} \quad (10.34)$$

Der Ausdruck (10.31) für  $U_W(t, t_0)$  ist nur beschränkt nützlich, weil wir die Störungstheorie nicht bräuchten, wenn wir  $U(t, t_0)$  direkt berechnen können.

Vorlesung 23: Fr, 19. 07. 2019

Allerdings können wir  $U_W(t, t_0)$  leicht mit einer Reihenentwicklung approximieren. Das Anfangswertproblem (10.28c) und (10.28d) ist äquivalent zur Integralgleichung

$$U_W(t, t_0) = \mathbf{1} + \frac{\lambda}{i\hbar} \int_{t_0}^t d\tau H_{I,W}(\tau) U_W(\tau, t_0), \quad (10.35)$$

die man iterieren kann

$$\begin{aligned} U_W(t, t_0) &= \mathbf{1} + \frac{\lambda}{i\hbar} \int_{t_0}^t d\tau_1 H_{I,W}(\tau_1) \\ &\quad + \left( \frac{\lambda}{i\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t d\tau_1 \int_{t_0}^{\tau_1} d\tau_2 H_{I,W}(\tau_1) H_{I,W}(\tau_2) U_W(\tau_2, t_0), \end{aligned} \quad (10.36)$$

um die *Dyson-Reihe*

$$\begin{aligned} U_W(t, t_0) &= \mathbf{1} + \frac{\lambda}{i\hbar} \int_{t_0}^t d\tau_1 H_{I,W}(\tau_1) + \left( \frac{\lambda}{i\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t d\tau_1 \int_{t_0}^{\tau_1} d\tau_2 H_{I,W}(\tau_1) H_{I,W}(\tau_2) \\ &\quad + \left( \frac{\lambda}{i\hbar} \right)^3 \int_{t_0}^t d\tau_1 \int_{t_0}^{\tau_1} d\tau_2 \int_{t_0}^{\tau_2} d\tau_3 H_{I,W}(\tau_1) H_{I,W}(\tau_2) H_{I,W}(\tau_3) + \mathcal{O}(\lambda^4) \end{aligned} \quad (10.37)$$

zu erhalten. Die Terme mit höheren Potenzen von  $\lambda$  sind formal höherer Ordnung, aber bei der Frage nach der Güte der Approximation muß man berücksichtigen, daß die Integrale für große Intervalle  $[t_0, t]$  auch selbst groß werden können.

### 10.2.2 Übergangswahrscheinlichkeiten

Ein System, das zum Zeitpunkt  $t_0$  im normierten Zustand  $|\psi\rangle$  war, wird zum Zeitpunkt  $t$  im Zustand  $U_W(t, t_0)|\psi\rangle$  sein. Deshalb ist die Wahrscheinlichkeit, das System zum Zeitpunkt  $t$  im normierten Zustand  $|\phi\rangle$  anzutreffen, das Betragsquadrat der *Übergangsamplitude*

$$p_{\psi \rightarrow \phi}(t, t_0) = |\langle \phi | \psi_W(t) \rangle|^2 = |\langle \phi | U_W(t, t_0) | \psi \rangle|^2. \quad (10.38)$$

Für die weitere Diskussion ist es hilfreich, als konkretes Beispiel eine bei  $t = 0$  eingeschaltete Störung

$$H_I(t) = \begin{cases} 0 & \text{für } t < 0 \\ V & \text{für } t > 0 \end{cases} \quad (10.39)$$

zu betrachten, wobei der selbstadjungierte Operator  $V$  nicht explizit zeitabhängig ist, aber aus Observablen wie Ort  $X$  und Impuls  $P$  zusammengesetzt ist und deshalb im Wechselwirkungsbild zeitabhängig ist

$$H_{I,W}(t) = e^{iH_0(t-t_0)/\hbar} H_I(t) e^{-iH_0(t-t_0)/\hbar}. \quad (10.40)$$

Im Fall  $t_0 < 0$  erhalten wir bis auf eine Phase das gleiche Resultat wie im Fall  $t_0 = 0$ , den wir der Einfachheit halber wählen. Es ergibt sich dann als Übergangsamplitude zwischen zwei normierten Eigenzuständen des ungestörten Hamiltonoperators  $H_0$

$$\begin{aligned} \langle m | U_W(t, 0) | n \rangle &= \langle m | n \rangle + \frac{\lambda}{i\hbar} \int_0^t d\tau_1 \langle m | H_{I,W}(\tau_1) | n \rangle + \mathcal{O}(\lambda^2) \\ &= \delta_{nm} + \frac{\lambda}{i\hbar} \int_0^t d\tau_1 \langle m | e^{iH_0\tau_1/\hbar} V e^{-iH_0\tau_1/\hbar} | n \rangle + \mathcal{O}(\lambda^2) \\ &= \delta_{nm} + \frac{\lambda}{i\hbar} \langle m | V | n \rangle \int_0^t d\tau_1 e^{i(E_m - E_n)\tau_1/\hbar} + \mathcal{O}(\lambda^2) \\ &= \delta_{nm} + \frac{\lambda}{i\hbar} \langle m | V | n \rangle \frac{\hbar}{i(E_m - E_n)} e^{i(E_m - E_n)\tau_1/\hbar} \Big|_0^t + \mathcal{O}(\lambda^2) \\ &= \delta_{nm} - \frac{\lambda \langle m | V | n \rangle}{E_m - E_n} (e^{i(E_m - E_n)t/\hbar} - 1) + \mathcal{O}(\lambda^2). \end{aligned} \quad (10.41)$$

Für  $m \neq n$  ergibt sich

$$p_{n \rightarrow m \neq n}^{(2)}(t, 0) = \left| \langle m | U_W^{(1)}(t, 0) | n \rangle \right|_{m \neq n}^2 = \frac{\lambda^2 |\langle m | V | n \rangle|^2}{(E_m - E_n)^2} \underbrace{\left| e^{i(E_m - E_n)t/\hbar} - 1 \right|^2}_{=1 - 2 \cos \frac{(E_m - E_n)t}{\hbar} + 1}$$

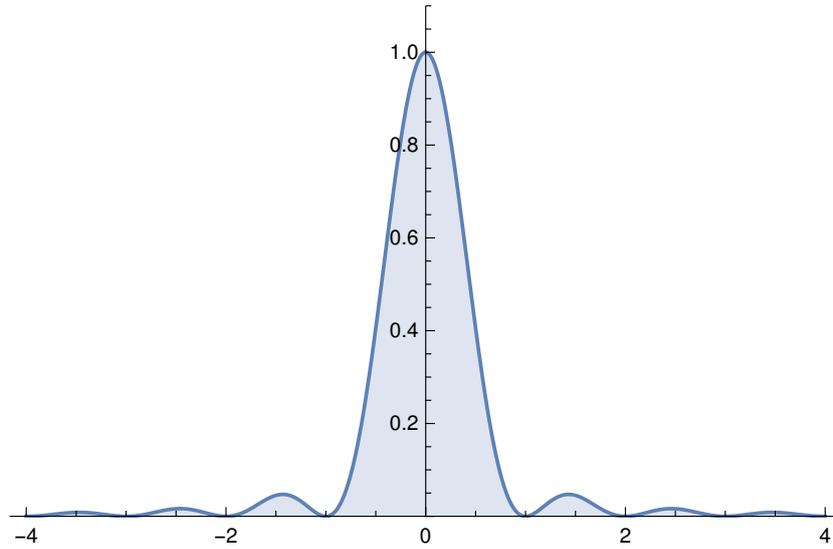


Abbildung 10.1: *Quadrat der Besselfunktion*  $(j_0(x))^2 = \left(\frac{\sin(\pi x)}{\pi x}\right)^2$ .

$$\begin{aligned}
 &= \frac{\lambda^2 |\langle m|V|n\rangle|^2}{(E_m - E_n)^2} 4 \sin^2 \left( \frac{(E_m - E_n)t}{2\hbar} \right) \\
 &= \lambda^2 \frac{t^2 |\langle m|V|n\rangle|^2}{\hbar^2} \left( j_0 \left( \frac{(E_m - E_n)t}{2\hbar} \right) \right)^2 \quad (10.42)
 \end{aligned}$$

mit der Bessel-Funktion

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x}. \quad (10.43)$$

Als Funktion von

$$\Delta E = E_m - E_n \quad (10.44)$$

betrachtet, fällt  $p_{n \rightarrow m \neq n}(t, 0)$  schnell ab (vgl. [Abbildung 10.1](#)) und die Beiträge außerhalb des Intervalls zwischen den Nullstellen in der Nähe des Ursprungs bei

$$\left| \frac{\Delta E t}{2\hbar} \right| = \pi \quad (10.45)$$

können vernachlässigt werden. Wenn wir

$$\Delta t = t - t_0 = t \quad (10.46)$$

für die Zeit schreiben, während der die Wechselwirkung  $H_I$  eingeschaltet ist, ergibt sich

$$\Delta E \Delta t \approx 2\pi\hbar \quad (10.47)$$

als *Zeit-Energie-Unschärfe*. Sie drückt aus, daß Übergänge, die die Energieerhaltung verletzen nur für eine sehr kurze Zeit nicht stark unterdrückt sind. Sie darf nicht mit der Heisenbergschen Unschärferelation für die gleichzeitige Messung nicht-vertauschender Observabler verwechselt werden.

Aufgrund von

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{k}{\pi} (j_0(kx))^2 = 1 \quad (10.48a)$$

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \frac{k}{\pi} (j_0(kx))^2 \Big|_{x \neq 0} = 0 \quad (10.48b)$$

gilt

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \frac{k}{\pi} (j_0(kx))^2 = \delta(x) \quad (10.49)$$

und wir finden im Einklang mit (10.47) für große Zeiten Energieerhaltung

$$\begin{aligned} p_{n \rightarrow m \neq n}^{(2)}(t, 0) &\xrightarrow{t \rightarrow +\infty} \lambda^2 \frac{t \pi |\langle m|V|n \rangle|^2}{\hbar^2} \delta\left(\frac{E_m - E_n}{2\hbar}\right) \\ &= t \lambda^2 |\langle m|V|n \rangle|^2 \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_m - E_n). \end{aligned} \quad (10.50)$$

Weil die Übergangswahrscheinlichkeit  $p_{n \rightarrow m \neq n}^{(2)}(t, 0)$  für große Zeiten *linear* wächst, liegt es nahe, eine *Übergangsrate* pro Zeiteinheit

$$R_{n \rightarrow m \neq n}^{(2)}(t) = \frac{dp_{n \rightarrow m \neq n}^{(2)}(t, 0)}{dt} \quad (10.51)$$

zu definieren, die für große Zeiten konstant wird

$$R_{n \rightarrow m \neq n}^{(2)}(\infty) = \lim_{t \rightarrow +\infty} R_{n \rightarrow m \neq n}^{(2)}(t) = \lambda^2 |\langle m|V|n \rangle|^2 \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_m - E_n). \quad (10.52)$$

Wenn man die Rechnung in die nächste Ordnung fortsetzt, findet man im Grenzfall  $t \rightarrow +\infty$  wieder Energieerhaltung zwischen Anfangs und Endzustand

$$R_{n \rightarrow m \neq n}^{(3)}(\infty) = \left| \lambda \langle m|V|n \rangle - \lambda^2 \sum_k \frac{\langle m|V|k \rangle \langle k|V|n \rangle}{E_k - E_n} \right|^2 \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_m - E_n), \quad (10.53)$$

aber *nicht* für die *virtuellen Zwischenzustände*, über die summiert werden muß, wenn man zur der Auswertung von  $VV$  eine Zerlegung der Eins einschleibt. Auch hier ist der Beitrag von Zwischenzuständen mit ähnlicher Energie verstärkt.

**Zusatzmaterial (nicht Teil der Vorlesung):**

Die Konvergenz der Summe über  $k$  ist übrigens in keiner Weise garantiert. Wenn die Summe für große  $E_k - E_n$  divergiert, spricht man von einer *Ultraviolett-Katastrophe* und wenn sie für kleine  $E_k - E_n$  divergiert von einer *Infrarot-Katastrophe*. Diese sind ein Zeichen dafür, daß  $H_0$  in der Zerlegung von  $H$  falsch gewählt wurde.

### 10.2.3 Fermis Goldene Regel

Bei nicht normierbaren Zuständen können wir uns die Energieerhaltung bei großen Zeiten zunutze machen, um einen einfachen Ausdruck für die Übergangsrate herzuleiten. Die Übergangsrate von einem Anfangszustand  $|i\rangle$  zu einem einzelnen Endzustand  $|f\rangle$  ist

$$R_{i \rightarrow f}^{(2)}(\infty) = \lambda^2 |\langle f|V|i\rangle|^2 \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_f - E_i) \quad (10.54)$$

Im Allgemeinen gibt es viele Zustände mit der gleichen Energie, aber unterschiedlichen anderen Quantenzahlen, wie Impuls oder Drehimpuls. Wenn diese Quantenzahlen nicht beobachtet werden, muß über alle Zustände summiert, bzw. integriert, werden die unter Berücksichtigung von Erhaltungssätzen erreicht werden können

$$R_{i \rightarrow f}^{(2)}(\infty) = \int dE_f \rho(E_f) \lambda^2 |\langle f|V|i\rangle|^2 \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_f - E_i) = \lambda^2 |\langle f|V|i\rangle|^2 \frac{2\pi}{\hbar} \rho(E). \quad (10.55)$$

Dabei ist  $E_f = E_i = E$  und  $\rho(E)$  die Dichte der erreichbaren Zustände mit Energie  $E$  im Hilbertraum. Diese wird auch als *Zustandsdichte* bezeichnet und kann in Systemen mit Wechselwirkung eine sehr komplizierte Form haben. Für freie Teilchen kann sie hingegen leicht durch Abzählen der Lösungen der stationären **SG** in einem endlichen Kasten bestimmt werden. Sie wächst meist mit dem Volumen des Kastens, sodaß die Übergangsrate pro Volumen eine wohldefinierte Größe ist. Die Formel (10.55) ist als *Fermis Goldene Regel* bekannt.

### 10.2.4 Harmonische Störung

Ein weiteres wichtiges Beispiel ist eine harmonische Störung, die, z. B., die Emission und Absorption von Photonen durch Atome beschreibt

$$H_I(t) = A e^{-i\omega t} + A^\dagger e^{i\omega t}. \quad (10.56)$$

In diesem Fall ist  $\omega$  die Frequenz des Photons und

$$A = g |n', l', m'\rangle \langle n, l, m| \quad (10.57)$$

der Operator, der den Sprung eines Elektrons vom Zustand  $|n, l, m\rangle$  in den Zustand  $|n', l', m'\rangle$  bewirkt. Für die Übergangsamplitude finden wir diesmal

$$\begin{aligned}
\langle m|U_W^{(1)}(t, 0)|n\rangle &= \frac{\lambda}{i\hbar} \int_0^t d\tau_1 \langle m|H_{I,W}(\tau_1)|n\rangle \\
&= \frac{\lambda}{i\hbar} \int_0^t d\tau_1 \left( \langle m|A|n\rangle e^{i(E_m - E_n - \hbar\omega)\tau_1/\hbar} + \langle m|A^\dagger|n\rangle e^{i(E_m - E_n + \hbar\omega)\tau_1/\hbar} \right) \\
&= -\lambda \left( \underbrace{\frac{\langle m|A|n\rangle}{E_m - E_n - \hbar\omega}}_{=c_+(t)} (e^{i(E_m - E_n - \hbar\omega)t/\hbar} - 1) \right. \\
&\quad \left. + \underbrace{\frac{\langle m|A^\dagger|n\rangle}{E_m - E_n + \hbar\omega}}_{=c_-(t)} (e^{i(E_m - E_n + \hbar\omega)t/\hbar} - 1) \right). \quad (10.58)
\end{aligned}$$

Im Betragsquadrat ergeben die quadratischen Terme wieder asymptotisch linear in  $t$  wachsende Terme

$$|c_+(t)|^2 \xrightarrow{t \rightarrow +\infty} t |\langle m|A|n\rangle|^2 \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_m - E_n - \hbar\omega) \quad (10.59a)$$

$$|c_-(t)|^2 \xrightarrow{t \rightarrow +\infty} t |\langle n|A|m\rangle|^2 \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_m - E_n + \hbar\omega), \quad (10.59b)$$

die zu einer konstanten Übergangsrate führen und  $\pm\hbar\omega$  in die Energieerhaltung einfügen. Man kann sich leicht davon überzeugen, daß die Interferenzterme

$$c_+^*(t)c_-(t) + c_-^*(t)c_+(t) \quad (10.60)$$

für  $t \rightarrow +\infty$  keine Terme proportional zu  $t$  enthalten und deshalb zur Übergangsrate nicht beitragen. Das Endergebnis in zweiter Ordnung  $\lambda$  ist also

$$\begin{aligned}
R_{i \rightarrow f}^{(2)}(\infty) &= \lambda^2 \frac{2\pi}{\hbar} \rho(E_f) \left( |\langle f|A|i\rangle|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \right. \\
&\quad \left. + |\langle i|A|f\rangle|^2 \delta(E_f - E_i + \hbar\omega) \right). \quad (10.61)
\end{aligned}$$

In unserem Beispiel beschreibt der erste Term die Absorption  $E_i + \hbar\omega \rightarrow E_f$  und der zweite Term die Emission  $E_i \rightarrow E_f + \hbar\omega$  eines Photons. Weil die Zustände für die Photonen nicht normierbar sind, müssen wir in diesem Fall die Rate noch mit der Zustandsdichte  $\rho(E_f)$  multiplizieren, die z. B. durch Betrachtung der Moden für Photonen in einem Kasten bestimmt werden kann.

## 10.3 Variationsprinzip

Vorlesung 24: Mo, 22. 07. 2019

Wenn es keine sinnvolle Aufspaltung (10.1) gibt, in der  $H_0$  exakt diagonalisierbar und Matrixelemente von  $\lambda H_I$  klein sind, ist die Störungsrechnung wertlos. In einem solchen Fall kann das *Ritzsche Variationsprinzip* hilfreich sein.

### 10.3.1 Grundzustand

Der Erwartungswert des Hamiltonoperators  $\langle \psi | H | \psi \rangle$  als Funktion der normierten Zustände  $|\psi\rangle$  wird vom Zustand niedrigster Energie  $|0\rangle$  minimiert, weil aus  $E_0 \leq E_n$

$$\begin{aligned} \langle \psi | H | \psi \rangle &= \sum_n \langle \psi | H | n \rangle \langle n | \psi \rangle = \sum_n \underbrace{E_n}_{\geq E_0} \langle \psi | n \rangle \langle n | \psi \rangle \\ &\geq \sum_n E_0 \langle \psi | n \rangle \langle n | \psi \rangle = E_0 \langle \psi | \psi \rangle = E_0 \langle 0 | 0 \rangle = \langle 0 | H | 0 \rangle \quad (10.62) \end{aligned}$$

folgt. Wenn aus der Form des Hamiltonoperators klar ist, daß die Eigenwerte nach unten beschränkt sind, ist man sicher, daß das Minimum auch angenommen wird. Man weiß nur nicht, ob der Grundzustand eindeutig ist.

Man kann deshalb einen<sup>5</sup> *Ansatz* für den Grundzustand  $|0\rangle$  machen, der von einem oder mehreren Parametern  $\{\alpha_i\}$  abhängt

$$|\alpha_1, \dots, \alpha_n\rangle \quad (10.63)$$

und den Erwartungswert des Hamiltonoperators als Funktion der Parameter

$$E(\alpha_1, \dots, \alpha_n) = \langle \alpha_1, \dots, \alpha_n | H | \alpha_1, \dots, \alpha_n \rangle \quad (10.64)$$

minimieren

$$\forall i = 1, \dots, n : \quad \frac{\partial E}{\partial \alpha_i}(\hat{\alpha}_1, \dots, \hat{\alpha}_n) = 0 \quad (10.65a)$$

$$\forall v \in \mathbf{R}^n : \quad \sum_{i,j=1}^n v_i v_j \frac{\partial^2 E}{\partial \alpha_i \partial \alpha_j}(\hat{\alpha}_1, \dots, \hat{\alpha}_n) > 0. \quad (10.65b)$$

Dann weiß man, daß

$$|\hat{0}\rangle = |\hat{\alpha}_1, \dots, \hat{\alpha}_n\rangle \quad (10.66)$$

---

<sup>5</sup>... mehr oder weniger guten ...

eine bestmögliche Approximation an den Grundzustand  $|\psi\rangle$  innerhalb der Menge

$$\{|\alpha_1, \dots, \alpha_n\rangle : \alpha_i \in \mathbf{R}\} \subset \mathcal{H} \quad (10.67)$$

ist. In einem endlich-dimensionalen Hilbertraum kann man so sogar den exakten Grundzustand  $|0\rangle$  finden. Im allgemeinen Fall hängt die Güte der Approximation empfindlich davon ab, wie „nahe“ die Vektoren  $|\alpha_1, \dots, \alpha_n\rangle$  dem richtigen Grundzustand kommen. In diesem Sinne ist die Näherung nicht kontrolliert.

Praktische Hinweis: bei der Konstruktion der Parametrisierung  $|\alpha_1, \dots, \alpha_n\rangle$  muß man die Normierung sicherstellen. Es kann aber bequemer sein, auf die explizite Normierung zu verzichten und

$$E(\alpha_1, \dots, \alpha_n) = \frac{\langle \alpha_1, \dots, \alpha_n | H | \alpha_1, \dots, \alpha_n \rangle}{\langle \alpha_1, \dots, \alpha_n | \alpha_1, \dots, \alpha_n \rangle} \quad (10.68)$$

zu minimieren.

### 10.3.2 Angeregte Zustände

Die Methode kann auf angeregte Zustände verallgemeinert werden, wenn man zunächst den Grundzustand sucht und den Ansatz auf den orthogonalen Unterraum projiziert. Dann man den ersten angeregten Zustand suchen und die Prozedur wiederholen.

### 10.3.3 Beispiel: Heliumatom

Man findet eine erstaunlich gute Approximation an den Grundzustand des Heliumatoms

$$H = \frac{1}{2\mu} \vec{P}_1^2 - \frac{Ze^2}{4\pi} \frac{1}{|\vec{X}_1|} + \frac{1}{2\mu} \vec{P}_2^2 - \frac{Ze^2}{4\pi} \frac{1}{|\vec{X}_2|} + \frac{e^2}{4\pi} \frac{1}{|\vec{X}_1 - \vec{X}_2|}, \quad (10.69)$$

wenn man als Ansatz für die Wellenfunktion das Produkt zweier Grundzustandswellenfunktionen des Wasserstoffatoms wählt

$$\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \langle \vec{x}_1, \vec{x}_2 | a \rangle = \frac{1}{\pi a^3} e^{-(r_1+r_2)/a}, \quad (10.70)$$

wobei der Parameter  $a > 0$  variiert werden kann und *nicht* auf den halben Bohr-Radius  $a_0/2$  festgelegt wird. Die physikalische Begründung ist, daß jedes Elektron nicht die gesamte Kernladung  $Z = 2$  sieht, sondern diese teilweise vom anderen Elektron abgeschirmt wird. Man erwartet also ein Minimum

$$\hat{a} \in [a_0/2, a_0] \quad (10.71)$$

sofern in  $H$  die abstoßende Wechselwirkung der Elektronen berücksichtigt wird. Das Ergebnis (vgl. [Sak94], Seite 368)

$$\hat{a} = \frac{a_0}{2 - 5/16} \quad (10.72)$$

liefert eine erstaunlich gute Approximation der gemessenen Bindungsenergie, die wesentlich besser ist, als das Ergebnis der ersten Ordnung zeitunabhängiger Störungsrechnung.

Die Verwendung von Variationsprinzipien sind ein wesentliches Werkzeug zur Beschreibung von Mehr- und *Vielkörpersystemen* in Atom-, Kern- und Festkörperphysik bei denen die Störungsrechnung versagt.

## 10.4 WKB-Methode<sup>6</sup>

Wenn wir für die Wellenfunktion den Ansatz

$$\langle \vec{x} | \psi(t) \rangle = \psi(\vec{x}, t) = e^{iS(\vec{x}, t)/\hbar} \quad (10.73)$$

machen, wird die linke Seite der **SG** zu

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{iS/\hbar} = -\frac{\partial S}{\partial t} e^{iS/\hbar} \quad (10.74)$$

und die rechte Seite der **SG** zu

$$\begin{aligned} H\psi &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta e^{iS/\hbar} + V e^{iS/\hbar} = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla} \left( \vec{\nabla} S \frac{i}{\hbar} e^{iS/\hbar} \right) + V e^{iS/\hbar} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left( -\frac{1}{\hbar^2} (\vec{\nabla} S)^2 + \frac{i}{\hbar} \Delta S \right) e^{iS/\hbar} + V e^{iS/\hbar}, \end{aligned} \quad (10.75)$$

also für  $e^{iS} \neq 0$

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} (\vec{\nabla} S)^2 + V = \frac{i\hbar}{2m} \Delta S. \quad (10.76)$$

Im formalen Grenzfall  $\hbar \rightarrow 0$  ergibt sich daraus die nichtlineare partielle Differentialgleichung mit reellen Koeffizienten

$$\frac{\partial S}{\partial t}(\vec{x}, t) + \frac{1}{2m} (\vec{\nabla} S(\vec{x}, t))^2 + V(\vec{x}) = 0 \quad (10.77)$$

für  $S$ .

---

<sup>6</sup>Im Sommersemester 2019 aus Zeitgründen übersprungen.

**Zusatzmaterial (nicht Teil der Vorlesung):**

Also gibt es reelle Lösungen für  $S$ , die im semiklassischen Grenzfall  $\hbar \rightarrow 0$  die *Hamilton-Jacobi-Gleichung* der klassischen Mechanik

$$\frac{\partial S}{\partial t}(\vec{x}, t) + H(\vec{x}, \vec{\nabla} S(\vec{x}, t), t) = 0 \quad (10.78)$$

lösen. In diesem Fall ist  $S$  die Erzeugende der kanonischen Transformation, die die Bewegungsgleichung löst.

Für Lösungen der stationären **SG** kann man

$$S(\vec{x}, t) = W(\vec{x}) - Et \quad (10.79)$$

bzw.

$$\psi(\vec{x}, t) = e^{-iEt/\hbar} e^{iW(\vec{x})/\hbar} \quad (10.80)$$

schreiben und es ergibt sich

$$\frac{1}{2m} \left( \vec{\nabla} W \right)^2 + V - E = \frac{i\hbar}{2m} \Delta W. \quad (10.81)$$

Den formalen Grenzfall  $\hbar \rightarrow 0$  sollte man besser durch die Bedingung

$$\hbar \left| \Delta S(\vec{x}, t) \right| \ll \left| \left( \vec{\nabla} S(\vec{x}, t) \right)^2 \right| \quad (10.82a)$$

bzw.

$$\hbar \left| \Delta W(\vec{x}) \right| \ll \left| \left( \vec{\nabla} W(\vec{x}) \right)^2 \right| \quad (10.82b)$$

ersetzen, die man *a posteriori* für die gefundene Lösung überprüfen kann.

Offensichtlich gilt in betrachteten Grenzfall

$$\left( \vec{\nabla} W(\vec{x}) \right)^2 = 2m(E - V(\vec{x})) \quad (10.83)$$

und wir können reelle  $W(\vec{x})$ , die einer oszillatorischen Wellenfunktion entsprechen, in einer Umgebung von Punkten  $\vec{x}_0$  mit  $V(\vec{x}_0) < E$  finden. In einer Umgebung von Punkten  $\vec{x}_0$  mit  $V(\vec{x}_0) > E$  finden wir imaginäre  $W(\vec{x})$ , die einer exponentiell ansteigenden oder abfallenden Wellenfunktion entsprechen.

### 10.4.1 Eindimensionale Systeme

Die weitere Diskussion ist für eindimensionale Systeme wesentlich übersichtlicher als der allgemeine Fall. Definiere

$$p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))} \quad (10.84)$$

für  $E > V(x)$  und entwickle  $W(x)$  in  $\hbar$

$$W(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \hbar^n W_n(x). \quad (10.85)$$

Die Gleichung für  $W$  wird zu einer nichtlinearen gewöhnliche Differentialgleichung

$$(W')^2 - p^2 = i\hbar W'', \quad (10.86)$$

die Ordnung für Ordnung

$$(W'_0)^2 = p^2 \quad (10.87a)$$

$$2W'_0 W'_1 = iW''_0 \quad (10.87b)$$

...

mit

$$W'_0 = \pm p \quad (10.88a)$$

$$W'_1 = \frac{i}{2} \frac{W''_0}{W'_0} = \frac{i}{2} \frac{p'}{p} \quad (10.88b)$$

...

bis auf eine komplexe Konstante, d. h. Normierung und Phase der Wellenfunktion, gelöst werden kann

$$W_0(x) = \pm \int^x d\xi p(\xi) = \pm \sqrt{2m} \int^x d\xi \sqrt{E - V(\xi)} \quad (10.89a)$$

$$W_1(x) = \frac{i}{2} \ln p(x) = \frac{i}{2} \ln \sqrt{E - V(x)} \quad (10.89b)$$

....

Das Vorzeichen von  $W_0(x)$  ist dabei unbestimmt und muß durch Anschlußbedingungen festgelegt werden. Wenn wir im Exponenten die Terme  $\mathcal{O}(\hbar)$  vernachlässigen, ist das Ergebnis

$$\psi(x) \propto e^{\pm i \int^x d\xi p(\xi)/\hbar - \frac{1}{2} \ln \sqrt{E - V(x)}} = \frac{1}{(E - V(x))^{1/4}} e^{\pm i \int^x d\xi p(\xi)/\hbar}. \quad (10.90)$$

Lokal können wir die Phase mit

$$\phi(x) = \pm \frac{1}{\hbar}(x - x_0)p(x_0) + \mathcal{O}((x - x_0)^2) \quad (10.91)$$

approximieren und finden eine ortsabhängige Wellenzahl

$$k(x) = \frac{p(x)}{\hbar} \approx W'(x) \quad (10.92)$$

und eine ortsabhängige *Compton-Wellenlänge*

$$\lambda(x) = \frac{2\pi}{k(x)} = \frac{2\pi\hbar}{p(x)}. \quad (10.93)$$

Die Bedingung (10.82) für die Gültigkeit der WKB-Näherung hat damit eine einfache physikalische Interpretation

$$1 \gg \frac{\hbar|W''|}{|W'|^2} \approx \frac{\hbar|W_0''|}{|W_0'|^2} = \frac{\hbar|p'|}{p^2} = \frac{|\lambda'|}{2\pi}, \quad (10.94)$$

d. h. die Änderung der Compton-Wellenlänge durch Änderung des Potentials muß sehr klein sein. Die komplementäre Sichtweise

$$\lambda(x)|V'(x)| = 4\pi \frac{\hbar|p'(x)|}{2m} \ll 4\pi \frac{p^2(x)}{2m} = 4\pi|E - V(x)| \quad (10.95)$$

zeigt, daß die Änderung des Potentials über eine Compton-Wellenlänge klein sein muß im Vergleich zur kinetischen Energie des Teilchens.

Die Rechnung kann für  $E < V(x)$  wiederholt werden und führt mit

$$\kappa(x) = \frac{\sqrt{2m(V(x) - E)}}{\hbar} \quad (10.96)$$

auf

$$\psi(x) \propto \frac{1}{(V(x) - E)^{1/4}} e^{\pm \int^x d\xi \kappa(\xi)}. \quad (10.97)$$

#### 10.4.2 Anschlußbedingungen

Offensichtlich bricht die Näherung an den Stellen mit  $V(x) \rightarrow E$  zusammen. In einer Umgebung dieser Stellen kann man aber entwickeln

$$V(x) = E + (x - x_0) \underbrace{V'(x_0)}_{= \frac{\hbar^2 C^3}{2m}} + \mathcal{O}((x - x_0)^2) \quad (10.98)$$

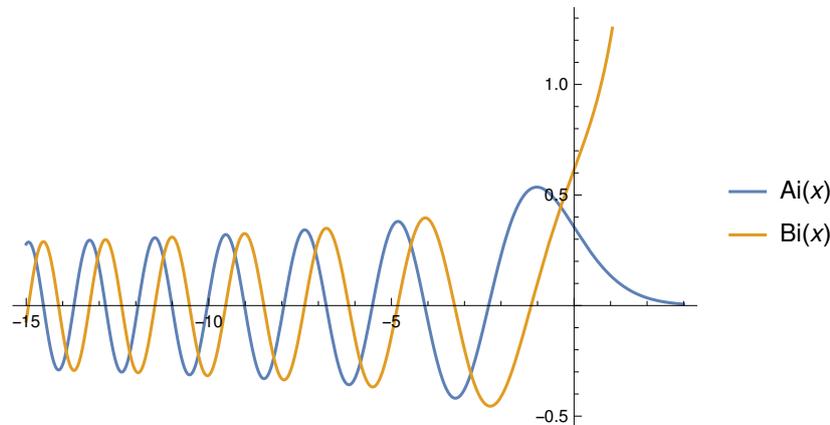


Abbildung 10.2: Die Airy-Funktionen (10.102).

und die SG

$$\psi''(x) - C^3 \cdot (x - x_0)\psi(x) = 0 \quad (10.99)$$

lösen. Dies ist offensichtlich eine einfache Transformation der *Airy-Gleichung*

$$\frac{d^2 w}{dz^2}(z) - zw(z) = 0 \quad (10.100)$$

mit

$$\psi(x) = w(C \cdot (x - x_0)) . \quad (10.101)$$

Die Lösungen interpolieren glatt zwischen oszillatorischem und exponentiellem Verhalten (vgl. Abbildung 10.2) und sind als *Airy-Funktionen*

$$\text{Ai}(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dt \cos\left(\frac{t^3}{3} + zt\right) \quad (10.102a)$$

$$\text{Bi}(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dt \left( e^{-t^3/3+zt} + \sin\left(\frac{t^3}{3} + zt\right) \right) \quad (10.102b)$$

bekannt. Die Airy-Gleichung entspricht für  $C > 0$  im Bereich  $z > 0$ , bzw.  $x > x_0$ , der Situation  $V > E$ . Wir erwarten also exponentiellem Abfall oder Anstieg der Airy-Funktionen für  $z > 0$ . Im Bereich  $z < 0$  erwarten wir hingegen oszillatorisches Verhalten, entsprechend  $V < E$ . In der Tat<sup>7</sup>

$$\text{Ai}(z) \rightarrow \begin{cases} \frac{1}{2\sqrt{\pi}z^{1/4}} e^{-2z^{3/2}/3} & \text{für } z \rightarrow +\infty \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}(-z)^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3}(-z)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) & \text{für } z \rightarrow -\infty \end{cases} \quad (10.103a)$$

<sup>7</sup>Die Approximationen sind bereits für  $|x| \gtrsim 2$  sehr gut (vgl. Abbildungen 10.3 und 10.4)!

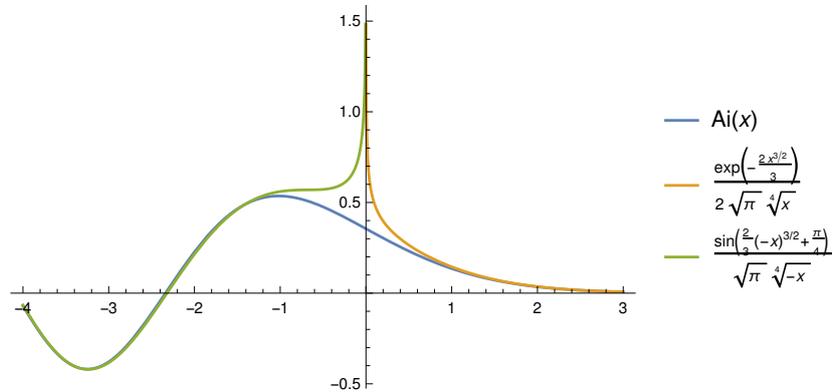


Abbildung 10.3: Die asymptotischen Näherungen (10.103a) der Airy-Funktion  $Ai$ .

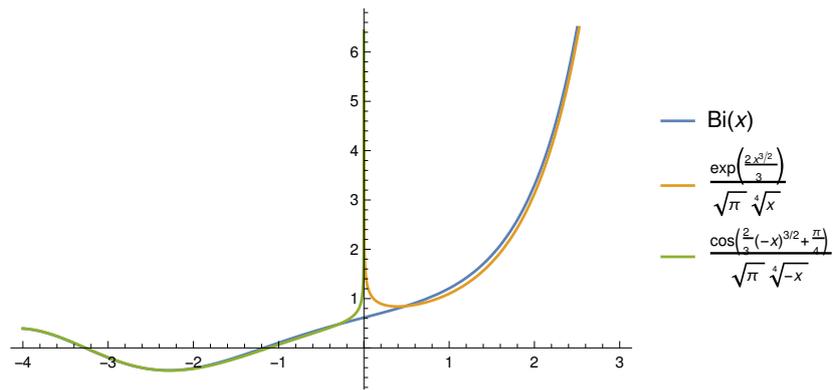


Abbildung 10.4: Die asymptotischen Näherungen (10.103b) der Airy-Funktion  $Bi$ .

$$Bi(z) \rightarrow \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\pi}z^{1/4}} e^{2z^{3/2}/3} & \text{für } z \rightarrow +\infty \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}(-z)^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3}(-z)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) & \text{für } z \rightarrow -\infty \end{cases} \quad (10.103b)$$

Für  $C < 0$  müssen wir lediglich die Transformation  $z \rightarrow -z$  durchführen.

Wir dürfen erwarten, daß sich diese Lösungen für hinreichend große  $|z|$  bis auf Normierung und Phase an die WKB-Näherung annähern. Das Argument der Exponentialfunktion, bzw. der trigonometrischen Funktionen, kann auch

$$\frac{2}{3}z^{3/2} = \int_0^z d\zeta \sqrt{\zeta} \quad (10.104)$$

geschrieben werden. Wenn wir die Taylor-Entwicklung (10.98) rückgängig machen

$$\begin{aligned} z = C \cdot (x - x_0) &= \left( \frac{2m}{\hbar^2} V'(x_0) \right)^{1/3} \frac{V(x) - E}{V'(x_0)} \\ &= \left( \frac{1}{2m\hbar V'(x_0)} \right)^{2/3} 2m(V(x) - E) \end{aligned} \quad (10.105)$$

und die Integrationsvariable transformieren

$$dz = dx C = dx \left( \frac{2m}{\hbar^2} V'(x_0) \right)^{1/3} \quad (10.106)$$

finden wir

$$\begin{aligned} dz\sqrt{z} &= dx \left( \frac{2m}{\hbar^2} V'(x_0) \right)^{1/3} \left( \frac{1}{2m\hbar V'(x_0)} \right)^{1/3} \sqrt{2m(V(x) - E)} \\ &= dx \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V(x) - E)}. \end{aligned} \quad (10.107)$$

Bis auf die Normierungskonstante ist das die WKB-Form der Wellenfunktion

$$\psi(x) \propto \frac{1}{(V(x) - E)^{1/4}} e^{-\int_0^x d\xi \sqrt{2m(V(\xi) - E)}/\hbar}. \quad (10.108)$$

Die analoge Rechnung für  $x \leq x_0$  liefert

$$\psi(x) \propto \frac{1}{(E - V(x))^{1/4}} \sin \left( \frac{1}{\hbar} \int_0^x d\xi \sqrt{2m(E - V(\xi))} + \frac{\pi}{4} \right). \quad (10.109)$$

Man kann also die Lösungen durch eine geeignete Normierung und Phasenverschiebung glatt an die WKB-Näherung anschließen, weil das oszillatorische Verhalten, bzw. der exponentielle Abfall, der beiden Funktionen zusammenpasst.

### 10.4.3 Anwendungen

Intuitiv kann man sich die WKB-Approximation für eindimensionale Systeme als eine Verallgemeinerung der in Abschnitt 5.3 bis 5.6 diskutierten Systeme mit stückweise konstantem Potential ansehen. Für hinreichend große  $|V(x) - E|$  wird das Potential durch immer feinere Stufenfunktionen approximiert und für  $V(x) \approx E$  wird mit den Airy-Funktionen ein sauberer Anschluß konstruiert.

*Tunnelwahrscheinlichkeit*

Ein der wichtigsten Anwendungen ist die näherungsweise Berechnung von Tunnelwahrscheinlichkeiten aus metastabilen Zuständen, wenn die Potentialmauer nicht durch ein konstantes Potential beschrieben wird. Ein frühes Beispiel hierfür ist das Tunneln durch die Coulomb-Barriere im nuklearen  $\alpha$ -Zerfall.

*Gebundene Zustände*

Ebenso kann man die Potentialtöpfe aus Abschnitt 5.4 verallgemeinern und aus der Normierbarkeit der Wellenfunktionen für gebundene Zustände mit den Anschlußbedingungen Näherungen für die Bindungsenergien berechnen.

## — 11 —

## MEHRTEILCHENSYSTEME

Bislang haben wir Systeme mit mehreren Teilchen nicht im Detail diskutiert. Nach den allgemeinen Regeln in Abschnitt ist der Zustandsraum des Gesamtsystems das Tensorprodukt der Teilsysteme. Allerdings werden wir sehen, daß *nicht* alle Zustände im Tensorprodukt physikalisch realisierbar sind.

## 11.1 Unterscheidbare Teilchen

Im Fall von Teilchen, die durch Ladung, Masse oder Spin unterschieden werden können. Sind alle Zustände im Tensorprodukt realisierbar. Wenn wir in einem einatomigen Atom oder Ion den Kern als punktförmig betrachten, ist sein Zustandsraum ebenso wie der des Elektrons (isomorph zu) dem Raum der quadratintegriblen Wellenfunktionen im dreidimensionalen Raum

$$\mathcal{H}_N = \mathcal{H}_e = L^2(\mathbf{R}^3, d^3x). \quad (11.1)$$

Der Zustandsraum des Ions ist also

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_N \otimes \mathcal{H}_e = L^2(\mathbf{R}^3 \times \mathbf{R}^3, d^3x_N d^3x_e) \quad (11.2)$$

mit Wellenfunktionen

$$\psi(\vec{x}_N, \vec{x}_e) = \langle \vec{x}_N, \vec{x}_e | \psi \rangle. \quad (11.3)$$

Der Hamiltonoperator des Gesamtsystems ist

$$H = \frac{1}{2m_N} \vec{P}_N^2 + \frac{1}{2m_e} \vec{P}_e^2 - \frac{Ze^2}{4\pi} \frac{1}{|\vec{X}_N - \vec{X}_e|} \quad (11.4)$$

und wirkt auf Wellenfunktionen als

$$(H\psi)(\vec{x}_N, \vec{x}_e) = \langle \vec{x}_N, \vec{x}_e | H | \psi \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m_N} \Delta_N \psi(\vec{x}_N, \vec{x}_e) - \frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_e \psi(\vec{x}_N, \vec{x}_e) - \frac{Ze^2}{4\pi} \frac{1}{|\vec{x}_N - \vec{x}_e|} \psi(\vec{x}_N, \vec{x}_e). \quad (11.5)$$

Wegen der Erhaltung des Gesamtimpulses

$$\left[ H, \vec{P}_N + \vec{P}_e \right] = 0 \quad (11.6)$$

empfehl es sich übrigens, auf Schwerpunkts- und Relativkoordinaten

$$\vec{X}_S = \frac{m_e}{M} \vec{X}_e + \frac{m_N}{M} \vec{X}_N \quad (11.7a)$$

$$\vec{X}_R = \vec{X}_e - \vec{X}_N \quad (11.7b)$$

$$\vec{P}_S = \vec{P}_e + \vec{P}_N \quad (11.7c)$$

$$\vec{P}_R = \frac{\mu}{m_e} \vec{P}_e - \frac{\mu}{m_N} \vec{P}_N \quad (11.7d)$$

mit Gesamtmasse und reduzierter Masse

$$M = m_e + m_N \quad (11.8a)$$

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_N} \quad (11.8b)$$

zu wechseln, weil der Hamiltonoperator

$$H = \frac{1}{2M} \vec{P}_S^2 + \frac{1}{2\mu} \vec{P}_R^2 - \frac{Ze^2}{4\pi} \frac{1}{|\vec{X}_R|} \quad (11.9)$$

von  $\vec{X}_S$  unabhängig ist und die neuen Koordinaten die gleichen Vertauschungsrelationen haben

$$[X_{S/R,i}, P_{S/R,j}] = i\hbar\delta_{ij} \quad (11.10a)$$

$$[X_{S/R,i}, P_{R/S,j}] = 0. \quad (11.10b)$$

## 11.2 Ununterscheidbare Teilchen

Die Situation ist völlig anders, wenn Teilchen nicht unterscheidbar sind. In der Quantenphysik haben Teilchen keine „Identität“: man kann Sie nur anhand von Observablen, wie Ort, Impuls, Drehimpuls, Energie, Ladung, Spin, etc. unterscheiden. Wenn wir, z. B., ein Elektron in einem Doppelspalt-Experiment (vgl. Abschnitt 1.1.4) nachweisen, ist es grundsätzlich nicht möglich,

zu sagen, durch welchen Schlitz das Elektron gekommen ist. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten müssen also symmetrisch unter dem Austausch der Koordinaten sein

$$|\langle \vec{x}_1, \vec{x}_2 | \psi \rangle|^2 = |\langle \vec{x}_2, \vec{x}_1 | \psi \rangle|^2 . \quad (11.11)$$

Also darf sich die Wahrscheinlichkeitsamplitude beim Austausch nur um eine Phase

$$\langle \vec{x}_1, \vec{x}_2 | \psi \rangle = \alpha \langle \vec{x}_2, \vec{x}_1 | \psi \rangle \quad (11.12)$$

mit

$$|\alpha| = 1 \quad (11.13)$$

ändern. Ein erneutes Austauschen muß wieder die ursprüngliche Wahrscheinlichkeitsamplitude ergeben, also

$$\alpha^2 = 1 \quad (11.14)$$

bzw.

$$\alpha = \pm 1 . \quad (11.15)$$

Dieses Argument verallgemeinert sich leicht auf Systeme mit mehr als zwei identischen Teilchen. Es gibt also nur total symmetrische oder total antisymmetrische Wahrscheinlichkeitsamplituden.

Wenn die Zustände durch andere oder mehr Quantenzahlen<sup>1</sup> charakterisiert sind, gilt das gleiche Argument für den *simultanen* Austausch aller Quantenzahlen. Aus dem Tensorprodukt

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1 \quad (11.16)$$

sind nur Zustände aus den total symmetrischen oder antisymmetrischen Unterräumen

$$\mathcal{H}_{S/A} = \mathcal{H}_1 \otimes_{S/A} \mathcal{H}_1 \quad (11.17)$$

physikalisch realisierbar.

### 11.2.1 Tensorprodukte

Wenn

$$\{|n\rangle \in \mathcal{H}_1\}_{n=1,2,\dots} \quad (11.18)$$

eine **ONB** von  $\mathcal{H}_1$  ist, dann sind

$$\{|n_1, n_2; A\rangle = |n_1\rangle \otimes_A |n_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2!}} (|n_1\rangle \otimes |n_2\rangle - |n_2\rangle \otimes |n_1\rangle)$$

<sup>1</sup>Eigenwerte von vertauschenden Observablen.

$$= \frac{1}{\sqrt{2!}} (|n_1, n_2\rangle - |n_2, n_1\rangle) = -|n_2, n_1; A\rangle \}_{n_1 < n_2} \quad (11.19)$$

eine **ONB** von  $\mathcal{H}_A$

$$\begin{aligned} \langle n_1, n_2; A | m_1, m_2; A \rangle &= \\ \frac{1}{2} (\langle n_1 | m_1 \rangle \langle n_2 | m_2 \rangle - \langle n_1 | m_2 \rangle \langle n_2 | m_1 \rangle - \langle n_2 | m_1 \rangle \langle n_1 | m_2 \rangle + \langle n_2 | m_2 \rangle \langle n_1 | m_1 \rangle) \\ &= \delta_{n_1, m_1} \delta_{n_2, m_2} - \delta_{n_1, m_2} \delta_{n_2, m_1}. \end{aligned} \quad (11.20)$$

Insbesondere gilt wegen  $n_1 < n_2$

$$\langle n_1, n_2; A | n_1, n_2; A \rangle = \delta_{n_1, n_1} \delta_{n_2, n_2} - \underbrace{\delta_{n_1, n_2}}_{=0} \underbrace{\delta_{n_2, n_1}}_{=0} = 1. \quad (11.21)$$

Analog ist

$$\{|n_1, n_2; S\rangle\}_{n_1, n_2} \quad (11.22)$$

mit

$$\begin{aligned} |n_1, n_2; S\rangle &= |n_2, n_1; S\rangle = |n_1\rangle \otimes_S |n_2\rangle = \\ \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2!}} (|n_1\rangle \otimes |n_2\rangle + |n_2\rangle \otimes |n_1\rangle) & \text{für } n_1 \neq n_2 \\ |n_1\rangle \otimes |n_1\rangle & \text{für } n_1 = n_2 \end{cases} \end{aligned} \quad (11.23)$$

eine **ONB** von  $\mathcal{H}_S$ . Analoge Formeln für mehr als zwei Teilchen ergeben sich leicht als Summen über Permutationen mit und ohne Gewichtung mit dem Vorzeichen der Permutation. Die total antisymmetrischen Zustände sind auch unter dem Namen *Slater-Determinanten* bekannt.

### 11.2.2 Bosonen und Fermionen

Die Teilchen, für die nur unter Permutationen total symmetrische Zustände erlaubt sind heißen *Bosonen* und die Teilchen, für die nur unter Permutationen total antisymmetrische Zustände erlaubt sind heißen *Fermionen*.

Empirisch findet man, daß Teilchen mit ganzzahligem Spin (z. B. Photonen) *immer* Bosonen sind, während Teilchen mit halbzahligem Spin (z. B. Elektronen und Nukleonen) *immer* Fermionen sind. Ein theoretisches Resultat der *relativistischen Quantenfeldtheorie*, das *Spin-Statistik-Theorem*, besagt, daß jede andere Zuordnung in mehr als zwei Dimensionen zu mathematischen Inkonsistenzen führt.

### 11.3 Pauli-Prinzip

Für Fermionen folgt das *Pauli-Prinzip*:

*zwei ununterscheidbare Teilchen mit halbzahligen Spin können nicht im gleichen Zustand sein.*

Ohne Spin-Bahn-Kopplung und Hyperfeinstrukturwechselwirkung ist

$$\{|n, l, m, m_s\rangle = |n, l, m\rangle \otimes |1/2, m_s\rangle\} \quad (11.24)$$

eine **ONB** aus Eigenzuständen des Hamiltonoperators für ein Elektron im Coulomb-Feld. Wenn wir die Wechselwirkung zwischen den Elektronen vernachlässigen dürften, wäre also

$$\{|n_1, l_1, m_1, m_{s,1}\rangle \otimes_A |n_2, l_2, m_2, m_{s,2}\rangle\} \quad (11.25)$$

eine **ONB** aus Eigenzuständen des Hamiltonoperators für zwei Elektronen im Coulomb-Feld. Weil die Zustände antisymmetrisch unter dem *simultanen* Austausch *aller* Quantenzahlen

$$\{n_1, l_1, m_1, m_{s,1}\} \leftrightarrow \{n_2, l_2, m_2, m_{s,2}\} \quad (11.26)$$

sind, können wir *nicht* schließen, daß  $n_1 \neq n_2$  usw. Vielmehr genügt es, wenn eine Quantenzahl unterschiedlich ist und

$$\begin{aligned} & |n, l, m, 1/2\rangle \otimes_A |n, l, m, -1/2\rangle \\ &= (|n, l, m\rangle \otimes_S |n, l, m\rangle) \otimes (|1/2, 1/2\rangle \otimes_A |1/2, -1/2\rangle) \\ &= (|n, l, m\rangle \otimes_S |n, l, m\rangle) \otimes \\ & \quad \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}(|1/2, 1/2\rangle \otimes |1/2, -1/2\rangle - |1/2, -1/2\rangle \otimes |1/2, 1/2\rangle)}_{=|0,0\rangle} \end{aligned} \quad (11.27)$$

ist somit ein erlaubter, antisymmetrischer Zustand. Allgemein kann man einen total antisymmetrischen Zustand für Mehrelektronensysteme als

- total symmetrischer Bahnanteil, total antisymmetrischer Spinanteil
- total antisymmetrischer Bahnanteil, total symmetrischer Spinanteil
- *passend* gemischt symmetrischer Bahn- und Spinanteil

konstruieren.

## 11.4 Aufbau der Materie

Vorlesung 25: Fr, 26.07.2019

Das Pauli-Prinzip hat weitreichende Folgen für den Aufbau der Materie: Atome, Atomkerne, Festkörper und Neutronensterne.

Wenn man die Wechselwirkung zwischen den Elektronen und die Spin-Bahn-Wechselwirkung als erste Näherung vernachlässigt, ist der  $k$ -Elektron-Zustand

$$|\psi\rangle = |n_1, l_1, m_1, m_{s,1}\rangle \otimes_A \cdots \otimes_A |n_k, l_k, m_k, m_{s,k}\rangle \quad (11.28)$$

ein Eigenzustand des Hamiltonoperators mit Energieeigenwert als Summe

$$E_\psi = \sum_{i=1}^k E_{n_i} \quad (11.29)$$

der Einzelenergien. Als Zustand niedrigster Energie bietet sich also eine Superposition der Zustände

$$\begin{aligned} |\psi_0\rangle &= |1, 0, 0, m_{s,1}\rangle \otimes_A \cdots \otimes_A |1, 0, 0, m_{s,k}\rangle \\ &= (|1, 0, 0\rangle \otimes_S \cdots \otimes_S |1, 0, 0\rangle) \otimes (|1/2, m_{s,1}\rangle \otimes_A \cdots \otimes_A |1/2, m_{s,k}\rangle) \end{aligned} \quad (11.30)$$

mit der niedrigst möglichen Energie  $E_\psi = kE_1$  an. Allerdings kann man sich leicht davon überzeugen, daß das Singlett

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1/2, 1/2\rangle \otimes |1/2, -1/2\rangle - |1/2, -1/2\rangle \otimes |1/2, 1/2\rangle) \quad (11.31)$$

der *einzig*e total antisymmetrische Spin-Zustand ist. Für mehr als zwei Elektronen ist es unmöglich, die zwei Spinzustände total antisymmetrisch zu kombinieren: für  $k$  Elektronen würde man  $k$  unabhängige Spinzustände benötigen, um einen total antisymmetrischen Zustand zu bauen.

### 11.4.1 Helium

Für den Grundzustand des Heliumatoms sind also zwei  $1s$ -Orbitale mit Spin-Singulett

$$\begin{aligned} |\text{He}\rangle &= (|1, 0, 0\rangle \otimes_S |1, 0, 0\rangle) \otimes \\ &\quad \frac{1}{\sqrt{2}} (|1/2, 1/2\rangle \otimes |1/2, -1/2\rangle - |1/2, -1/2\rangle \otimes |1/2, 1/2\rangle) \end{aligned} \quad (11.32)$$

ein guter Ansatz, der mit Methoden der Variationsrechnung in Abschnitt 10.3.3 verbessert wurde. Die entsprechende Wellenfunktion ist

$$\begin{aligned} \langle \vec{x}_1, m_{s,1}, \vec{x}_2, m_{s,2} | \psi \rangle &= \frac{1}{4\pi} R_{1,0}(r_1) R_{1,0}(r_2) \underbrace{\langle 1/2, m_{s,1}, 1/2, m_{s,2} | 0, 0 \rangle}_{=} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \delta_{m_{s,1}, \frac{1}{2}} \delta_{m_{s,2}, -\frac{1}{2}} - \delta_{m_{s,1}, -\frac{1}{2}} \delta_{m_{s,2}, \frac{1}{2}} \right) \end{aligned} \quad (11.33)$$

Wir können also aus dem Pauli-Prinzip schließen, daß im Grundzustand des Heliumatoms die beiden Elektronspins zu einem Spin 0 Singlett gekoppelt sind.

### 11.4.2 Lithium

Im Fall von Lithium ist der energetisch günstigste Ansatz eine Kombination von zwei  $1s$ -Orbitalen mit einem  $2s$ - oder  $2p$ -Orbital<sup>2</sup>. Die Ortsraumwellenfunktion hat eine gemischte Symmetrie unter Permutationen, die mit der gemischten Symmetrie der Spin-Wellenfunktionen gerade eine total antisymmetrische Kombination ergibt

$$|\text{Li}\rangle \propto |1, 0, 0, 1/2\rangle \otimes_A |1, 0, 0, -1/2\rangle \otimes_A |2, l, m, m_{s_3}\rangle + \text{Permutationen} \quad (11.34)$$

### 11.4.3 Schalenmodell

Es ergibt sich also ein Schalenmodell, in dem die Einteilchenzustände in der Reihenfolge aufsteigender Energie, bzw. Hauptquantenzahl, besetzt werden. Aufgrund der Antisymmetrie der Zustände unter Vertauschung aller Quantenzahlen kann jeder Ortsraumzustand  $|n, l, m\rangle$  höchstens zweimal besetzt werden. Es ergeben sich also Schalen mit  $2 \cdot 1, 2(1+3) = 8, 2(1+3+5) = 18, \dots$  Zuständen. Ohne das Pauli-Prinzip würden wir die Chemie nicht wiedererkennen! Alle Elektronen aller Elemente würden in  $1s$ -Orbitalen sitzen, die nur durch die Wechselwirkung der Elektronen untereinander deformiert wären.

Dadurch, daß die Energien mit wachsender Hauptquantenzahl zusammenrücken und gleichzeitig die Summe der Wechselwirkungen zwischen den Elektronen stärker wird, ist zu erwarten, daß dieses Prinzip für schwerere Atome durchbrochen wird. Man muß dann entweder zu empirischen Regeln, wie den *Hundsche Regeln*, greifen oder aufwendige numerische Rechnungen durchführen. Letztere basieren auf der *Hartree-Fock-Methode*, in der eine

<sup>2</sup>Ob  $2s$  oder  $2p$  macht erst dann einen Unterschied, wenn wir Spin-Bahn-Wechselwirkung und die Wechselwirkung der Elektronen untereinander berücksichtigen.

antisymmetrische Wellenfunktion angesetzt wird, die mit der Variationsmethode optimiert wird. Die ältere und wesentlich weniger aufwändige *Hartree-Methode* verzichtete auf die Antisymmetrisierung und liefert schlechtere Ergebnisse.

#### 11.4.4 *Fermioberfläche*

In Systemen mit sehr vielen Elektronen, z. B. im Festkörper, gilt das Pauli-Prinzip ebenfalls. Auch in großen, aber endlichen Volumina, gibt es nur eine endliche Anzahl von Zuständen unterhalb einer gegebenen Energie. Diese können jeweils mit maximal zwei Elektronen besetzt werden. Aus der Dichte der Elektronen ergibt sich so die *Fermienergie* des energetischsten Elektrons im Grundzustand. Die Nichtkomprimierbarkeit von Materie verdankt sich so vorwiegend dem Pauli-Prinzip, weil eine weitere Verdichtung die Fermienergie steigern würde.

## —12—

## MESSPROZESS UND VERSCHRÄNKUNG

## 12.1 Verschränkung

Betrachten wir ein System, das aus zwei Spin-1/2 Subsystemen zusammengesetzt ist

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1/2)} \otimes \mathcal{H}^{(1/2)}. \quad (12.1)$$

Für jeden beliebigen Einheitsvektor  $\vec{n}$  können wir aus den beiden Eigenzuständen des Spin-Operators  $\vec{n}\vec{\sigma}/2$  ein Singlett konstruieren

$$|\text{EPR}, \vec{n}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow, \vec{n}\rangle \otimes |\downarrow, \vec{n}\rangle - |\downarrow, \vec{n}\rangle \otimes |\uparrow, \vec{n}\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow, \vec{n}\rangle - |\downarrow\uparrow, \vec{n}\rangle). \quad (12.2)$$

Dieser Zustand hat Spin 0 (vgl. (9.53)), ist als rotationsinvariant und deshalb unabhängig von der Wahl von  $\vec{n}$

$$|\text{EPR}, \vec{n}\rangle = |\text{EPR}\rangle. \quad (12.3)$$

Die Messung der beiden Spins entlang der Richtungen der Einheitsvektoren  $\vec{a}$  und  $\vec{b}$  entspricht der Observablen

$$S(\vec{a}, \vec{b}) = \frac{\vec{\sigma}\vec{a}}{2} \otimes \frac{\vec{\sigma}\vec{b}}{2} = \frac{1}{4}\Sigma(\vec{a}, \vec{b}) \quad (12.4)$$

und die Berechnung des Erwartungswerts können wir mit der Wahl  $\vec{n} = \vec{a}$  oder  $\vec{n} = \vec{b}$  wesentlich vereinfachen

$$\begin{aligned} E(\vec{a}, \vec{b}) &= \langle \text{EPR} | \Sigma(\vec{a}, \vec{b}) | \text{EPR} \rangle = \langle \text{EPR}, \vec{b} | \Sigma(\vec{a}, \vec{b}) | \text{EPR}, \vec{b} \rangle = \\ &= \frac{1}{2} \left( \overbrace{\langle \uparrow, \vec{b} | \vec{\sigma}\vec{a} | \uparrow, \vec{b} \rangle}^{=\vec{a}\vec{b}} \overbrace{\langle \downarrow, \vec{b} | \vec{\sigma}\vec{b} | \downarrow, \vec{b} \rangle}^{=-1} - \langle \uparrow, \vec{b} | \vec{\sigma}\vec{a} | \downarrow, \vec{b} \rangle \overbrace{\langle \downarrow, \vec{b} | \vec{\sigma}\vec{b} | \uparrow, \vec{b} \rangle}^{=0} \right. \\ &\quad \left. - \langle \downarrow, \vec{b} | \vec{\sigma}\vec{a} | \uparrow, \vec{b} \rangle \overbrace{\langle \uparrow, \vec{b} | \vec{\sigma}\vec{b} | \downarrow, \vec{b} \rangle}^{=0} + \overbrace{\langle \downarrow, \vec{b} | \vec{\sigma}\vec{a} | \downarrow, \vec{b} \rangle}^{=-\vec{a}\vec{b}} \overbrace{\langle \uparrow, \vec{b} | \vec{\sigma}\vec{b} | \uparrow, \vec{b} \rangle}^{=1} \right) = -\vec{a}\vec{b}. \quad (12.5) \end{aligned}$$

Weil als Messergebnisse für  $\vec{\sigma}\vec{a}$  nur  $\pm 1$  möglich sind, interpoliert die Funktion  $E(\vec{a}, \vec{b})$  zwischen perfekter Antikorrelation für Messungen in gleicher Richtung

$$E(\vec{a}, \vec{a}) = -1 \quad (12.6a)$$

und perfekter Korrelation für Messungen in entgegengesetzter Richtung

$$E(\vec{a}, -\vec{a}) = 1. \quad (12.6b)$$

Wenn es gelingt, die beiden Spins zu separieren ohne den Zustand  $|\text{EPR}\rangle$  zu zerstören, bleibt die Korrelation (12.5) auch über große Abstände erhalten und wenn man später die Ergebnisse für „gleichzeitige“ Messungen<sup>1</sup> mit *zufällig* gewählten  $\vec{a}$  und  $\vec{b}$  zusammenführt, entsteht der Eindruck, die Messung am ersten Spin habe die Messung am zweiten Spin beeinflusst oder umgekehrt. Einstein war mit dieser „spukhaften Fernwirkung“ nicht einverstanden ...

### 12.1.1 Verborgene Parameter

Wenn man zulässt, daß es *verborgene Parameter*  $\lambda$  gibt, die den quantenmechanischen Zustand beschreiben, aber experimentell *nicht* zugänglich sind, kann man versuchen, die Korrelation (12.5) auch mit einer klassischen Wahrscheinlichkeitsdichte  $p$  für  $\lambda$  und einem Produkt von geeigneten Zufallsvariablen

$$\lambda \mapsto A(\vec{a}, \lambda) \quad (12.7a)$$

$$\lambda \mapsto B(\vec{b}, \lambda) \quad (12.7b)$$

realisieren

$$E_c(\vec{a}, \vec{b}) = \int d\lambda p(\lambda) A(\vec{a}, \lambda) B(\vec{b}, \lambda). \quad (12.8)$$

Dabei dürfen die Zufallsvariablen  $A$  und  $B$  nur die erlaubten Messwerte  $\pm 1$  für  $\vec{\sigma}\vec{a}$  und  $\vec{\sigma}\vec{b}$  annehmen.

Eine intuitiv naheliegende Möglichkeit für den verborgenen Parameter ist ein Einheitsvektor  $\vec{\lambda}$  mit

$$p(\vec{\lambda}) = \frac{1}{4\pi} \quad (12.9a)$$

$$A(\vec{a}, \vec{\lambda}) = \text{sgn}(\vec{\lambda}\vec{a}) = \frac{\vec{\lambda}\vec{a}}{|\vec{\lambda}\vec{a}|} \quad (12.9b)$$

<sup>1</sup>D. h. Messungen an Raumzeitpunkten mit raumartigem Abstand.

$$B(\vec{b}, \vec{\lambda}) = -A(\vec{b}, \vec{\lambda}). \quad (12.9c)$$

In der Tat werden damit die Korrelationen für (anti-)parallele Vektoren reproduziert

$$E_c(\vec{a}, \vec{a}) = \frac{1}{4\pi} \int_{S^2} d\vec{\lambda} \operatorname{sgn}(\vec{\lambda}\vec{a}) \left( -\operatorname{sgn}(\vec{\lambda}\vec{a}) \right) = -1 = E(\vec{a}, \vec{a}) \quad (12.10a)$$

$$E_c(\vec{a}, -\vec{a}) = \frac{1}{4\pi} \int_{S^2} d\vec{\lambda} \operatorname{sgn}(\vec{\lambda}\vec{a}) \left( -\operatorname{sgn}(-\vec{\lambda}\vec{a}) \right) = 1 = E(\vec{a}, -\vec{a}) \quad (12.10b)$$

Man kann also das Experiment so interpretieren, daß das System durch den verborgenen Parameter  $\vec{\lambda}$  charakterisiert ist und die Meßergebnisse für den ersten Spin *nur* von  $\vec{a}$  und die für den zweiten Spin *nur* von  $\vec{b}$  abhängen. Der *gemeinsame* verborgene Parameter wird bei der Präparation des Zustands  $|EPR\rangle$  ausgewürfelt und bleibt während der Separation bei den Spins. Das Ergebnis des Experiments am ersten Spin hängt *nicht* von der Ausrichtung des Experiments am zweiten Spin ab und umgekehrt. Man spricht von *lokalen Realismus*.

### 12.1.2 Bellsche Ungleichung

Das Problem ist, daß es keine Wahrscheinlichkeitsdichte  $p$  und Zufallsvariablen  $A$  und  $B$  gibt, die mit (12.8) das quantenmechanische Resultat (12.5) reproduzieren. Die perfekte Antikorrelation (12.6b) kann wegen  $|A(\vec{a}, \lambda)| = |B(\vec{b}, \lambda)| = 1$  nur realisiert werden, wenn

$$B(\vec{b}, \vec{\lambda}) = -A(\vec{b}, \vec{\lambda}). \quad (12.11)$$

Also gilt

$$E_c(\vec{a}, \vec{b}) = - \int d\lambda p(\lambda) A(\vec{a}, \lambda) A(\vec{b}, \lambda). \quad (12.12)$$

Daraus folgt mit  $(A(\vec{b}, \lambda))^2 = 1$

$$\begin{aligned} E_c(\vec{a}, \vec{b}) - E_c(\vec{a}, \vec{c}) &= - \int d\lambda p(\lambda) \left( A(\vec{a}, \lambda) A(\vec{b}, \lambda) - A(\vec{a}, \lambda) A(\vec{c}, \lambda) \right) \\ &= - \int d\lambda p(\lambda) A(\vec{a}, \lambda) A(\vec{b}, \lambda) \left( 1 - A(\vec{b}, \lambda) A(\vec{c}, \lambda) \right), \end{aligned} \quad (12.13)$$

die *Bellsche Ungleichung*

$$\left| E_c(\vec{a}, \vec{b}) - E_c(\vec{a}, \vec{c}) \right| \leq \int d\lambda p(\lambda) \left( 1 - A(\vec{b}, \lambda) A(\vec{c}, \lambda) \right) = 1 + E_c(\vec{b}, \vec{c}) \quad (12.14)$$

für Erwartungswerte in Realisierungen der QM mit lokalem verborgenen Parametern.

Um die Bellsche Ungleichung (12.14) für das experimentelle Ergebnis (12.5)

$$\left| \vec{a}\vec{b} - \vec{a}\vec{c} \right| = \left| E(\vec{a}, \vec{b}) - E(\vec{a}, \vec{c}) \right| \leq 1 + E(\vec{b}, \vec{c}) = 1 - \vec{b}\vec{c} \quad (12.15)$$

mit beliebigen Einheitsvektoren  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$  und  $\vec{c}$  zu überprüfen, genügt es exemplarisch

$$\vec{a}\vec{b} = 0 \quad (12.16a)$$

$$\vec{c} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\vec{a} + \vec{b}) \quad (12.16b)$$

wählen und findet mit

$$\left| \vec{a}\vec{b} - \vec{a}\vec{c} \right| = \frac{1}{\sqrt{2}} > \frac{\sqrt{2}-1}{\sqrt{2}} = 1 - \frac{1}{\sqrt{2}} = 1 - \vec{b}\vec{c} \quad (12.17)$$

daß sie verletzt ist. In der Zwischenzeit haben Experimente gezeigt, daß eine optimale Wahl von  $p$ ,  $A$  und  $B$  in (12.8) die Beobachtung (12.5) auch nicht im Rahmen der Meßgenauigkeit approximieren kann.

## 12.2 Dekohärenz<sup>2</sup>

Betrachten wir einen quantenmechanischen Meßprozeß. Die Zustände von zu messendem System und Meßapparat werden durch Vektoren in den Hilberträumen  $\mathcal{H}_S$  und  $\mathcal{H}_M$  beschrieben. Der Gesamthilbertraum ist dann

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_M. \quad (12.18)$$

Als System wählen wir wieder das QBit mit

$$|\psi\rangle = \psi_\uparrow |\uparrow\rangle + \psi_\downarrow |\downarrow\rangle \in \mathcal{H}_S \quad (12.19)$$

und als Meßapparat zunächst ein System mit drei Zuständen

$$|\phi\rangle = \phi_{+1} | +1\rangle + \phi_0 | 0\rangle + \phi_{-1} | -1\rangle \in \mathcal{H}_M. \quad (12.20)$$

Der Operator  $U : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$

$$U = P_\uparrow \otimes Q_{+1} + P_\downarrow \otimes Q_{-1} \quad (12.21a)$$

<sup>2</sup>Im Sommersemester 2019 aus Zeitgründen übersprungen.

mit  $U_i : \mathcal{H}_M \rightarrow \mathcal{H}_M$

$$Q_i = U_i + P_{-i} \quad (12.21b)$$

$$U_i = \sqrt{1-p}(P_0 + P_i) + \sqrt{p}(|i\rangle\langle 0| - |0\rangle\langle i|) \quad (12.21c)$$

$$P_i = |i\rangle\langle i| \quad (12.21d)$$

$$P_\uparrow = |\uparrow\rangle\langle \uparrow| \quad (12.21e)$$

$$P_\downarrow = |\downarrow\rangle\langle \downarrow| \quad (12.21f)$$

ist wegen

$$U_i^\dagger = \sqrt{1-p}(P_0 + P_i) - \sqrt{p}(|i\rangle\langle 0| - |0\rangle\langle i|) \quad (12.22)$$

und

$$U_i^\dagger U_i = 1 - P_{-i} = U_i U_i^\dagger \quad (12.23)$$

unitär

$$U^\dagger U = 1 = U U^\dagger. \quad (12.24)$$

Wenn sich das System im Zustand  $|\uparrow\rangle$ , bzw.  $|\downarrow\rangle$  befindet, transformiert  $U$  die Meßapparatur mit Wahrscheinlichkeit  $p$  aus dem Zustand  $|0\rangle$  in den Zustand  $|1\rangle$ , bzw.  $|-1\rangle$ . Somit ist er ein stark idealisiertes Modell für den quantenmechanischen Meßprozeß.

Wenn sich das Gesamtsystem vor der Messung in einem reinen oder gemischten Zustand, der von der faktorisierten Dichtematrix

$$\rho = \rho_S \otimes \rho_M \quad (12.25)$$

beschrieben wird, befindet, dann wird es nach der Messung im Zustand

$$\begin{aligned} \rho' &= U \rho U^\dagger \\ &= \left( P_\uparrow \otimes Q_{+1} + P_\downarrow \otimes Q_{-1} \right) \left( \rho_S \otimes \rho_M \right) \left( P_\uparrow \otimes Q_{+1}^\dagger + P_\downarrow \otimes Q_{-1}^\dagger \right) \\ &= P_\uparrow \rho_S P_\uparrow \otimes Q_{+1} \rho_M Q_{+1}^\dagger + P_\downarrow \rho_S P_\downarrow \otimes Q_{-1} \rho_M Q_{-1}^\dagger \\ &\quad + P_\uparrow \rho_S P_\downarrow \otimes Q_{+1} \rho_M Q_{-1}^\dagger + P_\downarrow \rho_S P_\uparrow \otimes Q_{-1} \rho_M Q_{+1}^\dagger \quad (12.26) \end{aligned}$$

sein. Wenn  $\rho$  ein reiner Zustand war, wird  $\rho'$  aufgrund der Unitarität von  $U$  wieder ein reiner Zustand sein. Wenn der Zustand des Gesamtsystems als Produkt geschrieben werden kann, ist der Erwartungswert des Tensorprodukts von Observablen das Produkt der Erwartungswerte

$$E(S \otimes M) = \text{tr}((S \otimes M)(\rho_S \otimes \rho_M)) = \text{tr}(S \rho_S \otimes M \rho_M) = \text{tr}(S \rho_S) \text{tr}(M \rho_M), \quad (12.27)$$

weil

$$\begin{aligned} \text{tr}(S \otimes M) &= \sum_{n,m} (\langle n| \otimes \langle m|) (S \otimes M) (|n\rangle \otimes |m\rangle) = \\ &= \sum_{n,m} \langle n|S|n\rangle \langle m|M|m\rangle = \sum_n \langle n|S|n\rangle \sum_m \langle m|M|m\rangle = \text{tr}(S) \text{tr}(M). \end{aligned} \quad (12.28)$$

Wenn die Meßapparatur nicht abgelesen wird, entspricht dies der trivialen Observablen  $\mathbf{1}$  und wir finden für die Observablen des Systems in faktorisierten Zuständen

$$E(S \otimes \mathbf{1}) = \text{tr}(S\rho_S) \text{tr}(\rho_M) \quad (12.29)$$

also wird das System in diesem Fall durch die *partielle Spur*

$$\text{tr}_M(S \otimes M) = \text{tr}(M) \cdot S \quad (12.30)$$

des Zustands beschrieben<sup>3</sup>

$$\rho_S = \text{tr}_M(\rho). \quad (12.31)$$

Damit

$$\begin{aligned} \rho'_S = \text{tr}_M(\rho') &= \text{tr} \left( Q_{+1} \rho_M Q_{+1}^\dagger \right) \cdot P_\uparrow \rho_S P_\uparrow + \text{tr} \left( Q_{-1} \rho_M Q_{+1}^\dagger \right) \cdot P_\downarrow \rho_S P_\uparrow \\ &+ \text{tr} \left( Q_{+1} \rho_M Q_{-1}^\dagger \right) \cdot P_\uparrow \rho_S P_\downarrow + \text{tr} \left( Q_{-1} \rho_M Q_{-1}^\dagger \right) \cdot P_\downarrow \rho_S P_\downarrow \end{aligned} \quad (12.32)$$

Wenn wir zur Vereinfachung annehmen, daß sich die Meßapparatur im reinen Zustand

$$\rho_M = P_0 = |0\rangle \langle 0| \quad (12.33)$$

befunden hat, können wir

$$\text{tr}(AP_0B) = \text{tr}(|0\rangle \langle 0| BA) = \langle 0|BA|0\rangle \quad (12.34)$$

benutzen und finden

$$\begin{aligned} \text{tr}_M(\rho') &= \langle 0|Q_{+1}^\dagger Q_{+1}|0\rangle \cdot P_\uparrow \rho_S P_\uparrow + \langle 0|Q_{+1}^\dagger Q_{-1}|0\rangle \cdot P_\downarrow \rho_S P_\uparrow \\ &+ \langle 0|Q_{-1}^\dagger Q_{+1}|0\rangle \cdot P_\uparrow \rho_S P_\downarrow + \langle 0|Q_{-1}^\dagger Q_{-1}|0\rangle \cdot P_\downarrow \rho_S P_\downarrow. \end{aligned} \quad (12.35)$$

Mit

$$\langle 0|Q_{\pm 1}^\dagger Q_{\pm 1}|0\rangle = \langle 0|U_{\pm 1}^\dagger U_{\pm 1}|0\rangle = \langle 0|0\rangle = 1 \quad (12.36)$$

<sup>3</sup>Diese Formeln sind für faktorisierte Dichtematrizen tautologisch, werden aber nicht-trivial, sobald Sie per Linearität der Spur auf Summen von Produkten erweitert werden.

und

$$\begin{aligned} \langle 0|Q_{\pm 1}^\dagger Q_{\mp 1}|0\rangle &= \langle 0|U_{\pm 1}^\dagger U_{\mp 1}|0\rangle = \\ &\langle 0|\left(\sqrt{1-p}P_0 + \sqrt{p}|0\rangle\langle \pm 1|\right)\left(\sqrt{1-p}P_0 + \sqrt{p}|\mp 1\rangle\langle 0|\right)|0\rangle = 1-p \end{aligned} \quad (12.37)$$

vereinfacht sich das Ergebnis zu

$$\mathrm{tr}_M(\rho') = P_\uparrow \rho_S P_\uparrow + P_\downarrow \rho_S P_\downarrow + (1-p)P_\downarrow \rho_S P_\uparrow + (1-p)P_\uparrow \rho_S P_\downarrow. \quad (12.38)$$

Im Fall  $p = 1$  ist die Messung effizient und die Dichtematrix des Systems wird diagonal

$$\rho'_S \xrightarrow{p \rightarrow 1} P_\uparrow \rho_S P_\uparrow + P_\downarrow \rho_S P_\downarrow. \quad (12.39)$$

Wenn wir die Meßapparatur ablesen und sie im Zustand  $|i\rangle$  antreffen, müssen wir die entsprechende Projektion  $P_i$  in die partielle Spur einfügen

$$\begin{aligned} \rho'_{S,i} &= \mathrm{tr}_M((\mathbf{1} \otimes P_i)\rho') \\ &= \mathrm{tr}\left(P_i Q_{+1} \rho_M Q_{+1}^\dagger\right) \cdot P_\uparrow \rho_S P_\uparrow + \mathrm{tr}\left(P_i Q_{-1} \rho_M Q_{-1}^\dagger\right) \cdot P_\downarrow \rho_S P_\downarrow \\ &\quad + \mathrm{tr}\left(P_i Q_{+1} \rho_M Q_{-1}^\dagger\right) \cdot P_\uparrow \rho_S P_\downarrow + \mathrm{tr}\left(P_i Q_{-1} \rho_M Q_{+1}^\dagger\right) \cdot P_\downarrow \rho_S P_\uparrow. \end{aligned} \quad (12.40)$$

Mit  $\rho_M = P_0$  verschwinden die Außerdiagonalelemente der Dichtematrix

$$\begin{aligned} \rho'_{S,i} &= |\langle i|Q_{+1}|0\rangle|^2 \cdot P_\uparrow \rho_S P_\uparrow + \langle i|Q_{-1}|0\rangle \langle i|Q_{+1}|0\rangle^* \cdot P_\downarrow \rho_S P_\uparrow \\ &\quad + \langle i|Q_{+1}|0\rangle \langle i|Q_{-1}|0\rangle^* \cdot P_\uparrow \rho_S P_\downarrow + |\langle i|Q_{-1}|0\rangle|^2 \cdot P_\downarrow \rho_S P_\downarrow \\ &= p\delta_{i,1} \cdot P_\uparrow \rho_S P_\uparrow + p\delta_{i,-1} \cdot P_\downarrow \rho_S P_\downarrow \end{aligned} \quad (12.41)$$

und es bleibt nur die Projektion auf den reinen Zustand, der gemessen wurde.

Wenn man versucht den idealisierten Operator  $U$  in (12.21a) durch eine Dynamik

$$U(t, t_0) = e^{-iH(t-t_0)/\hbar} \quad (12.42)$$

zu realisieren, wird die Wahrscheinlichkeit  $p$  notwendig zeitabhängig. In niedrig-dimensionalen Hilberträumen, wie in unserem Beispiel, wird diese Zeitabhängigkeit *immer* periodisch sein, sodaß der Fall eines konstanten  $p > 0$  nicht möglich ist. Andererseits wird ein Meßgerät, das man ablesen kann, immer *sehr* viele Zustände mit nahe beieinander liegenden Energien haben, weil es aus  $\mathcal{O}(10^{23})$  Teilchen besteht. Deshalb wird die Zeit in der  $p$  eine Periode durchläuft so schnell so groß, daß man von einer irreversiblen *Dekohärenz* reden kann.

Auf diese Weise entsteht aus der quantenmechanischen Beschreibung mit reinen und gemischten Zuständen und Wahrscheinlichkeitsamplituden eine klassische Beschreibung mit diagonalen Dichtematrizen und Wahrscheinlichkeiten.

### 12.2.1 Schrödingers Katzen und Kätzchen

Die unitäre Zeitentwicklung im Meßprozeß (12.26) bewirkt, daß die Zustände von makroskopischer Meßapparatur und zu messendem Quantensystem verschränkt werden. Damit entsteht die scheinbar paradoxe Situation, daß sich die Meßapparatur im Zeitintervall zwischen Messung und Ablesung des Meßergebnisses selbst in einer quantenmechanischen Superposition befindet.

Diese Paradoxie wird auf die Spitze getrieben durch den Mißbrauch der Vitalfunktionen einer Katze als Meßinstrument, die sich damit in einer Superposition

$$|\text{Katze}\rangle = \alpha |\text{lebendig}\rangle + \beta |\text{tot}\rangle \quad (12.43)$$

befindet. Erst das Ablesen des Ergebnisses durch eine weitere Messung mit einer „noch makroskopischeren“ Meßapparatur entscheidet zwischen  $|\text{lebendig}\rangle$  und  $|\text{tot}\rangle$ .

In der Praxis ist dies allerdings kein Problem. Um die Superposition aufrechtzuerhalten, müssen die Phasenbeziehungen zwischen allen Teilen der Meßapparatur sehr genau eingehalten werden und es zeigt sich in konkreten Modellen, daß schon eine kleine Anzahl von Freiheitsgraden ausreicht, die Superposition zu zerstören<sup>4</sup>. Diesen Übergang von Quantensystemen über Schrödinger-Kätzchen zu Schrödinger-Katzen kann experimentell studiert werden und die Vorhersagen der QM wurden eindrucksvoll bestätigt: Schrödinger-Kätzchen aus wenigen Photonen können von  $|\text{tot}\rangle$  zurück nach  $|\text{lebendig}\rangle$  oszillieren. Die Wiederkehrzeit wächst aber so schnell mit der Anzahl der Photonen an, daß sie bald nicht mehr meßbar ist.



*Yes, I can! ...  $|\text{lebendig}\rangle$  und  $|\text{tot}\rangle$  superponieren ...*

---

<sup>4</sup>Deshalb sind Quantencomputer so schwierig zu konstruieren!

—A—  
ABKÜRZUNGEN

**CSU** Cauchy-Schwarz Ungleichung

**DGL** Differentialgleichung

**OBdA** Ohne Beschränkung der Allgemeinheit

**ODE** Gewöhnliche Differentialgleichung

**ONB** Orthonormalbasis

**PDE** Partielle Differentialgleichung

**QM** Quantenmechanik

**SG** Schrödinger-Gleichung

## LITERATURVERZEICHNIS

- [Bö03] Manfred Böhm. Theoretische Physik III: Quantentheorie 1 (Universität Würzburg, Sommersemester 2003), 2003.
- [CTDL99] Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, and Franck Laloë. *Quantenmechanik*. de Gruyter, Berlin, 1999.
- [Dir58] P. A. M. Dirac. *The Principles of Quantum Mechanics*. Oxford University Press, 1958.
- [FLS65] Richard P. Feynman, Robert B. Leighton, and Matthew Sands. *The Feynman Lectures on Physics, Volume 3*. Addison-Wesley, 1965.
- [LL88] L. D. Landau and E. M. Lifschitz. *Lehrbuch der Theoretischen Physik: III Quantenmechanik*. Akademie-Verlag, Berlin, 1988.
- [Ohl16] Thorsten Ohl. Quantenfeldtheorie ii (Universität Würzburg, Sommersemester 2016), 2016.
- [Ohl17] Thorsten Ohl. Theoretische Physik I: Klassische Mechanik (Universität Würzburg, Wintersemester 2016/17), 2017.
- [Ohl18] Thorsten Ohl. Quantenfeldtheorie i (Universität Würzburg, Wintersemester 2017/18), 2018.
- [Sak94] Jun John Sakurai. *Modern Quantum Mechanics*. Addison-Wesley, 1994.
- [SF14] Leonard Susskind and Art Friedmann. *Quantum Mechanics, The Theoretical Minimum*. Basic Books, New York, 2014.
- [Str02] Norbert Straumann. *Quantenmechanik, Nichtrelativistische Quantentheorie*. Springer, Berlin Heidelberg, 2002.
- [Wei13] Steven Weinberg. *Lectures on Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, Cambridge — New York — Melbourne, 2013.

## INDEX

- Übergangsamplitude, 159  
Übergangsrate, 161  
Überlapp, 13  
ONB, 11
- adjungierter Operator, 19  
Anomalien, 42  
Antilinearität, 11  
Anzahloperators, 89  
Auswahlregeln, 117  
auszuprobieren, 3  
autonom, 39
- Basis, 11  
Bellsche Ungleichung, 184  
bit, 7  
Bohr Radius, 128  
Bosonen, 177  
Bra, 10, 12, 68  
Brakets, 10  
Bremsstrahlung, 5
- chaotisch, 2
- Darstellungssatz von Riesz, 12, 57  
Dekohärenz, 188  
diamagnetisch, 137  
Dichtematrix, 44, 70  
Differentialoperatoren, 60  
Dimension, 11  
direkte Summe, 112  
Distribution, 57  
Drehmatrizen, 106  
Drehoperator, 107
- effektivem Potential, 120  
Ehrenfest Theorem, 41, 73  
Eichinvarianz, 132  
Eichtransformationen, 134  
Eigenvektor, 21  
Eigenwert, 21  
Eins einschieben, 11  
entartet, 22, 33  
erhaltene Quantenzahlen, 150  
Erhaltungsgrößen, 41  
Erwartungswert, 34  
Erzeugungsoperator, 90
- Feinstrukturkonstante, 122  
Fermienergie, 181  
Fermionen, 177  
Fermis Goldene Regel, 162  
Flußquantisierung, 139
- gebundene Zustände, 95  
gemeinsame, 50  
Generator, 63  
Grundzustand, 88  
gute Quantenzahlen, 150
- Hamiltonoperator, 40, 72  
Hauptquantenzahl, 126  
Heisenbergbild, 156  
Heisenbergsche Unschärferelation, 50  
Hermite-Polynome, 90  
hermitisch konjugierte Matrix, 19  
Hilbertraum, 10  
Hundsche Regeln, 180
- Impulsoperator, 75

- Interferenz, 10  
inverse, 18  
irreduzibel, 112  
Isometrie, 18
- Ket, 10, 67  
kinetischen Impuls, 132  
klassische Mechanik, 1  
kohärenten Zustände, 93  
Kollaps der Wellenfunktion, 33, 71  
Kommutator, 41, 48, 87  
komplementär, 49  
konfluent hypergeometrische Funktion, 124  
Kontinuitätsgleichung, 81  
konvexe Summe, 45  
Korrespondenzprinzip, 42  
Kugelflächenfunktionen, 116  
Kummersche Differentialgleichung, 124
- linear, 16  
Linearität, 11  
lokalen Realismus, 184
- magnetischen Fluß, 139  
Matrixelement, 17  
minimalen Kopplung, 132
- Norm, 67  
normale Operatoren, 22
- Observable, 20, 33, 68  
Observablen, 2  
Operatoren, 16  
orthogonale Projektion, 20  
Ortsoperator, 54  
oszillatorisch, 94
- paramagnetisch, 137  
Parität, 97  
partielle Differentialgleichung, 84  
partielle Spur, 187
- Pauli-Matrizen, 23  
Phasenverschiebung, 100  
Plancksche Wirkungsquantum, 6, 40  
positiv, 44  
Projektionsoperator, 20  
Projektor, 20
- QBit, 7  
quadratintegrablen, 53  
Quantenfeldtheorie, 132, 177  
Quantenzahlen, 69
- radiale Schrödingergleichung, 119  
Reflexionskoeffizient, 101, 105  
reiner Zustand, 44  
Ritzsche Variationsprinzip, 164
- Schiebeoperatoren, 110  
Schrödingerbild, 156  
Schrödingergleichung, 39  
selbstadjungiert, 20  
Separationsansatz, 119  
sesquilinear, 10  
Spektrum, 68  
Spur, 35  
stationäre Schrödingergleichung, 72  
stationären Schrödingergleichung, 84  
statistische Mischung, 43  
Strahl, 14  
Streuzustände, 95  
Superauswahlregel, 10  
Superposition, 5  
Superpositionsprinzip, 10  
Symmetrie, 19  
Synchrotronstrahlung, 5
- Tensorprodukt, 50  
Term, 4  
Topologie, 140  
Transmissionskoeffizient, 101, 105
- unitär, 19

Unschärferelation, 49, 65

Vektorraum, 10

verborgene Parameter, 183

Vernichtungsoperators, 88

verschränkt, 51

Vertauschungsrelation, 65

Vielkörper, 166

virtuellen Zwischenzustände, 161

vollständig, 67

vollständigen Satz von vertauschen-  
den Observablen, 69

Vollständigkeit, 10

Wahrscheinlichkeit, 54, 71

Wahrscheinlichkeitsdichte, 54, 71, 81

Wahrscheinlichkeitsstromdichte, 81

Wechselwirkungsbild, 156

Wellenfunktion, 11, 53

Wellenfunktion im Ortsraum, 59

Wellenpaket, 60, 78

Zeitentwicklungsoperator, 38

Zeitumkehr, 18

Zerlegung der Einheit, 12

Zustand, 2

Zustandsdichte, 162

Zustandsvektor, 10