# Quantenmechanik

TU Berlin, SS 2009

Prof. Dr. T. Brandes

30. Juni 2009

## **INHALTSVERZEICHNIS**

1.	Einle	eitung		2
	1.1	Hohlra	aumstrahlung	2
		1.1.1	Bemerkungen	4
		1.1.2	Zustanddichte elektromagnetischer Wellen	4
	1.2	Weller	und Teilchen	5
		1.2.1	Einstein und der photoelektrische Effekt	5
		1.2.2	Materiewellen, Hamilton-Jacobi	6
		1.2.3	Wellenpakete	7
		1.2.4	Die Wellenfunktion	8
	1.3	Einsch	ub: Wahrscheinlichkeitsdichten	9
		1.3.1	Beispiele	9
		1.3.2	Erwartungswert und Varianz	10
	1.4	Die Ke	ontinuitätsgleichung	10
		1.4.1	Eindimensionaler Fall	11
		1.4.2	d = 3, Nabla-Kalkül	11
	1.5	Fourie	r-Transformation	12
		1.5.1	Orts- und Impulsraum (k-Raum), Zeit-Domäne und Frequenzraum	13
		1.5.2	Fouriertransformation: Beispiel Gauß-Funktion	14
		1.5.3	Einige Eigenschaften der Fourier-Transformation	14
		1.5.4	Lösung von pDGL mit Fouriertransformation	15
		1.5.5	Lösung der Schrödingergleichung	16
	1.6	Die De	elta-Distribution	17
		1.6.1	Eigenschaften der Delta-Distribution	17
		1.6.2	Delta-Distribution und Zustandsdichte	18
	1.7	Erste .	Anwendungen der Schrödinger-Gleichung, Tunneleffekt	19
		1.7.1	Stationäre Schrödinger-Gleichung	19
		1.7.2	Fall $d = 1$ , ebene Wellen	20
		1.7.3	Potential-Streuung	21
		1.7.4	Potential-Stufe	23
		1.7.5	Der Tunnel-Effekt	24
		1.7.6	Transfer-Matrix für beliebige Potentiale	25
		1.7.7	*Zusatzmaterial: Doppelmuldenpotential	27
	1.8	Ort ur	nd Impuls in der Quantenmechanik	30
		1.8.1	Korrespondenzprinzip	30

		1.8.2	Wellenfunktion im Impuls- und Ortsraum	32			
		1.8.3	Beispiel: Wellenpaket	34			
		1.8.4	Der Kommutator $[x, p]$	34			
2.	Grundzüge der Quantenmechanik $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $36$						
	2.1	Einfüh	urung in Hilberträume	36			
		2.1.1	Teilchen im Kastenpotential, Dirac-Notation(I)	36			
		2.1.2	Wiederholung: Fourier-Analyse	38			
		2.1.3	Vektorraum der Periodischen Funktionen	40			
		2.1.4	Linearität und Zeitentwicklung in der QM (I)	41			
	2.2	Der Hi	ilbertraum	43			
		2.2.1	Vektorräume	43			
		2.2.2	Normierte Räume, Banach-Räume	44			
		2.2.3	Unitäre Räume	46			
		2.2.4	Orthonormal systeme	48			
		2.2.5	Die Dirac-Notation (II)	50			
		2.2.6	Funktionenräume in der QM	52			
	2.3	Physik	alische Bedeutung der Fourierkoeffizienten	54			
		2.3.1	Diskretisierte Schrödinger-Gleichung	54			
		2.3.2	Die Wahrscheinlichkeitsamplituden	55			
	2.4	Der Ha	armonische Oszillator	56			
		2.4.1	Stationäre Zustände	57			
		2.4.2	Orthonormalität und Vollständigkeit	59			
	2.5	Linear	e Operatoren in der QM	60			
		2.5.1	Lineare Operatoren in Hilberträumen	60			
	2.6	Erzeug	ger und Vernichter, Phononen und Photonen	62			
		2.6.1	Auf- und Absteigeoperatoren $a^{\dagger}$ und $a$	62			
		2.6.2	Phononen und Photonen	64			
		2.6.3	Kohärente Zustände	64			
		2.6.4	* Zusatzmaterial: Verschobener harmonischer Oszillator	67			
	2.7	Das El	lektron im Magnetfeld	68			
		2.7.1	Das Prinzip der Eichinvarianz	68			
		2.7.2	Landau-Niveaus	70			
		2.7.3	Bedeutung des Vektorpotentials, Aharonov-Bohm-Effekt	73			
		2.7.4	Kann man das Vektorpotential wegtransformieren?	74			
	2.8	Das W	Vasserstoff-Atom	75			
		2.8.1	Kugelsymmetrische Potentiale in $d = 3 \dots \dots \dots \dots \dots$	75			
		2.8.2	Der Winkel-Anteil	77			
		2.8.3	Der Radial-Anteil	77			
	2.9	Der D	rehimpuls	79			
		2.9.1	Definitionen	79			
		2.9.2	Drehimpulsquadrat und Kugelflächenfunktionen	80			
		2.9.3	Gemeinsame Eigenfunktionen kommutierender Observablen	81			
			8				

		2.9.4	Drehimpuls-Kommutatorrelationen
	2.10	Der Sp	$\sin \ldots \ldots$
		2.10.1	Empirische Hinweise auf den Spin
		2.10.2	Pauli-Matrizen
		2.10.3	Spin-Hilbertraum $\mathbb{C}^2$
		2.10.4	Kombination von Spin- und Bahnzuständen
		2.10.5	Anwendung: Zeeman-Aufspaltung
		2.10.6	'Drehung der Stern-Gerlach-Apparatur' (I)
	2.11	Zeiten	twicklung in der Quantenmechanik (II)
		2.11.1	Unitärer Zeitentwicklungsoperator
		2.11.2	$Gruppeneigenschaft  \dots  \dots  \dots  \dots  \dots  91$
		2.11.3	Beispiel: Zweiniveausystem
		2.11.4	Schrödinger- und Heisenbergbild
	2.12	*Zusat	zmaterial: Time-dependent Hamiltonians (I)
		2.12.1	Spin $\frac{1}{2}$ in Magnetic Field $\dots \dots \dots$
		2.12.2	Landau-Zener-Rosen problem
	2.13	Symm	etrien in der Quantenmechanik
		2.13.1	Translation
		2.13.2	Rotationen
		2.13.3	'Drehung der Stern-Gerlach-Apparatur' (II)
		2.13.4	Symmetrien und Erhaltungsgrößen
h	\A/.'ı	Δ	(h
3.	vveit	erer Au	$\begin{array}{c} \text{fbau der Quantenmechanik} \dots \dots$
	3.1	Messu.	$\frac{102}{7}$
		$\begin{array}{c} 0 \cdot 1 \cdot 1 \\ 0 \cdot 1 \cdot 0 \end{array}$	Zusammenstenung der Axiome der QM
		3.1.2	Venter ali-hlasit and Management
		3.1.3	Primiel Desightener hei Orbite
	<u>ว</u> า	3.1.4 D: D:	beispiel: Projektoren bei Qubits
	3.2		Comicalità
		0.4.1 2.0.0	Gennischte Zustande
		0.4.4 2.0.2	Zeitentwicklung Lieuwille von Neumann Cleichung 112
		<b>১.∠.</b> ১ হ ০ ∡	* Ergöngung: Entropio thermische Zustände
	<u></u>	5.2.4 7	Erganzung: Entropie, thermische Zustande
	ა.ა	Zusam	Dipartita Systeme
		ე.ე.⊥ ეეე	Bipartite Systeme
		ე.ე.∠ ეეეე	Reduzierte Dichtematrix
		ე.ე.ე ეე∦	*Engenzung: Die Schmidt Zenlegung
	24	0.0.4 Doloob	Erganzung: Die Schmidt-Zerlegung
	3.4	Dekon	$ \begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$
		3.4.1 2.4.9	Liniuniung
	9 F	3.4.2 Ma=	Mikroskopische Dekonarenz-Modelle
	3.5	Messu:	$\operatorname{ngen}(\Pi)  \dots  \dots  \dots  \dots  \dots  \dots  \dots  \dots  \dots  $

	3.5.2	Modell für eine Messung
	3.5.3	Messung und Verschränkung
	3.5.4	Information und Kollaps
3.6	Versch	nränkung
	3.6.1	Korrelationen in Spin-Singlett-Zuständen
	3.6.2	Bellsche Ungleichungen
3.7	3.7 Zeitunabhängige Störungstheorie	
	3.7.1	Projektor-Methode
	3.7.2	Auswertung für die Eigenwerte
	3.7.3	Auswertung für die Zustände
	3.7.4	Parametrische Abhängigkeit von Spektren
3.8	Quant	enmechanik und Klassische Mechanik
	3.8.1	Die WKB-Näherung
	3.8.2	WKB und die Bohr-Sommerfeld-Quantisierung
	3.8.3	Feynman's Pfadintegral
	3.8.4	Poisson-Klammern und Kommutatoren
	3.8.5	Unkonventionelle Methoden: Bohmsche Quantenmechanik $\ .\ .\ .\ .$ 143
3.9	Zum V	Weiterstudium

Wiederum verwende ich für dieses Vorlesungsskript zur Quantenmechanik (Theoretische Physik II, Sommersemester 2009) eine Reihe von Textbüchern. Im Folgenden sind, wie im Skript selbst, meist nur die AUTORENNAMEN angegeben:

N. STRAUMANN ('Quantenmechanik', Springer): mathematisch solide, gute historische Einleitung. E. REBHAN: scheint gut zu sein. W. NOLTING und W. GREINER werden häufig für den Vorlesungsbetrieb an deutschen Unis verwendet.

Die \*-Kapitel sind weiterführendes Material, das auch nicht unbedingt für die Modulprüfung gelernt werden muß.

T. Brandes, Berlin 2009.

## 1. EINLEITUNG

## 1.1 Hohlraumstrahlung

Die Quantenmechanik (QM) kam am 14. Dezember 1900 mit dem Planckschen Vortrag über die Hohlraumstrahlung vor der physikalischen Gesellschaft in Berlin zur Welt - ein mehr oder weniger verzweifelter Versuch, Präzisions-Experimente von Lummer, Pringsheim, Kurlbaum, Paschen, Rubens und anderen zu erklären. In diesen Experimenten ging es um die spektrale Energiedichte u von elektromagnetischer Strahlung im thermischen Gleichgewicht. Bereits im 19. Jahrhundert hatte Kirchhoff aus thermodynamischen Überlegungen

$$u = u(\nu, T) \tag{1.1}$$

vorausgesagt, d.h. eine Abhängigkeit nur von der Frequenz  $\nu$  und der Temperatur T, aber nicht z.B. von der Form des ausstrahlenden 'schwarzen Körpers'. Das Auffinden der genauen Form der Funktion  $u = u(\nu, T)$ , die die beiden wichtigsten physikalischen Theorien im 19. Jhdt. involvierte (Elektrodynamik und Thermodynamik), brachte also den Durchbruch zu einer ganz neuen Theorie, nämlich der Quantentheorie - und damit gar nicht so, wie es sich Max Planck eigentlich erhofft hatte: er wollte die Thermodynamik nämlich mehr oder weniger aus der Elektrodynamik begründen.

Experimentell kam der Durchbruch durch Otto Lummer and Wilhelm Wien and der 'Physikalisch–Technischen–Reichsanstalt' (PTR) in Berlin, dem Vorläufer der heutigen PTB. Beide Forscher gingen auf die ursprüngliche Definition des Schwarzen Körpers zurück (thermisches Gleichgewicht mit den Wänden eines Behälters) und benutzten eine Kavität mit einem kleinen Loch, durch das die Strahlung austreten konnte.

Tatsächlich kannte man zu dieser Zeit bereits die theoretische Voraussagen**Wiens**, der 1893 ein *Skalengesetz* für  $u(\nu, T)$  gefunden hatte, nämlich

$$u(\nu, T) = \nu^3 f(\nu/T)$$
 (1.2)

mit einer (unbekannten) 'Skalenfunktion' f von nur einer Variablen, d.h. dem Verhältnis  $\nu/T$ . Daraus folgt unmittelbar das **Stefan–Boltzmann–Gesetz** 

$$U(T) := \int_0^\infty d\nu u(\nu, T) = \sigma T^4, \quad \sigma = const.$$
(1.3)

Wien schlug für die Form von f, analog zur Maxwellschen Geschwindigkeitsverteilung der Moleküle eines Gases, die folgende Form vor (**Wiensches Gesetz**):

$$u(\nu,T) = \frac{4\nu^3}{c^3} b \exp\left(-\frac{a\nu}{T}\right), \quad a,b = const,$$
(1.4)

wobe<br/>icdie Lichtgeschwindigkeit ist. Das Wiensche Gesetz war kompatibel mit den experimentellen Ergebnissen bis etwa zur Mitte des Jahres 1900. Lummer und sein Mitarbeiter Kurlbaum hatten sehr präzise Bolometer entwickelt, die auf dem von Samuel P. Langley 1880 in der Astrophysik benutzten Bolometer basierten. Weiterhin entwickelten Lummer und sein Mitarbeiter Pringsheim Schwarzkörper-Strahler, die in einem sehr großen Temperaturbereich zwischen -188°C und 1200°C (später bis 1600°C) operieren konnten.

Es stellte sich heraus, daß das Wiensche Gesetz (1.4) in ziemlich guter Übereinstimmung mit den experimentellen Daten war, aber es gab kleine Abweichungen bei hohen Temperaturen. Lummer und Pringsheim verbesserten daraufhin die Experimente bis in einen Wellenlängenbereich  $\lambda = c/\nu$  von  $\lambda = 8.3\mu$ m und zu Temperaturen T = 1650K, wo die Abweichungen sogar noch stärker wurden. Die Verwirrung wurde noch größer, als im Herbst 1900 Friedrich Paschen in Hannover gute Übereinstimmung seiner Daten mit (1.4) behauptete, und Max Planck ebenfalls die Herleitung des Wienschen Gesetzes aus thermodynamischen Erwägungen berichtete.

Die 'Bombe' kam dann mit neuen Messungen eines Gastwissenschaftlers an der PTR, Heinrich Rubens, der die Messungen bis hin zu  $\lambda = 50 \mu m$  ausdehnte. Die Abweichungen vom Wienschen Gesetz konnten dabei nicht länger wegdiskutiert werden. Es war im Gegenteil so, daß in diesem Grenzfall sehr langer Wellenlängen (der sich dann ironischerweise als der 'klassische Grenzfall' der QM herausstellte) Rubens sehr gute Übereinstimmung mit einem anderen Strahlungsgesetz fand, nämlich dem von Lord Rayleigh (**Rayleigh–Jeans–Gesetz**),

$$u(\nu, T) = \rho(\nu)\bar{E}(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}k_BT,$$
(1.5)

wobei  $k_B$  die Boltzmann-Konstante bezeichnet.

Rayleighs Gesetz folgte aus der **Zustanddichte**  $\rho(\nu) = 8\pi\nu^2/c^3$  (Dichte elektromagnetischer Eigenmoden pro Volumen und Frequenz) des elektromagnetischen Feldes im Innern einer Kavität, sowie dem thermodynamischen Theorem, das jedem Freiheitsgrad einer Schwingung im thermischen Gleichgewicht eine mittlere Energie  $\bar{E}(\nu) = k_B T$ (jeweils  $1/2k_B T$  für kinetische Energie und potentielle Energie), unabhängig von der Frequenz  $\nu$ .

Rubens berichtete Planck von dieser Entdeckung beim Tee (Kaffee?), und am selben Abend fand Planck, in einem verzweifelten Versuch, das Wiensche gesetz 'zu verbessern', eine Interpolations-Formel zwischen (1.4) und (1.5), **Plancksches Strahlungsgesetz** 

$$u(\nu,T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{\exp\left(\frac{h\nu}{k_BT}\right) - 1},\tag{1.6}$$

mit der neuen Konstante h (Plancksches Wirkungsquantum

$$h = 6.626 \times 10^{-34} Js. \tag{1.7}$$

Das Plancksche Strahlungsgesetz ergab eine exzellente Übereinstimmung mit allen experimentellen Daten.

#### 1.1.1 Bemerkungen

1. Statt *h* benutzt man heute meist  $\hbar = h/2\pi$ . Anstelle der Frequenz  $\nu$  benutzt man entsprechend die Winkelfrequenz  $\omega = 2\pi\nu$ . Wenn man  $\omega$  statt  $\nu$  benutzt, wird die spektrale Energiedichte  $w(\omega, T)$ , definiert als  $w(\omega, T)d\omega = u(\nu, T)d\nu$ . Mit  $d\omega = 2\pi d\nu$  ergibt das  $w(\omega, T) = \omega^2/(\pi^2 c^3) \times \hbar \omega/(\exp(\hbar \omega/kT) - 1)$ . Aufpassen beim Vergleich verschiedener Versionen: ein falscher Faktor  $2\pi$  kann ein Ergebnis um eine Größenordnung falsch machen!

2. Kosmische Hintergrundstrahlung (Urknall-Theorie) entspricht einer Temperatur  $T \approx 2.7$  K (R. H. Dicke und andere).

## 1.1.2 Zustanddichte elektromagnetischer Wellen

Wir betrachten folgende Riemann-Summe einer (zunächst beliebigen) Funktion f(x)

$$\lim_{L \to \infty} \frac{1}{L} \sum_{n=0}^{\infty} f(n/L) = \int_0^{\infty} f(x) dx.$$
(1.8)

Jetzt nehmen wir einen Kasten mit endlichem Volumen  $L^3$  mit stehenden Wellen als Funktion des Ortsvektors x der Form sin kx mit Wellenvektoren

$$\mathbf{k} = (\pi n_x/L, \pi n_y/L, \pi n_z/L) \tag{1.9}$$

haben (AUFGABE: begründe diese Form der Wellenvektoren). Wir betrachten nun wiederum eine Funktion  $f(\mathbf{k}) = f(k)$  dieser Wellenvektoren, die nur vom Betrag  $k \equiv |\mathbf{k}|$ abhängt (wobei wir etwas schlampig dasselbe Symbol f benutzen), und wie bei der Riemann-Summe oben möchten wir über alle  $\mathbf{k}$  summieren (z.B. um die gesamte Energie oder andere Größen auszurechnen). Hierfür benutzen wir

$$\lim_{L \to \infty} \frac{1}{L^3} \sum_{n_x, n_y, n_z = 0}^{\infty} f\left(\pi n_x / L, \pi n_y / L, \pi n_z / L\right) = \frac{1}{\pi^3} \int_0^\infty f(\mathbf{k}) dk_x dk_y dk_z, \quad (1.10)$$

d.h. im thermodynamischen Limes  $L \to \infty$  hat man

$$\lim_{L \to \infty} \frac{1}{L^3} \sum_{k_x, k_y, k_z > 0} f(k) = \frac{1}{\pi^3} \int_0^\infty f(k) dk_x dk_y dk_z = \frac{1}{\pi^3 2^3} \int_{-\infty}^\infty f(k) dk_x dk_y dk_z$$
$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty dk 4\pi k^2 f(k) = \int_0^\infty dk \frac{k^2}{2\pi^2} f(k).$$
(1.11)

Jetzt machen wir Gebrauch von der Dispersionsrelation elektromagnetischer Wellen im Vakuum,

$$\omega(\mathbf{k}) = c|\mathbf{k}|, \quad \text{Dispersions relation (EM-Wellen im Vakuum)}$$
(1.12)

und erhalten

$$\lim_{L \to \infty} \frac{1}{L^3} \sum_{k_x, k_y, k_z > 0} f(k) = \int_0^\infty d\omega \frac{\omega^2}{2\pi^2 c^3} f(\omega) \equiv \int_0^\infty d\omega \rho(\omega) f(\omega)$$

$$\rho(\omega) \equiv \frac{\omega^2}{2\pi^2 c^3}, \qquad (1.13)$$

wobei wir wieder (etwas schlampig) dasselbe Symbol für f(k) und  $f(\omega(k))$  verwenden. Hierbei ist  $\rho(\omega)$  die Zustandsdichte. Beispielweise können wir alle Zustände (d.h. alle stehenden Wellen) bis zu einem oberen Maximalwert ('cut-off')  $k_{\text{max}}$  abzählen, indem wir

$$f(k) = \theta(k_{\max} - k) \tag{1.14}$$

setzen, wobei  $\theta(x)$  die Stufenfunktion ist, also

$$\lim_{L \to \infty} \frac{1}{L^3} \sum_{k_x, k_y, k_z > 0, k < k_{\max}} = \int_0^{\omega_{\max}} d\omega \rho(\omega), \quad \omega_{\max} \equiv ck_{\max}.$$
 (1.15)

Entscheidend für konkrete Berechnungen ist, daß man im thermodynamischen Limes  $L \to \infty$  das Integral über  $\omega$  viel einfacher ausrechnen kann als die diskrete Summe über **k**.

Falls wir für jedes **k** *n* Zustände (z.B. für n = 2 verschiedene Polarisationsrichtungen) statt einem Zustand abzählen möchten, setzen wir einfach  $f(k) = n\theta(k_{\max} - k)$ . Den Faktor 2 schlägt man dann bei den EM Wellen häufig gleich der Zustandsdichte zu, die dann zu  $\rho_{\text{pol}}(\omega) \equiv \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}$  wird.

Wir werden später noch einmal für allgemeine Dispersionsrelationen auf den wichtigen Begriff der Zustandsdichte zurückkommen und ihn mit Hilfe der Diracschen Deltafunktion (Distribution) etwas präzisieren.

## 1.2 Wellen und Teilchen

Weitere Meilensteine auf dem Weg zur Entwicklung der QM sind bekannt. Zunächst ist das der **photoelektrische Effekt**, entdeckt von Hertz 1887 in Zinn-Platten, die sich positiv aufluden, wenn man sie mit UV-Licht bestrahlte. Elektronen treten aus der Metalloberfläche aus, falls die Frequenz des Lichts eine gewisse Schranke überschreitet. Weiterhin zeigten Experimente von Philipp Lenard, dass die kinetische Energie  $(1/2)mv^2$ der Elektronen unabhängig von der Strahlungsintensität war.

## 1.2.1 Einstein und der photoelektrische Effekt

In einer bahnbrechenden Arbeit von 1905 erklärte Einstein diesen Effekt: Die kinetische Energie der aus dem Metall emittierten Elektronen ist

$$E_{kin} = \frac{1}{2}mv^2 = h\nu - W > 0, \qquad (1.16)$$

wobei W die 'Austrittsarbeit' bezeichnet.

Einstein erklärte den Photoeffekt durch die Einführung diskreter *Lichtquanten* (Lichtquanten-Hypothese), d.h. Photonen mit Energie

$$E = h\nu. \tag{1.17}$$

Andererseits ist der relatvistischen Ausdruck für die Gesamtenergie eines Teilchens

$$E^2 = (mc^2)^2 + p^2c^2, (1.18)$$

und für Photonen, die sich mit Lichtgeschwindigkeit c bewegen, ist die Ruhmasse m gleich Null. Damit gilt

$$pc = h\nu \rightsquigarrow p = h/\lambda. \tag{1.19}$$

Mit dem Wellenvektor **k** mit Betrag  $|\mathbf{k}| = 2\pi/\lambda$ , der in die Richtung des Impulses **p** zeigt, bekommt man also die *Dispersionsrelation* zwischen Wellenvektor und Impuls

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k} \quad \text{Photonen.} \tag{1.20}$$

Insbesondere zeigt der photoelektrische Effekt also die Teilcheneigenschaften des Lichts, das doch andererseits nach dem Elektromagnetismus mit eine Welle sein soll (Interferenz etc.) Für eine ausführlichere Diskussion der Einsteinschen Arbeit vgl. wiederum STRAUMANN.

#### 1.2.2 Materiewellen, Hamilton-Jacobi

1923 erweiterte de Broglie den **Teilchen-Welle-Dualismus** auf materielle, massive Objekte. Aus theoretischer Sicht war das nicht ganz neu, wie wir aus der **Hamilton-Jacobi-Theorie** wissen (Eikonalgleichung, vgl. Mechanik-Skript). Man konnte also spekulieren, daß die klassischen Mechanik eine Art Grenzfall einer übergeordneten Theorie sein mußte, ähnlich wie die geometrische Optik ein Grenzfall der Wellenoptik im Grenzfall großer Wellenlängen ist.

Ein nicht-relativistisches, sich frei bewegendes Teilchen der Ruhmasse m und mit dem Impuls **p** hat kinetische Energie  $E = p^2/2m$ . Mit der Erweiterung des Teilchen-Welle-Dualismus auf massive Objekte kann ein Teilchen also als Welle aufgefaßt werden, wobei sich eine zu den Photonen analoge Dispersionsrelation postulieren läßt,

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$$
 massive Teilchen. (1.21)

Weitere experimentelle Ergebnisse (Streuung von Elektronen an Kristall-Oberflächen, Davisson und Germer) untermauerten diese Vermutung.

Die **de-Broglie-Beziehung** Gl. (1.21) ordnet einem Teilchen also einen Wellencharakter und einen Wellenvektor **k** zu, entsprechend  $E = h\nu = \hbar\omega = p^2/2m$  damit auch eine Frequenz bzw. eine Winkelfrequenz

$$\omega = \omega(\mathbf{k}) = \frac{\hbar k^2}{2m}$$
, Dispersionsrelation (Teilchen der Masse *m*. (1.22)

Die einfachste Form einer entsprechenden Welle ist eine ebene Welle,

$$\Psi(\mathbf{x},t) = Ae^{i(\mathbf{k}\mathbf{x}-\omega(\mathbf{k})t)}.$$
(1.23)

Hier tritt natürlich sofort ein Problem auf: wie soll man eine solche Welle interpretieren? Eine Welle ist ja en räumlich ausgedehntes Objekt, während ein Teilchen räumlich lokalisert ist, im Idealfall des Newtonschen Punktteilchens sogar unendlich scharf. Ein Ausweg kommt aus der Theorie der (klassischen EM Wellen) selbst: wie man am Auftreten von Interferenzeffekten, spielen bei Wellen Überlagerungen (Superpositionen) von ebenen Wellen eine zentrale Rolle. Das ist für uns nichts Neues - das ist nämlich genau das Prinzip der Fourieranalyse (Fourier-Reihen und Fourier-Transformation, vgl. Skript MMP).

#### 1.2.3 Wellenpakete

Superpositionen ebener de-Broglie-Wellen eines freien Teilchens der Energie  $E = p^2/2m$ haben also die Form

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk a(k) e^{i(kx - \omega(k)t)}, \quad \hbar\omega(k) = E = \hbar^2 k^2 / (2m), \quad (1.24)$$

wobei a(k) eine zunächst noch beliebige Funktion ist. Wir betrachten hier und im Folgenden zunächst alles in einer räumlichen Dimension (der *d*-dimensionale Fall geht völlig analog). Als Merkregel beachte man hier bereits, daß die zeitliche Entwicklung einer ebenen Welle  $e^{i(kx-\omega t)}$  ein *Minuszeichen* vor dem *t* hat.

Wir möchten die Zeitentwicklung des Wellenpakets  $\Psi(x,t)$  finden, d.h. seine Bewegungsgleichung. Differentiation von (1.24) nach der Zeit liefert

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = \int dka(k)\hbar\omega(k)e^{i(kx-\omega(k)t)} = \int dka(k)E(k)e^{i(kx-\omega(k)t)} = \\ = \int dka(k)\frac{\hbar^2k^2}{2m}e^{i(kx-\omega(k)t)} = -\frac{\hbar^2\partial_x^2}{2m}\int dka(k)e^{i(kx-\omega(k)t)} = \\ = -\frac{\hbar^2\partial_x^2}{2m}\Psi(x,t).$$
(1.25)

Bis hier haben wir nur ein n freies Teilchen betrachtet, das nur kinetische Energie  $E = p^2/2m = E(k) = (\hbar k)^2/2m$  hat. Im Allgemeinen ist die Gesamtenergie eines konservativen Systems die Summe aus kinetischer und potentieller Energie V(x). Wir *postulieren* deshalb die Verallgemeinerung des Falls V = 0,

$$i\hbar\partial_t\Psi(x,t) = \int dka(k)E(k)e^{i(kx-\omega(k)t)}, \quad V(x) = 0,$$
(1.26)

indem wir E(k) durch die Gesamtenergie E(k) + V(x) im Fall  $V(x) \neq 0$  ersetzen. Die Bewegungsgleichung lautet dann

$$i\hbar\partial_t\Psi(x,t) = \int dka(k)[E(k) + V(x)]e^{i(kx-\omega(k)t)} =$$
$$= [-\frac{\hbar^2\partial_x^2}{2m} + V(x)]\Psi(x,t).$$
(1.27)

Die Gleichung

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \left[-\frac{\hbar^2\partial_x^2}{2m} + V(x)\right]\Psi(x,t)$$
(1.28)

heißt Schrödinger-Gleichung und gehört zu den wichtigsten Gleichungen der Physik.

Bisher haben wir nur eine eindimensionale Version betrachtet. Die Verallgemeinerung auf höhere räumliche Dimensionen ist allerdings einfach: die Variablen x und k werden zu Vektoren  $\mathbf{x}$  und  $\mathbf{k}$ . Anstatt des Differentialoperators  $\partial_x^2$  hat man dann  $\partial_x^2 + \partial_y^2$  in d = 2 oder  $\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2$  in d = 3 Dimensionen (karteische Koordinaten), d.h. den Laplace-Operator  $\Delta = \partial_x^2 + \partial_y^2 + \dots$  Die Schrödinger-Gleichung wird dann zu

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{x},t) = \left[-\frac{\hbar^2\Delta}{2m} + V(\mathbf{x})\right]\Psi(\mathbf{x},t).$$
(1.29)

#### 1.2.4 Die Wellenfunktion

Die Berechnung der Zeitentwicklung des Wellenpakets ist natürlich keine 'Herleitung' der Schrödinger-Gleichung (SG). Letztere kann nicht hergeleitet, sondern nur plausibel gemacht werden. Weitere Eigenschaften der SG, wie z.B. die Voraussage des richtigen Spektrums für ein einfaches Modell des Wasserstoff-Atoms, zeigten, daß man sich auf dem richtigen Weg befand.

Die Deutung der Wellenfunktion selbst ist allerdings alles andere als trivial. Die Summe der experimentellen Erfahrung bezüglich komplementärer Wellen- und Teilchen-Phänomene führten schließlich zu einer konsistenten Deutung, die bis heute Bestand hat: der statistischen Interpretation der Wellenfunktion. Diese wird zum 1. Axiom der Quantenmechanik erhoben:

**Axiom 1:** Die Wellenfunktion  $\Psi(\mathbf{x}, t)$  eines Teilchens der Masse m, das sich in einem Potential  $V(\mathbf{x})$  bewegt, erfüllt die Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{x},t) = \left[-\frac{\hbar^2\Delta}{2m} + V(\mathbf{x})\right]\Psi(\mathbf{x},t).$$
(1.30)

Hierbei ist  $|\Psi(\mathbf{x},t)|^2 d^3 x$  die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen zur Zeit t im Volumenelement  $d^3 x$  um den Punkt  $\mathbf{x}$  zu detektieren. Die Wahrscheinlichkeit  $P(\Omega)$ , das Teilchen in einem endlichen Volumen  $\Omega$  zu finden, ist durch das räumliche Integral gegeben:

$$P(\Omega) = \int_{\Omega} d^3 x |\Psi(\mathbf{x}, t)|^2.$$
(1.31)

Es gilt die Normierungsbedingung

$$\int_{R^3} d^3 x |\Psi(\mathbf{x}, t)|^2 = 1.$$
(1.32)

Bemerkungen:

1. In dieser Form handelt es sich um die Schrödinger-Gleichung eines einzelnen Teilchens. Verallgemeinerungen auf N Teilchen sind möglich und werden später behandelt. Alle Wechselwirkungseffekte mit anderen Teilchen und mit der Umgebung stecken bei Gl. (1.30) im Potential  $V(\mathbf{x})$ , das z.B. durch äußere elektrische Felder erzeugt wird.

2. In der Schrödinger-Gleichung sind keine relativistischen Effekte berücksichtigt. Relativistische Effekte lassen sich durch entsprechend verallgemeinerte Gleichungen (Klein-Gordon-Gleichung, Dirac-Gleichung) berücksichtigen.

3. Die Normierungsbedingung (1.32) erfordert die **Quadrat-Integrabilität** der Wellenfunktionen. Dadurch kommt eine interessante mathematische Struktur ins Spiel, nämlich der Hilbertraum der quadrat-integrablen Funktionen. Wir werden uns weiter unten genauer mit dem Hilbertraum in der Quantenmechanik beschäftigen.

4. An dieser Stelle wird noch keine Aussage darüber gemacht, was 'messen' bzw. 'das Teilchen finden' genau bedeutet. Anschaulich stellen wir uns zunächst z.B. das Doppelspalt-Interferenzexperiment mit einem Schirm vor, dessen Schwärzung an einer Stelle  $\mathbf{x}$  eine Messung darstellt. Wir lassen nun viele Elektronen (oder andere Quantenteilchen) durch den Doppelspalt fliegen. Das Interferenzmuster auf dem Schirm läßt sich dann mit dem Betragsquadrat der Wellenfunktion statistisch interpretieren.

#### 1.3 Einschub: Wahrscheinlichkeitsdichten

Sei x eine Zufallsvariable mit kontinuierlichen Werten  $-\infty < x < \infty$ .

**Definition** Sei  $P(a \le x \le b)$  die Wahrscheinlichkeit für x, im Intervall [a, b] zu liegen. Die Wahrscheinlichkeitsdichte  $\rho(x)$  ist dann durch

$$P(a \le x \le b) = \int_{a}^{b} dx \rho(x) \tag{1.33}$$

definiert.

Es gilt

$$\rho(x) \ge 0, \quad \text{Positivität}$$
(1.34)

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \rho(x) = 1, \quad \text{Normierung} . \tag{1.35}$$

#### 1.3.1 Beispiele

1.3.1.1 Gauß-Verteilung

$$\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}$$
(1.36)

Hier überprüft man die Normierung mittels des Gauß-Integrals

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2 + bx} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{4a}}.$$
 (1.37)

## 1.3.1.2 $\chi^2$ -Verteilung mit *n* Freiheitsgraden

$$\rho(x) = \frac{1}{2^{n/2} \Gamma(n/2)} x^{n/2 - 1} e^{-x/2} \theta(x).$$
(1.38)

Hier überprüft man die Normierung mittels der Gamma-Funktion

$$\Gamma(z) \equiv \int_0^\infty dx x^{z-1} e^{-x}.$$
(1.39)

## 1.3.2 Erwartungswert und Varianz

**Definition** Sei x eine Zufallsvariable mit Wahrscheinlichkeitsdichte  $\rho(x)$  und f(x) eine beliebige Funktion von x. Der Mittelwert (Erwartungswert) der Funktion f ist dann

$$\langle f \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx \rho(x) f(x).$$
 (1.40)

Als Beispiel betrachten wir f(x) = x, dann ist

$$\langle x \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx \rho(x) x = \bar{x}$$
 (1.41)

der Mittelwert der Zufallsvariablen selbst.

Wir definieren weiterhin

**Definition** Sei x eine Zufallsvariable mit Wahrscheinlichkeitsdichte  $\rho(x)$ . Die Varianz (Streuung) von x ist dann durch

$$\langle \Delta x \rangle \equiv \langle (x - \bar{x})^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \tag{1.42}$$

definiert. Hierbei ist wieder  $\langle x^n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \rho(x) x^n$ .

Aufpassen also, ob das Quadrat innerhalb oder außerhalb der Klammer steht!

Weitere Informationen zur Wahrscheinlichkeitsrechnung und Statistik: z.B. BRON-STEIN.

AUFGABE: Berechne die Varianz der Gauß-Verteilung und der  $\chi^2$ -Verteilung mit n Freiheitsgraden!

## 1.4 Die Kontinuitätsgleichung

Die Kontinuitätsgleichung ist ein wichtiger Konsistenz-Check für die Schrödinger-Gleichung (SG) und die Interpretation von  $|\Psi|^2$  als eine (Wahrscheinlichkeits-)dichte.

## 1.4.1 Eindimensionaler Fall

Hierzu multiplizieren wir die SG mit  $\Psi^*(x, t)$ , der konjugiert komplexen WF. Eine weitere Gleichung erzeugen wir durch Multplikation der konjugiert komplexen SG mit  $-\Psi(x, t)$ , dann addieren wir beide mit dem Ergebnis

$$i\hbar(\Psi^*\partial_t\Psi + \Psi\partial_t\Psi^*) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\Psi^*\partial_x^2\Psi - \Psi\partial_x^2\Psi^*\right]$$
$$i\hbar\partial_t(\Psi\Psi^*) = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x \left[\Psi^*\partial_x\Psi - \Psi\partial_x\Psi^*\right].$$
(1.43)

Dies kann in Form einer Kontinuitätsgleichung geschrieben werden

$$\partial_t \rho(x,t) + \partial_x j(x,t) = 0 \qquad (1.44)$$

$$\rho(x,t) \equiv \Psi(x,t) \Psi^*(x,t)$$

$$j(x,t) := -\frac{i\hbar}{2m} \left[ \Psi(x,t)^* \partial_x \Psi(x,t) - \Psi(x,t) \partial_x \Psi^*(x,t) \right].$$

Neben der Wahrscheinlichkeitsdichte  $\rho(x, t)$  ist auch die Wahrscheinlichkeits-Stromdichte j(x, t) reell. Die Gl. (1.44) ist eine eindimensionale Version einer Kontinuitätsgleichung

$$\partial_t \rho(\mathbf{x}, t) + div \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = 0, \qquad (1.45)$$

wie man sie auch aus anderen Gebieten der Physik kennt.

Wir integrieren Gl. (1.44) von  $x = -\infty$  bis  $x = \infty$  and nehmen an, daß  $\Psi$  bei  $\pm \infty$  verschwindet, was plausibel ist. Dann folgt

$$\partial_t \int_{-\infty}^{\infty} dx \rho(x,t) = 0 \rightsquigarrow \int_{-\infty}^{\infty} dx \rho(x,t) = const.$$
 (1.46)

DISKUSSION

#### 1.4.2 d = 3, Nabla-Kalkül

Die entsprechende Herleitung für den Fall d = 3 geht am einfachsten mittel **Nabla-Kalkül** (BRONSTEIN): Der Nabla-Operator  $\nabla$  steht je nach Argument für die Operationen div, grad, rot gemäß

$$\nabla \times \mathbf{v} = \operatorname{rot} \mathbf{v}, \quad \operatorname{Vektorfeld} \mathbf{v}$$
 (1.47)

 $\nabla \mathbf{v} = \operatorname{div} \mathbf{v}, \quad \operatorname{Vektorfeld} \mathbf{v}$ (1.48)

 $\nabla f = \operatorname{grad} f$ , Skalare Funktion f. (1.49)

Produkte können formal mit der Produktregel ausgerechnet werden, z.B.

$$\operatorname{div}(f\mathbf{v}) = \nabla(f\mathbf{v}) = \mathbf{v}\nabla f + f\nabla \mathbf{v} = \mathbf{v}\operatorname{grad} f + f\operatorname{div} \mathbf{v}.$$
(1.50)

Für den Laplace-Operator gilt

$$\Delta f = \operatorname{div}\operatorname{grad} f = \nabla \cdot \nabla f \tag{1.51}$$

Damit läßt sich die dreidimensionale Version der Kontinuitätsgleichung leicht aus der SG herleiten (AUFGABE),

$$\partial_t \rho(\mathbf{x}, t) + \operatorname{div} \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = 0$$
 (1.52)

$$\rho(\mathbf{x},t) \equiv \Psi(\mathbf{x},t)\Psi^*(\mathbf{x},t) \tag{1.53}$$

$$\mathbf{j}(x,t) \equiv -\frac{i\hbar}{2m} \left[ \Psi(\mathbf{x},t)^* \nabla \Psi(\mathbf{x},t) - \Psi(\mathbf{x},t) \nabla \Psi^*(\mathbf{x},t) \right]. \quad (1.54)$$

## 1.5 Fourier-Transformation

Dieser Einschub entspricht dem Kapitel 3.4 des Skripts 'Mathematische Methoden'. Wir wiederholen hier die Fouriertransformation.

Wir kennen bereits die komplexe Fourier-Entwicklung einer periodischen Funktion f(x) = f(x + 2L) auf dem Intervall [-L, L],

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{i\frac{n\pi}{L}x}, \qquad (1.55)$$

und fragen nun, was für  $L \to \infty$  passiert. Heuristisch gilt folgendes: wir betrachten das Integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(k)dk = \lim_{L,N\to\infty} \sum_{n=-N}^{N} \frac{2\pi}{2L} f(k_n), \quad k_n = n\pi/L, \quad \text{Riemann-Summe .(1.56)}$$

Hierbei ist  $\frac{2\pi}{2L} \equiv \Delta k$  die Feinheit der Unterteilung der Riemann-Summe, die das Integral für  $L, N \to \infty$  immer besser approximiert. Wir haben also (wie bei der Zustandsdichte oben) den Übergang von der diskreten Summe im k-Raum zum Integral,

$$\lim_{L,N\to\infty} \frac{1}{2L} \sum_{n=-N}^{N} f(n\pi/L) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(k) dk, \qquad (1.57)$$

eine wichtige und in verschiedenen Gebieten (Quantenphysik, Festkörpertheorie, Strahlungstheorie,...) oft benutzte Formel. Beachte: Die Länge 2L des Intervalls geht im Vorfaktor im Limes  $L \to \infty$  in den Faktor  $2\pi$  über. In den Fourierreihen haben wir nun entsprechend den Übergang für  $L \to \infty$ ,

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{i\frac{n\pi}{L}x} = \frac{1}{2L} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left( \int_{-L}^{L} dx' f(x') e^{-i\frac{n\pi}{L}x'} \right) e^{i\frac{n\pi}{L}x}$$
(1.58)  

$$\rightarrow \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \left( \int_{-\infty}^{\infty} dx' f(x') e^{-ikx'} \right) e^{ikx}$$
  

$$\equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \tilde{f}(k) e^{ikx}.$$
(1.59)

Hierbei ist also der Koeffizient  $c_n$  mit diskretem Index n in den Koeffizienten  $\tilde{f}(k)$  mit kontinuierlichem Index k übergegangen. Beachte, dass wir im Integral, welches  $\tilde{f}(k)$ definiert, x' als Integrationsvariable benutzten, da x bereits als Buchstabe vergeben ist.

## Definition

$$\tilde{f}(k) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) e^{-ikx}, \quad \text{Fourier-Transformierte von } f(x)$$
(1.60)

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \tilde{f}(k) e^{ikx}, \quad \text{Fourier-Darstellung}$$
(1.61)

- Man bezeichnet die Fourier-Transformierte  $\tilde{f}(k)$  von f(x) manchmal auch als Fourier-Hintransformation und die Darstellung von f(x) mittels  $\tilde{f}(k)$  als Fourier-Rücktransformation.
- Beachte die Aufteilung des Faktors  $1/2\pi$ : in der Physik wird das meist so wie oben (unsymmetrisch) definiert. In der Mathematik definiert man das meist symmetrisch mit zwei Faktoren  $1/\sqrt{2\pi}$ .
- Ebenfalls beachte (und memoriere) man die Vorzeichen  $\mp ikx$  bei Hin- und Rücktransformation.
- Selbstverständlich haben wir hier überhaupt nicht über Konvergenz- und Existenzfragen gesprochen (LITERATUR: Forster, Analysis III).

#### 1.5.1 Orts- und Impulsraum (k-Raum), Zeit-Domäne und Frequenzraum

Ein in der Physik häufige Bezeichnung: Eine Funktion f(x) sei im Ortsraum definiert, d.h. x sei eine Ortsvariable. Dann bezeichnet man

$$f(x)$$
, Darstellung von  $f$  im Ortsraum (1.62)

$$f(k)$$
, Darstellung von  $f$  im Impulsraum (k-Raum) (1.63)

Beide Darstellungen sind äquivalent, da sie ja Fouriertransformierte (FT) voneinander sind. Die Bezeichnung *Impulsraum* kommt aus der de-Broglie-Beziehung  $p = \hbar k$  der Quantenmechanik mit  $\hbar \equiv h/2\pi$  und dem Planck'schen Wirkungsquantum h. Wenn es nicht um Quantenmechanik geht, spricht man besser vom k-Raum oder dem **Raum der** Wellenvektoren.

Analog definiert man die FT einer Funktion f(t) der Zeit,

$$\widetilde{f}(\omega) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt f(t) e^{i\omega t}, \quad \text{Fourier-Transformierte von } f(t)$$
(1.64)

$$f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \tilde{f}(\omega) e^{-i\omega t}, \quad \text{Fourier-Darstellung} .$$
(1.65)

Hierbei sind die Vorzeichen im Exponenten der FT im Vergleich zur FT vom Orts in den Impulsraum genau anders herum (Konvention). Man bezeichnet

- f(t), Darstellung von f in der Zeit-Domäne (1.66)
- $\tilde{f}(\omega)$ , Darstellung von f im Frequenzraum. (1.67)

Wiederum sind beide Darstellungen äquivalent. Manchmal spricht man auch von Originalbereich (z.B. f(t)) und Bildbereich (z.B.  $\tilde{f}(\omega)$ ).

Häufig hat man auch Fouriertransformationen in zwei Variablen, z.B. Ort und Zeit:

$$\tilde{u}(k,\omega) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx dt u(x,t) e^{i(\omega t - kx)}, \quad \text{Fourier-Transformierte von } u(x,t) 1.68$$

$$u(x,t) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dk d\omega \tilde{u}(k,\omega) e^{-i(\omega t - kx)}, \quad \text{Fourier-Darstellung} .$$
(1.69)

Jetz sehen wir auch den Sinn der Vorzeichen-Konvention: in der Fourier-Darstellung haben wir zeitabhängige ebene Wellen  $e^{-i(\omega t - kx)}!$ 

#### 1.5.2 Fouriertransformation: Beispiel Gauß-Funktion

Wir berechnen für  $x_0 = 0$  (Mittelwert Null) die Fouriertransformierte von p(x) (AUF-GABE)

$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \rightsquigarrow \tilde{p}(k) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx p(x) e^{-ikx} = e^{-\frac{1}{2}\sigma^2 k^2}.$$
 (1.70)

Die Fouriertransformierte einer Gauß-Funktion ist also bis auf den Vorfaktor wieder eine Gauß-Funktion. Es gilt also heuristisch folgende *Unschärfe-Relation*:

- Breite Gauß-Funktion p(x) im *Ortsraum*, d.h. große  $\sigma \rightsquigarrow$  schmale Fouriertransformierte  $\tilde{p}(k)$  im k-Raum.
- Schmale Gauß-Funktion p(x) im *Ortsraum*, d.h. kleine  $\sigma \rightsquigarrow$  breite Fouriertransformierte  $\tilde{p}(k)$  im k-Raum.

Je schärfer die Verteilung p(x) im Ortsraum, desto unschärfer (breiter) wird sie im k-Raum. Umgekehrt: je unschärfer die Verteilung p(x) im Ortsraum, desto schärfer (schmaler) wird sie im k-Raum.

AUFGABE: Berechne die Fouriertransformierte der Kastenfunktion  $f(-a \le x \le a) = 1$ , f(|x| > a) = 0, a > 0, und diskutiere das Ergebnis.

#### 1.5.3 Einige Eigenschaften der Fourier-Transformation

LITERATUR: BRONSTEIN. FORSTER Analysis III.

Wir betrachten eine Funktion f(t) und bezeichnen ihre FT mit Hilfe des Operators (Abbildung)  $\mathcal{F}: f \to \tilde{f}$ ,

$$\mathcal{F}[f](\omega) \equiv \tilde{f}(\omega) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt f(t) e^{i\omega t}.$$
(1.71)

Es gilt (AUFGABE)

$$\mathcal{F}[\alpha f + \beta g] = \alpha \mathcal{F}[f] + \beta \mathcal{F}[g], \quad \text{Linearität.}$$
 (1.72)

$$\mathcal{F}[f'](\omega) = -i\omega\mathcal{F}[f](\omega)$$
, Differentiation im Originalbereich. (1.73)

$$\mathcal{F}[f(t-t_0)](\omega) = e^{i\omega t_0} \mathcal{F}[f(t)](\omega), \quad \text{Verschiebungssatz.}$$
(1.74)

Häufig hat man es z.B. in der Signalverarbeitung mit sogenannten **Faltungsintegralen** zu tun,

$$(f_1 * f_2)(t) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} d\tau f_1(\tau) f_2(t-\tau), \quad \text{Faltungsintegral} . \tag{1.75}$$

So kann  $f_1(t)$  z.B. das Originalsignal darstellen, das aber durch eine Apparatur noch zeitverzögert und verändert wird, was durch die Integration über  $f_2$  zum Ausdruck kommt. Weitere physikalische Anwendungen solcher Faltungsintegrale sind Systeme, die mit einer Umgebung zeitverzögert wechselwirken, z.B. dissipative Systeme (mikroskopische Modelle für Reibung).

Für die FT von Faltungsintegralen gilt der wichtige **Faltungssatz** (Beweis als AUF-GABE)

$$\mathcal{F}[f_1 * f_2] = \mathcal{F}[f_1]\mathcal{F}[f_2] \tag{1.76}$$

Die Faltung im Originalbereich wird also zu einem gewöhnlichen Produkt im Bildbereich.

## 1.5.4 Lösung von pDGL mit Fouriertransformation

Wir lösen die Diffusionsgleichung in einer Dimension als Anfangswertproblem

$$\frac{\partial}{\partial t}n(x,t) = D\frac{\partial^2}{\partial x^2}n(x,t), \quad n(x,0) = n_0(x)$$
(1.77)

durch Fouriertransformation,

$$\frac{\partial}{\partial t}\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\tilde{n}(k,t)e^{ikx} = D\frac{\partial^2}{\partial x^2}\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\tilde{n}(k,t)e^{ikx}$$
(1.78)

Vertauschen von Differentiation und Integration führt einfach auf

$$0 = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \left[ \frac{\partial}{\partial t} \tilde{n}(k,t) + Dk^2 \tilde{n}(k,t) \right] e^{ikx}.$$
 (1.79)

Das diese Gleichung für alle x gelten muß, folgt

$$\frac{\partial}{\partial t}\tilde{n}(k,t) + Dk^2\tilde{n}(k,t) = 0$$
(1.80)

$$\rightsquigarrow \tilde{n}(k,t) = \tilde{n}(k,t=0)e^{-Dk^2t} = \tilde{n}_0(k)e^{-Dk^2t}.$$
 (1.81)

Für gegebenes Anfangsprofil  $n_0(x)$  wird  $\tilde{n}_0(k)$  durch FT berechnet und dann mittels Fourier-Rücktransformation n(x, t).

AUFGABE: Löse die Diffusionsgleichung in einer Dimension auf  $(-\infty, \infty)$ , Gl. (1.77), für  $n_0(x) = \frac{\bar{n}}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}$  mit reellem  $x_0$  und  $\bar{n}$ . Interpretiere das Ergebnis physikalisch.

#### 1. Einleitung

## 1.5.5 Lösung der Schrödingergleichung

Die Schrödingergleichung eines freien Teilchens der Masse m, das sich in einer Dimension bewegt, lautet

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t), \quad \Psi(x,0) = \Psi_0(x).$$
(1.82)

In dieser Form handelt es sich hierbei um ein **Anfangswertproblem** mit der Anfangsbedingung (AB)  $\Psi(x, 0) = \Psi_0(x)$ . Wie bei der Diffusionsgleichung können wir die Gleichung wieder durch Separationsansatz und mittels Fourier-Reihen auf einem endlichen Intervall lösen. Auf dem unendlichen Intervall  $(-\infty, \infty)$  geht das am einfachsten durch Fouriertransformation:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dk}{2\pi}e^{ikx}\tilde{\Psi}(k,t) = -\frac{\hbar^2\partial_x^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dk}{2\pi}e^{ikx}\tilde{\Psi}(k,t) = \frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dk}{2\pi}k^2e^{ikx}\tilde{\Psi}(k,t)$$
$$\Rightarrow 0 = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{dk}{2\pi}e^{ikx}\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\Psi}(k,t) - \frac{\hbar^2k^2}{2m}\tilde{\Psi}(k,t)\right]$$
$$\Rightarrow 0 = -i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\Psi}(k,t) - \frac{\hbar^2k^2}{2m}\tilde{\Psi}(k,t).$$
(1.83)

Die letzte Gleichung ist eine gewöhnliche DGL in der Zeittund kann deshalb einfach gelöst werden,

$$0 = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Psi}(k,t) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tilde{\Psi}(k,t)$$
  

$$\rightsquigarrow \quad \tilde{\Psi}(k,t) = \tilde{\Psi}(k,t=0)e^{-i\omega(k)t}, \quad \omega(k) \equiv \frac{\hbar k^2}{2m}.$$
(1.84)

Hier erscheint die AB  $\tilde{\Psi}(k, t=0)$  als Fourier-Transformierte (FT),

$$\tilde{\Psi}(k,t=0) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi(x,t=0) e^{-ikx} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi_0(x) e^{-ikx} = \tilde{\Psi}_0(k). \quad (1.85)$$

Mit der AB  $\Psi_0(x)$  kennt man auch ihre FT  $\tilde{\Psi}(k, t = 0)$ , mit der man also die Lösung  $\Psi(x, t)$  zu späteren Zeiten t > 0 durch Fourier-Rücktransformation berechnen kann:

$$\underline{\Psi(x,t)} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \tilde{\Psi}(k,t) e^{ikx} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx} e^{-i\frac{\hbar k^2 t}{2m}} \tilde{\Psi}_0(k)$$
(1.86)

AUFGABE: Löse die Schrödingergleichung in einer Dimension auf  $(-\infty, \infty)$  für eine Anfangsbedingung  $\Psi_0(x)$ , deren Betragsquadrat eine Gauß-Verteilung darstellt. Wiederhole die einzelnen Schritte in der obigen Herleitung. Interpretiere das Ergebnis physikalisch.

## 1.6 Die Delta-Distribution

Die Diracsche Delta-Distribution ('Delta-Funktion') ist in der QM ein außerordentlich nützliches Werkzeug.

LITERATUR: Forster, Analysis III. Im Grenzfall verschwindender Breite $\sigma$ der Gauß-Funktion definiert man zunächst heuristisch

$$\delta(x - x_0) \equiv \lim_{\sigma \to 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma^2}}, \quad \text{(Dirac) Delta-Distribution}$$
(1.87)

in dem Sinne, dass bei Integration über 'gutartige' Funktionen f(x)

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x - x_0) f(x) = \lim_{\sigma \to 0} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma^2}} f(x) = f(x_0)$$
(1.88)

gilt. Diese Operation ist ein Funktional (einer Funktion f wird ein Wert  $f(x_0)$  zugeordnet), aus historischen Gründen spricht man in der Physik aber von der (Dirac'schen) *Delta-Funktion*. Die Darstellung Gl. (1.87) ist nicht die einzige: es gilt z.B. auch

$$\delta(x - x_0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-ik(x - x_0)}.$$
(1.89)

AUFGABE: Beweis von Gl. (1.89) mittels der Definition der Fouriertransformation einer Funktion f(x).

#### 1.6.1 Eigenschaften der Delta-Distribution

Für die Darstellung der Delta-Distribution gilt (vgl. FORSTER III):

**Satz 1.** Set f(x) eine integrierbare Funktion mit Normierung  $\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) = 1$ . Dann gilt der 'Grenzwert' für 'gutartige' Testfunktionen  $\phi(x)$ 

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{\varepsilon} f\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) \phi(x) = \phi(0), \qquad (1.90)$$

also als 'Merkregel'

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \frac{1}{\varepsilon} f\left(\frac{x}{\varepsilon}\right). \tag{1.91}$$

AUFABE: Überprüfe einige der möglichen Darstellungen der Delta-Distibution.

**Satz 2.** Es gelten folgende weitere Eigenschaften der Delta-Distibution, vgl. auch den WIKIPEDIA-Artikel

$$\delta(ax) = \frac{\delta(x)}{|a|} \tag{1.92}$$

$$\delta(g(x)) = \sum_{i} \frac{\delta(x - x_i)}{|g'(x_i)|}, \qquad (1.93)$$

wobei im zweiten Fall die  $x_i$  die Nullstellen (einfache Nullstellen angenommen) der differenzierbaren Funktion g(x) sind. Für die mehrdimensionale Delta-Funktion gilt schließlich gilt der Zusammenhang mit der Stufenfunktion  $\theta(x)$ ,

$$\frac{d}{dx}\theta(x-x_0) = \delta(x-x_0). \tag{1.94}$$

#### 1.6.2 Delta-Distribution und Zustandsdichte

Wir werfen hier noch einmal einen Blick auf den Begriff 'Zustandsdichte'. Ein System (z.B. Oszillator-System) habe N Eigenzustände mit diskreten Frequenzen  $\omega_n$ . Wir definieren die Zustandsdichte  $\rho(\omega)$  dann als

$$\rho(\omega) \equiv \sum_{n=1}^{N} \delta(\omega - \omega_n).$$
(1.95)

Offensichtlich gilt dann

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \rho(\omega) = \sum_{n=1}^{N} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \delta(\omega - \omega_n) = N, \qquad (1.96)$$

d.h. wir erhalten durch Integration trivial die Gesamtzahl N der Zustände.

Interessanter sind nun sehr große Systeme, wo man den thermodynamischen Limes unendlicher Systemgröße betrachten möchte. Man dividiert dann üblicherweise durch das Systemvolumen. Für Photonen mit  $\omega_{\mathbf{k}} = \omega_{-\mathbf{k}}$  und Zuständen, die durch stehende Wellen der Form sin  $\mathbf{kx}$  mit Wellenvektoren  $\mathbf{k} = (\pi n_x/L, \pi n_y/L, \pi n_z/L)$  in einem Hohlraum mit Volumen  $L^3$  gegeben sind, hat man dann z. B.

$$\rho(\omega)_{\rm ph} \equiv \lim_{L \to \infty} \frac{1}{L^3} \sum_{k_x, k_y, k_z > 0} \delta(\omega - \omega_{\mathbf{k}}) = \frac{1}{\pi^3} \int_0^\infty dk_x dk_y dk_z \delta(\omega - \omega_{\mathbf{k}})$$
$$= \frac{1}{\pi^3 2^3} \int_{-\infty}^\infty dk_x dk_y dk_z \delta(\omega - \omega_{\mathbf{k}}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty dk 4\pi k^2 \delta(\omega - ck)$$
$$= \int_0^\infty dk \frac{k^2}{2\pi^2} \delta(\omega - ck) = \frac{\omega^2}{2\pi^2 c^3}, \qquad (1.97)$$

wobei wir im letzten Schritt

$$\delta(\omega - ck) = \frac{1}{c}\delta\left(\frac{\omega}{c} - k\right), \quad c > 0$$
(1.98)

benutzt und mit der Delta-Funktion das Integral 'geschlachtet' haben. Wir erkennen, daß diese Rechnung unsere altes Ergebnis der Zustandsdichte der Hohlraumstrahlung Gl. (1.13) in einfacher Weise reproduziert.

AUFGABEN:

1. Man betrachte im obigen Beispiel für die Photonen statt der stehenden Wellen sin  $\mathbf{kx}$  mit Wellenvektoren  $\mathbf{k} = (\pi n_x/L, \pi n_y/L, \pi n_z/L)$  jetzt laufende Wellen  $e^{i\mathbf{kx}}$  mit Wellenvektoren  $\mathbf{k} = (2\pi n_x/L, 2\pi n_y/L, 2\pi n_z/L)$ , wie sie sich für periodische Randbedingungen

(Torus) ergeben. Zeige, daß sich im Limes  $L \to \infty$  dieselbe Zustandsdichte ergibt. Hinweis: für laufende Wellen beschreiben die Wellenvektoren **k** und  $-\mathbf{k}$  unterschiedliche Zustände, und man muß sowohl über positive wie auch negative Komponenten von **k** summieren.

2. Berechne die Zustandsdichte für nichtrelativistische, freie Teilchen der Masse in d Dimensionen,

$$\rho_{\rm d}(\omega) \equiv \lim_{L \to \infty} \frac{1}{L^d} \sum_{\mathbf{k}} \delta(\omega - \omega_{\mathbf{k}}), \quad \hbar \omega_{\mathbf{k}} \equiv \frac{\hbar^2 |\mathbf{k}|^2}{2m}. \tag{1.99}$$

## 1.7 Erste Anwendungen der Schrödinger-Gleichung, Tunneleffekt

## 1.7.1 Stationäre Schrödinger-Gleichung

Die Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{x},t) = \left[-\frac{\hbar^2\Delta}{2m} + V(\mathbf{x})\right]\Psi(\mathbf{x},t) \equiv \hat{H}\Psi(\mathbf{x},t).$$
(1.100)

ist eine partielle DGL. Als ersten Lösungsschritt machen wir einen Separations ansatz, um die Zeit t abzuseparieren,

$$\Psi(\mathbf{x},t) = \psi(\mathbf{x})f(t). \tag{1.101}$$

Einsetzen in (1.100) liefert

$$\frac{i\hbar\partial_t f(t)}{f(t)} = \frac{\hat{H}\psi(\mathbf{x})}{\psi(\mathbf{x})} = E.$$
(1.102)

Beide Seiten von (1.102) hängen unabhängig entwerder nur von t oder von  $\mathbf{x}$  ab und müssen daher konstant = E sein. Lösen der Gleichung für f(t) ergibt  $f(t) = \exp{-iEt/\hbar}$  und damit

$$\Psi(\mathbf{x},t) = \psi(\mathbf{x})e^{-iEt/\hbar},\tag{1.103}$$

wobei E aus Dimensionsgründen eine Energie sein muß.

Um  $\psi(\mathbf{x})$  zu bestimmen, muß man also die stationäre Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H}\psi(\mathbf{x}) = E\psi(\mathbf{x}) \longleftrightarrow \left[-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + V(\mathbf{x})\right]\psi(\mathbf{x}) = E\psi(\mathbf{x})$$
(1.104)

lösen. Mathematisch gesehen ist die Gleichung  $\hat{H}\psi = E\psi$  mit dem Hamilton-Operator  $\hat{H}$  ein **Eigenwert-Problem**.

**Definition** Die zeitunabhängigen Lösungen  $\psi(\mathbf{x})$  von

$$\left[-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + V(\mathbf{x})\right]\psi(\mathbf{x}) = E\psi(\mathbf{x})$$
(1.105)

werden als stationäre Zustände bezeichnet.

Wir werden sehen, daß häufig stationäre Zustände für beliebiges E gar nicht existieren, sondern nur bestimmte Werte (Eigenwerte) von E möglich sind. In solchen Fällen sagt man, die Energie sei *quantisiert*.

### 1.7.2 Fall d = 1, ebene Wellen

Im einfachsten Fall in d = 1 ist das Potential  $V(x) \equiv 0$ , und man bekommt zwei linear unabhängige Lösungen der stationären SG in der Form ebener Wellen,

$$\frac{\hbar^2 \partial_x^2}{2m} \psi(x) = E\psi(x) \rightsquigarrow \psi_+(x) = e^{ikx}, \quad \psi_-(x) = e^{-ikx}$$
(1.106)

$$k = \sqrt{(2m/\hbar^2)E} \tag{1.107}$$

mit positiver Energie E > 0. Alternativ schreiben wir die Lösungen als

$$\psi_k(x) = e^{ikx}, \quad k = \pm \sqrt{(2m/\hbar^2)E}.$$
 (1.108)

Diese Lösungen beschreiben ebene Wellen mit festem Wellenvektor k und deshalb and festem Impuls  $p = \hbar k$ , die Dispersionsrelation ist

$$E = E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$
 (1.109)

Es gibt keine physikalisch sinnvolle Lösung mit negativer Energie E < 0, denn dann würde die Wellenfunktion unendlich entweder für  $x \to \infty$  oder  $x \to -\infty$  werden.

Wir erkennen ein Problem, denn  $\psi_k(x)$  in Gl. (1.108) läßt sich nicht normieren, wie es sich normalerweise für Wellenfunktionen gehört:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_k(x)|^2 = \infty.$$
(1.110)

Eine praktische Lösung besteht darin, ein großes, aber endliches Intervall [-L/2, L/2]statt der gesamten x-Achse zu betrachten, und damit die WF gemäß

$$\psi_k = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx}, \quad \int_{-L/2}^{L/2} dx |\psi_k(x)|^2 = 1$$
 (1.111)

zu normieren. Man kann dann weiterhin das Interval zu einem Ring zusammenschließen und an der Schnittstelle **periodische Randbedingungen fordern**. Die Forderung nach Stetigkeit von  $\psi_k$  führt dann auf eine Quantisierung der möglichen Werte für k,

$$\psi_k(L/2) = \psi_k(-L/2) \rightsquigarrow 1 = e^{ikL} \rightsquigarrow k_n = \frac{2\pi n}{L}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, ...,$$
(1.112)

d.h. einer diskreten Menge möglicher k-Werte und damit diskreten Energien  $E_n = \hbar^2 k_n^2/2m$ . Für jede Energie  $E = E_n > 0$  gibt es zwei linear unabhängige Lösungen mit Wellenvektor  $2\pi n/L$  und  $-2\pi n/L$ . Man sagt, der Energie-Wert  $E_n$  sei zweifach

21

entartet. Wenn L sehr groß wird, bleiben die möglichen Werte für k immer noch diskret, aber ihr Abstand wird immer kleiner, und im Grenzfall  $L \to \infty$  hat man wieder ein Kontinuum an Energiewerten. Im Folgenden wird die Normierung der Wellenfunktion selbst keine Rolle spielen, und wir werden mit kontinuierlichen k-Werten arbeiten.

Die SG für ein konstantes Potential V(x) = V

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V\right]\psi(x) = E\psi(x)$$
(1.113)

hat ebenfalls zwei linear unabhängige Lösungen

$$\psi_k(x), \quad k \equiv \pm \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left(E - V\right)}. \tag{1.114}$$

Jetzt müssen wir allerdings eine Fallunterscheidung vornehmen:

1. Falls E > V, ist k reell und die zwei  $\psi_k(x)$  beschreiben ebene Wellen, die in die positive bzw. die negative x-Richtung laufen. Solche Lösungen heißen auch oszillatorische Lösungen.

2. Falls E < V, wird k rein imaginär, und wir schreiben

$$k = i\kappa \equiv i\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left(V - E\right)} \tag{1.115}$$

mit reellem  $\kappa$ . Die zwei l. u. Lösungen sind dann die Exponential-Funktionen  $e^{\pm\kappa x}$ . Für festes E ist die allgemeine Lösung  $\psi(x)$  der stationären SG also eine **Superposition**, d.h. eine Linearkombination

$$\psi(x) = ae^{ikx} + be^{-ikx} \tag{1.116}$$

mit k entweder reell oder imaginary,  $k = i\kappa$ . Weil die WF eine komplexwertige Funktion ist, können die Koeffizienten a, b komplexe Zahlen sein. Man beachte, daß es keine Linearkombinationen vom Typ  $ae^{ikx} + be^{-\kappa x}, a, b \neq 0$  geben kann. 3. Falls E = V, lautet die SG ja  $\frac{d^2}{L^2}\psi(x) = 0$  mit der Lösung

$$dx^2 + (x)$$

$$\psi(x) = a + bx. \tag{1.117}$$

(SONDERFALL).

#### 1.7.3 Potential-Streuung

Wir betrachten nun ein stückweise stetiges Potential V(x) und die Lösungen der SG in den jeweiligen Intervallen,

$$V(x) = \begin{cases} V_1, & & \\ V_2, & & \\ V_3, & & \\ \dots & \dots & \\ V_N & & \\ V_{N+1} & & \\ \end{cases} \psi(x) = \begin{cases} a_1 e^{ik_1 x} + b_1 e^{-ik_1 x}, & -\infty < x \le x_1 \\ a_2 e^{ik_2 x} + b_2 e^{-ik_2 x}, & x_1 < x \le x_2 \\ a_3 e^{ik_3 x} + b_3 e^{-ik_3 x}, & x_2 < x \le x_3 \\ \dots & \dots & \dots \\ a_N e^{ik_N x} + b_N e^{-ik_N x}, & x_{N-1} < x \le x_N \\ a_{N+1} e^{ik_{N+1} x} + b_{N+1} e^{-ik_{N+1} x}, & x_N < x < \infty \end{cases}$$

$$(1.118)$$

wobei

$$k_j = \sqrt{(2m/\hbar^2) (E - V_j)}.$$
(1.119)

(SKIZZE!) Wir betrachten den Fall  $E > V_1, V_{N+1}$  so daß  $k_1$  und  $k_{N+1}$  reelle Wellenvektoren sind und  $\psi(x)$  laufende, ebene Wellen außerhalb des *Streugebiets*  $[x_1, x_N]$  beschreiben.

Wir wollen nun Lösungen der SG unter der **Streubedingung**  $b_{N+1} = 0$  bestimmen, d.h. wir suchen Lösungen, die auf der rechten Seite des Streugebiets von der Form  $a_{N+1}e^{ik_{N+1}x}$  sind, d.h. dort nach rechts laufen, aber keinen Anteil, der von rechts einläuft. Auf der linken Seite andererseits soll die Welle die Form  $a_1e^{ik_1x}+b_1e^{-ik_1x}$  haben, d.h. eine Superposition einer nach rechts einlaufenden (incoming) und einer nach links laufenden (reflektierten, outgoing) Welle. Das Ziel ist es, den reflektierten und den transmittierten Anteil der Welle zu bestimmen, d.h. die Koeffizienten  $b_1$  auf der linken Seite und  $a_{N+1}$ auf der rechten Seite.

<u>AUFGABE 1:</u> Wir fordern Stetigkeit von  $\psi(x)$  und seiner Ableitung  $\psi'(x)$  bei  $x = x_1$ . 1. Zeige, daß für Lösungen der stationären SG in d = 1 für ein endliches Potential V(x) Stetigkeit der Ableitung  $\psi'(x)$  an allen Stellen x gelten muß.

2. Zeige nun, daß sich zwei Gleichungen ergeben, die sich in der Matrix-Form

$$\mathbf{u}_1 = T^1 \mathbf{u}_2, \quad \mathbf{u}_i = \begin{pmatrix} a_i \\ b_i \end{pmatrix}, \quad i = 1, 2, \tag{1.120}$$

 $\operatorname{mit}$ 

$$T^{1} = \frac{1}{2k_{1}} \begin{pmatrix} (k_{1} + k_{2})e^{i(k_{2} - k_{1})x_{1}} & (k_{1} - k_{2})e^{-i(k_{1} + k_{2})x_{1}} \\ (k_{1} - k_{2})e^{i(k_{2} + k_{1})x_{1}} & (k_{1} + k_{2})e^{-i(k_{2} - k_{1})x_{1}} \end{pmatrix}.$$
 (1.121)

schreiben lassen.

<u>AUFGABE 2:</u> Zeige, daß sich die Wellenfunktion auf der linken Seite mit der auf der rechten Seite des Streugebiets mit Hilfe der **Transfer-Matrix** M verbinden läßt, wobei

$$\mathbf{u}_1 = M \mathbf{u}_{N+1}, \quad M = T^1 T^2 \dots T^N$$
 (1.122)

und die  $T^i$  sowie  $\mathbf{u}_{N+1}$  analog zu oben zu definieren sind. <u>AUFGABE 3:</u> Benutze die Stromdichte

$$j(x) \equiv -\frac{i\hbar}{2m} \left[ \psi(x)^* \partial_x \psi(x) - \psi(x) \partial_x \psi^*(x) \right] = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left[ \psi^*(x) \psi'(x) \right], \quad (1.123)$$

und zeige

$$j(x > x_N) = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im}(ik_{N+1}|a_{N+1}|^2) = |a_{N+1}|^2 \frac{\hbar k_{N+1}}{m}$$
  
$$j(x < x_1) = \frac{\hbar k_1}{m} [|a_1|^2 - |b_1|^2].$$
(1.124)

Die Stromdichte  $j(x > x_N)$  beschreibt eine Fluß rechts vom Streugebiet nach  $x \to \infty$ . Auf der anderen Seite ist  $j(x < x_1)$  auf der linken Seite die Differenz eines einfließenden, positiven Stroms (einfallende Teilchen) und eines ausfließenden, negativen Stroms (reflektierte Teilchen).

<u>AUFGABE 4</u>: Definiere den Transmissions- Koeffizienten T als das Verhältnis vom Strom rechts vom Streugebiet zum einfließenden Strom links vom Streugebiet, d.h.

$$T \equiv \frac{k_{N+1}}{k_1} \left| \frac{a_{N+1}}{a_1} \right|^2.$$
(1.125)

Zeige damit, daß

$$T = \frac{k_{N+1}}{k_1} \frac{1}{|M_{11}|^2} \tag{1.126}$$

gilt, wobei  $M_{11}$  das obere linke Matrixelement der Transfer-Matrix M ist. AUFGABE 5: Definiere den Reflexions-Koeffizienten und zeige die Form

$$R \equiv \left|\frac{b_1}{a_1}\right|^2 = \left|\frac{M_{21}}{M_{11}}\right|^2,$$
 (1.127)

wobei  $M_{21}$  das untere linke Matrixelement der Transfer-Matrix M ist. Zeige weiterhin durch Benutzung von Gl. (1.124) die Gleichung

$$T + R = 1.$$
 (1.128)

Im Folgenden wenden wir diese Ergebnisse an, um den Transmissionskoeffizienten T, Gl.(1.126), für zwei Beispiele zu berechnen

## 1.7.4 Potential-Stufe

Die Stufe bei  $x_1 = 0$  ist der Fall N = 1,  $V_1 = 0$  und  $V_2 = V > 0$  in (1.118). a) Für E > V gilt  $k_1 = \sqrt{(2m/\hbar^2)E}$  und  $k_2 = \sqrt{(2m/\hbar^2)(E - V)}$ , und die Transfer-Matrix  $T_1 = M$ , Gl. (1.121) liefert

$$M_{11} = (T_1)_{11} = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{k_2}{k_1} \right) e^{i(k_2 - k_1)x_1} = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{k_2}{k_1} \right).$$
(1.129)

Daraus erhält man T und R,

$$T = \frac{k_2}{k_1} \frac{1}{|M_{11}|^2} = \frac{4\sqrt{1 - (V/E)}}{(1 + \sqrt{1 - (V/E)})^2}$$
$$R = \left|\frac{M_{21}}{M_{11}}\right|^2 = \left|\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right|^2 = \frac{(1 - \sqrt{1 - (V/E)})^2}{(1 + \sqrt{1 - (V/E)})^2},$$
(1.130)

insbesondere gilt

$$T + R = 1$$
 (1.131)

b) Für E < V wird  $k_2$  imaginär und es gibt keine laufenden Wellen in der klassisch verbotenen Zone x > 0, denn hier reicht die Gesamtenergie nicht aus! Mit  $k_2 = i\kappa_2$ ,  $\kappa_2 = \sqrt{(2m/\hbar^2)|E - V|}$ , wird die WF rechts  $\psi(x > 0) = a_2 e^{-\kappa_2 x} + b_2 e^{\kappa_2 x} = a_2 e^{-\kappa_2 x}$ , denn  $b_2 = 0$  (Streubedingung). Es folgt für den Reflexionskoeffizienten

$$R = \left| \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right|^2 = \left| \frac{k_1 - i\kappa_2}{k_1 + i\kappa_2} \right|^2 = 1.$$
(1.132)

Da es für x > 0 keine laufenden Wellen im Fall E < V gibt, läßt sich Gl. (1.126) für den Transmissionskoeffizienten T nicht mehr direkt anwenden. Die Teilchenstromdichte Gl. (1.123) wird jedoch j(x > 0 = 0, was T = 0 bedeutet. Wiederum gilt also T + R = 1, wie es sein muß.

#### 1.7.5 Der Tunnel-Effekt

Der Tunnel-Effekt (F. Hund, zwanziger Jahre) ist eins der frühen, spektakulären Ergebnisse der QM. Er liegt zahlreichen Phänomenen in Physik und Chemie zugrunde, bis hin zu Anwendungen wie der Tunnel-Diode.

In unserem Transfermatrix-Formalismus betrachten wir eine Rechteck-Barriere (SKIZ-ZE). In Gl. (1.118), setzen wir N = 2,  $x_2 = -x_1 = a$ ,  $V_1 = V_3 = 0$ , und  $V_2 = V > 0$ .

Ausmultiplizieren der Matrizen  $T_1$  and  $T_2$  liefert  $M = T_1T_2$  (AUFGABE)

$$M = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix}$$
  

$$M_{11} = e^{2ik_1a} \left[ \frac{k_1^2 + k_2^2}{2k_1k_2} i \sin(-2k_2a) + \cos(2k_2a) \right] = M_{22}^*$$
  

$$M_{12} = \frac{k_1^2 - k_2^2}{4k_1k_2} 2i \sin(2k_2a) = -M_{21}.$$
(1.133)

Fall: E > V.

Hier sind  $k_1$  und  $k_2$  beide reell, und man erhält (AUFGABE)

$$T = \frac{1}{\frac{(k_1^2 - k_2^2)^2}{4k_1^2 k_2^2} \sin^2(2k_2 a) + 1} = \frac{1}{1 + \frac{\sin^2(2\alpha\sqrt{E/V - 1})}{4(E/V)(E/V - 1)}}, \quad \alpha = \sqrt{\frac{2mVa^2}{\hbar^2}}.$$
 (1.134)

Fall: E < V.

Hier wird  $k_2 = i\kappa_2 \equiv i\sqrt{(2m/\hbar^2)(V-E)}$  imaginär, und man erhält (AUFGABE)

$$T = \frac{1}{\frac{(k_1^2 + \kappa_2^2)^2}{4k_1^2 \kappa_2^2} \sinh^2(2\kappa_2 a) + 1} = \frac{1}{1 + \frac{\sinh^2(2\alpha\sqrt{1 - E/V})}{4(E/V)(1 - E/V)}}, \quad \alpha = \sqrt{\frac{2mVa^2}{\hbar^2}}.$$
 (1.135)

AUFGABE: Skizziere den Transmissionskoeffizienten T(E) als Funktion der Energie.

Für bestimmte Werte von E wird T(E) = 1. Die Bedingung für diese **Transmissions-Resonanzen** hat die Form

$$\sin(2k_2a) = 0 \rightsquigarrow 2k_2a = n\pi \rightsquigarrow E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m(2a)^2} + V.$$
(1.136)

Die Energien  $E_n$  sind gerade die möglichen Energiewerte eines Teilchens der Masse m in einem Kasten der Breite 2a mit unendlich hohen Wänden, dessen Energie-Nullpunkt um V nach oben verschoben ist.

Für Energien E < V wächst T mit der Energie E an. Insbesondere ist die WF unterhalb der Barriere, d.h. im Intervall [-a, a], von Null verschieden: man hat also eine endliche Wahrscheinlichkeit, das Teilchen unter der Barrier zu finden. Ein klassisches Teilchen kann sich nirgends befinden, wo seine potentielle Energie größer als seine Gesamtenergie wäre.

#### 1.7.6 Transfer-Matrix für beliebige Potentiale

Die Transfer-Matrix M verknüpft die Amplituden der Zustände (ebenen Wellen) links und rechts des Streugebiets,

$$\mathbf{u}_L = M \mathbf{u}_R, \quad \mathbf{u}_L = \begin{pmatrix} a_L \\ b_L \end{pmatrix}, \quad \mathbf{u}_R = \begin{pmatrix} a_R \\ b_R \end{pmatrix}, \quad (1.137)$$

vgl. Gl. (1.118), wobei wir jetzt  $\mathbf{u}_L$  statt  $\mathbf{u}_1$  sowie  $\mathbf{u}_R$  statt  $\mathbf{u}_{N+1}$  schreiben und  $k_R = k_L = k$  voraussetzen (SKIZZE), d.h. Potential V = 0 außerhalb des Streugebiets  $[x_1, x_n]$ . Den Transmissionskoeffizienten T für Streuung von links nach rechts erhielten wir aus der Streubedingung  $b_R = 0$  über

$$a_L = M_{11}a_R \rightsquigarrow T \equiv \left|\frac{a_R}{a_L}\right|^2 = \left|\frac{1}{M_{11}}\right|^2.$$
(1.138)

Wie ist es bei Streuung von rechts nach links, d.h. mit Streubedingung  $a_L = 0$ , d.h. einfallende Wellen von rechts und keine einfallenden Wellen von links? Der Transmissionskoeffizient  $\tilde{T}$  und der Reflexionskoeffizient  $\tilde{R}$  sind in diesem Fall über

$$\tilde{T} \equiv \left| \frac{b_L}{b_R} \right|^2, \quad \tilde{R} \equiv \left| \frac{a_R}{b_R} \right|^2$$
 (1.139)

zu definieren.

Die stationäre SG

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$
(1.140)

habe Lösungen  $\psi(x)$ . Dann ist die konjugiert komplexe WF  $\psi^*(x)$  ebenfalls Lösung dieser SG, denn E und V(x) sind reell. Konkret heißt das für unser stückweise konstantes Potential

$$V(x) = \begin{cases} V_{1}, & & \\ V_{2}, & & \\ V_{3}, & & \\ V_{N} & & \\ V_{N+1} & & \\ \end{cases} \psi^{*}(x) = \begin{cases} a_{1}^{*}e^{-ik_{1}x} + b_{1}^{*}e^{ik_{1}x}, & -\infty < x \le x_{1} \\ a_{2}^{*}e^{-ik_{2}x} + b_{2}^{*}e^{ik_{2}x}, & x_{1} < x \le x_{2} \\ a_{3}^{*}e^{-ik_{3}x} + b_{3}^{*}e^{ik_{3}x}, & x_{2} < x \le x_{3} \\ & & \\ \dots & & \\ a_{N}^{*}e^{-ik_{N}x} + b_{N}^{*}e^{ik_{N}x}, & x_{N-1} < x \le x_{N} \\ a_{N+1}^{*}e^{-ik_{N+1}x} + b_{N+1}^{*}e^{ik_{N+1}x}, & x_{N} < x < \infty \end{cases}$$
(1.141)

d.h. alles ist wie vorher in Gl. (1.118), bloß mit vertauschten und konjugierten Koeffizienten  $b_1 \rightarrow a_1^*$ ,  $a_1 \rightarrow b_1^*$  etc. Insbesondere gilt

$$\begin{pmatrix} b_L^* \\ a_L^* \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} b_R^* \\ a_R^* \end{pmatrix}$$
(1.142)

mit derselben Transfer-Matrix M, denn die Bedingung an die Stetigkeit der WF und ihrer Ableitung ist ja dieselbe. Wir schreiben das als

$$\sigma_x \begin{pmatrix} a_L^* \\ b_L^* \end{pmatrix} = M \sigma_x \begin{pmatrix} a_R^* \\ b_R^* \end{pmatrix}, \quad \sigma_x \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$
(1.143)

Zusammen mit dem ursprünglichen

$$\begin{pmatrix} a_L \\ b_L \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} a_R \\ b_R \end{pmatrix}$$
(1.144)

führt das auf

$$\sigma_x M^* \begin{pmatrix} a_R^* \\ b_R^* \end{pmatrix} = M \sigma_x \begin{pmatrix} a_R^* \\ b_R^* \end{pmatrix}$$
(1.145)

oder

$$\sigma_x M^* = M \sigma_x, \tag{1.146}$$

was ausgeschrieben eine Bedingung für die Matrixelemente der Transfermatrix M liefert,

$$M_{22}^* = M_{11}, \quad M_{12}^* = M_{21}. \tag{1.147}$$

Mit  $0 = a_L^* = M_{21}b_R^* + M_{22}a_R^*$  folgt für den Reflexionskoeffizienten  $\tilde{R}$  damit

$$\tilde{R} \equiv \left| \frac{a_R}{b_R} \right|^2 = \left| \frac{M_{21}}{M_{22}} \right|^2 = \left| \frac{M_{21}}{M_{11}} \right|^2 = R$$
(1.148)

und wegen der aus der Kontinuitätsgleichung  $divj = -\dot{\rho} = 0$  für stationäre Zustände erhaltenen Summenregel (AUFGABE 5 oben),

$$1 = T + R = \tilde{T} + \tilde{R} \tag{1.149}$$

folgt weiterhin

$$\tilde{T} = T. \tag{1.150}$$

Die Reflexions- und Transmissionskoeffizienten hängen also nicht davon ab, ob man von links nach rechts streut oder umgekehrt! Das gilt für beliebige Formen des Potentials V(x) und ist insbesondere für unsymmetrische Potentiale (z.B. dreieckiger 'Keil' etc.) ein überraschendes Ergebnis.

Schließlich folgern wir für die Determinante der Transfermatrix

$$\det(M) = \begin{vmatrix} M_{11} & M_{21}^* \\ M_{21} & M_{11}^* \end{vmatrix} = |M_{11}|^2 - |M_{12}|^2 = \frac{1}{T} - \frac{R}{T} = \frac{1-R}{T} = \frac{T}{T} = 1. \quad (1.151)$$



Fig. 1.1: Symmetric potential V(x) within a one-dimensional potential well.

## 1.7.7 \*Zusatzmaterial: Doppelmuldenpotential

We consider a particle of mass m confined in a one-dimensional potential well with infinitely high walls at  $x = \pm L/2$ . Within the well, i.e. within the interval [-a/2, a/2], a < L, there is a symmetric potential V(x) = V(-x) > 0, see Fig. 1.1. We wish to determine the stationary bound states with energy E and the possible energy eigenvalues E for this potential. Because the potential is symmetric around the origin, the eigenstate wave functions must have even or odd parity  $\psi_{\pm}(x) = \pm \psi(-x)$ . For |x| > a/2, the wave function must be a superposition of plane waves that has to vanish at the boundaries  $\pm L/2$ . Therefore, we can set

$$\psi_{\pm}(x) = \begin{cases} A \sin k(x+L/2) = a_1 e^{ikx} + b_1 e^{-ikx} & -L/2 < x < -a/2 \\ \phi_{\pm}(x) & -a/2 < x < a/2 \\ \pm A \sin k(L/2-x) = a_3 e^{ikx} + b_3 e^{-ikx} & a/2 < x < L/2 \end{cases}, \quad (1.152)$$

where A is a complex constant,  $k = \sqrt{(2m/\hbar^2)E}$  and  $\phi_{\pm}(x)$  the wave function within the potential region |x| < a/2. It is convenient to write the even (+) and odd (-) wave functions within one line, using the definitions

$$\begin{aligned}
\psi_{\pm}(x) &= \psi_{L}(x) + \phi_{\pm}(x) \pm \psi_{R}(x), \\
\psi_{L}(x) &:= \begin{cases} A \sin k(x + L/2) = -L/2 < x < -a/2 \\ 0 & else \end{cases} \\
\psi_{R}(x) &:= \begin{cases} A \sin k(L/2 - x) = a/2 < x < L/2 \\ 0 & else \end{cases} 
\end{aligned}$$
(1.153)

Here,  $\psi_L(x)$  is localized only in the left part x < -a/2 and  $\psi_R(x)$  is localized only in the right part x > a/2 of the well.

We now use our transfer matrix formalism to obtain the equation that determines the possible energy values E: The solution on the left of the potential V(x) is connected to the solution on the right

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_3 \\ b_3 \end{pmatrix} \rightsquigarrow \begin{pmatrix} e^{ikL/2} \\ -e^{-ikL/2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mp e^{-ikL/2} \\ \pm e^{ikL/2} \end{pmatrix},$$

which yields two linear equations

$$e^{ikL/2} = \mp M_{11}e^{-ikL/2} \pm M_{12}e^{ikL/2} - e^{-ikL/2} = \mp M_{12}^*e^{-ikL/2} \pm M_{22}e^{ikL/2}.$$
(1.154)

Here, the upper sign always holds for the even solution  $\psi_+(x)$  while the lower sign holds for the odd solution  $\psi_-(x)$ . In fact, for a symmetric potential V(x) = V(-x),  $M_{22}^* = M_{11}$ and  $M_{21} = M_{12}$  such that the second of the above equations is just the conjugate complex of the first. The condition that determines the possible wave vectors k and therewith the energies  $E = \hbar^2 k^2/2m$  is

$$\pm 1 = -M_{11}(k)e^{-ikL} + M_{12}(k), \qquad (1.155)$$

where we explicitly indicated the k-dependence of the transfer matrix elements.

## 1.7.7.1 Case of no potential V(x) = 0

In this case,

$$\begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \rightsquigarrow \pm 1 = -e^{ikL} \rightsquigarrow kL = \begin{cases} \pi, 3\pi, 5\pi, \dots & (+)even \\ 2\pi, 4\pi, 6\pi, \dots & (-)odd \end{cases} (1.156)$$

#### 1.7.7.2 Tunnel barrier potential within well

For a rectangular tunnel barrier of width a and height V, that is  $V(x) = V\theta(a/2 - |x|)$ , we have calculated the transfer matrix M before (note that now the width is a and not 2a,  $\sin(ix) = i \sinh(x)$ , and  $\cos(ix) = \cosh(x)$ :

$$M_{11} = e^{ika} \left[ \cosh(\kappa a) + i \frac{\varepsilon_{-}}{2} \sinh(\kappa a) \right]$$
  

$$M_{12} = i \frac{\varepsilon_{+}}{2} \sinh(\kappa a)$$
  

$$\varepsilon_{\pm} := \frac{\kappa}{k} \pm \frac{k}{\kappa}, \quad k = \sqrt{(2m/\hbar^{2})E}, \quad \kappa = \sqrt{(2m/\hbar^{2})(V - E)}.$$
 (1.157)

From this and Eq. (1.155), we obtain

$$\pm 1 = -e^{ik(a-L)} \left[ \cosh(\kappa a) + i\frac{\varepsilon_{-}}{2}\sinh(\kappa a) \right] + i\frac{\varepsilon_{+}}{2}\sinh(\kappa a)$$
(1.158)

We multiply this equation by  $e^{-ik(a-L)/2}$  and take the real part to obtain two equations for the even and the odd case. We can check that taking the imaginary part leads to the same result. Using

$$\coth(x/2) = \frac{\sinh x}{\cosh x - 1} = \frac{\cosh x + 1}{\sinh x},\tag{1.159}$$

we obtain

$$1 = \frac{\kappa}{k} \tan\left(k\frac{a-L}{2}\right) \tanh\left(\frac{\kappa a}{2}\right), \quad \text{even '+'}$$
  

$$1 = \frac{\kappa}{k} \tan\left(k\frac{a-L}{2}\right) \coth\left(\frac{\kappa a}{2}\right), \quad \text{odd '-'}.$$
(1.160)

Case  $V \to \infty$ : In this case,  $\kappa \to \infty$  and

$$0 = \tan\left(k\frac{a-L}{2}\right) \rightsquigarrow k\frac{L-a}{2} = n\pi, \quad n = 1, 2, 3, ...,$$
(1.161)

where (L - a)/2 is the length of the two infinite potential wells that are completely separated by the infinitely high barrier. The wave functions in the two wells and the energies are just the ones that we have calculated for an infinite potential well.

Case  $V < \infty$  large, L = 2a: We wish to see how the energies and wave functions change if we lower the central barrier from its infinite value to finite V. We already expect that due to the tunnel effect, the left and the right well, which for  $V \to \infty$  were completely separated from each other, must become coupled now. We already know the limiting cases

$$k\frac{a}{2} = n\pi, \quad n = 1, 2, 3, ..., \quad V \to \infty$$
  

$$k2a = n\pi, \quad n = 1, 2, 3, ..., \quad V = 0$$
  

$$k = ?, \quad 0 < V < \infty.$$
(1.162)

Introducing dimensionless variables

$$x = ka/2, \quad \alpha := \sqrt{ma^2 V/2\hbar^2}, \tag{1.163}$$

the transcendent equations (1.160) become

$$-1 = \frac{\sqrt{\alpha^2 - x^2}}{x} \tan x [\tanh(\sqrt{\alpha^2 - x^2})]^{\pm 1}.$$
 (1.164)

We expand this for large  $\alpha \gg 1$  around the lowest energy solution for the case  $V \to \infty$ , that is around  $x_1 = \pi$  by setting  $x = x_1 + y$ ,  $y \ll 1$ . This yields

$$-1 \approx \frac{\alpha}{x_1 + y} \tan(x_1 + y) [\tanh(\alpha)]^{\pm 1} \approx \frac{\alpha}{\pi} y [\tanh(\alpha)]^{\pm}$$
  
$$\rightsquigarrow x \approx \pi \left(1 - \frac{1}{\alpha} [\tanh(\alpha)]^{\mp 1}\right).$$
(1.165)

The corresponding wave vectors for the lowest energy solution therefore are

$$k_+ \approx \frac{2\pi}{a} \left( 1 - \frac{1}{\alpha \tanh(\alpha)} \right), \quad k_- \approx \frac{2\pi}{a} \left( 1 - \frac{\tanh(\alpha)}{\alpha} \right).$$
 (1.166)

Since  $\tanh \alpha < 1$ , we recognize  $k_+ < k_-$ . Compared with the case  $V \to \infty$  where the lowest k was  $k = 2\pi/a$ , we now have a **splitting** into two different k's. The lowest symmetric (even) wave function has an energy  $E_+ = \hbar^2 k_+^2/2m$  that is lower than the energy  $E_- = \hbar^2 k_-^2/2m$  of the lowest odd wave function. This **level splitting** is an important general feature appearing when two regions in space become coupled by the tunnel effect.

For very large V, the wave functions that belong to  $k_{\pm}$  below the barrier must be very small: we see that as  $\alpha \to \infty$ ,  $\Psi_{\pm}(x = \pm a/2) \to 0$  whence by continuity also the central part of the wave function  $\phi_{\pm}(x)$  must become very small. Then, we can approximate the wave functions for the two lowest energies  $E_{\pm}$  as

$$\psi_{\pm}(x) = \psi_L(x) \pm \psi_R(x),$$
 (1.167)

where in the definition of the left and right part wave functions  $\psi_{L/R}(x)$  we have to use  $k_+$  for the even and  $k_-$  for the odd solution. In fact, for large V, Eq. (1.166) tells us that the  $k_{\pm}$  are very close to the wave vector  $k = 2\pi/a$  of the infinite–barrier limit, cf. Eq. (1.162), and therefore the  $\psi_{L/R}(x)$  are very close to the lowest sin–wave functions of the left and right well.

## 1.8 Ort und Impuls in der Quantenmechanik

Ort und Impuls sind in der klassischen Mechanik die zentralen Variablen bei der Beschreibung im Phasenraum. Entsprechend wird man untersuchen, was aus ihnen in der QM wird. Mathematisch gesehen sind unglücklicherweise Ort und Impuls, insbesondere auf unbeschränkten Gebieten, etwas diffizile Größen. Für die Entwicklung der QM sind sie jedoch unverzichtbar, und wir werden deshalb zunächst etwas heuristisch vorgehen.

#### 1.8.1 Korrespondenzprinzip

Wir hatten das Betragsquadrat der WF  $|\Psi(x,t)|^2$  für ein Teilchen im Potential V(x) als W-dichte interpretiert. Das Ergebnis einer einzelnen Messung des Ortes x kann nur mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit vorausgesagt werden. Bei häufiger Wiederholung der Messung unter identischen Bedingungen hat man dann einen Mittelwert (Erwartungswert) des Ortes zur Zeit t,

$$\langle x \rangle_t = \int dx |\Psi(x,t)|^2 x. \tag{1.168}$$

Hier haben wir wiederum der Einfachheit halber eine eindimensionale Situation angenommen, in d Dimensionen hat man analog

$$\langle \mathbf{x} \rangle_t = \int d^d x |\Psi(\mathbf{x}, t)|^2 \mathbf{x}.$$
 (1.169)

Der Erwartungswert ist nun ein *d*-dimensionaler Vektor als Funktion der Zeit t, wie durch die Notation  $\langle ... \rangle_t$  gekennzeichnet wird.

#### 1. Einleitung

Als nächstes möchten wir den Erwartungswert des Impulses **p** des Teilchens berechnen. Da wir in bis jetzt nur die WF und die entsprechende W-Dichte  $|\Psi(x,t)|^2$  vorliegen haben, postulieren wir für den Erwartungswert von p (wieder in d = 1) das, was wir aus der klasssischen Mechanik erwarten,

$$\langle p \rangle_t \equiv m \frac{d}{dt} \langle x \rangle_t. \tag{1.170}$$

Wir schreiben

$$\langle p \rangle_t = m \frac{d}{dt} \langle x \rangle_t = m \int dx \frac{d}{dt} |\Psi(x,t)|^2 x = -m \int dx \frac{\partial}{\partial x} j(x,t) x$$

$$= [p. I.] = m \int dx j(x,t) = [Definition j]$$

$$= -\frac{i\hbar}{2} \int dx [\Psi^*(x,t)\partial_x \Psi(x,t) - \Psi(x,t)\partial_x \Psi^*(x,t)] = [p. I.]$$

$$= -\frac{i\hbar}{2} \int dx [\Psi^*(x,t)\partial_x \Psi(x,t) + \partial_x \Psi(x,t)\Psi^*(x,t)]$$

$$= \int dx [\Psi^*(x,t)\frac{\hbar\partial_x}{i}\Psi(x,t)],$$

$$(1.171)$$

wobei p. I. für partielle Integration steht. Durch Vergleich erhalten wir

$$\langle x \rangle_t = \int dx \Psi^*(x,t) x \Psi(x,t), \quad \langle p \rangle_t = \int dx \Psi^*(x,t) \frac{\hbar \partial_x}{i} \Psi(x,t)$$
(1.172)

und stellen fest, dass der Ort x mit der (etwas trivialen) Operation 'Multiplikation mit x' korrespondiert. Weiterhin korrespondiert der Impuls mit der ganz und gar nicht trivialen, da unerwarteten Operation  $-i\hbar\partial_x$ . Wiederum kann alles auf d Dimensionen verallgemeinert werden, wenn man  $x \to \mathbf{x}$  und  $\partial_x \to (\partial_1, \partial_2, ..., \partial_d) = \nabla$  (Gradient oder Nabla–Operator) setzt. Wir erkennen also: in der QM werden Ort und Impuls zu **Operatoren**. Wir formulieren das als unser zweites Axiom:

Axiom 2: Der Ort x entspricht in der Quantenmechanik dem **Operator** 'Multiplikation mit x', und der Impuls p entspricht dem Differential-Operator  $-i\hbar\nabla$ , angewendet auf die Wellenfunktion wie in (1.172),(1.184),(1.186), d.h.

$$\mathbf{x} \to \hat{\mathbf{x}}, \quad \mathbf{p} \to \frac{\hbar}{i} \nabla.$$
 (1.173)

Man bezeichnet diese Vorschrift auch als Korrespondenzprinzip.

Bemerkungen:

<sup>1.</sup> Das Korrespondenzprinzip ist ein wichtiges Mittel, um eine klassische Theorie zu quantisieren. Allerdings erkennen wir bereits Probleme: wir sind hierbei auf kartesische Koordinaten angewiesen. Schon bei den verallgemeinerten Orts- und Impulskoordinaten
der klassischen Hamilton-Theorie (kanonische Trafos) ist nicht ohne Weiteres klar, wie man vorgeht.

2. Eine alternative Quantisierungsvorschrift, die nur die Lagrange- und nicht die Hamilton-Funktion benutzt, ist das **Feynmansche Pfadintegral**, das außerdem eine enge Verbindung zu den Extremalprinzipien der klassischen Mechanik hat.

3. Es gibt daneben noch andere, z.T. auch relativ abstrakte Quantisierungsverfahren, die auf algebraischen Methoden beruhen, auf die wir hier aber nicht eingehen.

Es soll aber betont werden, daß alle diese Verfahren letztendlich keine 'Herleitung der Quantenmechanik' aus irgendwelchen physikalisch tieferen Prinzipien bringen.

#### 1.8.2 Wellenfunktion im Impuls- und Ortsraum

Die Normierung einer WF  $\Psi(x)$  im Ortsraum können wir mittels Fouriertransformation auf den Impulsraum übertragen. Wir setzen der Übersichlichkeit halber  $\hbar = 1$ , so daß die de-Broglie-Beziehung einfach p = k wird und wir nicht zwischen Impuls und Wellenvektor zu unterscheiden brauchen. Später können wir dann durch Dimensionsanalyse in allen Gleichungen das  $\hbar$  wieder installieren. Es ist

$$\int dx \Psi^*(x)\Psi(x) = \int dx \int \frac{dp'}{2\pi} \tilde{\Psi}^*(p') e^{-ip'x} \int \frac{dp}{2\pi} \tilde{\Psi}(p) e^{ipx}$$
$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \int dp' \int dp \tilde{\Psi}^*(p') \tilde{\Psi}(p) 2\pi \delta(p-p')$$
$$= \frac{1}{2\pi} \int dp \tilde{\Psi}^*(p) \tilde{\Psi}(p), \quad \text{Parsevalsche Gleichung}, \quad (1.174)$$

wobei wir einfach die Fourierdarstellung eingesetzt und

$$\int dx e^{ip'x} e^{-ipx} = 2\pi\delta(p-p') \tag{1.175}$$

ausgenutzt haben. Es gilt also für die Normierung

$$\int dx \Psi^*(x) \Psi(x) = \frac{1}{2\pi} \int dp \tilde{\Psi}^*(p) \tilde{\Psi}(p) = 1, \qquad (1.176)$$

d.h. wir haben folgende Interpretation:

 $|\Psi(x)|^2$ , Wahrscheinlichkeitsdichte im Ortsraum (1.177)

$$\frac{1}{2\pi} |\tilde{\Psi}(p)|^2$$
, Wahrscheinlichkeitsdichte im Impulsraum . (1.178)

Um Erwartungswerte von Funktionen F(x) des Ortes oder von Funktionen G(p) des Impulses zu berechnen, können wir also die übliche Definition Gl. (1.40) mit den entsprechenden W-dichten verwenden, d.h.

$$\langle F(x)\rangle = \int dx |\Psi(x)|^2 F(x)$$
 (1.179)

$$\langle G(p) \rangle = \int \frac{dp}{2\pi} |\tilde{\Psi}(p)|^2 G(p). \qquad (1.180)$$

Wir testen die zweite dieser Beziehungen gleich für G(p) = p,

$$\langle p \rangle = \int \frac{dp}{2\pi} |\tilde{\Psi}(p)|^2 p = \int \frac{dp}{2\pi} \int dx' \Psi^*(x') e^{ipx'} p \int dx \Psi(x) e^{-ipx}.$$
 (1.181)

Hier schreiben wir

$$p \int dx \Psi(x) e^{-ipx} = \int dx \Psi(x) (i\partial_x) e^{-ipx} = [p.I.] \int dx e^{-ipx} (-i\partial_x) \Psi(x) (1.182)$$

und erhalten

$$\langle p \rangle = \int dx' \Psi^*(x') \int dx (-i\partial_x) \Psi(x) \delta(x-x') = \int dx \Psi^*(x) \frac{\partial_x}{i} \Psi(x). \quad (1.183)$$

Bis auf das  $\hbar$ , das wir ja gleich eins gesetzt hatten, stimmt das mit unserem alten Ergebnis Gl. (1.172) überein und bestärkt uns deshalb, das die Interpretation von  $\frac{dp}{2\pi}|\tilde{\Psi}(p)|^2$  als W-Dichte im Impulsraum konsistent ist.

Eine ähnliche Rechnung führt nun auf

$$\langle p^n \rangle_t = \int dx \Psi^*(x,t) \left[\frac{\hbar \partial_x}{i}\right]^n \Psi(x,t), \quad n = 1, 2, 3...$$
(1.184)

Für Taylor-entwickelbare Funktionen  ${\cal G}(p)$ können wir das gliedweise anwenden und haben

$$\langle G(p) \rangle_t = \int dx \Psi^*(x,t) G\left(\frac{\hbar \partial_x}{i}\right) \Psi(x,t).$$
 (1.185)

Hierbei wird die Taylor-Reihe der Funktion G(p) in jedem Term durch Potenzen des Differentialoperators  $\frac{\hbar\partial_x}{i}$ , der auf die nachfolgende Wellenfunktion  $\Psi(x,t)$  wirkt, ersetzt.

Wiederum kann alles auf *d* Dimensionen verallgemeinert werden, wenn man  $x \to \mathbf{x}$ und  $\partial_x \to (\partial_1, \partial_2, ..., \partial_d) = \nabla$  (Gradient oder Nabla–Operator) setzt. Wir erkennen also: in der QM werden Ort und Impuls zu **Operatoren**. Wir fassen zusammen:

Erwartungswerte von Funktionen  $F(\mathbf{x})$  des Ortes oder von Funktionen  $G(\mathbf{p})$  des Impulses für ein quantenmechanisches System mit Wellenfunktion  $\Psi(\mathbf{x}, t)$  sind gegeben durch

$$\langle F(\mathbf{x}) \rangle_t = \int d^3 x \Psi^*(\mathbf{x}, t) F(\hat{\mathbf{x}}) \Psi(\mathbf{x}, t)$$
  
 
$$\langle G(\mathbf{p}) \rangle_t = \int d^3 x \Psi^*(\mathbf{x}, t) G(\hat{\mathbf{p}}) \Psi(\mathbf{x}, t), \quad \hat{\mathbf{p}} \equiv \frac{\hbar \nabla}{i}.$$
 (1.186)

Merkregel: bei der Bildung von Erwartungswerten von Funktionen werden in diesen Ort und Impuls durch die entsprechenden Operatoren ersetzt, anschliessend die Funktionen zwischen  $\Psi^*$  und  $\Psi$  'ge-sandwiched' und dann über den Ort integriert. Wir werden später in der Formalisierung der QM die Ausdrücke Gl. (1.186) in natürlicher Weise als Matrixelemente von Operatoren identifizieren.

## 1.8.3 Beispiel: Wellenpaket

Wir betrachten das Wellenpaket

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi a^2}}} \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right).$$
 (1.187)

und berechnen

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x,t) x \Psi(x,t) = 0, \quad \langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x,t) \frac{\hbar \partial_x}{i} \Psi(x,t) = 0. \quad (1.188)$$

Weiterhin gilt (AUFGABE)

$$\langle p^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{2a^2}, \quad \langle x^2 \rangle = \frac{a^2}{2}.$$
 (1.189)

Damit ergibt sich für die Varianzen

$$\Delta p^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 = \langle p^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{2a^2}, \quad \Delta x^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \langle x^2 \rangle = \frac{a^2}{2} \tag{1.190}$$

deren Produkt gerade

$$\Delta x^2 \cdot \Delta p^2 = \frac{\hbar^2}{4} \tag{1.191}$$

ergibt. Dieses Wellenpaket erfüllt also die Heisenbergsche Unschärferelation

$$\Delta x^2 \cdot \Delta p^2 \ge \frac{\hbar^2}{4}.\tag{1.192}$$

gerade mit dem Gleichheitszeichen. Wir werden weiter unten Heisenbergsche Unschärferelationen für beliebige Paare von Operatoren (und nicht nur x und p) entwickeln.

## **1.8.4** Der Kommutator [x, p]

Das Korrespondenzprinzip wird auch auf weiter abgeleitete Größen ausgedehnt: Insbesondere ist das die Gesamtenergie, die in der klassischen Mechanik für ein konservatives System durch die Hamilton-Funktion

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{x}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x})$$
(1.193)

gegeben ist. Das Korrespondenzprinzip besagt dann, daß die Hamilton-Funktion durch den Hamilton-Operator (Hamiltonian)  $\hat{H}$  ersetzt werden muß,

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + V(\hat{\mathbf{x}}). \tag{1.194}$$

Hierbei ist in *d* Dimensionen der Laplace-Operator  $\Delta = \nabla \cdot \nabla = \partial_1^2 + ... \partial_d^2$  in kartesischen Koordinaten, auf die wir uns hier zunächst stets beschränken. Der 'Hut' steht dabei für Operatoren, wird aber oft weggelassen.

Mit Hilfe des Hamilton-Operators läßt sich die Schrödinger-Gleichung in folgender Form schreiben:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{x},t) = \hat{H}\Psi(\mathbf{x},t).$$
 (1.195)

Das ist die allgemeinste Form der Schrödinger-Gleichung in der QM.

Probleme beim Übergang von der klassischen Hamiltonfunktion zum quantenmechanischen Hamilton-Operator treten nun auf, wenn man Produkte von Orts- und Impulsvariablen vorliegen hat, d.h. Terme wie xp,  $x^2p^2$  oder Ähnliches.

Ort x und Impuls p werden in der QM nach Axiom 2 zu Operatoren. Angewendet auf eine beliebige Wellenfunktion  $\Psi$  erhält man für das Operator-Produkt  $\hat{x}\hat{p}$ , d.h. die Hintereinanderschaltung der Operatoren, den Ausdruck

$$\hat{x}\hat{p}\Psi(x) = \frac{\hbar}{i}x\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x) = \frac{\hbar}{i}x\Psi'(x)$$
$$\hat{p}\hat{x}\Psi(x) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}x\Psi(x) = \frac{\hbar}{i}\left(\Psi(x) + x\Psi'(x)\right)$$
(1.196)

Das Ergebnis hängt also von der Reihenfolge von  $\hat{x}$  und  $\hat{p}$  ab: beide Operatoren kommutieren nicht (vertauschen nicht). Das ist eine Eigenschaft, die man z.B. aus der linearen Algebra von Matrizen kennt. Es gilt

$$(\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})\Psi(x) = i\hbar\Psi(x) \tag{1.197}$$

Durch Vergleich beider Seiten erhält man die kanonischen Vertauschungs-Relationen

$$[\hat{x},\hat{p}] \equiv \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar.$$
(1.198)

Hierbei ist der **Kommutator** zweier Operatoren A und B allgemein definiert als

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A},$$
 Kommutator . (1.199)

Verallgemeinert auf drei Dimensionen mit den Komponenten  $\hat{x}_k$  von  $\hat{\mathbf{x}}$  und  $\hat{p}_k$  von  $\hat{\mathbf{p}}$ , k = 1, 2, 3, hat man

$$[\hat{x}_k, \hat{p}_l] = i\hbar\delta_{kl}, \quad [\hat{x}_k, \hat{x}_l] = [\hat{p}_k, \hat{p}_l] = 0$$
(1.200)

wobei  $\delta_{kl}$  das Kronecker-Symbol ist.

# 2. GRUNDZÜGE DER QUANTENMECHANIK

# 2.1 Einführung in Hilberträume

## 2.1.1 Teilchen im Kastenpotential, Dirac-Notation(I)

Wir beginnen mit dem Beispiel der eindimensionalen SG auf dem endlichen Intervall $[x_1, x_2] = [0, L], L > 0$ . Ein Teilchen der Masse m sei in diesem Intervall eingesperrt (am Rand seien unendlich hohe Potential'wände'). Die stationäre SG habe also ein Potential der Form

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & -\infty < x \le 0\\ 0, & 0 < x \le L\\ \infty & L < x < \infty \end{cases}$$
(2.1)

Das Teilchen ist in [0, L] eingesperrt und kann nicht nach außen. Außerhalb ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit Null und damit

$$\psi(x) = \begin{cases} 0, & -\infty < x \le 0\\ ae^{ikx} + be^{-ikx}, & 0 < x \le L\\ 0, & L < x < \infty \end{cases}$$
(2.2)

1. Wir verlangen das Verschwinden der WF bei x = 0 und x = L, so daß man Stetigkeit hat. Es folgt

$$\psi(0) = 0 \rightsquigarrow 0 = a + b \rightsquigarrow \psi(x) = c \sin(kx), \quad 0 \le x \le L, \quad c = const.$$
  
$$\psi(L) = 0 \rightsquigarrow \sin(kL) = 0.$$
 (2.3)

Die erste Bedingung besagt, daß die WF eine Sinus-Funktion sein muß. Die zweite Bedingung ist interessanter: sie stellt eine Bedingung an die möglichen Werte  $k_n$  des Wellenvektors k, nämlich

$$kL = n\pi \rightsquigarrow k \equiv k_n = \frac{n\pi}{L}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$(2.4)$$

Die zweite **Randbedingung** bei x = L schränkt die möglichen Werte der Energie E ein, denn  $k \equiv \sqrt{(2m/\hbar^2)(E-V)} = \sqrt{(2m/\hbar^2)E}$ . Deshalb kann die Energie nur die Werte

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2mL^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$
(2.5)

annehmen. Wir begegnen hier also einem Beispiel einer *Quantisierung der Energie*. Der Grund für diese Quantiserung ist offensichtich: Die WF muß in den Potential-Kasten

hineinpassen, genauso wie es z.B. bei klassischen akustischen Wellen in Resonatoren der Fall ist, wo nur bestmmte Wellenlägen zugelassen sind. Die erlaubten Wellenvektoren  $k_n$  sind dann mit der Energie über die de-Broglie-Beziehung  $p = \hbar k \rightsquigarrow p_n = \hbar k_n$ verknüpft, und diese Energie ist schlichtweg die kinetische Energie  $E = p^2/2m$  des Teilchens innerhalb des Kastens, wo das Potential ja Null ist, so daß automatisch (2.5) folgt.

2. Es gibt offensichtlich nur diskrete Eigenwerte der Energie, man spricht von einem **diskreten Energiespektrum**. Im Gegensatz hierzu können z.B. die ebenen Wellen  $e^{\pm ikx}$  eines freien, nicht durch ein Potential eingeschränkten Teilchens beliebige Wellenvektoren k haben und damit auch beliebige, kontinuierliche Werte der (positiven) Energie  $E = \hbar^2 k^2/2m$ . In einem solchen Fall spricht man von einem **kontinuierlichen Spektrum**.

3. Um das Betragsquadrat der WF  $\psi_n(x) = c \sin(k_n x)$  als W-dichte interpretieren zu können, muß gelten

$$1 = \int_{0}^{L} dx |\psi_{n}(x)|^{2} = \int_{0}^{L} dx |c|^{2} \sin^{2}(n\pi x/L)$$
  
$$= \frac{1}{2} \int_{0}^{L} dx |c|^{2} [1 - \cos(n2\pi x/L)] = \frac{|c|^{2}L}{2}$$
  
$$|c|^{2} = \frac{2}{L} \rightsquigarrow c = \sqrt{\frac{2}{L}} e^{i\phi} \rightsquigarrow \psi_{n}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(n\pi x/L) e^{i\varphi}, \qquad (2.6)$$

wobei  $\varphi \in R$  ein reeller Phasenfaktor ist. Diese **Normierungs-Bedingung** bestimmt die WF  $\psi_n(x)$  eindeutig bis auf einen **Phasenfaktor**: falls  $\Psi$  eine normierte Lösung der stationären SG ist, so ist  $\Psi e^{i\varphi}$  ebenfalls eine Lösung. Man hat also Äquivalenzklassen von Lösungen.

**Definition** Eine Lösung  $\psi_n(x)$  einer stationären Schrödingergleichung

$$H\psi_n = E_n\psi_n \tag{2.7}$$

wird als Eigenzustand (stationärer Zustand) zum Eigenwert  $E_n$  bezeichnet.

Wir haben hier bereits das Argument x in der Wellenfunktion  $\psi_n(x)$  weggelassen, da wir uns im Folgenden nicht so sehr mit der speziellen Form von  $\psi$ , sondern mit seiner Eigenschaft als Element eines Funktionenraumes (Vektorraum der Wellenfunktionen, Hilbertraum) beschäftigen möchten. Um das zu unterstreichen, führt man in der QM die **Dirac-Notation** ein.

#### **Definition** Dirac-Notation (I)

Stationäre Zustände einer stationären Schrödingergleichung werden abstrakt als **Dirac Kets**  $|n\rangle$  notiert. Man schreibt

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle. \tag{2.8}$$

Die zugehörigen Wellenfunktionen  $\psi_n(x)$  schreibt man dann im Ortsraum als

$$\psi_n(x) \equiv \langle x | n \rangle. \tag{2.9}$$

Für das Kastenpotential lauten diese also explizit

$$\langle x|n\rangle = \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right),$$
 (2.10)

wobei wir den Phasenfaktor gleich Eins gesetzt haben. Die Dirac-Notation ist am Anfang gewöhnungsbedürftigt, sie ist aber außerordentlich flexibel und nützlich und sollte deshalb gleich von Anfang an eingeübt werden.

AUFGABE: Bestimme die Wellenfunktionen  $\psi_n(x)$  der stationären Zustände eines Kastenpotentials in d = 1 räumlicher Dimension mit *endlicher* Tiefe. Es sollen nur die Wellenfunktionen bestimmt werden, für die  $\psi_n(\pm \infty) = 0$  gilt, d.h. die gebundenen Zustände.

#### 2.1.2 Wiederholung: Fourier-Analyse

Das obige Beispiel erinnert uns bereits stark an die uns bereits bekannten Fourier-Reihen. Insbesondere sind die stationären Zustände Gl. (2.10) genau die Basisfunktionen bei der halbintervalligen Fourierreihen-Entwicklung einer Funktion  $\psi(x)$  auf dem Intervall (0, L) (SKRIPT MMP),

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$
, halbintervallige Sinus-Reihe (2.11)

$$b_n = \frac{2}{L} \int_0^L dx \psi(x) \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$
(2.12)

Wir schieben deshalb zur Wiederholung den entsprechenden Teil aus MMP ein. LITE-RATUR: Forster, Analysis I. Als Visualisierung weiterhin web-animationen: z.B. wikipedia 'Fourier series'; http://www.falstad.com/fourier/ (05/2008). Zunächst betrachten wir allgemeiner Fourierreihen.

**Definition** Fourier-Reihen einer Funktion  $\psi(x)$  auf dem Intervall [-L, L] sind definiert als unendliche Reihe der Form

$$\psi(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left( a_n \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right) + b_n \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \right).$$
(2.13)

mit reellen Koeffizienten  $a_n$ ,  $b_n$ . Man bezeichnet diese Darstellung von  $\psi(x)$  auch als Entwicklung nach stehenden Wellen. Die so definierte Funktion ist periodisch,  $\psi(x) = \psi(x + 2L)$ .

Allgemeiner definiert man die komplexe Fourier-Reihen einer periodischen Funktion  $\psi(x) = \psi(x + 2L)$  auf dem Intervall [-L, L] als

$$\psi(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{i\frac{n\pi}{L}x}.$$
(2.14)

mit komplexen Koeffizienten  $c_n$ .

Man bezeichnet diese Darstellung von  $\psi(x)$  dann als Entwicklung nach ebenen (laufenden) Wellen.

Die Fourier- Koeffizienten dieser Entwicklung bestimmt man durch Integration,

$$a_n = \frac{1}{L} \int_{-L}^{L} dx \psi(x) \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right), \quad b_n = \frac{1}{L} \int_{-L}^{L} dx \psi(x) \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$
(2.15)

$$c_n = \frac{1}{2L} \int_{-L}^{L} dx \psi(x) e^{-i\frac{n\pi}{L}x}.$$
 (2.16)

Das folgt, indem man die Reihen jeweils mit  $\cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$ ,  $\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$  bzw.  $e^{-i\frac{n\pi}{L}x}$  multipliziert und integriert unter Benutzung von (NACHRECHNEN!)

$$\frac{1}{L} \int_{-L}^{L} dx \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \cos\left(\frac{m\pi}{L}x\right) = \delta_{nm}$$
(2.17)

$$\frac{1}{L} \int_{-L}^{L} dx \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \sin\left(\frac{m\pi}{L}x\right) = \delta_{nm}$$
(2.18)

$$\frac{1}{L} \int_{-L}^{L} dx \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \sin\left(\frac{m\pi}{L}x\right) = 0$$
(2.19)

$$\frac{1}{2L} \int_{-L}^{L} dx e^{i \frac{(n-m)\pi}{L}x} = \delta_{nm}.$$
 (2.20)

Bei halbintervalligen Fourier-Reihen (Sinus und Cosinus) ist die Funktion  $\psi(x)$  hier auf dem Intervall (0, L) definiert (im Gegensatz zu (-L, L)), und zwar mittels

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right), \quad \text{halbintervallige Sinus-Reihe}$$
(2.21)

$$b_n = \frac{2}{L} \int_0^L dx \psi(x) \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$
(2.22)

$$\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$
, halbintervallige Cosinus-Reihe (2.23)

$$a_n = \frac{2}{L} \int_0^L dx \psi(x) \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right).$$
(2.24)

Den Fall  $\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$  ist für das Problem des Teilchens im Kasten relevant: hier wird eine beliebige Wellenfunktion  $\psi$  nach stationären Eigenzuständen Zuständen Fourier-entwickelt. In Dirac-Schreibweise liest sich das

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} b_n |n\rangle, \qquad (2.25)$$

wobei hier auch die WF  $\psi(x)$  als Vektor aufgefaßt wird. Das bringt uns zum

## 2.1.3 Vektorraum der Periodischen Funktionen

Periodische, komplexwertige Funktion  $\psi$  mit  $\psi(x) = \psi(x+2L)$  auf dem Intervall [-L, L]bilden einen **Vektorraum**  $\mathcal{H}$  (Hilbertraum, wird später in der Quantenmechanik sehr wichtig)). Eine Basis dieses Vektorraum sind die Funktionen

$$e_n : \mathbb{R} \to \mathbb{C}, \quad e_n(x) \equiv e^{i\frac{n\pi}{L}x}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$
 (2.26)

Da es unendlich viele n gibt, ist diese Basis und damit der Vektorraum unendlichdimensional. Analogie zu gewöhnlichen Vektoren  $\mathbf{y}$  im  $\mathbb{C}^d$ :

• Vektoren  $\mathbf{y}$  im  $\mathbb{C}^d$ 

$$\mathbf{y} = \sum_{n=1}^{d} c_n \mathbf{e}_n$$
, Basisdarstellung (2.27)

$$c_n = (\mathbf{e}_n, \mathbf{y}) \equiv \sum_{i=1}^d (\mathbf{e}_n)_i^* y_i$$
, Skalarprodukt (2.28)

$$(\mathbf{e}_n, \mathbf{e}_m) = \sum_{i=1}^d \delta_{in} \delta_{im} = \delta_{nm}, \quad \text{Orthonormal basis} .$$
 (2.29)

• Vektoren (Funktionen)  $\psi$  in  $\mathcal{H}$ : Funktionen  $\psi$  (nicht ihre Funktionswerte) werden als abstrakte Objekte, d.h. Vektoren ausgefasst. Die Fourier-Koeffizienten  $c_n$  entsprechen den Komponenten des Vektors in einer Orthonormalbasis.

$$\psi = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e_n, \quad \text{Basisdarstellung}$$
(2.30)

$$c_n = (e_n, \psi) \equiv \frac{1}{2L} \int_{-L}^{L} dx e_n^*(x) \psi(x), \quad \text{Skalarprodukt}$$
(2.31)

$$(e_n, e_m) = \delta_{nm}$$
, Orthonormalbasis. (2.32)

In der Dirac-Schreibweise der QM schreibt man die Basisdarstellung als

$$|\psi\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n |n\rangle$$
, Basisdarstellung (2.33)

$$c_n = \langle n | \psi \rangle \equiv \frac{1}{2L} \int_{-L}^{L} dx e_n^*(x) \psi(x), \quad \text{Skalarprodukt}$$
(2.34)

$$\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$$
, Orthonormalbasis. (2.35)

Endliche Fourierreihen

$$\psi_N : \mathbb{R} \to \mathbb{C}, \quad \psi_N(x) \equiv \sum_{n=-N}^N c_n e^{i\frac{n\pi}{L}x}, \quad c_n = \frac{1}{2L} \int_{-L}^L dx \psi(x) e^{-i\frac{n\pi}{L}x}$$
(2.36)

konvergieren im Allgemeinen nicht punktweise (für jedes x) gegen die Funktion  $\psi(x)$ , sondern nur im **quadratischen Mittel**:

$$\lim_{N \to \infty} \|\psi - \psi_N\| = 0, \qquad (2.37)$$

wobei der Abstand (Norm) zwischen  $\psi$  und  $\psi_N$  durch das Skalarprodukt gegeben ist,

$$\|\psi - \psi_N\|^2 \equiv (\psi - \psi_N, \psi - \psi_N) \equiv \frac{1}{2L} \int_{-L}^{L} dx |\psi(x) - \psi_N(x)|^2.$$
(2.38)

Beispiel: Gibbsches Phänomen (web-animation) an Sprungstellen. AUFGABEN:

1. Man beweise die **Parsevalsche Gleichung (Vollständigkeisrelation)** für die komplexen Fourier-Reihen periodischer, integrierbarer Funktionen  $\psi$  auf [-L, L],

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} |c_n|^2 = \frac{1}{2L} \int_{-L}^{L} dx |\psi(x)|^2$$
(2.39)

2. Wir betrachten den quantenmechanischen Zustand  $|\Phi\rangle$  eines Teilchens im Kastenpotental der Breite L. Der Zustand sei durch die WF

$$\langle x|\Phi\rangle = \Phi(x) \equiv Nx(L-x) \tag{2.40}$$

gegeben. Bestimme die Konstante N so, daß der Zustand normiert ist. 3. Beweise die Formel

$$\frac{\pi^3}{32} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)^3}.$$
(2.41)

Hinweis: Entwickle hierzu den Zustand  $|\Phi\rangle$  aus Aufgabe 2 nach den stationären Zuständen  $|n\rangle$ , Gl. (2.10).

#### 2.1.4 Linearität und Zeitentwicklung in der QM (I)

Wir beschäftigen uns mit dem Zusammenhang zwischen der stationären SG und der vollen zeitabhängigen SG und behalten als Beispiel das Teilchen im Kastenpotential mit den stationären Zuständen  $|n\rangle$  mit WF  $\psi_n(x)$  im Auge, die Lösungen der stationären SG sind,

$$\hat{H}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x). \tag{2.42}$$

Wir betrachten nun die zeitabhängige SG

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(x,t), \quad \Psi(x,0) = \Psi_0(x)$$
 (2.43)

als Anfangswertproblem, d.h. mit vorgegebener Anfangsbedingung (AB)  $\Psi_0(x)$ .

#### 2.1.4.1 Stationäre Zustände

Falls  $\Psi_0(x) = \psi_n(x)$ , d.h. die AB einer der stationären Zustände  $\psi_n(x)$  ist, gilt

$$\Psi_0(x) = \psi_n(x) \rightsquigarrow \Psi(x,t) = e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n(x), \qquad (2.44)$$

denn

$$i\hbar \frac{\partial e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n(x)}{\partial t} = e^{-iE_n t/\hbar} E_n \psi_n(x) = e^{-iE_n t/\hbar} \hat{H} \psi_n(x)$$
$$= \hat{H} e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n(x).$$
(2.45)

Im letzten Schritt haben wir benutzt, daß der Hamiltonian  $\hat{H}$  nicht auf den Faktor  $e^{-iE_nt/\hbar}$  wirkt, der ja nur von der Zeit t und nicht vom Ort x abhängt. Wir haben damit

**Satz 3.** Die Zeitentwicklung eines stationären Zustandes  $|n\rangle$  ist 'trivial' durch Multiplikation mit dem Phasenfaktor  $e^{-iE_nt/\hbar}$  gegeben, wobei  $E_n$  der Eigenwert der Energie in  $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$  ist:

$$|\Psi(t=0)\rangle = |n\rangle \rightsquigarrow |\Psi(t)\rangle = e^{-iE_nt/\hbar}|n\rangle$$
(2.46)

Hierbei haben wir in Gl. (2.46) die Gl. (2.44) in Dirac-Schreibweise notiert. Der Phasenfaktor  $e^{-iE_nt/\hbar}$  ist hierbei insofern trivial, als daß er nicht aus der Äquivalenzklasse des Zustands  $|n\rangle$  herausführt. Insbesondere gilt hier

$$\Psi(x,t) = e^{-iE_nt/\hbar}\psi_n(x) = e^{-iE_nt/\hbar}\Psi(x,0)$$
  

$$\rightsquigarrow |\Psi(x,t)|^2 = |\Psi(x,0)|^2, \qquad (2.47)$$

d.h. die W-dichte hängt nicht von der Zeit ab, d.h. ist stationär.

#### 2.1.4.2 Beliebige Zustände

Das ändert sich, wenn wir als AB keinen stationären, sondern einen beliebigen Anfangszustand  $|\Psi(t = 0)\rangle$  vorliegen haben, dessen Wellenfunktion  $\Psi(x, 0)$  wir ja in eine Fourierreihe nach den stationären Zuständen  $|n\rangle$  entwickeln können. Allgemein lautet solch eine Fourierreihe

$$|\Psi(t=0)\rangle = \sum_{n} c_n |n\rangle \leftrightarrow \Psi(x,0) = \sum_{n} c_n \psi_n(x),$$
 Wellenpaket (2.48)

mit komplexen Koeffizienten  $c_n$ . Dieser Anfangszustand ist also eine Linearkombination (Superposition) von stationären Zuständen. Dieser Fall ist für die Zeitentwicklung wesentlich interessanter:

**Satz 4.** Die Zeitentwicklung einer Superposition von stationären Zuständen ergibt sich aus der Superposition der einzelnen zeitentwickelten stationären Zustände,

$$\Psi(x,t=0) = \sum_{n} c_n \psi_n(x) \rightsquigarrow \Psi(x,t) = \sum_{n} c_n e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n(x)$$
(2.49)

 $oder \ in \ Dirac-Notation$ 

$$|\Psi(t=0)\rangle = \sum_{n} c_n |n\rangle \rightsquigarrow |\Psi(t)\rangle = \sum_{n} c_n e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle.$$
(2.50)

Dieses folgt aus der Linearität der SG, die für die QM überhaupt von zentraler Wichtigkeit ist. Wir setzen also wieder in die zeitabhängige SG ein,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = \sum_{n} c_{n} e^{-iE_{n}t/\hbar} E_{n} \psi_{n}(x) = \sum_{n} c_{n} e^{-iE_{n}t/\hbar} \hat{H} \psi_{n}(x)$$
$$= \hat{H} \left( \sum_{n} c_{n} e^{-iE_{n}t/\hbar} \psi_{n}(x) \right) = \hat{H} \Psi(x,t), \qquad (2.51)$$

d.h.  $\Psi(x, t)$  erfüllt in der Tat die zeitabhängige SG. Entscheidend ausgenutzt haben wir hierbei, das der Hamiltonoperator  $\hat{H}$  ein **linearer Operator** ist. Wir erinnern uns, daß in der bisher betrachteten Einteilchen-QM in *d* Dimensionen  $\hat{H}$  explizit durch einen Operator der Form

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + V(\mathbf{x}) \tag{2.52}$$

gegeben ist, wobei  $\Delta$  der Laplace-Operator (ein linearer Differential<br/>operator) und V(x) der Operator 'Multiplikation mit der Funktion V(x)' ist. Bei Anwendungen auf Linear-<br/>kombinationen gilt also

$$\hat{H}(c_1\Psi_1(x,t) + c_2\Psi_2(x,t)) = c_1\hat{H}\Psi_1(x,t) + c_2\hat{H}\Psi_2(x,t)$$
(2.53)

und entsprechende für beliebige Linearkombinationen.

#### AUFGABEN

1. Betrachte das Kastenpotential der Breite L und die Zeitentwicklung des Anfangzustands  $\Psi(x, t = 0) = c_1 \psi_1(x) + c_3 \psi_3(x)$ . Skizziere die W-dichte  $|\Psi(x, t)|^2$  für  $c_1 = c_3$ . 2. ZEITENTWICKLUNG

## 2.2 Der Hilbertraum

Jetzt ist es an der Zeit, die bisher benutzten mathematischen Konzepte (Hilbertraum, lineare Operatoren) in etwas geschlossenerer Form darzustellen.

#### 2.2.1 Vektorräume

Wir wiederholen:

**Definition** (komplexer Vektorraum) Eine Menge V von Elementen heißt komplexer Vektorraum (komplexer linearer Raum), wenn gilt: 1. Mit  $x \in V, y \in V$  ist auch die Summe  $x + y \in V$  und V ist bezüglich der Addition eine abelsche Gruppe, es existiert ein Nullelement  $o \in V$  it o + x = x für alle  $x \in V$ , und zu jedem  $x \in V$  existiert ein  $-x \in V$  mit x + (-x) = o.

2. Mit  $x \in V$  und einer komplexen Zahl  $\alpha \in \mathbb{C}$  ist auch  $\alpha x \in V$  und es gilt mit  $x, y \in V$  und  $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ 

$$\alpha(x+y) = \alpha x + \alpha y, \quad (\alpha+\beta)x = \alpha x + \beta x \tag{2.54}$$

$$(\alpha\beta)x = \alpha(\beta x) \tag{2.55}$$

$$(\alpha\beta)x = \alpha(\beta x) \tag{2.55}$$

$$1x = x \tag{2.56}$$

Für die Definition 'Basis' und lineare Unabhängigkeit, vgl. Lineare Algebra (1. Semester) Beispiele:

- $V = \mathbb{C}^n$ , der übliche *n*-dimensionale komplexe Vektorraum mit Basisvektoren  $\mathbf{e}_1$ , ...,  $\mathbf{e}_n$ .
- Der Vektorraum der Polynome in einer Variablen x mit komplexen Koeffizienten vom Grad n,  $p(x) = c_0 + c_1 x + ... c_n x^n$ . Beachte: hierbei wird nichts über die Natur von x ausgesagt.
- Der Vektorraum C([a, b]) der komplexwertigen, auf dem reellen Intervall [a, b] definierten stetigen Funktionen  $f : [a, b] \to \mathbb{C}, x \to f(x)$ .

#### 2.2.2 Normierte Räume, Banach-Räume

**Definition** (Norm) Eine Norm eines komplexen Vektorraums V ist eine Abbildung  $V \to \mathbb{R}_+, \psi \to ||\psi||$  so daß für  $\psi, \phi \in V$  gilt

$$\|\psi\| \ge 0, \quad \|\psi\| = 0 \leftrightarrow \psi = o \tag{2.57}$$

$$\|c\psi\| = |c|\|\psi\|, \quad c \in \mathbb{C}$$

$$(2.58)$$

$$\|\psi + \phi\| \leq \|\psi\| + \|\phi\|$$
, Dreiecksungleichung. (2.59)

Ein Vektorraum mit Norm heißt normierter Raum.

In einem Vektorraum kann es mehrere verschiedene Normen geben. Beispiele:

•  $V = \mathbb{C}^n$ , der übliche *n*-dimensionale komplexe Vektorraum mit Vektoren  $\mathbf{x} = x_1 \mathbf{e}_1 + \ldots + x_n \mathbf{e}_n$ . Beispiele für Normen sind

 $\|\mathbf{x}\| = \|\mathbf{x}\|_2 \equiv \sqrt{|x_1|^2 + \dots + |x_n|^2}, \quad 2\text{-Norm}$  (2.60)

$$\|\mathbf{x}\| = \|\mathbf{x}\|_p \equiv (|x_1|^p + \dots + |x_n|^p)^{\frac{1}{p}}, \quad p\text{-Norm}$$
 (2.61)

Für reelle Vektoren entspricht die 2-Norm der üblichen Länge eines Vektors.

• Der Vektorraum C([a, b]) der komplexwertigen, auf dem reellen Intervall [a, b] definierten stetigen Funktionen  $\psi : [a, b] \to \mathbb{C}, x \to f(x)$ . Beispiele für Normen sind

$$\|\psi\| = \|\psi\|_{\max} \equiv \max_{x \in [a,b]} \psi(x), \quad \text{Maximums-Norm}$$
(2.62)

$$\|\psi\| = \|\psi\|_2 \equiv \sqrt{\int_a^b dx |\psi(x)|^2}, \quad \text{`Quadrat-Norm'}$$
(2.63)

(2.64)

Als Nächstes benötigen wir den Begriff der Konvergenz von Funktionsfolgen. Wir möchten ja, wie wir es bereits von den Fourierreihen her kennen, z.B. eine gegebene (Wellen)-Funktion  $\phi(x)$  durch eine unendliche Linearkombination von Basisfunktionen, wie z.B. die  $\psi_n(x)$  des Kastenpotentials, darstellen.

**Definition** (Cauchy-Folge) Eine Folge  $\psi_n$ , n = 1, 2, 3, ... von Vektoren eines normierten Vektorraums V heißt Cauchy-Folge, falls es für alle  $\varepsilon > 0$  eine ganze Zahl  $N(\varepsilon)$  gibt, so daß für alle  $n, m > N(\varepsilon)$  folgt  $||\psi_n - \psi_m|| < \varepsilon$ .

Der Abstand zwischen den Elementen der Folge wird also zu großen n hin beliebig klein. Allerdings kann es passieren, dass im Limes  $n \to \infty$  der **Grenzwert** der Folge nicht mehr innerhalb des Vektorraums V liegt! Ob das passiert oder nicht, hängt stark von der Norm ab, mit der der Abstand gemessen wird. Man zeichnet deshalb durch folgende Definition die normierten Räume V aus, in denen jede Cauchy-Folge gegen ein Element aus V konvergiert:

**Definition** Vollständige normierte Räume V, d.h. Räume, in denen jede Cauchy-Folge konvergiert, heißen Banach-Räume.

Beispiele:

- $V = \mathbb{C} = \mathbb{C}^{n=1}$ , die komplexen Zahlen selbst als Vektorraum mit der Norm ||z|| = |z| für  $z \in \mathbb{C}$ . Hier konvergiert jede Cauchy-Folge gegen einen Grenzwert in  $\mathbb{C}$ , also ist  $V = \mathbb{C}$  ein Banach-Raum.
- Der Vektorraum C([a, b]) der komplexwertigen, auf dem reellen Intervall [a, b] definierten stetigen Funktionen  $f : [a, b] \to \mathbb{C}, x \to f(x)$  mit der Maximums-Norm  $||f||_{\max}$  ist ein Banach-Raum:

**Satz 5.** (Satz von der gleichmäßigen Konvergenz) In der Maximums-Norm  $||f||_{\max}$ konvergiert jede Cauchy-Folge  $f_n$  in C([a,b]) gegen eine stetige Funktion f aus C([a,b]),

$$\lim_{n \to \infty} \|f_n - f\|_{\max} = 0.$$
 (2.65)

Beweis vgl. FORSTER I.

• Der Vektorraum C([a, b]) der komplexwertigen, auf dem reellen Intervall [a, b] definierten stetigen Funktionen  $f : [a, b] \to \mathbb{C}, x \to f(x)$  mit der 'Quadrat-Norm'  $\|\psi\|_2 \equiv \sqrt{\int_a^b dx |f(x)|^2}$  ist kein Banachraum, d.h. nicht vollständig, denn es gibt Cauchy-Folgen, die gegen unstetige Funktionen  $f \notin C([a, b])$  konvergieren.

AUFGABE: Konstruktion eines solchen Beispiels.

## 2.2.3 Unitäre Räume

Die für die QM wichtigsten Räume sind solche, in denen es ein Skalarprodukt gibt:

**Definition** (Skalarprodukt) Ein Skalarprodukt eines komplexen Vektorraums V ist eine Abbildung  $V \times V \to \mathbb{C}$ , die zwei Vektoren  $|\psi\rangle \in V$ ,  $|\phi\rangle \in V$  eine komplexe Zahl  $(|\psi\rangle, |\phi\rangle) \equiv \langle \psi | \phi \rangle$  so zuordnet, daß gilt

$$(|\psi\rangle, |\psi\rangle) \equiv \langle \psi | \psi \rangle \ge 0 \tag{2.66}$$

$$(|\psi\rangle + |\phi\rangle, |\chi\rangle) = (|\psi\rangle, |\chi\rangle) + (|\phi\rangle, |\chi\rangle)$$
(2.67)

$$(|\psi\rangle, c|\phi\rangle) \equiv \langle \psi|c\phi\rangle = c(|\psi\rangle, |\phi\rangle) \equiv c\langle \psi|\phi\rangle, \quad c \in \mathbb{C}$$

$$(2.68)$$

$$(|\psi\rangle, |\phi\rangle) \equiv \langle \psi | \phi \rangle = (|\phi\rangle, |\psi\rangle)^* \equiv \langle \phi | \psi \rangle^*.$$
(2.69)

Hierbei haben wir gleichzeitig mit der üblichen Mathematiker-Schreibweise des Skalarprodukts die Dirac-Notation der Physiker benutzt, d.h.

$$(|\psi\rangle, |\phi\rangle) \equiv \langle \psi | \phi \rangle. \tag{2.70}$$

Diese Notation wird später nochmals verstärkt motiviert durch Auffassen vom *Dirac-Bra*  $\langle \psi |$  als *Funktional*, s.u.

Mit der obigen Definition kann ein Skalar  $c \in \mathbb{C}$  aus der *rechten* Seite des Skalarprodukts herausgezogen. Steht ein Skalar im linken Argument, so folgt

$$(c|\psi\rangle, |\phi\rangle) = (|\phi\rangle, c|\psi\rangle)^* = (c(|\phi\rangle, |\psi\rangle))^* = c^*(|\psi\rangle, |\phi\rangle), \qquad (2.71)$$

d.h. er kommt konjugiert komplex heraus. Es gilt offensichtlich also auch

$$(|\psi\rangle, c|\phi\rangle) = (c^*|\psi\rangle, |\phi\rangle), \quad c \in \mathbb{C}.$$
 (2.72)

**Definition** (Unitärer Raum) Ein normierter komplexer Vektorraum V, dessen Norm durch ein Skalarprodukt

$$\||\psi\rangle\| \equiv \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle} \tag{2.73}$$

definiert wird, heißt unitärer Raum.

Beispiele:

•  $V = \mathbb{C}^n$ , der übliche *n*-dimensionale komplexe Vektorraum mit Vektoren  $\mathbf{x} = x_1 \mathbf{e}_1 + \ldots + x_n \mathbf{e}_n$ ,  $\mathbf{y} = y_1 \mathbf{e}_1 + \ldots + y_n \mathbf{e}_n$  und den üblichen Basis-Einheitsvektoren  $\mathbf{e}_i$ . Ein Skalarprodukt wird definiert durch

$$(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \equiv \sum_{i=1}^{n} x_i^* y_i.$$
(2.74)

Wir überprüfen, daß mit dieser Definition  $(\mathbf{x}, c\mathbf{y}) = \sum_{i=1}^{n} x_i^* cy_i = c(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ , wie es sein muß.

• Der Vektorraum C([a, b]) der komplexwertigen, auf dem reellen Intervall [a, b] definierten stetigen Funktionen  $\phi : [a, b] \to \mathbb{C}, x \to \phi(x)$  mit der 'Quadrat-Norm'  $\|\psi\|_2 \equiv \sqrt{\int_a^b dx |\phi(x)|^2}$  ist ein unitärer Raum. Das Skalarprodukt zweier Funktionen  $|\psi\rangle, |\phi\rangle$  ist definiert durch das Integral,

$$(|\psi\rangle, |\phi\rangle) \equiv \langle \psi |\phi\rangle \equiv \int_{a}^{b} dx \psi^{*}(x)\phi(x).$$
 (2.75)

**Satz 6.** In unitären Räumen V gilt für alle  $|\psi\rangle \in V$ ,  $|\phi\rangle \in V$ ,

 $|\langle \psi | \phi \rangle|^2 \le \langle \psi | \psi \rangle \langle \phi | \phi \rangle$ , Schwarzsche Ungleichung . (2.76)

AUFGABE: 1. Beweis der Schwarzschen Ungleichung. 2. Überprüfung, daß die Skalarprodukt-Norm in unitären Räumen die Dreiecksungleichung

$$||x+y|| \le ||x|| + ||y||, \quad \text{Dreiecksungleichung}$$
(2.77)

erfüllt.

#### Definition Ein vollständiger unitärer Raum V heißt Hilbertraum.

Beispiele:

- Wieder  $V = \mathbb{C}^n$ .
- Der Vektorraum  $l_2$  der Vektoren mit unendlich vielen Komponenten  $f = (f_1, f_2, ...)$ mit  $f_i \in \mathbb{C}$  und  $\sum_{i=1}^{\infty} |f_i|^2 < \infty$ . Mit dem Skalarprodukt

$$(f,g) \equiv \sum_{i=1}^{\infty} f_i^* g_i \tag{2.78}$$

ist  $l_2$  ein unitärer Raum. Er ist auch vollständig (AUFGABE).

#### 2.2.4 Orthonormalsysteme

Ähnlich wie im endlichdimensionalen unitären Raum  $\mathbb{C}^n$  wollen wir für jeden unitären Raum Basisvektoren definieren, nach denen wir jeden Vektor entwickeln können: das ist ganz analog zu den Fourierreihen. Im Gegensatz zum  $\mathbb{C}^n$  tritt in Funktionenräumen aber die Frage nach der Konvergenz auf. Wir wissen z.B. bereits, daß Fourierreihen zwar konvergieren, die Grenzfunktion i.a. aber nicht mehr *stetig* zu sein braucht.

Wir definieren zunächst

**Definition** Eine abzählbare Menge von Vektoren  $x_i$  eines unitären Raums heißt **Or-**thonormalsystem, wenn

$$(x_i, x_j) = \delta_{ij}.\tag{2.79}$$

Es gilt

Satz 7. (Schmidtsches Orthogonalisierungsverfahren) Sei A eine abzählbare Menge von linear unabhängigen Vektoren  $x_i$  eines unitären Raumes V. Aus den  $x_i$  läßt sich ein Orthonormalsystem rekursiv ausrechnen,

$$e_1 = \frac{x_1}{\|x_1\|}, \quad e_k = \frac{y_k}{\|y_k\|}, \quad y_k \equiv x_k - \sum_{j=1}^{k-1} (e_j, x_k) e_j.$$
 (2.80)

Die  $e_1, ..., e_k$  des Orthonormalsystems erzeugen denselben Unterraum von V wie die entsprechenden  $x_1, ..., x_k$  der Menge A.

Wir erinnern uns jetzt an unsere Basisdarstellung im Vektorraum  $\mathbb{C}^d$ ,

$$\mathbf{y} = \sum_{n=1}^{d} c_n \mathbf{e}_n = \sum_{n=1}^{d} (\mathbf{e}_n, \mathbf{y}) \mathbf{e}_n$$
(2.81)

$$(\mathbf{e}_n, \mathbf{e}_m) = \delta_{nm}$$
, Orthonormalbasis. (2.82)

und definieren allgemein

**Definition** In einem unitären Raum V heißen die Skalarprodukte  $(e_i, y)$  eines Vektors  $y \in V$  mit den Vektoren  $e_i$  eines Orthonormalsystems **Entwicklungskoeffizienten** (Fourier-Koeffizienten) von y bezüglich des Orthonormalsystems.

Wie im  $\mathbb{C}^n$ , möchte man jeden Hilbertraum-Vektor bezüglich eines Orthonormalsystems (Basis) entwickeln können. Das funktioniert in *separablen* Hilberträumen (s.u.):

**Definition** Ein Hilbertraum  $\mathcal{H}$  heißt **separabel**, wenn er eine abzählbare Menge  $\mathcal{M} \equiv \{x_i\}_{i=1}^{\infty}$  enthält, die in  $\mathcal{H}$  dicht ist, d.h. falls es zu jedem  $y \in \mathcal{H}$  ein  $x_i \in \mathcal{M}$ , das y beliebig gut approximiert, also  $||y - x_i|| < \varepsilon$  für beliebig kleines  $\varepsilon$ .

Damit sind wir vorläufig am Ziel angekommen:

**Axiom** Zustände quantenmechanischer Systeme werden durch Vektoren separabler Hilberträume beschrieben.

#### BEISPIELE: ...

Separable Hilberträume haben eine großartige Eigenschaft: in ihnen existiert eine abzählbare Basis, nach der man jeden Vektor entwickeln kann. Wir präzisieren:

**Definition** Ein Orthonormalsystem  $\{e_i\}$  (abzählbar oder überabzählbar) eines Hilbertraums  $\mathcal{H}$  heißt vollständiges Orthonormalsystem (VOS) oder Basis, wenn nur der Nullvektor und kein anderes Element aus  $\mathcal{H}$  zu allen  $e_i$  orthogonal ist.

#### Es gilt nun das

**Satz 8.** Ein Hilbertraum  $\mathcal{H}$  ist genau dann separabel, wenn er ein vollständiges abzählbares Orthonormalsystem enthält.

BEWEIS: vgl. GROSSMANN, Funktionalanalysis:

 $\rightarrow$  Wenn  $\mathcal{H}$  separabel ist, wende man auf die in  $\mathcal{H}$  dichte abzählbare Menge  $\mathcal{M} \equiv \{x_i\}_{i=1}^{\infty}$  das Schmidtsche Orthogonalisierungsverfahren

$$e_1 = \frac{x_1}{\|x_1\|}, \quad e_k = \frac{y_k}{\|y_k\|}, \quad y_k \equiv x_k - \sum_{j=1}^{k-1} (e_j, x_k) e_j.$$
 (2.83)

an, und zwar unter Weglassen aller durch linear abhängige Vektoren erzeugten  $y_k$  (SKIZ-ZE). Die damit entstehende Menge  $\{e_i\}$  ist ein VOS, denn jeder zu allen  $e_i$  orthogonale Vektor  $x \neq o$  muß auch zur Menge  $\mathcal{M}$  orthogonal sein, muß sich aber andererseits beliebig gut durch einen Vektor aus  $\mathcal{M}$  approximieren lassen, was ein Widerspruch ist. Also muß x der Nullvektor sein, und damit ist  $\{e_i\}$  ein VOS.

 $\leftarrow$  ist die hier nicht besonders interessante Richtung, für deren Beweis man auf die Dichtheit der rationalen Zahlen p/q in den reellen Zahlen zurückgreift.

Der folgende Satz stellt noch einmal die wichtigsten Eigenschaften eines vollständigen Orthonormalsystems (Basis) zusammen, die man bei Rechnungen in der QM häufig ausnutzt.

**Satz 9.** Sei  $\{e_n\}_{n=1}^{\infty}$  ein abzählbares Orthonormalsystem eines separablen Hilbertraums  $\mathcal{H}$ .

Die Fourier-Koeffizienten  $(e_n, y)$  erfüllen die Besselsche Ungleichung

$$\sum_{n=1}^{k} |(e_n, y)|^2 \le (y, y)$$
(2.84)

für jedes k. Folgende Aussagen sind äquivalent:

1.  $\{e_n\}_{n=1}^{\infty}$  ist ein VOS.

- 2.  $y = \sum_{n=1}^{\infty} (e_n, y) e_n$  für jedes  $y \in \mathcal{H}$ .
- 3. Für alle  $x, y \in \mathcal{H}$  gilt

$$(y,x) = \sum_{n=1}^{\infty} (y,e_n)(e_n,x),$$
 Vollständigkeitsrelation (2.85)

4. Es gilt für jedes  $x \in \mathcal{H}$ 

$$||x||^2 = \sum_{n=1}^{\infty} |(e_n, x)|^2, \quad \text{Parsevalsche Gleichung} .$$
 (2.86)

BEWEIS: ...

## 2.2.5 Die Dirac-Notation (II)

Die Dirac-Notation ist eine bequeme Schreibweise für Zustände  $\psi$ , Skalarprodukte ( $\psi$ ,  $\phi$ ), Fourierkoeffizienten etc. in einem Hilbertraum  $\mathcal{H}$ . Wir fassen zunächst alle Definitionen zusammen:

- Zustände  $\psi \in \mathcal{H}$  werden geschrieben als **Dirac-Kets**  $|\psi\rangle$ .
- Das Skalarprodukt  $(\psi, \phi)$  wird geschrieben als

$$(\psi, \phi) \equiv \langle \psi | \phi \rangle. \tag{2.87}$$

• Fourierkoeffizienten bezüglich einer Basis mit Basisvektoren  $e_n \equiv |n\rangle$ werden zu

$$(e_n, f) = \langle n | f \rangle \tag{2.88}$$

• Die Vollständigkeitsrelation mit Basisvektoren  $e_n \equiv |n\rangle$  wird

$$\langle f|g\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \langle f|n\rangle \langle n|g\rangle \rightsquigarrow \hat{1} = \sum_{n=1}^{\infty} |n\rangle \langle n|, \text{ vollständige Eins }.$$
 (2.89)

$$|g\rangle = \hat{1}|g\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |n\rangle \langle n|g\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \langle n|g\rangle |n\rangle.$$
(2.90)

Die letzte Gleichung ist nichts anderes als die Fourierzerlegung von  $|g\rangle$  in der Basis  $|n\rangle$ .

• Die Parsevalsche Gleichung lautet dann

$$\langle f|f\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |\langle n|f\rangle|^2.$$
(2.91)

Insbesondere die vollständige Eins ist ein nützliches Werkzeug, um Skalarprodukte explizit nach Fourierkoeffizienten aufzuspalten, i.e. durch **Einschieben der Eins** wie in der Vollständigkeitsrelation,

$$\langle f|g\rangle = \langle f|\hat{1}|g\rangle = \langle f|\sum_{n=1}^{\infty} |n\rangle\langle n|g\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \langle f|n\rangle\langle n|g\rangle.$$
(2.92)

Beispiel:

• Sei der Hilbertraum  $\mathcal{H} = \mathbb{C}^k$ , der übliche k-dimensionale komplexe Vektorraum mit Vektoren  $\mathbf{x} = x_1 \mathbf{e}_1 + \ldots + x_k \mathbf{e}_k$ . Wir schreiben diese als Dirac-Kets

$$|x\rangle = \sum_{n=1}^{k} x_k |n\rangle = \sum_{n=1}^{k} = \langle n|x\rangle |n\rangle.$$
(2.93)

Die vollständige Eins ist hier nichts anderes als die Einheitsmatrix in, d.h. in der Basis der  $|n\rangle$  haben wir

$$\hat{1} = \sum_{n=1}^{k} |n\rangle \langle n| = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0\\ 0 & 1 & \dots & 0\\ \dots & \dots & \dots & 0\\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}.$$
(2.94)

Woher kommt jetzt aber der Name Dirac-Kets? Aus dem englischen bracket für 'Klammer', d.h. das Skalarprodukt  $\langle \psi | \phi \rangle$ . Die  $| \phi \rangle$  sind dort die oben definierten Kets, die  $\langle \psi |$  heißen **Dirac-Bras** oder einfach **Bras**. Die Bras sind Elemente des Dualraums  $\mathcal{H}'$  des Hilbertraums  $\mathcal{H}$ 

**Definition** Der **Dualraum**  $\mathcal{H}'$  eines Hilbertraums  $\mathcal{H}$  ist der Raum aller linearen (und beschränkten) Funktionale

$$F: \mathcal{H} \to \mathbb{C}, \quad |\phi\rangle \to F(|\phi\rangle).$$
 (2.95)

Nach einem Satz aus der Funktionalanalysis können alle solchen Funktionale mit Hilfe des Skalarprodukts dargestellt werden, d.h. für jedes Funktional F gibt es einen Vektor  $|\psi\rangle$ , so daß

$$F(|\phi\rangle) = (|\psi\rangle, |\phi\rangle) \equiv \langle \psi | \phi \rangle \tag{2.96}$$

In der letzten Gleichung haben wir hierbei also die Identifikation

$$F: \mathcal{H} \to \mathbb{C} \leftrightarrow \langle \psi | : \mathcal{H} \to \mathbb{C}$$

$$(2.97)$$

gemacht: das Funktional  $\langle \psi |$  bewirkt nichts anderes als die skalare Multiplikation mit dem Vektor  $|\psi \rangle$ .

Beispiel:

• Sei der Hilbertraum wieder  $\mathcal{H} = \mathbb{C}^k$ , der übliche k-dimensionale komplexe Vektorraum mit Vektoren  $\mathbf{x} = x_1 \mathbf{e}_1 + ... + x_k \mathbf{e}_k$ . Dann sind die Dirac-Kets  $|x\rangle$  die üblichen Spalten-Vektoren, die entsprechenden Dirac-Bras hingegen sind die Zeilen-Vektoren mit komplex-konjugierten Einträgen,

$$|x\rangle = \begin{pmatrix} x_1 \\ \dots \\ x_n \end{pmatrix}, \quad \langle x| = (x_1^*, \dots, x_n^*).$$
(2.98)

Damit werden die  $\langle x |$  tatsächlich zu linearen Funktionalen in der Form von Skalarprodukten, d.h.

$$\langle x|: \mathbb{C}^n \to \mathbb{C}, \quad |y\rangle \to \langle x|y\rangle = (|x\rangle, |y\rangle) = \sum_{n=1}^k x_n^* y_n$$
$$= (x_1^*, ..., x_n^*) \begin{pmatrix} y_1 \\ .. \\ y_n \end{pmatrix}.$$
(2.99)

AUFGABE: Betrachte den reellen Vektorraum  $\mathbf{R}^3$ . Was ist die Wirkung der linearen Funktionale  $\langle e_1 |, \langle e_2 |, \langle e_3 |, \text{deren Dirac-Bras zu den üblichen Basis-Dirac-Kets } | e_1 \rangle, | e_2 \rangle,$  $| e_3 \rangle$  (Einheitsvektoren des  $\mathbf{R}^3$ ) dual sind?

#### 2.2.6 Funktionenräume in der QM

Als Beispiel für einen Funktionenraum hatten wir bereits den Vektorraum C([a, b])der komplexwertigen, auf dem reellen Intervall [a, b] definierten *stetigen* Funktionen  $\psi : [a, b] \to \mathbb{C}, x \to f(x)$ , kennen gelernt. Mit der Maximums-Norm  $||f||_{\max}$  ist dieser Funktionenraum vollständig, also ein Banachraum. Diese Norm ist aber, im Gegensatz zur 'Quadrat-Norm'  $||f||_2 \equiv \sqrt{\int_a^b dx |f(x)|^2}$ , nicht durch ein Skalarprodukt induziert also ist C([a, b]) mit der Maximums-Norm kein Hilbert-Raum. Andererseits ist C([a, b])in der 'Quadrat-Norm' nicht vollständig, da es Funktionenfolgen mit Grenzfunktionen in der Quadrat-Norm gibt, die nicht mehr stetig sind.

Um trotzdem sowohl Vollständigkeit als auch die Quadratnorm (und damit Hilberträume) zu bekommen, weitet man den Funktionsbegriff etwas aus und geht zu sogenannten *messbaren* Funktionen über. Im Wesentlichen beinhaltet diese Funktionenklasse auch solche Funktionen, die nicht mehr stetig zu sein brauchen, die aber *quadratsintegrabel* sind. Den entsprechenden Funktionenraum bezeichnet man als den **Funktionenraum**  $L_2(\Omega)$  der quadratintegralen, komplexwertigen Funktionen über einem Gebiet  $\Omega \in \mathbb{R}^n$ . Für  $\Omega = [a, b] \in \mathbb{R}$  ist das ein endliches Intervall in den reellen Zahlen. Häufig hat man in der QM dreidimensionale Probleme - dann ist  $\Omega = \mathbb{R}^3$ . Es gilt nun folgender Satz: **Satz 10.** Der Funktionenraum  $L_2(\Omega)$  der quadratintegralen, komplexwertigen Funktionen mit der  $L_2$ -Norm

$$||f||_{2} \equiv \left(\int_{\Omega} d^{n} x |f(\mathbf{x})|^{2}\right)^{\frac{1}{2}}$$
(2.100)

ist ein separabler Hilbertraum.

Wir werden diesen Satz hier allerdings nicht beweisen. Weiterführendes Material in den mathematischen Gebieten *Maßtheorie* (insbesondere zum verallgemeinerten Integrationsbegriff: das Lebesgue-Integral, das das Riemannsche Integral für messbare Funktionen verallgemeinert, vgl. z. B. FORSTER III) sowie *Funktionalanalysis*. Beides ist nützlich, aber nicht wesentlich für ein tieferes Verständnis der QM.

Im  $L_2(\Omega)$  gibt es nun, da es sich um einen separablen Hilbertraum handelt, vollständige Orthonormalsysteme. Für  $\Omega \in \mathbb{R}^1$  (reelles Intervall) handelt es sich dabei um unterschiedliche Basisfunktionen, die alle für bestimmte Modellsysteme der QM eine große Rolle spielen. Kennen gelernt haben wir bereits die folgenden:

#### 2.2.6.1 Trigonometrische Basisfunktionen

(vgl. GROSSMANN)

• Im endlichen Intervall $\Omega = [-L,L] \in \mathbb{R}^1$ sind das die Basisfunktionen der komplexen Fourierreihe,

$$e_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2L}} e^{i\frac{n\pi}{L}x}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$
 (2.101)

hier mit Normierungsfaktor $\frac{1}{\sqrt{2L}}$ versehen, so daß $\|e_n\|_2=1$  .

• Alternativ kann man in  $\Omega = [-L, L]$  als Orthogonal system auch die reell-wertigen Basisfunktionen (Fourier-Entwicklung nach Sinus- und Cosinus-Funktionen) verwenden,

$$\frac{1}{\sqrt{2L}}, \quad \frac{1}{\sqrt{L}}\cos\frac{n\pi}{L}x, \quad \frac{1}{\sqrt{L}}\sin\frac{n\pi}{L}x. \tag{2.102}$$

• Im Intervall  $\Omega = [0, L] \in \mathbb{R}^1$  sind die Basisfunktionen Gl. (2.10)

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad n = 1, 2, 3, \dots$$
 (2.103)

vollständig. Dieses sind die Basisfunktionen des Teilchens im Kastenpotential mit unendlich hohen Wänden! Sie haben gleichzeitig die schöne Eigenschaft, daß sie am Rand des Kastens verschwinden, d.h.  $\psi_n(0) = \psi_n(L) = 0$ .

• Ebenfalls vollständig im Intervall  $\Omega = [0, L] \in \mathbb{R}^1$  sind die Cosinus-Funktionen,

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}\cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right)}, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$
 (2.104)

## 2.3 Physikalische Bedeutung der Fourierkoeffizienten

## 2.3.1 Diskretisierte Schrödinger-Gleichung

Als Vorbereitung betrachten wir eine diskretisierte Version der eindimensionalen stationären SG auf einem endlichen Intervall,

$$\hat{H}\psi(x) \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x), \quad x \in [a, b].$$
(2.105)

Wir ersetzen hierzu die Wellenfunktion  $\psi(x)$  durch einen (komplexen) Vektor  $|\psi\rangle \in \mathbb{C}^{n+1}$ , dessen Komponenten die Werte von  $\psi(x)$  an n+1 diskreten Stützstellen  $x_i$  sind,

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_0 \\ \dots \\ \psi_n \end{pmatrix}, \quad \psi_i = \psi(x_i), \quad x_i = a + \frac{i}{n}(b-a), \quad i = 0, \dots, n.$$
(2.106)

Es ist also gerade  $x_0 = a$  und  $x_n = b$ .

Wir approximieren weiterhin die zweite Ableitung  $\psi''(x)$  durch einen Differenzenausdruck (vgl. BRONSTEIN oder Vorlesungen zur numerischen Msthematik),

$$\psi''(x_i) \to \frac{\psi(x_{i+1}) - 2\psi(x_i) + \psi(x_{i-1})}{\delta^2}, \quad \delta \equiv \frac{b-a}{n}, \quad i = 1, ..., n-1.$$
 (2.107)

In der diskretisierten Version wird die SG damit zu einem linearen Gleichungssystem für die Komponenten  $\psi(x_i)$ ,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\psi(x_{i+1}) - 2\psi(x_i) + \psi(x_{i-1})}{\delta^2} + V(x_i)\psi(x_i) = E\psi(x_i), \quad i = 1, ..., n - 1.$$
(2.108)

Für i = 0 und i = n hängt die Form dieser diskretisierten Gleichung von den Randbedingungen bei x = a und x = b ab. Wir können in Gl. (2.108) z.B. formal  $\psi(x_{-1}) = \psi(x_{n+1}) = 0$  setzen (WF verschwindet außerhalb des Intervalls [a, b]), oder periodische Randbedingungen fordern, also in Gl. (2.108) formal

$$\psi_{-1} = \psi_n, \quad \psi_{n+1} = \psi_0, \quad \text{periodische Randbedingungen} .$$
 (2.109)

In beiden Fällen schreiben wir Gl. (2.108) mit den Komponenten  $\psi_i$  des Vektors  $|\psi\rangle$  in Matrixform

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_0 & T & 0 & \dots & r \\ T & \varepsilon_1 & T & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots & T & \varepsilon_{n-1} & T \\ r & 0 & \dots & T & \varepsilon_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_0 \\ \vdots \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_0 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix}.$$
(2.110)

Hierbei ist

$$\varepsilon_i \equiv \frac{\hbar^2}{m\delta^2} + V(x_i), \quad T \equiv -\frac{\hbar^2}{2m\delta^2}$$
 (2.111)

$$r \equiv \begin{cases} 0 & \text{feste RB} \\ T & \text{periodische RB} \end{cases}$$
(2.112)

Die Matrixform der diskretisierten SG Gl. (2.108) hat also die Form

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle, \quad |\psi\rangle \in \mathbf{C}^{n+1}$$
 (2.113)

mit einer quadratischen  $(n + 1) \times (n + 1)$ -Matrix. Als Eigenwertgleichung hat diese Gleichung mit der symmetrischen Matrix H nun n+1 Eigenlösungen, d.h. Eigenvektoren  $|\alpha\rangle$  mit Eigenwerten  $E_{\alpha}$ ,

$$H|\alpha\rangle = E_{\alpha}|\alpha\rangle. \tag{2.114}$$

AUFGABE 1: Betrachte die diskrete Version der SG in einer Dimension. Bestimme zunächst die normierten Eigenvektoren  $|\alpha\rangle$  und die zugehörigen Eigenwerte  $E_{\alpha}$  von Gl. (2.114) für den Fall von nur zwei Stützstellen i = 0 und i = 1. Nimm hierzu für die Matrix H an, daß  $\varepsilon_0 = \varepsilon_1 = 0$ .

AUFGABE 2: Bestimme die normierten Eigenvektoren  $|\alpha\rangle$  und die zugehörigen Eigenwerte  $E_{\alpha}$  von Gl. (2.114) für  $\varepsilon_i = 0$  periodische Randbedingungen r = T.

a) Führe die Rechnung numerisch aus (MATHEMATICA), z.B. für n = 5. Stelle das 'Spektrum' der Eigenwerte  $E_{\alpha}$  für n = 100 graphisch dar. Setze T = 1 in der Matrix des Hamiltonians H.

b) Zeige, daß sich die Matrix H in Dirac-Notation als

$$H = T \sum_{l=0}^{n-1} (|l\rangle \langle l+1| + |l+1\rangle \langle l|) + |0\rangle \langle n| + |n\rangle \langle 0|$$
(2.115)

schreiben läßt.

c) Mache für die Eigenvektoren  $|\alpha\rangle$  den Ansatz  $|\alpha\rangle = \sum_{l=0}^{n} e^{i\alpha l} |l\rangle$  mit den Basis-Kets  $|l\rangle$  und bestimme damit die möglichen Werte für  $\alpha$  und  $E_{\alpha}$ .

## 2.3.2 Die Wahrscheinlichkeitsamplituden

In Dirac-Notation sind die Basisvektoren des  $\mathbf{C}^{n+1}$  die Kets  $|i\rangle$ , i = 0, ...n. Die Komponenten  $\psi_i$  eines normierten Zustandes  $|\psi\rangle$  entsprechen in der ursprünglichen SG den Werten der WF  $\psi(x_i)$ . Das Betragsquadrat  $|\psi(x_i)|^2$  ist die W-dichte, das Teilchen am Ort  $x_i$  zu finden. Im diskreten Fall können wir jetzt von Wahrscheinlichkeiten (und nicht Wahrscheinlichkeitsdichten) sprechen:

$$\begin{aligned} |\psi(x_i)|^2 &= |(|i\rangle, |\psi\rangle)|^2 &= |\langle i|\psi\rangle|^2 \equiv p_i \\ &\equiv & \text{Wahrscheinlichkeit, das Teilchen an Stützstelle } i \text{ zu finden}(2.116) \end{aligned}$$

Bei einer Messung des 'Ortes', der hier ja disktretisiert ist, sind die Fourierkoeffizienten  $\langle i|\psi\rangle$  in der Entwicklung

$$|\psi\rangle = \sum_{i=0}^{n} \langle i|\psi\rangle|i\rangle \tag{2.117}$$

nach den Basisvektoren  $|i\rangle$  also Wahrscheinlichkeitsamplituden, d.h. deren Betragsquadrat gibt gerade die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen an der Stützstelle *i* zu finden. Da die Stützstelle *i* genau dem Zustandsvektor  $|i\rangle \in \mathbb{C}^{n+1}$  entspricht, kann man von der Wahrscheinlichkeit sprechen, das Teilchen im Zustand  $|i\rangle$  aufzufinden. Wir stellen fest, daß es hier nur abzählbar viele, nämlich sogar endlich viele, und zwar n+1 Möglichkeiten gibt, denn es gibt ja nur n + 1 Stützstellen. Für die Summe der Wahrscheinlichkeiten gilt natürlich

$$\sum_{i=0}^{n} p_{i} = \sum_{i=0}^{n} |(|i\rangle, |\psi\rangle)|^{2} = \langle \psi | \psi \rangle = 1,$$
(2.118)

was natürlich nichts anderes als die Parsevalsche Gleichung ist.

In Analogie zu dieser 'Ortsmessung' postulieren wir nun, daß entsprechendes bei einer Messung der Energie des Teilchens gilt:

**Axiom 3** Sei  $|\psi\rangle$  ein normierter Vektor eines Hilbertraums, in dem es eine Basis aus Eigenvektoren der Energie H gemäß

$$H|\alpha\rangle = E_{\alpha}|\alpha\rangle \tag{2.119}$$

gebe. Dann wird bei einer Messung der Energie einer der Eigenwerte  $E_{\alpha}$  gemessen, und zwar geschieht das mit der Wahrscheinlichkeit  $|\langle \alpha | \psi \rangle|^2$ . Tritt *Entartung* auf, d.h. gibt es mehrere  $|\alpha_i\rangle$  zu einem  $E_{\alpha}$ , so ist diese Wahrscheinlichkeit durch  $\sum_i |\langle \alpha_i | \psi \rangle|^2$  zu ersetzen.

Insbesondere gibt es also keine 'Zwischenwerte' - es werden  $ausschlie \beta lich$  Eigenwerte gemessen.

Wir erkennen, daß das Skalarprodukt sowie die Parsevalsche Gleichung  $\sum_{\alpha} |\langle \alpha | \psi \rangle |^2 = \langle \psi | \psi \rangle = 1$  eine ganz entscheidende Rolle bei der Entwicklung dieser physikalischen Interpretation spielt. Das ist der Grund, warum Hilberträume in der QM so wichtig sind.

## 2.4 Der Harmonische Oszillator

Wir betrachten eins der wichtigsten Modellsysteme der QM überhaupt: den harmonischen Oszillator. In d = 1 lautet der Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \qquad (2.120)$$

und wir wollen hierfür die stationäre SG

$$\hat{H}_{\rm osc}\psi = E\psi \rightsquigarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)\psi(x) = E\psi(x), \qquad (2.121)$$

lösen.

## 2.4.1 Stationäre Zustände

Um (2.121) zu lösen, führen wir dimensionslose Größen ein,

$$q \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x, \quad \varepsilon \equiv \frac{E}{\hbar\omega}, \quad \phi(q) := \psi(x).$$
 (2.122)

Damit wird (2.121) zu

$$\phi''(q) + (2\varepsilon - q^2)\phi(q) = 0.$$
(2.123)

Für große  $q \to \infty$  argumentieren wir, daß man den Term  $\propto \varepsilon$  vernachlässigen kann. Das ergibt asymptotisch für  $\phi(q \to \pm \infty)$ ,

$$\phi(q \to \pm \infty) \propto e^{\pm q^2/2},\tag{2.124}$$

was wir durch Differenzieren überprüfen,

$$\phi'(q \to \pm \infty) \propto \pm q e^{\pm q^2/2}, \quad \phi''(q \to \pm \infty) \propto \pm e^{\pm q^2/2} + q^2 e^{\pm q^2/2} \to q^2 e^{\pm q^2/2}.$$
 (2.125)

Dieses ist ein einfaches Bespiel einer **asymptotischen Analyse** einer DGL (BEN-DER,ORSZAG).

Offensichtlich gibt es zwei verschiede Lösungen: die eine wächst gegen Unendlich mit  $q \to \pm \infty$ , während die andere gegen Null geht. Nur der letzte Fall führt zu normierbaren Wellenfunktionen, deshalb schreiben wir

$$\phi(q) = e^{-q^2/2} h(q) \tag{2.126}$$

mit einem Ansatz für die bis jetzt unbekannte Funktion h(q), die bestimmt wird, indem man in Gl. (2.123) einsetzt:

$$h''(q) - 2qh'(q) + (2\varepsilon - 1)h(q) = 0.$$
(2.127)

Diese Gleichung versuchen wir, durch einen Potenzreihenansatz zu lösen,

$$h(q) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k q^k$$
  

$$h'(q) = \sum_{k=0}^{\infty} k a_k q^{k-1}$$
  

$$h''(q) = \sum_{k=1}^{\infty} k(k+1) a_{k+1} q^{k-1} = \sum_{k=0}^{\infty} (k+1)(k+2) a_{k+2} q^k.$$
 (2.128)

Einsetzen in Gl. (2.127) ergibt die Rekursion

- -

$$\sum_{k=0}^{\infty} \left[ (k+1)(k+2)a_{k+2} - 2ka_k + (2\varepsilon - 1)a_k \right] q^k = 0.$$
(2.129)

Die linke Seite muß für alle Werte von q verschwinden, deshalb muß die Klammer [...] ebenfalls Null sein, was auf

$$a_{k+2} = \frac{2k - 2\varepsilon + 1}{(k+1)(k+2)}a_k \tag{2.130}$$

führt. Für große  $k \to \infty$  ergibt sich

$$a_{k+2} \approx \frac{2}{k} a_k, \quad k \to \infty,$$
 (2.131)

Falls die Folge der  $a_k$  nicht oberhalb eines bestimmten k = n abbricht, nähert sich damit die entsprechende Potenzreihe h(q) asymptotisch der Funktion  $e^{q^2}$  für große q (AUFGA-BE). Dann ist allerdings die WF  $\phi(q) = e^{-q^2/2}h(q) \rightarrow e^{q^2/2}$  nicht mehr normierbar. Als einziger Ausweg bleibt zu fordern, daß die Folge der  $a_k$  oberhalb eines n = k abbricht und damit h(q) ein Polynom endlichen Grades wird. Das bedeutet, daß der Zähler in Gl. (2.130) für ein bestimmtes k = n verschwindet, also

$$2\varepsilon = 2n + 1 \rightsquigarrow \varepsilon \equiv \varepsilon_n = n + \frac{1}{2}.$$
 (2.132)

Diese Bedingung legt in der Tat die möglichen Werte der Energie E fest, nämlich

$$E \equiv E_n = \hbar \omega \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$
 (2.133)

Damit haben wir die berühmte Quantisierung der Energiewerte des harmonischen Oszillators hergeleitet, die Planck ja bereits bei der Herleitung seiner Strahlungsformel angenommen hatte!

Für jede ganze Zahl *n* ergibt sich ein Eigenwert der Energie  $E_n$  mit der entsprechenden Eigenfunktion  $\phi_n(q) = h_n(q)e^{-q^2/2}$  aus der endlichen Rekursions-Formel (2.130) für das Polynom  $h_n(q)$ . Die Polynome h(q) erfüllen die DGL (2.127) mit  $2\varepsilon = n$ , also

$$h''(q) - 2qh'(q) + 2nh(q) = 0$$
, Hermite-Differentialgleichung (2.134)

und heißen **Hermite-Polynome**  $H_n(q)$ , wenn sie so normiert werden, daß die WF  $\psi_n(x) \equiv \phi_n(q)$  als Funktion der echten Ortsvariable x gemäß

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_n(x)|^2 = 1$$
 (2.135)

normiert sind. Explizit findet man als Lösung von  $\hat{H}_{osc}|n\rangle = E_n|n\rangle$  also die Eigenwerte  $E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$  und die Eigenzustände

$$\langle x|n\rangle = \psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{n!2^n}} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

$$H_n(q) = (-1)^n e^{q^2} \frac{d^n}{dq^n} e^{-q^2}.$$

$$(2.136)$$

Die Hermite-Polynome  $H_n(x)$  für die ersten *n* folgen mittels (2.136) (wir schreiben für q jetzt x)

$$H_0(x) = 1$$

$$H_1(x) = 2x$$

$$H_2(x) = 4x^2 - 2$$

$$H_3(x) = 8x^3 - 12x$$

$$H_4(x) = 16x^4 - 48x^2 + 12.$$
(2.137)

## 2.4.2 Orthonormalität und Vollständigkeit

Die Hermite-Polynome  $H_n(x), -\infty < x < \infty$ , kann man durch eine erzeugende Funktion

$$e^{2tx-t^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(x)}{n!} t^n, \quad -\infty < x, t < \infty$$
 (2.138)

definieren.

AUFGABE 1: Zeige hiermit die Formel

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}.$$
 (2.139)

AUFGABE 2: Bestimme den Normierungsfaktor  $N_n$  der Eigenzustände

$$\psi_n(x) \equiv N_n H_n(x) e^{-\frac{x^2}{2}}$$
 (2.140)

des harmonischen Oszillators (wir haben  $\frac{m\omega}{\hbar} = 1$  gesetzt). Hierzu benutze man das folgende Kurvenintegral in der komplexen Ebene,

$$\frac{1}{2\pi i} \int_C \frac{dz}{z^n} = \delta_{n,1}, \quad n \in \mathbb{Z}$$
(2.141)

wobei die Kurve um den Ursprung läuft, und zeige damit zunächst die Darstellung

$$H_n(x) = \frac{n!}{2\pi i} \int_C dz \frac{e^{2zx-z^2}}{z^{n+1}}.$$
(2.142)

Zeige damit, daß die  $\psi_n(x)$  orthogonal sind und daß

$$N_n = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}n!2^n}}.$$
 (2.143)

AUFGABE 3: Beweise die Vollständigkeit der  $\psi_n(x)$ . Nimm hierfür an, daß es eine WF  $\phi(x)$  gibt mit  $\int_{-\infty}^{\infty} dx H_n(x) e^{-\frac{x^2}{2}} \phi(x) = 0$  für alle *n*. Definiere hierzu die Fouriertransformierte

$$\tilde{F}(z) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{x^2}{2}} e^{izx} \phi(x).$$
(2.144)

## 2.5 Lineare Operatoren in der QM

Mit dem Ortsoperator  $\hat{x}$ , dem Impulsoperator  $\hat{p}$  und dem Hamiltonoperator  $\hat{H}$  haben wir bereits *lineare Operatoren* kennengelernt, die jeweils zu bestimmten Größen der klassischen Mechanik korrespondieren (Korrespondenzprinzip). Wir wollen einige Definitionen und Eigenschaften linearer Operatoren in Hilberträumen zusammenfassen.

#### 2.5.1 Lineare Operatoren in Hilberträumen

Das Folgende bezieht sich auf Hilberträume, obwohl analoge Definitionen auch in anderen Räumen (z.B Banachräumen) funktionieren.

**Definition** Ein linearer Operator  $\hat{A}$  in einem Hilbertraum  $\mathcal{H}$  ist eine lineare Abbildung zwischen Unterräumen von  $\mathcal{H}$ ,

$$\hat{A}: D(\hat{A}) \to W(\hat{A}), \quad x \to \hat{A}x, \quad \hat{A}(c_1x_1 + c_2x_2) = c_1\hat{A}x_1 + c_2\hat{A}x_2.$$
 (2.145)

Das ist also genau wie in der linearen Algebra im  $\mathbb{C}^n$ , wo die linearen Operatoren durch endliche Matrizen dargestellt werden können. Zusätzlich kommt in allgemeinen Hilberträumen (die ja auch unendlich dimensonal sein können) der Begriff des *beschränkten Operators* hinzu.

**Definition** Ein linearer Operator  $\hat{A}$  heißt **beschränkt**, wenn es eine Konstante C > 0 gibt, so daß

$$\|\hat{A}x\| \le C\|x\| \tag{2.146}$$

für alle  $x \in D(\hat{A})$  gilt. Die **Norm** eines linearen Operators  $\hat{A}$  ist die kleinste Schranke

$$\|\hat{A}\| \equiv \sup_{o \notin x \in D(\hat{A})} \frac{\|Ax\|}{\|x\|}.$$
(2.147)

Beispiele:

• Auf den Zuständen  $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$  des Kastenpotentials ist der Ortsoperator beschränkt, der Impulsoperator aber unbeschränkt.

Wie bei Matrizen im  $\mathbb{C}^n$  sind die hermiteschen Operatoren mit ihren reellen Eigenwerten besonders interessant:

**Definition** Der zu einem linearer Operator  $\hat{A}$  mit in  $\mathcal{H}$  dichtem Definitionsbereich  $D(\hat{A})$ adjungierte Operator  $\hat{A}^{\dagger}$  ist über das Skalarprodukt

$$(y, \hat{A}x) = (\hat{A}^{\dagger}y, x), \quad x, y \in D(\hat{A})$$

$$(2.148)$$

definiert. In Dirac-Notation lautet das

$$\langle y|\hat{A}x\rangle = \langle \hat{A}^{\dagger}y|x\rangle, \quad x,y \in D(\hat{A}).$$
 (2.149)

• Im Hilbertraum  $\mathcal{H} = \mathbb{C}^n$  ist die zu einer quadratischen Matrix A adjungierte Matrix  $A^{\dagger} = (A^*)^T$  (konjugiert komplex, Zeilen und Spalten vertauscht).

Es gilt für das Produkt zweier Operatoren  $\hat{A}$ ,  $\hat{B}$ ,

$$(\hat{A}\hat{B})^{\dagger} = \hat{B}^{\dagger}\hat{A}^{\dagger}, \qquad (2.150)$$

d.h. die Reihenfolge kehrt sich um (AUFGABE).

Weiterhin definieren wir

**Definition** Ein linearer Operator  $\hat{A}$  mit in  $\mathcal{H}$  dichtem Definitionsbereich  $D(\hat{A})$  heißt hermitesch, wenn

$$(y, \hat{A}x) = (\hat{A}y, x), \quad x, y \in D(\hat{A}).$$
 (2.151)

Beispiele:

- Im Hilbertraum  $\mathcal{H} = \mathbb{C}^n$  die Matrizen  $A = A^{\dagger} = (A^*)^T$
- Im Hilbertraum  $\mathcal{H} = L_2([a, b])$  der quadratintegrablen Funktionen auf dem Intervall [a, b] ist der Ortsoperator  $\hat{x}$  hermitesch. Für den Impulsoperator  $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$  ist die Situation etwas diffiziler: Hier muß man den Definitionsbereich auf Funktionen einschränken, die am Rand verschwinden.

Man verschärft die Bedingung 'hermitesch' noch etwas, indem man definiert:

**Definition** Ein hermitescher Operator  $\hat{A}$  heißt **selbstadjungiert**, wenn für die Definitionsbereich gilt:  $D(\hat{A}) = D(\hat{A}^{\dagger})$ .

Für beschränkte Operatoren fallen die Begriffe hermitesch und selbstadjungiert zusammen.

Es gilt

**Satz 11.** Die Eigenwerte selbstadjungierter Operatoren  $\hat{A}$  sind reell, und Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal. Weiterhin sind alle Skalarprodukte  $(x, \hat{A}x), x \in D(\hat{A})$  hermitescher Operatoren  $\hat{A}$  reell.

Selbstadjungierte Operatoren sind also immer hermitesch, haben reelle Eigenwerte, und  $(x, \hat{A}x)$  ist immer reell.

In Verallgemeinerung unserer bisherigen Axiome postulieren wir deshalb

**Axiom** Physikalische Messgrößen werden durch selbstadjungierte Operatoren  $\hat{A}$  beschrieben.

Beispiele:

• Orts- , Impuls- und Hamiltonoperator.

Orts- und Impulsoperator sind leider mathematisch gesehen etwas schwierige Operatoren (Unbeschränktheit).

Das vorerst letzte Axiom betrifft die Messwerte:

**Axiom** Der Erwartungswert  $\langle \hat{A} \rangle_{|\psi\rangle}$  der entsprechenden Messgröße  $\hat{A}$  für ein System im Zustand  $|\psi\rangle$  ist durch das Skalarprodukt

$$\langle \hat{A} \rangle_{|\psi\rangle} = \langle \psi | \hat{A} \psi \rangle \tag{2.152}$$

gegeben. Weiterhin habe  $\hat{A}$  Eigenvektoren  $|\lambda\rangle$ , die im Hilbertraum  $\mathcal{H}$  ein VOS bilden. Die möglichen Messwerte sind die Eigenwerte  $\lambda$  von  $\hat{A}$ , die mit der Wahrscheinlichkeit  $p_{\lambda} \equiv |\langle \lambda | \psi \rangle|^2$  auftreten. Tritt *Entartung* auf, d.h. gibt es mehrere  $|\lambda_i\rangle$  zu einem  $\lambda$ , so ist diese Wahrscheinlichkeit durch  $p_{\lambda} = \sum_{i} |\langle \lambda_i | \psi \rangle|^2$  zu ersetzen.

## 2.6 Erzeuger und Vernichter, Phononen und Photonen

Wir wollen hier den eindimensionalen harmonischen Oszillator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{x}^2, \qquad (2.153)$$

mit einer algebraischen Methode behandeln, die für die Weiterentwicklung und Interpretation der QM ein große Rolle spielt.

## **2.6.1** Auf- und Absteigeoperatoren $a^{\dagger}$ und a

Wir definieren zwei Operatoren

$$a \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}, \quad \text{Vernichter}$$
 (2.154)

$$a^{\dagger} \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}, \quad \text{Erzeuger} .$$
 (2.155)

Weil  $\hat{x}$  und  $\hat{p}$  selbst hermitesch sind, ist der Erzeuger  $a^{\dagger}$  ('a dagger') der zum Vernichter adjungierte Operator. Aus dem Kommutator von Ort  $\hat{x}$  und Impuls  $\hat{p}$  finden wir leicht

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \rightsquigarrow [a, a^{\dagger}] = 1.$$

$$(2.156)$$

Wir definieren nun den **Besetzungszahl-Operator**  $\hat{N}$ 

$$\hat{N} \equiv a^{\dagger}a, \tag{2.157}$$

der hermitesch ist wegen  $\hat{N}^{\dagger} = (a^{\dagger}a)^{\dagger} = a^{\dagger}(a^{\dagger})^{\dagger} = \hat{N}$ , vgl. Gl. (2.150). Der Hamiltonian (2.153) schreibt sich damit als (AUFGABE)

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{x}^2 = \hbar\omega \left(a^{\dagger}a + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right).$$
(2.158)

Da  $\hat{H}$  als Messgröße selbstadjungiert sein muß, gilt dieses offenbar auch für  $\hat{N}$ , dessen Eigenwerte also reell sein müssen und die wir als n bezeichen, um nun zu zeigen, daß  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$  Wir bezeichnen die entsprechenden normierten Eigenvektoren von  $\hat{N}$  mit  $|n\rangle$ ,

$$N|n\rangle = n|n\rangle. \tag{2.159}$$

SCHRITT 1: Wir zeigen  $n \ge 0$ : dazu bemerken wir

$$0 \le ||a|n\rangle||^2 = \langle n|a^{\dagger}a|n\rangle = \langle n|\tilde{N}|n\rangle = n\langle n|n\rangle = n.$$
(2.160)

SCHRITT 2: Wir steigen die Leiter hinunter: wenn  $|n\rangle$  ein Eigenvektor von  $\hat{N}$  mit Eigenwert n ist, dann ist auch  $a|n\rangle$  ein EV von  $\hat{N}$  mit EW n-1,  $a^2|n\rangle$  ein EV von  $\hat{N}$  mit EW n-2,  $a^3|n\rangle$  ein EV von  $\hat{N}$  mit EW n-3,...

$$\hat{N}a = a^{\dagger}aa = \left(aa^{\dagger} - [a, a^{\dagger}]\right)a = \left(aa^{\dagger} - 1\right)a = a\left(\hat{N} - 1\right)$$

$$\rightsquigarrow \hat{N}\underline{a|n} = a\left(\hat{N} - 1\right)|n\rangle = (n - 1)\underline{a|n}$$

$$\rightsquigarrow \hat{N}\underline{a^{2}|n} = (\hat{N}a)a|n\rangle = a\left(\hat{N} - 1\right)a|n\rangle = a(n - 1 - 1)a|n\rangle = (n - 2)\underline{a^{2}|n\rangle}$$
...
$$(2.161)$$

SCHRITT 3: Für n mit 0 < n < 1 liefert die Eigenwert-Gleichung  $\hat{N}a|n\rangle = (n-1)a|n\rangle$ negative Eigenwerte n-1, was nach Schritt 1 nicht sein kann, es sein denn  $a|n\rangle = 0$  ist der Nullvektor. Das kann aber nicht sein, denn  $||a|n\rangle|| = \sqrt{n} > 0$ . In derselben Weise führt 1 < n < 2 durch Anwendung von a auf einen Widerspruch. Als einzige Möglichkeit bleibt, daß das Absteigen bei n = 0 beim Zustand  $|n = 0\rangle$  aufhört und nur die Werte n = 0, 1, 2, 3... zugelassen sind.

Schritt 4: Der Zustand  $a|n\rangle$  ist ein EV von  $\hat{N}$  mit EW n-1 und muß deshalb proportional zu  $|n-1\rangle$  sein,

$$\begin{aligned} a|n\rangle &= C_n|n-1\rangle \rightsquigarrow n = \langle na^{\dagger}|an\rangle = |C_n|^2 \langle n-1|n-1\rangle = |C_n|^2 \\ \rightsquigarrow a|n\rangle &= \sqrt{n}|n-1\rangle. \end{aligned}$$
(2.162)

Ein möglicher Phasenfaktor  $e^{i\phi}$  wird hier gleich Eins gesetzt. Entartung wird hier ausgeschlossen durch explizite Konstruktion der Zustände  $|n\rangle$ , ausgehend vom **Grundzu**stand  $|0\rangle$ .

AUFGABE: Berechne die WF des Grundzustands  $\psi_0(x) = \langle x | = 0 \rangle$  explizit durch Ausnutzen der Gleichung  $a|0\rangle = 0$ .

Wegen  $a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$  heißt der Operator *a* Absteigeoperator, Vernichtungsoperator oder kurz 'Vernichter'. Der normierte Zustand  $a^{\dagger}|n\rangle$  andererseits ist (AUFGABE)

$$a^{\dagger}|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle. \tag{2.163}$$

Der Operator  $a^{\dagger}$  heißt deshalb Aufsteigeoperator oder Erzeuger.

Alle normierten Eigenzustände  $|n\rangle$  können aus dem Grundzustand  $|0\rangle$  durch sukzessive Anwendung des Erzeugers  $a^{\dagger}$  erzeugt werden (AUFGABE),

$$|n\rangle = \frac{(a^{\dagger})^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle. \tag{2.164}$$

#### 2.6.2 Phononen und Photonen

Der Eigenzustand  $|n\rangle$  des harmonischen Oszillators mit Energie  $\hbar\omega(n + 1/2)$  heißt auch **Fockzustand**. Seine Energie entspricht *n* 'Quanten' der Energie  $\hbar\omega$  plus die **Null-punktsenergie**  $\hbar\omega/2$ . Diese Quanten werden als **Phononen** bezeichnet, wenn der Oszillator-Hamiltonian einen mechanischen Schwingungsfreiheitsgrad beschreibt. Der Fock-Zustand  $|n\rangle$  heißt dann entsprechend *n*-**Phononen-Zustand**.

$$|n\rangle \longleftrightarrow n$$
-Phononen-Zustand. (2.165)

Die Schwingungsfreiheitsgrade des elektromagnetischen Feldes führen in der QM ebenfalls auf einen Oszillator-Hamiltonian. Die entsprechenden Energiequanten werden dann als **Photonen** und die Fockzustände als *n*-**Photonen-Zustände** bezeichnet. Diese spielen in der Quantenoptik eine große Rolle.

Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren spielen weiterhin eine zentrale Rolle bei der Quantisierung klassischer Felder (wie der elektromagnetischen Felder), was ihm Rahmen der **2. Quantisierung** und Vielteilchen-Quantenmechanik systematisch behandelt wird (weiterführende VL zur QM).

### 2.6.3 Kohärente Zustände

Wegen der großen Bedeutung der Leiteroperatoren a und  $a^{\dagger}$  kann man nach deren Eigenzuständen fragen. Wir beginnen mit dem Absteigeoperator a und fordern

$$a|z\rangle = z|z\rangle \tag{2.166}$$

mit dem zu bestimmenden Zustand  $|z\rangle$  und dem Eigenwert z, der i.a. komplex sein kann, denn a ist ja nicht hermitesch. Wir setzen  $|z\rangle$  als Linearkombination der Fock-Zustände  $|n\rangle$  (Eigenzustände des Hamiltonians  $\hat{H}_{osc}$  des harmonischen Oszillators) an,

$$|z\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle.$$
(2.167)

Wir erhalten eine Iterationsgleichung für die Koeffizienten  $c_n$ ,

$$a|z\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \sqrt{n} |n-1\rangle = z \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle$$
  
$$\Rightarrow c_{n+1}\sqrt{n+1} = zc_n \rightsquigarrow |z\rangle = c_0 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle, \qquad (2.168)$$

und die Forderung nach Normierung führt auf

$$1 = \langle z | z \rangle = |c_0|^2 e^{|z|^2}, \qquad (2.169)$$

was insgesamt den kohärenten Zustand (Glauber-Zustand<sup>1</sup>)

$$|z\rangle = e^{-\frac{1}{2}|z|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$
 (2.170)

ergibt (der freie Phasenfaktor ist wieder gleich Eins gesetzt worden).

Ein spezieller kohärenter Zustand ist natürlich der Grundzustand  $|z = 0\rangle = |0\rangle$  des harmonischen Oszillators, insgesamt gibt es aber (überabzählbar) viele (für jedes  $z \in \mathbb{C}$ ). Im Ortsraum erhält man deren Wellenfunktionen direkt aus

$$a|z\rangle = z|z\rangle \rightsquigarrow \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - z + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\partial_x\right)|z\rangle = 0$$
  
$$\rightsquigarrow \left(q - \sqrt{2}z + \partial_q\right)\Psi_z(q) = 0, \quad q \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$$
  
$$\rightsquigarrow \frac{d\Psi_z}{\Psi_z} = (\sqrt{2}z - q)dq \rightsquigarrow \ln\Psi_z = -\frac{1}{2}q^2 + \sqrt{2}zq + c$$
  
$$\rightsquigarrow \Psi_z(q) = C_z e^{-\frac{1}{2}q^2 + \sqrt{2}zq}, \quad C_z \text{ Normierung }.$$
(2.171)

Das ist, wie man durch quadratische Ergänzung des Exponenten sieht, eine verschobene Gauß-Funktion im Ortsraum! Für z = 0 erhalten wir wieder die Wellenfunktion des Grundzustands,  $\langle x|0 \rangle = \Psi_0(x)$ .

Die Iteration Gl. (2.168) funktioniert allerdings nur bei den Eigenzuständen  $|z\rangle$  des Absteigeoperators a: Es gibt keine Eigenzustände des Aufsteigeoperators  $a^{\dagger}$  (AUFGA-BE). Wir können allerdings das hermitesch konjugierte der Definitionsgleichung  $a|z\rangle = z|z\rangle$  schreiben als

$$\langle z|a^{\dagger} = z^* \langle z| \tag{2.172}$$

im Sinne des mit den Bra-Vektoren (Funktionalen) definierten Skalarproduktes: Das Skalarprodukt von  $a|z\rangle$  mit einem beliebigen Ket  $|f\rangle$  des Hilbertraums ist

$$(a|z\rangle, |f\rangle) = {}^{2}(|z\rangle, a^{\dagger}|f\rangle) = {}^{3}\langle z|a^{\dagger}|f\rangle.$$

Man bezeichnet  $\langle z |$  dann als *linker Eigenvektor* von  $a^{\dagger}$ . Beachte, dass das z in  $\langle z |$  nicht konjugiert komplex geschrieben wird, sondern explizit

$$\langle z| = e^{-\frac{1}{2}|z|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(z^*)^n}{\sqrt{n!}} \langle n|.$$
(2.173)

Es gilt also z.B. in Skalarprodukten

$$\langle z|a|z\rangle = \langle z|z\rangle z = z, \quad \langle z|a^{\dagger}|z\rangle = z^*.$$
 (2.174)

 $<sup>^1</sup>$  Roy J. Glauber, \*1925, Nobelpreis 2005 für die Entwicklung der Theorie der kohärenten Zustände in der Quantenoptik

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Definition des adjungierten Operators

 $<sup>^{3}</sup>$ 'Mathematiker-Skalar<br/>produkt' in 'Physiker-Skalar<br/>produkt' umschreiben

Wir schreiben den Orts- und Impulsoperator als

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left( a + a^{\dagger} \right), \quad \hat{p} = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \left( a^{\dagger} - a \right).$$
 (2.175)

Für deren Erwartungswerte in den kohärenten Zuständen gilt dann also

$$\langle z|\hat{x}|z\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left( \langle z|a|z\rangle + \langle z|a^{\dagger}|z\rangle \right) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (z+z^{*}) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} 2\text{Re}z \langle z|\hat{p}|z\rangle = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \left( \langle z|a^{\dagger}|z\rangle - \langle z|a|z\rangle \right) = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (z^{*}-z) = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} 2\text{Im}z$$

$$(2.176)$$

Die kohärente Zustände haben weiterhin ein *minimales Produkt der quantenmecha*nischen Unschärfe in Ort x und Impuls p. Wir formulieren zunächst allgemein (BEWEIS als AUFGABE)

**Satz 12.** Seien  $\hat{A}$ ,  $\hat{B}$  zwei Observablen (selbstadjungierte Hilbertraum-Operatoren) und  $|\Psi\rangle$  ein Hilbertraum-Zustand. Dann gilt die **Heisenbergsche Unschärferelation** 

$$\langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle \langle (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle)^2 \rangle \ge \frac{1}{4} \left| \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right|^2, \quad \langle . \rangle \equiv \langle \Psi | . | \Psi \rangle.$$
(2.177)

Für die kohärenten Zustände gilt nun (AUFGABE)

$$\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle \langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4}, \quad \langle \hat{A} \rangle \equiv \langle z | \hat{A} | z \rangle,$$
 (2.178)

d.h. für die  $|z\rangle$  wird das Produkt der Unschärfen  $\langle (x - \langle x \rangle)^2$  und  $\langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle$  von Ortsund Impulsoperator in der Heisenbergschen Unschärferelation minimal.

AUFGABE 1: Beweisen Sie die Heisenbergsche Unschärferelation.

AUFGABE 2a) Berechnen Sie für den 1d harmonischen Oszillator die Zeitentwicklung  $|\Psi(t > 0)\rangle$  eines kohärenten Zustandes  $|\Psi(t = 0)\rangle = |z\rangle$  für ein gegebenes komplexes z. Skizzieren Sie die Zeitentwicklung in der komplexen Ebene.

AUFGABE 2b) Berechnen Sie die Wahrscheinlichkeitsverteilung P(n), im kohärenten Zustand  $|\Psi(t)\rangle$  eine Anzahl von *n* Energie-Quanten (Photonen, Phononen) zu finden.

AUFGABE 3a) Zeigen Sie, daß die kohärenten Zustände  $|z\rangle$  eine vollständige Basis im Hilbertraum des 1d harmonischen Oszillators sind. Zeigen Sie hierzu

$$\int \frac{d^2 z}{\pi} |z\rangle \langle z| = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n|, \qquad (2.179)$$

wobei das Integral über die gesamte komplexe Ebene läuft (Mass  $d^2z \equiv dxdy$  für z = x + iy) und  $\sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n|$  die vollständige Eins in der Basis der Fockzustände ist.

AUFGABE 3b) Zeigen Sie, daß die kohärenten Zustände<br/>  $|z\rangle$  keine Orthogonalbasis bilden.

AUFGABE 4) Betrachte Zustände im Hilbertraum  $\mathcal{H} = L(\mathbb{R})$  (WF auf der reellen Achse). Sind die kohärenten Zustände  $|z\rangle$  die einzigen Zustände, für die das Produkt der Unschärfen von Orts- und Impulsoperator in der Heisenbergschen Unschärferelation minimal wird?

## 2.6.4 \* Zusatzmaterial: Verschobener harmonischer Oszillator

We shift the harmonic oscillator potential,

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{x}^2 \to \hat{H}_\lambda \equiv \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 (\hat{x} + \lambda x_0)^2$$

$$x_0 \equiv \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}, \qquad (2.180)$$

where  $x_0$  is a length and  $\lambda \in \mathbb{R}$  a dimensionless real number. Using the ladder operators a and  $a^{\dagger}$ , we can write  $H_{\lambda}$  as

$$\hat{H}_{\lambda} = H + \lambda \hbar \omega \left( a + a^{\dagger} \right) + \hbar \omega \lambda^2$$
 (2.181)

$$= \hbar\omega\left(\left(a^{\dagger} + \lambda\right)\left(a + \lambda\right) + \frac{1}{2}\right)$$
(2.182)

$$= \hbar\omega \left(b^{\dagger}b + \frac{1}{2}\right), \qquad (2.183)$$

where in the last line we introduced shifted ladder operators according to

$$b \equiv a + \lambda. \tag{2.184}$$

The shifted Hamiltonian has eigenstates

$$\hat{H}_{\lambda}|n\rangle_{\lambda} = E_n|n\rangle_{\lambda}, \quad E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$
(2.185)

with eigenstates  $|n\rangle_{\lambda}$  that refer to the new shifted ladder operators b,  $b^{\dagger}$  as usual, i.e.  $b|n\rangle_{\lambda} = \sqrt{n}|n-1\rangle_{\lambda}$  etc. since the commutation relations are

$$[b, b^{\dagger}] = 1$$
 (2.186)

as for the original  $a, a^{\dagger}$ . The eigenvalues of the energy  $E_n$  are the same as before.

How are the shifted eigenstates  $|n\rangle_{\lambda}$  related to the unshifted ones? The groundstate  $|n = 0\rangle_{\lambda}$  of  $\hat{H}_{\lambda}$  is defined as

$$b|0\rangle_{\lambda} = 0 \rightsquigarrow (a+\lambda)|0\rangle_{\lambda} = 0 \rightsquigarrow a|0\rangle_{\lambda} = -\lambda|0\rangle_{\lambda}.$$
(2.187)

The last equation, however, is just the eigenvalue equation of a coherent state,  $a|z\rangle = z|z\rangle$ , of the unshifted oscillator. By comparison we therefore have up to a phase factor

$$|0\rangle_{\lambda} = |z = -\lambda\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\lambda|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\lambda)^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle.$$
(2.188)

In the basis of the unshifted oscillator, the ground state of the shifted harmonic oscillator is a coherent state.
# 2.7 Das Elektron im Magnetfeld

## 2.7.1 Das Prinzip der Eichinvarianz

Wir erinnern uns zunächst, daß sich das elektromagnetische Feld der Maxwellschen Gleichungen mit Hilfe eines skalaren Potentials  $\Phi = \Phi(\mathbf{x}, t)$  und eines Vektorpotentials  $\mathbf{A} = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  schreiben läßt als

$$\mathbf{B} = \operatorname{rot}\mathbf{A}, \quad \operatorname{Magnetfeld}$$
 (2.189)

$$\mathbf{E} = -\nabla \Phi - \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}, \quad \text{Elektrisches Feld} , \qquad (2.190)$$

wobei  $\mathbf{E} = \mathbf{E}(\mathbf{x}, t)$  und  $\mathbf{B} = \mathbf{B}(\mathbf{x}, t)$  dreidimensionale Vektorfelder sind. Die Potentiale sind allerdings nicht eindeutig festgelegt:  $\mathbf{E}$  und  $\mathbf{B}$  sind invariant unter **Eichtransformationen**,

$$\mathbf{A}(\mathbf{x},t) \rightarrow \mathbf{A}(\mathbf{x},t) + \nabla \chi(\mathbf{x},t)$$
 (2.191)

$$\Phi(\mathbf{x},t) \rightarrow \Phi(\mathbf{x},t) - \frac{\partial}{\partial t}\chi(\mathbf{x},t),$$
 (2.192)

wobei  $\chi(\mathbf{x}, t)$  eine beliebige (differenzierbare) skalare Funktion sein kann, was man direkt durch Einsetzen nachprüft (AUFGABE). In der *klassischen Mechanik* baut man **E** und **B** in die Hamiltonfunktion *H* eines freien Teilchens mit Masse *m* und Ladung *e* ein durch die Ersetzungsvorschrift

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \to H = \frac{(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{x}, t))^2}{2m} + e\Phi(\mathbf{x}, t), \qquad (2.193)$$

was über die Hamiltonschen Gleichungen zu den korrekten Newtonschen Gleichungen mit der Lorentzkraft führt,

$$m\ddot{\mathbf{x}} = e\left(\dot{\mathbf{x}} \times \mathbf{B} + \mathbf{E}\right), \quad \text{Lorentzkraft.}$$
 (2.194)

Man sagt, die Newtonschen Gleichungen sind *eichinvariant*, da in ihnen nur  $\mathbf{E}$  und  $\mathbf{B}$  auftreten und sie sich unter Eichtransformationen, Gl. (2.191), nicht ändern. Diese *Eichinvarianz* wird in der QM eine noch größere Rolle spielen (s.u.).

**Definition** Die Ersetzungsvorschrift

$$\mathbf{p} \to \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \tag{2.195}$$

## heißt minimale Kopplung.

Über das Korrespondenzprinzip

$$\mathbf{p} \to \frac{\hbar}{i} \nabla$$
 (2.196)

erhalten wir den quantenmechanischen Hamilton<br/>operator für die Schrödingergleichung eines Teilchens mit Mass<br/>emund Ladung eim elektromagnetischen Feld,

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = \hat{H}\Psi = \left\{\frac{(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A})^2}{2m} + e\Phi\right\}\Psi.$$
(2.197)

Für  $\mathbf{A} = 0$  kennen wir das bereits als SG eines Teilchens im (skalaren) Potential  $V(\mathbf{x}, t) = e\Phi(\mathbf{x}, t)$ , wobei wir bisher nur zeitunabhängige Potentiale  $V(\mathbf{x})$  betrachtet haben.

Was wird aus der Eichinvarianz in der QM? Wir beweisen folgenden

**Satz 13.** Die Schrödingergleichung Gl. (2.197) eines Teilchens mit Masse m und Ladung e im elektromagnetischen Feld ist invariant unter

$$\mathbf{A}(\mathbf{x},t) \rightarrow \mathbf{A}(\mathbf{x},t) + \nabla \chi(\mathbf{x},t)$$
 (2.198)

$$\Phi(\mathbf{x},t) \rightarrow \Phi(\mathbf{x},t) - \frac{\partial}{\partial t}\chi(\mathbf{x},t)$$
 (2.199)

$$\Psi(\mathbf{x},t) \quad \to \quad \Psi(\mathbf{x},t)e^{i\frac{e}{\hbar}\chi(\mathbf{x},t)},\tag{2.200}$$

wobei  $\chi(\mathbf{x}, t)$  eine differenzierbare skalare Funktion ist.

Zum Beweis müssen wir zeigen, daß die umge<br/>eichte WF $\Psi({\bf x},t)e^{i\frac{e}{\hbar}\chi({\bf x},t)}$  die umge<br/>eichte SG

$$\left\{\frac{(\mathbf{p} - e\mathbf{A} - e\nabla\chi)^2}{2m} + e\Phi - e\left(\frac{\partial}{\partial t}\chi\right)\right\}\Psi e^{i\frac{e}{\hbar}\chi} - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(\Psi e^{i\frac{e}{\hbar}\chi}\right) = 0 \qquad (2.201)$$

erfüllt, wobe<br/>i $\Psi(\mathbf{x},t)$  die ursprüngliche SG Gl. (2.197) erfüllt. Hierzu ist nach der Produktregel

$$(\mathbf{p} - e\mathbf{A} - e\nabla\chi)\Psi e^{i\frac{e}{\hbar}\chi} = \left(\frac{\hbar}{i}\nabla - e\mathbf{A} - e\nabla\chi\right)\Psi e^{i\frac{e}{\hbar}\chi}$$

$$= e^{i\frac{e}{\hbar}\chi}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - e\mathbf{A} - e\nabla\chi\right)\Psi + \left(\frac{\hbar}{i}\nabla\frac{ie}{\hbar}\chi\right)\Psi e^{i\frac{e}{\hbar}\chi} = e^{i\frac{e}{\hbar}\chi}(\mathbf{p} - e\mathbf{A})\Psi \quad (2.202)$$

$$\Rightarrow (\mathbf{p} - e\mathbf{A} - e\nabla\chi)^{2}\Psi e^{i\frac{e}{\hbar}\chi} = (\mathbf{p} - e\mathbf{A} - e\nabla\chi)e^{i\frac{e}{\hbar}\chi}(\mathbf{p} - e\mathbf{A})\Psi$$

$$= \left(\frac{\hbar}{i}\nabla\frac{ie}{\hbar}\chi\right)e^{i\frac{e}{\hbar}\chi}(\mathbf{p} - e\mathbf{A})\Psi + e^{i\frac{e}{\hbar}\chi}(\mathbf{p} - e\mathbf{A} - e\nabla\chi)(\mathbf{p} - e\mathbf{A})\Psi$$

$$= e^{i\frac{e}{\hbar}\chi}(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^{2}\Psi \quad (2.203)$$

Entsprechend gilt

$$-e\left(\frac{\partial}{\partial t}\chi\right)\Psi e^{i\frac{e}{\hbar}\chi} - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(\Psi e^{i\frac{e}{\hbar}\chi}\right)$$
$$= -e\left(\frac{\partial}{\partial t}\chi\right)\Psi e^{i\frac{e}{\hbar}\chi} - e^{i\frac{e}{\hbar}\chi}\Psi i\hbar i\frac{e}{\hbar}\frac{\partial}{\partial t}\chi - i\hbar e^{i\frac{e}{\hbar}\chi}\frac{\partial}{\partial t}\Psi = -i\hbar e^{i\frac{e}{\hbar}\chi}\frac{\partial}{\partial t}\Psi \quad (2.204)$$

Insgesamt ist die linke Seite von Gl. (2.201) also tatsächlich

$$e^{i\frac{e}{\hbar}\chi}\left[\left\{\frac{(\mathbf{p}-e\mathbf{A})^2}{2m}+e\Phi\right\}\Psi-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi\right]=0,$$
(2.205)

denn  $\Psi(\mathbf{x}, t)$  erfüllt die ursprüngliche SG Gl. (2.197). QED.

Die umgeeichte WF  $\Psi(\mathbf{x},t)e^{i\frac{e}{\hbar}\chi(\mathbf{x},t)}$  liefert dieselbe W-Dichte wie die ursprüngliche WF  $\Psi(\mathbf{x},t)$ ,

$$\tilde{\Psi}(\mathbf{x},t) \equiv \Psi(\mathbf{x},t)e^{i\frac{e}{\hbar}\chi(\mathbf{x},t)} \rightsquigarrow |\tilde{\Psi}|^2 = |\Psi|^2, \qquad (2.206)$$

also dieselbe Physik.

AUFGABE: Wir wollen die allgemeine Form des Hamiltonoperators  $\hat{H}$  in Gl. (2.197) aus dem freien Hamiltonian  $\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}$  und dem **Prinzip der lokalen Eichinvarianz** herleiten: Lokale Eichtransformationen der Wellenfunktion

$$\Psi(\mathbf{x},t) \to \tilde{\Psi}(\mathbf{x},t) \equiv \Psi(\mathbf{x},t)e^{i\varphi(\mathbf{x},t)}$$
(2.207)

sollen nichts an der Physik ändern, d.h wenn  $\Psi(\mathbf{x}, t)$  Lösung einer zeitabhängigen Schrödingergleichung SG ist, so soll auch  $\tilde{\Psi}(\mathbf{x}, t)$  eine äquivalente Lösung einer äquivalenten zeitabhängigen Schrödingergleichung SG sein.

Zeige, daß durch Verallgemeinerung der Ableitungen  $\nabla$  und  $\frac{\partial}{\partial t}$  zu kovarianten Ableitungen gen

$$abla \to \mathbf{D}, \quad \frac{\partial}{\partial t} \to D_0 \quad (SG), \quad \nabla \to \tilde{\mathbf{D}}, \quad \frac{\partial}{\partial t} \to \tilde{D}_0, \quad \tilde{SG}$$
(2.208)

das Prinzip der lokalen Eichinvarianz erfüllt werden kann. Mache hierzu den Ansatz

$$\tilde{\mathbf{D}} = \nabla + \mathbf{f}(\mathbf{x}, t), \quad \tilde{D}_0 = \frac{\partial}{\partial t} + g(\mathbf{x}, t)$$
(2.209)

mit den *Eichfeldern*  $\mathbf{f}(\mathbf{x}, t)$  und  $g(\mathbf{x}, t)$  und berechne damit, wie sich die Eichfelder transformieren müssen, wenn man

$$\tilde{\mathbf{D}}\tilde{\Psi} = e^{i\varphi(\mathbf{x},t)}\mathbf{D}\Psi, \quad \tilde{D}_0\tilde{\Psi} = e^{i\varphi(\mathbf{x},t)}D_0\Psi$$
(2.210)

fordert. Ersetze nun in der ursprünglich freien SG,  $i\partial_t \Psi = \frac{-1}{2m} \nabla^2 \Psi$  die Ableitungen durch die entsprechenden kovarianten Ableitungen. Schreibe die neugewonnene SG sowie SG auf. Identifiziere die Eichfelder  $\mathbf{f}(\mathbf{x}, t)$  und  $g(\mathbf{x}, t)$  durch Umbenennung als Vektorpotential **A** bzw. skalares Potential  $\Phi$  der Elektrodynamik.

Aus der Forderung nach lokaler Eichinvarianz der SG haben wir damit aus der ursprünglich *freien Theorie* eine Theorie mit Eichfeldern hergeleitet, deren Existenz ein Indiz für die Existenz elektromagnetischer Erscheinungen ist. Dieses Prinzip spielt weiterhin eine große Rolle bei der Formulierung moderner, 'fundamentaler' Theorien der Materie als *Eichtheorien* (z.B. Quantenchromodynamik).

## 2.7.2 Landau-Niveaus

Wir betrachten hier die einfachsten Grundlagen des Quanten-Halleffekts, für den K. v. Klitzing 1985 (ganzzahliger QHE) sowie Störmer, Tsui und Laughlin 1998 (gebrochenzahlinger QHE) Nobelpreise bekommen haben. Wir behandeln zunächst ein einzelnes Elektron in einer zweidimensionalen (x-y)-Ebene mit einem konstanten Magnetfeld B in z-Richtung. In z-Richtung wird ein starkes *confinement*-Potential angenommen (z.B. Kastenpotential mit sehr hohen Wänden), was auf eine Separation der Wellenfunktion in der Form

$$\Psi(x, y, z) = \psi(x, y)\phi(z) \tag{2.211}$$

führt, wobei für  $\phi(z)$  der Grundzustand des Confinement-Potentials angenommen wird. In der folgenden SG kann dann  $\phi(z)$  stets absepariert werden, und man braucht nur noch eine zweidimensionale SG für  $\psi(x, y)$  zu betrachten.

Der Hamiltonoperator eines Teilchens mit Ladung e und Masse m ist

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right)^2, \quad \mathbf{B} = \text{rot}\mathbf{A}.$$
 (2.212)

Wir haben jetzt unterschiedliche Möglichkeiten der Eichung, um das Magnetfeld aus dem Vektorpotential zu erzeugen:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = -By\mathbf{e}_x$$
, Landau-Eichung (2.213)

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{B}{2} \left( -y \mathbf{e}_x + x \mathbf{e}_y \right), \quad \text{zirkulare Eichung} . \tag{2.214}$$

Wir ÜBERPRÜFEN, daß mit diesen Definitionen jeweils  $\operatorname{rot} \mathbf{A}(\mathbf{r}) = B\mathbf{e}_z$ . In der Landau-Eichung lautet die stationäre SG in der *x-y*-Ebene

$$\left[\frac{1}{2m}\left(p_x + \frac{eB}{c}y\right)^2 + \frac{1}{2m}p_y^2\right]\psi(x,y) = E\psi(x,y),\tag{2.215}$$

aus der wir durch einen Separationsansatz

$$\psi(x,y) = e^{ikx}\chi(y) \tag{2.216}$$

eine Gleichung für  $\chi(y)$  erhalten,

$$\left[\frac{1}{2m}p_y^2 + \frac{1}{2}m\omega_c^2 \left(\frac{c}{eB}k + y\right)^2\right]\chi(y) = E\chi(y), \quad \omega_c \equiv \frac{eB}{mc}$$
(2.217)

mit der Zyklotron-Frequenz  $\omega_c$ . Das ist gerade die Gleichung des linearen harmonischen Oszillators - nur verschoben um  $\frac{c}{eB}k$ , d.h. die Wellenfunktionen sind durch Gl. (2.136) gegeben. Die stationären Zustände und die entsprechenden Eigenwerte lauten also

$$\chi_n(y) = \psi_n \left( y + \frac{c}{eB} k \right) = \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{n!2^n}} H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \tilde{y} \right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} \tilde{y}^2}, \quad \tilde{y} = y + \frac{c}{eB} k$$

$$E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right), \quad n=0,1,2,3,...,$$
 Landau-Niveaus. (2.218)

Insgesamt lauten die Wellenfunktionen also

$$\langle x, y | nk \rangle = e^{ikx} \psi_n \left( y + \frac{c}{eB} k \right), \quad E_n = \hbar \omega \left( n + \frac{1}{2} \right).$$
 (2.219)

Da die Energien  $E_n$  gar nicht von der Quantenzahl k (Impuls in x-Richtung) abhängen, hat man eine hohe *Entartung*, d.h. alle Zustände  $|nk\rangle$  zum selben n haben die gleiche Energie  $E_n$ . Dies ist ein wesentliches Merkmal der Bewegung im konstanten Magnetfeld.

Wir wollen den Hamiltonian Gl. (2.212) nun auch in der zirkularen Eichung, und zwar algebraisch mit Hilfe von Leiteroperatoren behandeln, ähnlich dem harmonischen Oszillator. In d = 2 entspricht die Bewegung im Magnetfeld klassisch der Überlagerung zweier harmonischer Schwingungen, d.h. einer Kreisbewegung. Deshalb brauchen wir zwei Sorten von Leiteroperatoren, die wir zunächst als  $\alpha^{(\dagger)}$  und  $\beta^{(\dagger)}$  bezeichnen. AUFGABE 1a): Zeigen Sie, daß sich  $\hat{H}$  in folgender Form schreiben läßt ( $\hbar = 1$ ),

$$\hat{H} = \frac{1}{2ml} (\beta^{\dagger} \beta + \alpha^{\dagger} \alpha - sL_z), \quad L_z \equiv xp_y - yp_x$$
(2.220)

$$\alpha \equiv \frac{1}{2l}(x+isy), \quad \beta \equiv l(ip_x - sp_y), \quad s \equiv \operatorname{sign}(eB), \quad l \equiv \sqrt{\frac{c}{|eB|}}.$$
 (2.221)

AUFGABE 1b): Beweisen Sie  $L_z = -s(\alpha^{\dagger}\beta + \alpha\beta^{\dagger})$  und berechnen Sie den Kommutator  $[\beta^{\dagger}, \alpha]$ . Zeigen Sie damit, daß

$$\hat{H} = \omega_c \left( \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha^{\dagger} + \beta^{\dagger}) \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha + \beta) + \frac{1}{2} \right), \quad \omega_c \equiv \frac{|eB|}{mc}.$$
(2.222)

Die Winkelfrequen<br/>z $\omega_c$  bezeichnet man hierbei als Zyklotronfrequenz. AUFGABE 1<br/>c): Definieren Sie

$$a \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha + \beta) \tag{2.223}$$

und zeigen Sie  $[a, a^{\dagger}] = 1$ . Damit bekommt der Hamiltonian die bekannte Form des harmonischen Oszillators,  $\hat{H} = \omega_c (a^{\dagger}a + \frac{1}{2})$ , der also nur von den a und  $a^{\dagger}$ , aber nicht von den b und  $b^{\dagger}$  abhängt.

In den folgenden Aufgaben wollen wir uns nun mit den Eigenzuständen des Hamiltonians  $\hat{H}$  (Elektron im Magnetfeld, d = 2, zirkulare Eichung) beschäftigen. Sei  $L_z$  die z-Komponente des Drehimpuls-Operators (s.u.).

AUFGABE 2a) Zeigen Sie, daß  $[\hat{H}, L_z] = 0$  und es folglich Eigenfunktionen  $|nm\rangle$  gibt mit

$$\hat{H}|nm\rangle = \omega_c \left(n + \frac{1}{2}\right)|nm\rangle, \quad L_z|nm\rangle = sm|nm\rangle.$$
 (2.224)

Welche Eigenwerte haben die Operatoren  $a^{\dagger}a$  und  $b^{\dagger}b$ ? Welche Werte kann n dabei annehmen? Welchen Werte kann m für gegebenes n annehmen?

AUFGABE 2b) Drücken Sie *a* und *b* durch *x*, *y*,  $\partial_x$  sowie  $\partial_y$  aus (setzen Sie die magnetische Länge  $l = (c/|eB|)^{1/2}$  der Einfachheit halber gleich Eins). Definieren Sie  $z \equiv x + isy$ und zeigen Sie

$$a^{\dagger} = \sqrt{2} \left( -\partial_z + \frac{z^*}{4} \right), \quad b^{\dagger} = \sqrt{2} \left( -\partial_{z^*} + \frac{z}{4} \right)$$
 (2.225)

mit den Wirtinger-Ableitungen  $\partial_z \equiv \frac{1}{2}(\partial_x - is\partial_y)$  und  $\partial_{z^*} \equiv \frac{1}{2}(\partial_x + is\partial_y)$ . AUFGABE 2c) Benutzen Sie die Darstellung  $|nm\rangle = (n!(n+m)!)^{-1/2}(a^{\dagger})^n(b^{\dagger})^{n+m}|00\rangle$  und leiten Sie damit die explizite Form der WF im untersten Landau-Niveau n = 0 her,

$$\langle xy|0m\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^{m+1}\pi m!}} z^m e^{-\frac{1}{4}|z|^2}.$$
 (2.226)

Hinweis: beginnen Sie mit dem Fall m = 0.

BONUS-AUFGABE 2d) Berechnen Sie den Erwartungswert  $\langle r^2 \rangle_m \equiv \langle 0m | r^2 | 0m \rangle$ . Für endliche Systemflächen A (Scheibengeometrie) sollte sinnvollerweise  $\pi \langle r^2 \rangle_m \leq A$  gelten. Zeigen Sie, daß sich damit eine Oberschranke für m mit der Entartung  $N_s$  ergibt,

$$m \le N_s - 1, \quad N_s = \frac{A}{2\pi l^2}, \quad l \equiv \sqrt{c/|eB|}.$$
 (2.227)

## 2.7.3 Bedeutung des Vektorpotentials, Aharonov-Bohm-Effekt

In der QM sind nicht nur die Felder **E** und **B**, sondern auch die *Potentiale* (Vektor- und skalar) physikalisch wirksam. Wir zeigen das am Beispiel des Vektorpotentials **A** mit dem **Aharonov-Bohm-Effekt**<sup>4</sup>.

Ein Elektron bewege sich in der x-y-Ebene, in der Ursprung senkrecht in z-Richtung von einer undurchlässigen Spule durchstoßen sei. Das Elektron bewege sich nur in einem Gebiet  $\Omega$  außerhalb der Spule - topologisch gesehen ist dieses Gebiet also nicht einfach zusammenhängend (man kann keine Schleife um die Spule legen und die Schleife ganz auf einen Punkt zusammenziehen). Eine einfache Idealisierung ist eine sehr dünne Spule mit Magnetfeld

$$\mathbf{B} = \Phi \delta^{(2)}(x, y) \mathbf{e}_z. \tag{2.228}$$

Hierbei ist  $\Phi$  der magnetische Fluß durch die Spule, d.h.

$$\int dx dy \mathbf{B} \mathbf{e}_z = \Phi. \tag{2.229}$$

Das Magnetfeld wirkt nur innerhalb, aber nicht außerhalb der Spule und deshalb nicht direkt auf das Elektron. Insbesondere wirkt keine Lorentzkraft auf das Elektron. Trotzdem hat das Magnetfeld einen Effekt, aber nur über sein *Vektorpotential*: In ebenen Polarkoordinaten  $(r, \theta)$  schreiben wir dieses als

$$\mathbf{A} = \frac{\Phi}{2\pi r} \mathbf{e}_{\theta} \rightsquigarrow \operatorname{rot} \mathbf{A} = 0, \quad r \neq 0, \quad \oint \mathbf{A} d\mathbf{r} = \int dx dy \mathbf{B} \mathbf{e}_{z} = \Phi, \quad (2.230)$$

d.h. wir erhalten über den Stokesschen Integralsatz den korrekten Fluß mit dieser Wahl von  $\mathbf{A}$ .

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup> Y. Aharonov and D. Bohm, Phys. Rev. **115**, 485 (1959).

Wir lösen nun die stationäre SG auf einem eindimensionalen Ring mit Radius r > 0, auf dem sich das Elektron in in der x-y-Ebene bewege: man braucht dann nur die  $\theta$ -Richtung des Impulsoperators,

$$\mathbf{e}_{\theta}\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r})\right) = \frac{\hbar}{i}\frac{1}{r}\partial_{\theta} - \frac{e}{c}\frac{\Phi}{2\pi r},\tag{2.231}$$

also ist der Hamiltonian

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right)^2 = -\frac{\hbar^2}{2mr^2} \left( \partial_\theta - i \frac{e\Phi}{c2\pi\hbar} \right)^2 = -\frac{\hbar^2}{2mr^2} \left( \partial_\theta - i \frac{\Phi}{\Phi_0} \right)^2$$

$$\Phi_0 \equiv \frac{2\pi\hbar c}{e}, \quad \text{Fluß-Quant} . \qquad (2.232)$$

Wir erhalten also die SG

$$\hat{H}\psi(\theta) = E\psi(\theta) \rightsquigarrow \left[ \left( \partial_{\theta} - i\frac{\Phi}{\Phi_0} \right)^2 + \frac{2mr^2}{\hbar^2} E \right] \psi(\theta) = 0$$
(2.233)

Mit dem Ansatz  $\psi(\theta) = e^{in\theta}$  mit  $n \in \mathbb{Z}$  erhalten wir auf dem Ring eindeutige Lösungen,  $\psi(\theta) = \psi(\theta + 2\pi m),$ 

$$\left(in - i\frac{\Phi}{\Phi_0}\right)^2 + \frac{2mr^2}{\hbar^2}E = 0 \rightsquigarrow E_n = \frac{\hbar^2}{2mr^2}\left(n - \frac{\Phi}{\Phi_0}\right)^2.$$
 (2.234)

Das Spektrum der Eigenwerte hängt also von  $\Phi/\Phi_0$  ab, obwohl klassisch gar kein Magnetfeld auf das Elektron wirkt! Für  $\Phi/\Phi_0 = 0$  oder  $\Phi/\Phi_0 = k$  mit  $k \in \mathbb{Z}$  sind die Eigenwerte einfach die uns bereits bekannten  $E_n$  des freien Teilchens auf einem 'zusammengebogenen Kasten' der Länge  $2L = 2\pi r$  (Intervall [-L, L], Wellenfunktionen  $\propto e^{i\frac{n\pi}{L}x}$ , periodische Randbedingungen),

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2} = \frac{\hbar^2 n^2}{2mr^2}.$$
(2.235)

Man kann jetzt auch die Streuung eines Elektrons berechnen, das sich frei in der x-y-Ebene bewegt. Zwischen Trajektorien von Wellenpaketen, die oberhalb bzw. unterhalb der Spule laufen, entsteht dann eine **Aharonov-Bohm-Phase**, die in Interferenzexperimenten beobachtet wird. Wiederum ist das ein reiner Quanteneffekt, denn es wirkt ja nirgends ein Magnetfeld auf das Elektron. Die Interferenz ist hier von *topologischer* Natur.

#### 2.7.4 Kann man das Vektorpotential wegtransformieren?

Diese Frage können wir uns z.B. im obigen Beispiel des Teilchens auf dem Ring stellen, der von einem Aharonov-Bohm-Fluß  $\Phi = \int dx dy \mathbf{B} \mathbf{e}_z$  durchstoßen wird. Man wäre versucht, die Wellenfunktion  $\psi(\theta)$  umzutransformieren durch Einführen eines neuen Vektorpotentials **A** mit gleicher Rotation rot  $\mathbf{A} = \mathbf{B} = 0$  wie in Gl. (2.198)

$$\psi(\theta) = e^{i\frac{\Phi}{\Phi_0}\theta}\tilde{\psi}(\theta) \rightsquigarrow \left[\partial_{\theta}^2 + \frac{2mr^2}{\hbar^2}E\right]\tilde{\psi}(\theta), \quad \text{funktioniert nicht!}$$
(2.236)

wobei  $\psi$  die SG ohne den Aharonov-Bohm-Fluß erfüllt. Das funktioniert nicht, denn damit wäre die WF  $\psi(\theta)$  nicht mehr eindeutig: Bei Ersetzen von  $\theta \to \theta + 2\pi k, k \in \mathbb{N}$ hätte man

$$\psi(\theta + 2\pi k) = e^{i\frac{\Phi}{\Phi_0}(\theta + 2\pi k)}\tilde{\psi}(\theta) = e^{i\frac{\Phi}{\Phi_0}2\pi k}\psi(\theta) \neq \psi(\theta), \qquad (2.237)$$

ausgenommen die Spezialfälle, wo $\frac{\Phi}{\Phi_0}$ ganzzahlig ist und wir bereits aus Gl. (2.234) wissen, daß sich gegenüber dem Fluß-freien Fall nichts am Spektrum ändert.

Allgemein stellen wir uns die Frage, wann wir in einem Magnetfeld-freien Gebiet  $\Omega$ ein Vektorpotential **A** mit rot  $\mathbf{A} = \mathbf{B} = 0$  auf Null umeichen können, um z.B. mit dem einfacheren Hamiltonian  $\hat{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + e\Phi$  arbeiten zu können. Die Eichinvarianz-Bedingung Gl. (2.198) lautet dann explizit (wir betrachten hier nur den zeitunabhängigen Fall)

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}) + \nabla \chi(\mathbf{x}) = 0. \tag{2.238}$$

Das ist eine DGL für die gesuchte skalare Funktion  $\chi(\mathbf{x})$ , die in der klassischen Mechanik der Definition des Potentials V einer Kraft  $\mathbf{F}(\mathbf{x}) = -\nabla V(\mathbf{x})$  entspräche. Es gilt

**Satz 14.** Ein Vektorfeld  $\mathbf{F}(\mathbf{x})$  auf einem Gebiet  $\Omega$  des  $\mathbb{R}^3$  hat ein Potential,  $\mathbf{F}(\mathbf{x}) = -\nabla V(\mathbf{x})$ , wenn gilt: a) rot  $\mathbf{F} = 0$  in  $\Omega$ , b)  $\Omega$  ist einfach zusammenhängend. Explizit hat man

$$V(\mathbf{x}) = -\int_{\mathbf{x}_0}^{\mathbf{x}} d\mathbf{s} \mathbf{F}(\mathbf{s}), \qquad (2.239)$$

ein wegunabhängiges Kurvenintegral zwischen einem Aufpunkt  $\mathbf{x}_0$  und dem Punkt  $\mathbf{x}$ .

Punkt b) ist hier entscheidend: im Beispiel eines Ring-förmigen Gebiets  $\Omega$  in der *x-y*-Ebene um einen Aharonov-Bohm-Fluß ist  $\Omega$  z.B. *nicht* einfach zusammenhängend, und es existiert deshalb kein eindeutiges  $\chi(\mathbf{x})$ , dessen Gradient das Vektorpotential  $\mathbf{A}(\mathbf{x})$  des Flusses wegtransformieren könnte.

# 2.8 Das Wasserstoff-Atom

#### **2.8.1** Kugelsymmetrische Potentiale in d = 3

Die stationäre SG in d = 3

$$\left[-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + V(\mathbf{x})\right] \Psi(\mathbf{x}) = E \Psi(\mathbf{x})$$
(2.240)

enthält den Laplace-Operator

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$
 (2.241)

Für ein allgemeines  $V(\mathbf{x})$  ist es meist sehr schwierig, diese Gleichung exakt zu lösen. Einfacher wird es, wie in der klassischen Mechanik, bei zentralsymmetrischen Problemen, d.h.

$$V(\mathbf{x}) = V(r), \quad r = |\mathbf{x}|. \tag{2.242}$$

Ein Beispiel ist das Coulomb-Potential, das durch eine fest am Ursprung  $\mathbf{x} = \mathbf{0}$  sitzende Punktladung Ze > 0 erzeugt wird und auf ein Teilchen der Masse m und Ladung -e im Abstand r vom Ursprung wirkt,

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}.$$
(2.243)

Hier ist es natürlich vorteilhaft, Polarkoordinaten gemäß

$$x = r\sin\theta\cos\varphi, \quad y = r\sin\theta\sin\varphi, \quad z = r\cos\theta$$
 (2.244)

einzuführen und damit den Laplace-Operator auszudrücken,

$$\Delta \Psi = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} \right].$$
(2.245)

Die WF $\Psi=\Psi(r,\theta,\varphi)$ hängt jetzt ebenfalls von Polarkoordinaten ab. Wir multiplizieren die SG mit $r^2,$ 

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right) + \frac{2m}{\hbar^2}r^2[E - V(r)]\Psi - \left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\varphi^2}\right] = 0,$$

was man mit Hilfe zweier Operatoren  $\hat{h}$  und  $\hat{\Omega}$  als

$$\begin{split} \hat{h}\Psi &+ \hat{\Omega}\Psi &= 0\\ \hat{h}\Psi &\equiv \frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right) + \frac{2m}{\hbar^2}r^2[E - V(r)]\Psi\\ \hat{\Omega}\Psi &\equiv -\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\varphi^2}\right]. \end{split}$$

schreiben kann. Das suggeriert einen Separationsansatz der Form

$$\Psi(r,\theta,\varphi) = R(r)Y(\theta,\varphi). \tag{2.246}$$

Die Gleichung  $\hat{h}\Psi + \hat{\Omega}\Psi = 0$  bedeutet

$$\hat{h}R(r)Y(\theta,\varphi) + \hat{\Omega}R(r)Y(\theta,\varphi) = Y(\theta,\varphi)\hat{h}R(r) + R(r)\hat{\Omega}Y(\theta,\varphi) = 0$$
  
$$\rightsquigarrow \frac{1}{R(r)}\hat{h}R(r) = -\frac{1}{Y(\theta,\varphi)}\hat{\Omega}Y(\theta,\varphi) \equiv -c.$$
(2.247)

Damit haben wir den **Radial-Teil** R(r) vom **Winkel-Anteil**  $Y(\theta, \varphi)$  absepariert, und beide Anteile können getrennt behandet werden. Der Winkel-Anteil kann exakt gelöst werden - er hängt mit dem *Drehimpuls* zusammen. Der Radial-Anteil kann für ein allgemeines Potential V(r) i.A. nur numerisch bestimmt werden. Für das 1/r-Potential gibt es aber wie beim Kepler-Problem eine exakte Lösung.

## 2.8.2 Der Winkel-Anteil

Der Winkel-Anteil von (2.247) führte uns auf das Eigenwertproblem  $\hat{\Omega}Y = cY$ , ausgeschrieben also

$$-\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y(\theta,\varphi)}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y(\theta,\varphi)}{\partial\varphi^2}\right] = cY(\theta,\varphi).$$
(2.248)

An dieser Stelle werden wir die Eigenfunktionen Y des Operators  $\hat{\Omega}$  nicht explizit konstruieren, sondern nur das Ergebnis angeben und hierauf im nächsten Kapitel über den Drehimpuls zurückkommen.

Ähnlich zum harmonischen Oszillator stellt sich heraus, daß es Lösungen von (2.248) nur für Werte c = -l(l+1) gibt, wobei l = 0, 1, 2, 3, ... eine ganze Zahl ist. Alle Lösungen können durch zwei *Quantenzahlen l* und *m* charakterisiert werden, wobei *m* eine ganze Zahl mit Werten -l, -l+1, ..., l-1, l ist.

Die Lösungsfunktionen werden als Kugelflächenfunktionen (spherical harmonics) bezeichnet und haben explizit die Form

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = (-1)^{(m+|m|)/2} i^{l} \left[ \frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} \right]^{1/2} P_{l}^{|m|}(\cos\theta) e^{im\varphi}$$

$$P_{l}^{|m|}(x) := \frac{1}{2^{l}l!} (1-x^{2})^{|m|/2} \frac{d^{l+|m|}}{dx^{l+|m|}} (x^{2}-1)^{l}$$

$$l = 0, 1, 2, 3, ...; \quad m = -l, -l+1, -l+2, ..., l-1, l. \quad (2.249)$$

Die  $P_l^{|m|}$  hierin heißen **assoziierte Legendre-Polynome**. Die Kugelflächenfunktionen bilden ein vollständiges Orthonormalsystem (VOS) auf der Oberfläche der Einheitskugel  $|\mathbf{x}| = 1$ . Wir schreiben die Vollständigkeitsrelation explizit auf,

$$|lm\rangle \iff Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

$$\langle l'm'|lm\rangle = \delta_{ll'}\delta_{mm'} \iff \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi} Y_{l'm'}^{*}(\theta,\varphi)Y_{lm}^{*}(\theta,\varphi)\sin\theta d\theta d\varphi = \delta_{ll'}\delta_{mm'}.$$
(2.250)

Die Kugelflächenfunktionen mit l = 0, 1, 2, 3, 4, ... werden häufig als s-, p-, d-, f-, g-,... Orbitale bezeichnet, vor allem in der Quantenchemie. Ihre explizite Form lautet

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_{10} = i\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta, \quad Y_{1\pm 1} = \mp i\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta \cdot e^{\pm i\varphi}.$$
 (2.251)

Kugelflächenfunktionen werden in vielen Bereichen der Wissenschaft benutzt, wenn es um die Entwicklung von Funktionen im dreidimensionalen Raum geht.

## 2.8.3 Der Radial-Anteil

Der Radialanteil der SG folgt aus (2.247) mit c = -l(l+1),

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right) + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(r)]R(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}R(r) = 0.$$
(2.252)



Fig. 2.1: Absolute squares of various spherical harmonics. From http://mathworld.wolfram.com/SphericalHarmonic.html

Für das Wasserstoff-Atom lautet das anziehende Coulomb-Potential, das vom Proton mit Ladung +e > 0 erzeugt wird (Z = 1),

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}.$$
(2.253)

# ZWEIKÖRPERPROBLEM, REDUZIERTE MASSE.

Streng genommen ist die Schrödinger-Gleichung hier schon nicht mehr gültig, denn sie berücksichtigt keine relativistischen Effekte. Letztere führen zu weiteren interessanten Feinstruktur-Effekten und werden u.a. in QM II behandelt. Weiterhin ist das Proton kein Elementarteilchen, sondern aus Quarks zusammengesetzt. Die Struktur des Protons wird in der obigen SG also auch nicht berücksichtigt.

Wir geben für die Eigenwerte der Energie und die Radialfunktionen zunächst nur das Ergebnis an: für Zustände, in denen das Elektron an das Potential 'gebunden' ist (analog zu den Kepler-Ellipsen im Kepler-Problem), sind die möglichen Eigenwerte  $E = E_n$  durch eine **Hauptquantenzahl** n charakterisiert,

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 a_0} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \text{ Lyman-Formel}$$
  

$$a_0 \equiv \frac{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2}{me^2} \text{ Bohr Radius.}$$
(2.254)

Die Radial-Anteile der WF für gebundene Zustände sind

$$R_{nl}(r) = -\frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}} e^{-r/na_0} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^l L_{n+l}^{2l+1} \left(\frac{2r}{na_0}\right), \quad l = 0, 1, ..., n-1$$
(2.255)

$$L_n^m(x) = (-1)^m \frac{n!}{(n-m)!} e^x x^{-m} \frac{d^{n-m}}{dx^{n-m}} e^{-x} x^n$$
 verallgemeinerte Laguerre-Polynome

Die gesamte WF für gebundene Zustände des Wasserstoff-Problems lauten deshalb gemäß unserem Separationsansatz (2.246),

$$\Psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi).$$
(2.256)

In Dirac-Notation schreiben wir die stationären Zustände als  $|nlm\rangle$ , d.h.

$$|nlm\rangle \leftrightarrow \langle \mathbf{r}|nlm\rangle \equiv \Psi_{nlm}(\mathbf{r}).$$
 (2.257)

Der Grundzustand des Wasserstoffproblems ist der Zustand  $|GS\rangle = |100\rangle$  mit der Energie  $E_0 = -13.6$  eV für ein Elektron. Die *Entartung* der Energieniveaus  $E_n$ , d.h. die Anzahl linear unabhängiger stationärer Zustände mit gleicher Energie  $E_n$ , ist

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2.$$
(2.258)

Hierbei sind der Spin sowie Feinstruktur-Effekte durch relativistische Korrekturen noch nicht berücksichtigt.

## 2.9 Der Drehimpuls

Symmetrien spielen in der Physik eine wichtige Rolle. Die oben betrachteten Zentralpotentiale V(r) haben *Rotations-Symmetrie*. In der klassischen Mechanik folgt deshalb mit dem Noether-Theorem die Existenz einer Erhaltungsgröße (Drehimpuls). Beim Kepler-Problem folgte daraus der Flächensatz (Keplers zweites Gesetz).

## 2.9.1 Definitionen

In der klassischen Mechanik ist der Drehimpuls einer Punktmasse am Ort ${\bf x}$  und mit dem Impuls ${\bf p}$  definiert als

$$\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p},\tag{2.259}$$

in kartesischen Komponenten also

$$\mathbf{L} = \begin{vmatrix} \cdot & \cdot & \cdot \\ x_1 & x_2 & x_3 \\ p_1 & p_2 & p_3 \end{vmatrix} = (x_2 p_3 - x_3 p_2, x_3 p_1 - x_1 p_3, x_1 p_2 - x_2 p_1)^T.$$
(2.260)

Der entsprechende quantenmechanische Ausdruck folgt aus dem Korrespondenz-Prinzip,

$$\hat{\mathbf{x}} = (\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3)^T, \quad \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla = -i\hbar(\partial_{x_1}, \partial_{x_2}, \partial_{x_3})^T = (\hat{p}_1, \hat{p}_2, \hat{p}_3).$$
 (2.261)

Für den Operator des Drehimpulses bedeutet das

$$\hat{\mathbf{L}} = -i\hbar\hat{\mathbf{x}} \times \nabla = (\hat{x}_2\hat{p}_3 - \hat{x}_3\hat{p}_2, \hat{x}_3\hat{p}_1 - \hat{x}_1\hat{p}_3, \hat{x}_1\hat{p}_2 - \hat{x}_2\hat{p}_1)^T.$$
(2.262)

# 2.9.2 Drehimpulsquadrat und Kugelflächenfunktionen

In Kugelkoordinaten hat man

$$\hat{L}_{x} = -i\hbar \left( -\sin\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} - \cos\varphi \cot\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right)$$

$$\hat{L}_{y} = -i\hbar \left( \cos\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} - \sin\varphi \cot\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right)$$

$$\hat{L}_{z} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi},$$
(2.263)

sowie für das Quadrat

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right].$$
(2.264)

In Kugelkoordinaten ist die z-Achse die zentrale Achse, um die die Winkelkoordinate  $\varphi$  rotiert. Die Drehimpuls-Komponente  $\hat{L}_z$  entspricht Drehungen um die z-Achse, der entsprechende quantenmechanische Ausdruck wird deshalb sehr einfach: er ist durch eine Differentiation nach  $\varphi$  gegeben.

Der Operator für das Quadrat des Drehimpulse,  $\hat{\mathbf{L}}^2$ , ist gerade das  $-\hbar^2$ -Fache des Ausdrucks für  $\hat{\Omega}$ , Gl. (2.246), im Winkelanteil des Laplace-Operators, d.h.

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{\Omega}}{r^2} = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\mathbf{L}^2}{\hbar^2 r^2}.$$
(2.265)

Insbesondere sind also die Eigenfunktionen  $Y_{lm}$  von  $\hat{\Omega}$  auch Eigenfunktionen von  $\hat{\mathbf{L}}^2$ , vgl Gl. (2.248) mit c = -l(l+1),

$$\hat{\mathbf{L}}^2 Y_{lm}(\theta,\varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta,\varphi), \quad l = 0, 1, 2, 3, \dots$$
(2.266)

Weiterhin besteht die Abhängigkeit der Kugelflächenfunktionen  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  vom Winkel  $\varphi$  nur über den Term  $e^{im\varphi}$ : daraus folgt

$$\hat{L}_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar m Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad m = -l, -l - 1, ..., l - 1, l,$$
 (2.267)

was bedeutet, daß die  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  auch Eigenfunktionen der z-Komponente des Drehimpulses sind. Das ist Ausdruck eines allgemeineren Theorems über gemeinsamer Eigenfunktionen, das wir gleich weiter unten diskutieren. Wir fassen aber zunächst noch einmal zusammen: **Satz 15.** Der Hamiltonian eines Teilchens der Masse m im kugelsymmetrischem Potential in d = 3 Dimensionen läßt sich mit Hilfe des Drehimpuls-Quadrats  $\hat{\mathbf{L}}^2$  schreiben als

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + V_{\text{eff}}(r)$$

$$V_{\text{eff}}(r) \equiv \frac{\mathbf{L}^2}{2mr^2} + V(r), \quad \text{Effektives Potential.}$$
(2.268)

Die entsprechenden Eigenfunktionen  $\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$  sind auch Eigenfunktionen des Drehimpuls-Quadrats  $\hat{\mathbf{L}}^2$  und der z-Komponente des Drehimpulses  $\hat{L}_z$ ,

$$\hat{H}\Psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = E_n\Psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)$$

$$\hat{\mathbf{L}}^2\Psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = \hbar^2 l(l+1)\Psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)$$

$$\hat{L}_z\Psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = \hbar m\Psi_{nlm}(r,\theta,\varphi).$$
(2.269)

Das effektive Potential  $V_{\text{eff}}(r)$  kennen wir bereits aus der Behandlung zentralsymmetrischer Probleme in d = 3 in der klassischen Mechanik, vgl. MECHANIK-SKRIPT Gl. (1.74). Dort kann man es gebrauchen, um sich zunächst einen ersten Überblick über die klassische Bewegung zu verschaffen, die wegen Drehimpulserhaltung in einer festen Ebene abläuft (vgl. Kepler-Problem). Aus dem Energieerhaltungssatz

$$E = \frac{1}{2}m\mathbf{v}^{2} + V(r) = \frac{m}{2}\left(\dot{r}^{2} + r^{2}\dot{\phi}^{2}\right) + V(r) = \frac{m}{2}\dot{r}^{2} + \frac{L^{2}}{2mr^{2}} + V(r)$$
  
$$= \frac{m}{2}\dot{r}^{2} + V_{\text{eff}}(r)$$
(2.270)

folgt ja eine DGL für  $r(t)(0 \le r < \infty)$ . Der Term  $\frac{L^2}{2mr^2}$  heißt **Drehimpulsbarriere** und entspricht einem *abstoßenden* Potential. Wir betrachten als Beispiel ein *anziehendes* 1/r-Potential (Gravitationspotential oder Coulombpotential), also

$$V_{\rm eff}(r) \equiv \frac{L^2}{2mr^2} - \frac{\alpha}{r} \tag{2.271}$$

mit  $\alpha > 0$ . Die Schnittpunkte von  $V_{\text{eff}}(r)$  mit der Gesamtenergie E bestimmen die Umkehrpunkte der Bahn, d.h. die Radii r mit verschwindenden Radialgeschwindigkeiten  $\dot{r} = 0$ . Je nach Wert vom Drehimpuls L und Gesamtenergie E gibt es gebundene Lösungen (sie entsprechen den Kepler-Ellipsen der Planeten) und nichtgebundene Lösungen, bei denen die Körper aus dem Unendlichen kommen, am Potential gestreut werden und dann wieder im Unendlichen verschwinden. Entsprechend unterscheidet man auch in der Quantenmechank zwischen gebundenen Zuständen und Streuzuständen.

#### 2.9.3 Gemeinsame Eigenfunktionen kommutierender Observablen

Wir kommen jetzt auf die oben diskutierten gemeinsamen Eigenwert-Gleichungen  $\hat{\mathbf{L}}^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1)Y_{lm}$  und  $\hat{L}_z Y_{lm} = \hbar m Y_{lm}$  zurück. Hierzu benötigen wir folgendes Theorem:

**Satz 16.** Zwei miteinander kommutierende Observablen (selbstadjungierte Operatoren) A und B haben gemeinsame Eigenfunktionen.

Zum Beweis schreiben wir die EW-Gleichung zum EW  $\alpha$ ,

$$A|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \rightsquigarrow AB|\alpha\rangle = BA|\alpha\rangle = \alpha B|\alpha\rangle, \qquad (2.272)$$

also ist  $B|\alpha\rangle$  EV von A zum EW  $\alpha$ . Falls  $\alpha$  nicht entartet ist, muß  $B|\alpha\rangle$  in der linearen Hülle von  $\alpha$  liegen, also proportional zu  $\alpha$  sein, was  $B|\alpha\rangle = \beta|\alpha\rangle$  mit  $\beta \in \mathbb{C}$  bedeutet, d.h.  $|\alpha\rangle$  ist EV von B zum Eigenwert  $\beta$ .

Falls  $\alpha$  *n*-fach entartet ist, lautet die EW-Gleichung für A

$$A|\alpha_i\rangle \ = \ \alpha|\alpha_i\rangle, \quad i=1,...,n. \rightsquigarrow AB|\alpha_k\rangle = BA|\alpha_k\rangle = \alpha B|\alpha_k\rangle,$$

und wieder muß  $B|\alpha_k\rangle$  in der linearen Hülle aller Eigenvektoren  $|\alpha_i\rangle$  von A liegen, die den Unterraum zum Eigenwert  $\alpha$  aufspannen:

$$B|\alpha_k\rangle = \sum_i \langle \alpha_i | B\alpha_k \rangle | \alpha_i \rangle, \quad A|\alpha_i\rangle = \alpha |\alpha_i\rangle, \quad \langle \alpha_i | \alpha_j \rangle = \delta_{ij}. \tag{2.273}$$

Da  $B = B^{\dagger}$  selbstadjungiert ist, muß gelten

$$c_{ik} \equiv \langle \alpha_i | B\alpha_k \rangle = \langle B\alpha_i | \alpha_k \rangle = \langle \alpha_k | B\alpha_i \rangle^* = c_{ki}^*, \qquad (2.274)$$

d.h. die Matrix C der Koeffizienten  $c_{ik}$  ist selbstadjungiert. Dann kann man sie aber mit Hilfe einer unitären Transformation diagonalisieren gemäß

$$C = SDS^{-1}, \quad \rightsquigarrow B|\alpha_k\rangle = \sum_{i,\mu} S_{i\mu} D_\mu S_{\mu k}^{-1} |\alpha_i\rangle$$

$$\sum_k S_{kl} B|\alpha_k\rangle = \sum_{i,\mu,k} S_{i\mu} D_\mu S_{\mu k}^{-1} S_{kl} |\alpha_i\rangle = \sum_i S_{il} D_l |\alpha_i\rangle$$

$$\rightsquigarrow B|\alpha_l\rangle' = D_l |\alpha_l\rangle', \quad |\alpha_l\rangle' \equiv \sum_i S_{il} |\alpha_i\rangle, \quad l = 1, ..., n.$$

$$A|\alpha_l\rangle' = \sum_i S_{il} A|\alpha_i\rangle = \alpha \sum_i S_{il} |\alpha_i\rangle = \alpha |\alpha_l\rangle'. \quad (2.275)$$

Damit sind die neuen Basisvektoren der unitär transformierten Basis  $|\alpha_l\rangle'$  Eigenvektoren von B mit Eigenwerten  $D_l$ , und gleichzeitig Eigenvektoren von A mit dem Eigenwert  $\alpha$ . QED.

#### 2.9.4 Drehimpuls-Kommutatorrelationen

(Wir in Teilen in den ÜBUNGSAUFGABEN behandelt). Als Operatoren vertauschen die Komponenten  $L_x$ ,  $L_y$ ,  $L_z$  des Drehimpulsoperators nicht, sondern es gelten die **Drehimpuls-Vertauschungsrelationen**, die man direkt durch nachrechnen bestätigt (ÜBUNGSAUFGABE)

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z$$
, plus zyklische Vertauschung , (2.276)

was man mit Hilfe des epsilon-Tensors als

$$[L_j, L_k] = i\varepsilon_{jkl}L_l \tag{2.277}$$

schreiben kann. Weiterhin gilt für den Kommutator von  $\hat{\mathbf{L}}^2$ ,

$$[\hat{\mathbf{L}}^2, L_x] = [\hat{\mathbf{L}}^2, L_y] = [\hat{\mathbf{L}}^2, L_z] = 0.$$
 (2.278)

Nach Satz<br/>16 haben z.B.  $\hat{\mathbf{L}}^2$  und  $L_z$  also ein gemein<br/>sames System von Eigenfunktionen.

Umgekehrt stellen wir jetzt die Vertauschungsrelationen (VR) von Operatoren  ${\cal J}_l$ 

$$[J_j, J_k] = i\epsilon_{jkl}J_l, \quad j, k, l = 1, 2, 3$$
(2.279)

als abstrakte algebraische Relationen an den Anfang. Wir fragen nach möglichen Darstellungen dieser VR durch Hilbertraum-Operatoren. Dabei stößt man auch auf halbzahlige Drehimpulse, z.B. den Spin 1/2. Wir gehen dabei wie folgt vor: Zunächst gilt (ÜBUNGSAUFGABE)

$$[J^2, J_3] = 0, \quad J^2 \equiv J_1^2 + J_2^2 + J_3^2, \tag{2.280}$$

damit haben  $J^2$  und  $J_3$  nach Satz (16) ein gemeinsames System von Eigenfunktionen,

$$J^{2}|\lambda\nu\rangle = \lambda|\lambda\nu\rangle, \quad J_{3}|\lambda\nu\rangle = m_{\nu}|\lambda\nu\rangle.$$
(2.281)

Hierbei können die Eigenwerte  $\lambda$  von  $J^2$  im Allgemeinen entartet sein, die Eigenzustände  $|\lambda\nu\rangle$  werden deshalb mit weiteren Quantenzahlen  $\nu$  gekennzeichnet.

Jetzt definiert man **Schiebeoperatoren**, um analog zum harmonischen Oszillator eine algebraische Behandlung durchzuführen. Wir definieren

$$J_{\pm} \equiv J_1 \pm i J_2, \quad [J_3, J_{\pm}] = \pm J_{\pm}, \tag{2.282}$$

und es gilt (ÜBUNGSAUFGABE)

$$J_{-}J_{+}|\lambda\nu\rangle = (\lambda - m_{\nu}^{2} - m_{\nu})|\lambda\nu\rangle, \quad \lambda - m_{\nu}^{2} - m_{\nu} \ge 0$$
  
$$J_{3}J_{+}|\lambda\nu\rangle = (m_{\nu} + 1)|\lambda\nu\rangle. \quad (2.283)$$

Mehrfaches Anwenden von  $J_+$  auf  $|\lambda\nu\rangle$  gibt immer höhere Werte  $m_{\nu}$ , obwohl  $m_{\nu}$  beschränkt sein muss. Es existiert also ein maximales  $m_{\nu} = j$ , für das man

$$j \ge m_{\nu}, \quad \lambda = j(j+1) \tag{2.284}$$

erhält. Analog findet man durch Anwenden des Schiebeoperators  $J_{-}$  ein minimales  $m_{\nu} = -j$ . Es gilt also

$$-j \le m_{\nu} \le j. \tag{2.285}$$

Von -j gelangt man nach j in ganzzahligen Schritten nur, falls j entweder ganz oder halbzahlig ist! Die Quantenzahl j des Drehimpulses hat also nur die möglichen Werte

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$$
 (2.286)

Für gegebenes j gibt es 2j + 1 Eigenwerte m von  $J_3$ , wir haben also

$$J^{2}|jm\rangle = j(j+1)|jm\rangle, \quad J_{3}|jm\rangle = m|jm\rangle.$$

$$(2.287)$$

Damit haben wir die möglichen Eigenwerte von  $J^2$  und  $J_3$  gefunden! Bis auf einen beliebigen Phasenfaktor hat man weiterhin (ÜBUNGSAUFGABE)

$$J_{\pm}|jm\rangle = \sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}|jm\pm 1\rangle.$$
(2.288)

## 2.10 Der Spin

## 2.10.1 Empirische Hinweise auf den Spin

(GASIOROWICZ) Erste empirische Hinweise kamen über Atomspektren und die Idee W. Paulis (1924), neben den Quantenzahlen n, l, m eine weitere zweiwertige Quantenzahl einzuführen. Goodsmit und Uhlenbeck schlugen daraufhin das Konzept des *intrinsischen Drehimpulses* eines Elektrons mit dem Wert  $s = \frac{1}{2}$  vor. Ein weiterer empirischer Hinweis ist der Stern-Gerlach-Versuch.

Der Stern-Gerlach-Versuch benutzt einen Atomstrahl mit Ag-Atomen, die in x-Richtung fliegen. Dabei treten sie durch ein inhomogenes Magnetfeld  $\mathbf{B} = B(z)\mathbf{e}_z$ , das in z-Richtung zeigt. Wenn die Atome ein magnetisches Moment  $\boldsymbol{\mu} \equiv (\mu_x, \mu_y, \mu_z)^T$  haben (vgl. Magnetostatik), so ist die potentielle Energie im Magnetfeld  $\mathbf{B}$  durch das Potential  $V(z) = -\boldsymbol{\mu}\mathbf{B}$  gegeben, was zu einer Kraft  $\mathbf{F}$  in z-Richtung führt gemäß

$$\mathbf{F} = -\nabla V(z) = (0, 0, \mu_z B'(z))^T.$$
(2.289)

Nach der klassischen Mechanik würde das eine kontinuierliche Ablenkung der Atome in z-Richtung geben. Beobachtet werden aber nur zwei Flecke. Weitere ähnliche Untersuchungen führen zu folgendem Schluß: Das magnetische Moment der Atome ist letztendlich auf die einzelnen Elektronen zurückzuführen. Weiterhin existiert der Effekt auch für ein einzelnes Elektron.

## 2.10.2 Pauli-Matrizen

Aus der Drehimpuls-Algebra im vorherigen Kapitel hatten wir bereits die Möglichkeit halbzahliger Werte für die Drehimpulsquantenzahl j erkannt. Mit  $j = \frac{1}{2}$  gibt es dann zwei Möglichkeiten für die entsprechende Quantenzahl m, nämlich  $m = \pm \frac{1}{2}$ . Deshalb postulieren wir: Das Elektron hat einen Eigendrehimpuls (*Spin*) vom Betrag  $\hbar/2$  mit zwei Projektionen  $\pm \hbar/2$ , der mit einem magnetischen Moment verknüpft ist. Es gilt dann

**Satz 17.** Der Operator des Spin-Drehimpulses **S** des Elektrons erfüllt wie alle Drehimpulse  $[S_i, S_k] = i\epsilon_{ikl}S_l$ ; insbesondere gilt

$$S^{2}|sm\rangle = s(s+1)|sm\rangle, \quad S_{3}|sm\rangle = m|sm\rangle, \quad s = \frac{1}{2}, \quad m = \pm \frac{1}{2}.$$
 (2.290)

Eine explizite Darstellung der Spinoperatoren erfolgt durch die **Pauli-Matrizen**  $\sigma_i$  mittels  $S_i = \frac{\hbar}{2} \sigma_i$  (mit  $\sigma_1 \equiv \sigma_x$ ,  $\sigma_2 \equiv \sigma_y, \sigma_3 \equiv \sigma_z$ ),

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$
(2.291)

Die Pauli-Matrizen haben die Eigenschaft

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1 \tag{2.292}$$

$$\sigma_x \sigma_y + \sigma_y \sigma_x = 0, \quad \sigma_x \sigma_z + \sigma_z \sigma_x = 0, \quad \sigma_z \sigma_y + \sigma_y \sigma_z = 0$$
(2.293)

Der Beweis der Vertauschungsrelationen  $[S_j, S_k] = i\epsilon_{jkl}S_l$  mit  $S_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i$  sowie der angegebenen Eigenschaften der Pauli-Matrizen erfolgt durch direktes NACHRECHNEN.

Im Gegensatz zu den ganzzahligen Drehimpulsen l = 0, 1, 2, ..., die wir beim Wasserstoffproblem kennen gelernt hatten, läßt sich der halbzahlige Spin  $j \equiv s = \frac{1}{2}$  nicht mittels Differentialoperatoren darstellen, insbesondere läßt er sich nicht auf irgendwelche Kombinationen von Ort und Impuls zurückführen. Er ist eine echte neue, quantenmechanische innere Eigenschaft des Elektrons, für die es kein Korrespondenzprinzip gibt.

AUFGABE: Der Spin-Operator  $\mathbf{S} = (S_x, S_y, S_z)$  des Elektrons erfüllt per Definition die Drehimpulsalgebra  $[S_j, S_k] = i\hbar\epsilon_{jkl}S_l$ . Ein Zustand werde durch  $|s, s_z\rangle$  dargestellt  $(s = 1/2 \text{ und } s_z = \pm 1/2)$  und genügt den Eigenwertgleichungen  $\mathbf{S}^2|s, s_z\rangle = \hbar^2 s(s + 1)|s, s_z\rangle$  und  $S_z|s, s_z\rangle = \hbar s_z|s, s_z\rangle$ .

1. Wir geben die Spin-Operatoren in der konventionellen  $\{S_z\}$ -Darstellung an, in der  $S_z$  diagonal ist:

$$S_z = \begin{pmatrix} +\hbar/2 & 0\\ 0 & -\hbar/2 \end{pmatrix}.$$

Leiten Sie nun Ausdrücke für die Operatoren  $S_x$  und  $S_y$  her, indem Sie das Ergebnis von Aufgabe 18 nutzen. Bestimmen Sie dazu zunächst die Matrixelemente der Operatoren  $S_{\pm} \equiv S_x \pm iS_y$  und verwenden Sie die Gleichung

$$S_{\pm}|s,s_z\rangle = \hbar\sqrt{(s\mp s_z)(s\pm s_z+1)} |s,s_z\pm 1\rangle.$$

Mit der Definition der Pauli-Matrizen  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ 

$$\sigma_x \equiv \sigma_1 \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y \equiv \sigma_2 \equiv \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z \equiv \sigma_3 \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

lässt sich das Ergebnis kompakt als  $\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$  schreiben.

2. Zeigen Sie die folgende Eigenschaft der Pauli-Matrizen durch explizites Nachrechnen:

$$\sigma_j \sigma_k = i\epsilon_{jkl}\sigma_l + \delta_{jk}\mathbf{1}$$

Beweisen Sie, dass daraus für den Kommutator  $[\sigma_j, \sigma_k]$  bzw. den Antikommutator  $\{\sigma_j, \sigma_k\} \equiv \sigma_j \sigma_k + \sigma_k \sigma_j$  folgt:

$$[\sigma_j, \sigma_k] = 2i\epsilon_{jkl}\sigma_l, \qquad \{\sigma_j, \sigma_k\} = 2\delta_{jk}\mathbf{1}$$

# **2.10.3** Spin-Hilbertraum $\mathbb{C}^2$

In der Quantenmechanik II wird sich der Spin in natürlicher Weise aus der relativistischen Dirac-Gleichung ergeben. Von dort werden wir auf die Pauli-Gleichung (nichtrelativistischer Grenzfall der Dirac-Gleichung) geführt (vgl. SKRIPT Quantenmechanik Sommersemester 2007).

Das zusätzliche quantenmechanische Potential (**Zeeman-Term**), das auf ein Teilchen mit Spin  $s = \frac{1}{2}$  in einem Magnetfeld in z-Richtung wirkt, lautet

$$H_{\sigma B} \equiv -g_e \mu_B B \sigma_z = -g_e \mu_B B \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad g_e = 1 \quad \text{in Dirac-Theorie}(2.294)$$
$$\mu_B \equiv \frac{e\hbar}{2m} \quad \text{Bohr-Magneton}, \quad (2.295)$$

wobei  $g_e$  der g-Faktor des Elektrons ist. Das magnetische Moment wird in der QM also ein Operator  $\boldsymbol{\mu} = g_e \mu_B \boldsymbol{\sigma}$ . Proton:  $g_p = 2.79...$ , Neutron  $g_n = -1.91...$  In dieser Form ist der Hamiltonoperator  $H_{\sigma B}$  also eine 2 × 2-Matrix, die ausschließlich die Wirkung bes Magnetfelds auf den Spin des Teilchens beschreibt. Allgemein gilt

**Satz 18.** Der Hilbertraum  $\mathcal{H}$  der inneren Spin-Zustände ein Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchens (kurz 'Spin- $\frac{1}{2}$ ') ist der komplexe Vektorraum  $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$ , der z.B. von den zwei Eigenzuständen von  $\sigma_z$ 

$$|\uparrow\rangle_z \equiv |\uparrow, \mathbf{e}_z\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1\\0 \end{pmatrix}, \quad |\downarrow\rangle_z \equiv |\downarrow, \mathbf{e}_z\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0\\1 \end{pmatrix}$$
 (2.296)

aufgespannt wird. Jeder Spinzustand  $|\chi\rangle$  ist eine Linearkombination  $|\chi\rangle = \alpha |\uparrow\rangle_z + \beta |\downarrow\rangle_z$ mit  $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ . Alle linearen Operatoren  $\hat{A}$  auf  $\mathcal{H}$  lassen sich durch Linearkombinationen der Paulimatrizen und der Einheitsmatrix  $\hat{1}$  darstellen,

$$\hat{A} = c_0 \hat{1} + c_1 \sigma_1 + c_2 \sigma_2 + c_3 \sigma_3 \equiv c_0 \hat{1} + \boldsymbol{\sigma} \mathbf{c}, \quad c_i \in \mathbb{C}$$

$$(2.297)$$

mit  $\mathbf{c} = (c_1, c_2, c_3)$  und dem Vektor der Pauli-Matrizen  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ ,

$$\boldsymbol{\sigma} = \left( \left( \begin{array}{cc} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{array} \right), \left( \begin{array}{cc} 0 & -i \\ i & 0 \end{array} \right), \left( \begin{array}{cc} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{array} \right) \right)$$
(2.298)

Zum Beweis: Der  $\mathbb{C}^2$  hat die angegebene Basis. Die linearen Operatoren auf  $\mathbb{C}^2$ sind die linearen Abbildungen, die durch 2 × 2-Matrizen dargestellt werden, für die es eine Basis aus vier linear unabhängigen Matrizen gibt. Die  $\sigma_i$  und  $\hat{1}$  sind aber linear unabhängig und bilden deshalb eine solche Basis. QED.

Schließlich ist eine weitere nützliche Eigenschaft der Pauli-Matrizen wie folgt gegeben (AUFGABE)

**Satz 19.** Für den Vektor der Pauli-Matrizen  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ , einen reellen Einheitsvektor **n** und einen reellen Parameter  $\alpha$  gilt

$$e^{i\alpha\boldsymbol{\sigma}\mathbf{n}} = (\cos\alpha)\hat{1} + i(\sin\alpha)\boldsymbol{\sigma}\mathbf{n}.$$
(2.299)

# 2.10.4 Kombination von Spin- und Bahnzuständen

'Bahnzustände' sind die Zustände  $|\psi\rangle \in L_2(\Omega)$  mit quadratintegrablen Wellenfunktionen  $\psi(\mathbf{r})$  im Ortsraum, die wir bisher betrachtet hatten. Hinzu kommt jetzt der innere Spin-Freiheitsgrad mit den Spinzuständen  $|\chi\rangle \in \mathbb{C}^2$ , die für Spin  $s = \frac{1}{2}$  einfach zweikomponentige Vektoren sind. Beides kann nun durch Bildung des **Tensorprodukts** der zwei Hilberträume zusammengefaßt werden:

**Definition** Der Hilbertraum der *Spinoren* besteht aus Elementen des Tensorprodukts  $\mathcal{H} \equiv L_2(\Omega) \otimes \mathbb{C}^2$ , d.h. Linearkombinationen der Form

$$|\Psi\rangle = \sum_{i} c_{i} |\Psi_{i}\rangle \otimes |\chi_{i}\rangle, \quad |\Psi_{i}\rangle \in L_{2}(\Omega), \quad |\chi_{i}\rangle \in \mathbb{C}^{2}.$$
(2.300)

Das Skalarprodukt in  $\mathcal{H}$  ist

$$\langle \Psi' | \Psi \rangle = \sum_{ij} (c'_i)^* c_j \langle \Psi'_i | \Psi_j \rangle \langle \chi'_i | \chi_j \rangle.$$
(2.301)

Wenn wir den Spin-up- und den Spin-down-Anteil zusammenfassen, bekommen wir eine Entwicklung in der Basis des  $\mathbb{C}^2$ , d.h. nach Spin-Eigenvektoren  $|\uparrow\rangle_z$ ,  $|\downarrow\rangle_z$  in der üblichen Form

$$|\Psi\rangle = |\Psi_{\uparrow}\rangle \otimes |\uparrow\rangle_z + |\Psi_{\downarrow}\rangle \otimes |\downarrow\rangle_z, \quad |\Psi_{\sigma}\rangle \in L_2(\Omega), \quad \sigma = \uparrow, \downarrow.$$
(2.302)

Wir schreiben damit in Dirac-Notation die Spin- $\sigma$ -Komponenten des Zustands  $|\Psi\rangle$  im Ortsraum als

$$\langle x\sigma|\Psi\rangle \equiv \Psi_{\sigma}(x), \quad \sigma=\uparrow,\downarrow,$$
(2.303)

und  $|\langle x\sigma|\Psi\rangle|^2$  ist die W-dichte, das Teilchen am Ort x mit Spin in  $\sigma$ -Richtung zu finden. Manchmal schreibt man auch

$$\langle x|\Psi\rangle \equiv \begin{pmatrix} \Psi_{\uparrow}(x) \\ \Psi_{\downarrow}(x) \end{pmatrix}$$
(2.304)

als zweikomponentigen Vektor mit  $L_2$ -Wellenfunktionen als Komponenten. In konsistenter Dirac-Notation ist dann

$$\langle \uparrow | \langle x | \Psi \rangle = \Psi_{\uparrow}(x), \quad \langle \downarrow | \langle x | \Psi \rangle = \Psi_{\downarrow}(x)$$
 (2.305)

als Projektion auf die jeweiligen Spin-Komponenten.

Sei weiterhin  $|n\rangle$  eine Basis des 'Bahn'-Hilbertraums  $L_2(\Omega)$ . Dann ist  $\{|n\rangle \otimes |\sigma\rangle_z\}$ ,  $\sigma =\uparrow,\downarrow$  eine Basis des Tensorprodukts (Spinorraum)  $\mathcal{H}$ , dessen Elemente Linearkombinationen sind,

$$|\Psi\rangle = \sum_{n} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} c_{n\sigma} |n\rangle \otimes |\sigma\rangle_z, \quad c_{n\sigma} \in \mathbb{C}.$$
 (2.306)

**Definition** Auf einem Tensorprodukt  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  zweier Hilberträume sind lineare Operatoren durch  $\hat{A} = \hat{A}_1 \otimes \hat{A}_2$  gegeben, wobei der lineare Operator  $\hat{A}_1$  in  $\mathcal{H}_1$  und entsprechend  $\hat{A}_2$  in  $\mathcal{H}_2$  wirkt gemäß

$$\hat{A}|\Psi\rangle = \hat{A}\sum_{i} c_{i}|\Psi_{i}\rangle \otimes |\chi_{i}\rangle \equiv \sum_{i} c_{i}(\hat{A}_{1}|\Psi_{i}\rangle) \otimes (\hat{A}_{2}|\chi_{i}\rangle).$$
(2.307)

Im Hilbertraum der Spinoren bedeutet das Folgendes:

**Satz 20.** Im Hilbertraum  $\mathcal{H} \equiv L_2(\Omega) \otimes \mathbb{C}^2$  der Spinor-Wellenfunktionen (Bahn- und Spinanteil) eines Elektrons haben lineare Operatoren die Form

$$\hat{A} = \hat{O}(\mathbf{x}, \mathbf{p}) \otimes \hat{1}_{\mathbb{C}^2}, \quad \hat{1}_{\mathbb{C}^2} \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \text{nur Bahnanteil}$$
(2.308)

$$\hat{A} = \hat{1}_{L_2} \otimes \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$$
, nur Spinanteil (2.309)

$$\hat{A} = \hat{O}(\mathbf{x}, \mathbf{p}) \otimes \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$$
, beide Anteile, (2.310)

wobei  $\hat{1}_{L_2}$  der Einheitsoperator ('unity') bezeichnet, der 'nichts' auf dem Bahnanteil  $\in L_2(\Omega)$  der Wellenfunktion bewirkt.

Der Fall 'beide Anteile' wird als **Spin-Bahn-Kopplung** bezeichnet und ist z.B. für die Feinstruktur des Wasserstoffspektrums wichtig (QM II).

Wir betrachten nun den Hamiltonoperator mit dem zusätzlichen Zeeman-Term Gl. (2.294), das auf ein Teilchen mit Spin  $s = \frac{1}{2}$  in einem Magnetfeld wirkt. Für ein Magnetfeld **B**, das jetzt in eine beliebige Richtung zeigen soll, verallgemeinern wir den Spin-Anteil Gl. (2.294),

$$H_{\sigma B} \equiv -g_e \frac{e\hbar}{2m} B\sigma_z$$
, Magnetfeld in z-Richtung (2.311)

$$H_{\sigma B} \equiv -g_e \frac{e\hbar}{2m} \sigma \mathbf{B}$$
, Magnetfeld in beliebige Richtung (2.312)

mit dem Vektor  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_2)$  der Pauli-Matrizen, Gl. (2.298). Insgesamt wird dann mit dem Bahnanteil der Hamiltonian des Elektrons zu

$$\hat{H} = \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{x})\right) \otimes \hat{1}_{\mathbb{C}^2} + \hat{1}_{L_2} \otimes \left(\frac{-g_e e\hbar}{2m}\right) \boldsymbol{\sigma} \mathbf{B}.$$
(2.313)

In der Praxis läßt man in der Notation meist die Einheitsoperatoren einfach weg und schreibt die entsprechende Schrödinger-Gleichung dann als

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi\rangle = \hat{H}|\Psi\rangle$$
$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{x}) - \frac{g_e e\hbar}{2m}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{B}, \quad \text{Pauli-Gleichung.}$$
(2.314)

# 2.10.5 Anwendung: Zeeman-Aufspaltung

Wir betrachten die Pauli-Gleichung mit konstantem Magnetfeld **B** und skalarem Potential  $\Phi(\mathbf{r})$ ,

$$i\partial_t \Psi = H\Psi, \quad H = \frac{(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2}{2m} - \frac{e\hbar}{2m}\sigma\mathbf{B} + e\Phi(\mathbf{r}).$$
 (2.315)

Wir wählen das Vektor<br/>potential  ${\bf A}$  als

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r} \tag{2.316}$$

und erhalten (AUFGABE)

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + e\Phi(\mathbf{r}) + \frac{\mu_B}{\hbar} \left(\mathbf{L} + \hbar\boldsymbol{\sigma}\right) \mathbf{B} + \frac{e^2}{8m} (\mathbf{B} \times \mathbf{r})^2$$
(2.317)

mit dem Drehimpuls L. Für kleine Magnetfelder schreiben wir genähert

$$H = H_0 + V, \quad H_0 \equiv \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + e\Phi(\mathbf{r}), \quad V \equiv \frac{\mu_B}{\hbar} \left(\mathbf{L} + \hbar\boldsymbol{\sigma}\right) \mathbf{B}.$$
 (2.318)

Seien  $|nlm\rangle$  die Eigenzustände von  $H_0$  mit Eigenenergien  $E_n^0$  für ein Coulombpotential  $\Phi(r)$  (Wasserstoff-Atom). Wir schreiben die Eigenzustände von H mit Spin als Produktzustände,

$$|nlm\sigma\rangle \equiv |nlm\rangle \otimes |\sigma\rangle, \tag{2.319}$$

wobei  $|\sigma\rangle$  ein Spinor-Eigenzustand von  $\sigma \mathbf{n}$ ,  $\mathbf{n} = \mathbf{B}/B$  ist. Dann sind die zugehörigen Eigenenergien  $E_{nlm\sigma}$ 

$$E_{nlm\sigma} = E_n^0 + \mu_B B(m+\sigma), \qquad (2.320)$$

d.h. die ursprünglichen  $E_n^0$  werden **aufgespalten** (AUFGABE: Aufspaltung im Termschema skizzieren!)

## 2.10.6 'Drehung der Stern-Gerlach-Apparatur' (I)

Die zwei Spin-Zustände

$$|\uparrow, \mathbf{e}_z\rangle, \quad |\downarrow, \mathbf{e}_z\rangle$$
 (2.321)

mit  $m = \pm 1/2$  sind Eigenzustände von  $S_z$  bzw. der Pauli-Matrix  $\sigma_z$ ,

$$\sigma_{z}|\uparrow, \mathbf{e}_{z}\rangle = +1|\uparrow, \mathbf{e}_{z}\rangle \leftrightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0\\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1\\ 0 \end{pmatrix} = +1\begin{pmatrix} 1\\ 0 \end{pmatrix}$$
(2.322)

$$\sigma_{z}|\downarrow, \mathbf{e}_{z}\rangle = -1|\downarrow, \mathbf{e}_{z}\rangle \leftrightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0\\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0\\ 1 \end{pmatrix} = -1 \begin{pmatrix} 0\\ 1 \end{pmatrix}$$
(2.323)

und damit Eigenzustände des 'Zeeman-Term'-Hamiltonians  $H_{\sigma B} \equiv -g_e \mu_B \sigma \mathbf{B}$  in der Pauli-Gleichung für Magnetfeld  $\mathbf{B} = (0, 0, B)$  in z-Richtung.

Jetzt drehen wir das Magnetfeld in eine beliebige Richtung **n**, so daß **B** = B**n**. Wir wollen wieder die Eigenzustände von  $H_{\sigma B}$  berechnen (der Vorfaktor  $-g_e \mu_B B$  spielt hier keine Rolle). Dann brauchen wir die Eigenzustände des Operators

$$(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{n}) = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\phi} \\ \sin\theta e^{i\phi} & -\cos\theta \end{pmatrix}_{z}, \quad \mathbf{n} = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta), \quad (2.324)$$

für die gilt (AUFGABE)

$$(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{n})|\uparrow,\mathbf{n}\rangle = |\uparrow,\mathbf{n}\rangle, \quad |\uparrow,\mathbf{n}\rangle = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2} \\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2} \end{pmatrix}_{z}$$
(2.325)

$$(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{n})|\downarrow,\mathbf{n}\rangle = -|\downarrow,\mathbf{n}\rangle, \quad |\downarrow,\mathbf{n}\rangle = \begin{pmatrix} -\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2}\\ \cos\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2} \end{pmatrix}_{z}, \quad (2.326)$$

wobei der Index z anzeigt, daß sich die Komponenten auf die Basis der  $|\uparrow, \mathbf{e}_z\rangle$ ,  $|\downarrow, \mathbf{e}_z\rangle$  bezieht.

# 2.11 Zeitentwicklung in der Quantenmechanik (II)

Mit der Zeitentwicklung hatten wir uns bereits weiter oben in Abschnitt (2.1.4) beschäftigt. Bitte dort WIEDERHOLEN!

## 2.11.1 Unitärer Zeitentwicklungsoperator

Die Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle, \quad |\Psi(t=0)\rangle = |\Psi\rangle_0, \quad |\Psi(t)\rangle \in \mathcal{H}$$
 (2.327)

beschreibt die Zeitentwicklung von Zuständen im Hilbertraum  $\mathcal{H}$  als Anfangswertproblem. Sie wird bestimmt durch (den hier zunächst zeitunabhängigen) Hamiltonian  $\hat{H}$ und den Anfangszustand  $|\Psi(t=0)\rangle$ . Formal kann man die SG dann lösen durch

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\Psi(t=0)\rangle, \quad \hat{U}(t) \equiv e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}, \quad \text{Zeitentwicklungsoperator} .$$
 (2.328)

Hierbei ist die Exponentialfunktion eines Operators  $\hat{A}$  über die Reihe definiert,

$$e^{\hat{A}} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^n}{n!}.$$
(2.329)

Wir können die Zeitentwicklung umkehren,

$$\hat{U}^{-1}(t)|\Psi(t)\rangle = |\Psi(t=0)\rangle.$$
 (2.330)

Dann gilt

$$\hat{U}^{-1}(t) = e^{+\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = \hat{U}(-t), \qquad (2.331)$$

denn mit dieser Form werden beide Seiten in Gl. (2.330) für alle Zeiten t gleich: für t = 0 ist das offensichtlich, und die zeitliche Änderung beider Seiten verschwindet,

$$\frac{\partial}{\partial t}e^{+i\hat{H}t}|\Psi(t)\rangle = e^{+i\hat{H}t}i\hat{H}|\Psi(t)\rangle + e^{+i\hat{H}t}(-i)\hat{H}|\Psi(t)\rangle = 0.$$
(2.332)

**Definition** Ein **unitärer Operator**  $\hat{U}$  im Hilbertraum  $\mathcal{H}$  ist ein linearer Operator mit Definitionsbereich  $D(\hat{U}) = \mathcal{H}$ , der das Skalarprodukt invariant läßt, d.h.

$$(\hat{U}|\psi\rangle, \hat{U}|\phi\rangle) \equiv \langle \psi\hat{U}|\hat{U}\phi\rangle = (|\psi\rangle, |\phi\rangle) \equiv \langle \psi|\phi\rangle.$$
(2.333)

Es gelten folgende Aussagen:

**Satz 21.** Unitäre Operatoren  $\hat{U}$  erfüllen  $\hat{U}^{\dagger}\hat{U} = \hat{1}$  (Einsoperator), und ihr Inverses ist  $\hat{U}^{-1} = \hat{U}^{\dagger}$ . Sie sind normale Operatoren, d.h. sie erfüllen  $\hat{U}^{\dagger}\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^{\dagger}$ . Weiterhin ist der Zeitentwicklungsoperator  $\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$  ein unitärer Operator.

Beim Zeitentwicklungsoperator gilt nämlich ( $\hbar = 1$ )

$$\hat{U}^{\dagger}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i\hat{H}t)^{\dagger}}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{i\hat{H}t}{n!} = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = \hat{U}^{-1}(t).$$
(2.334)

## 2.11.2 Gruppeneigenschaft

Wenn man als Anfangszeit in der Schrödingergleichung ein beliebiges  $t_0$  wählt, gilt Entsprechendes:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle, \quad |\Psi(t_0)\rangle = |\Psi\rangle_0$$
  
$$\rightsquigarrow |\Psi(t)\rangle = U(t-t_0) |\Psi(t_0)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)} |\Psi\rangle_0.$$
(2.335)

Weiterhin verifiziert man

$$U(t-t_1)U(t_1-t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_1)}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_1-t_0)} = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)} = U(t-t_0)$$
(2.336)

$$U(t_1)U(t_2) = U(t_1 + t_2), \quad U(0) = \hat{1}.$$
 (2.337)

Die U(t) bilden also eine Gruppe mit kontinuierlichem Parameter t, nach dem man die Gruppenelemente differenzieren kann. Solche Gruppen werden als **Lie-Gruppen** bezeichnet. Die Ableitung bei t = 0 mit  $U(t = 0) = \hat{1}$  bezeichnet man als *Generator* der Liegruppe,

$$i\frac{d}{dt}U(t)\Big|_{t=0} = i\frac{d}{dt}\left[1 - \frac{i\hat{H}t}{1!} + \ldots\right]_{t=0} = \hat{H}, \quad (\hbar = 1),$$
(2.338)

denn man kann aus ihm über die Exponentialreihe die gesamte Zeitentwicklung, d.h. das U(t), generieren. Wir merken uns: Der Generator der Zeitentwicklung ist der Hamiltonoperator.

Für negative Zeit-Parameter, also U(-t) mit t > 0, läuft die Zeitentwicklung rückwärts. Wie bei orthogonalen Rotationen im  $\mathbb{R}^2$  ist von vorneherein keine Rotationsrichtung (vorwärts/rückwärts bzw. nach links/ nach rechts) besonders ausgezeichnet. Das ist ein wesentliches Merkmal der Quantentheorie und zeichnet sie, wie andere 'fundamentale' Theorien (klassische Mechanik, Elektromagnetismus) als *mikroskopische Theorie* aus. Im Gegensatz hierzu sind viele *makroskopische Theorien*, wie z.B. die Thermodynamik, nicht zeitumkehrinvariant. Der Verlust der Zeitumkehrinvarianz, d.h. die Auszeichnung einer Zeitrichtung ('Zeitpfeil') beim Übergang von mikroskopischen zu makroskopischen Beschreibungsweisen, ist ein wesentliches Merkmal bei der Beschreibung komplexer Systeme. Ihr genaues Verständnis ist z.T. noch Gegenstand der aktuellen Forschung.

## 2.11.3 Beispiel: Zweiniveausystem

Als Beispiel für die unitäre Zeitentwicklung in der Quantenmechanik betrachten wir unsere diskrete SG aus Abschnitt (2.108) für ein **Zweiniveau-System**, d.h. ein System mit nur zwei Zuständen. In der Basis der 'Stützstellen-Kets'  $|L\rangle$  ('links') und  $|R\rangle$  ('rechts') lautet der Hamiltonian dann, vgl. Gl. (2.110)

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \varepsilon_L & T_c \\ T_c & \varepsilon_R \end{pmatrix}.$$
(2.339)

Wir können diesen Hamiltonian mit Hilfe von Pauli-Matrizen umschreiben,

$$\hat{H} = \frac{(\varepsilon_L + \varepsilon_R)}{2}\hat{1} + \frac{(\varepsilon_L - \varepsilon_R)}{2}\sigma_z + T_c\sigma_x.$$
(2.340)

Wir vereinfachen das weiterhin für den Fall  $\varepsilon_L = -\varepsilon_R \equiv \varepsilon/2$  zu

$$\hat{H} = \frac{\varepsilon}{2}\sigma_z + T_c\sigma_x$$
, Zweiniveau-System . (2.341)

Wir berechnen den Zeitentwicklungsoperator U(t) des Zweiniveau-Systems für den einfachsten Fall  $\varepsilon = 0$ ,

$$U(t) = \cos(tT_c)\hat{1} - i\sin(tT_c)\sigma_x.$$
(2.342)

Für einen Anfangszustand folgt dann

$$|\Psi(t=0)\rangle = \alpha_L |L\rangle + \alpha_R |R\rangle \rightsquigarrow |\Psi(t)\rangle = U(t)|\Psi(t=0)\rangle.$$
(2.343)

Für den Spezialfall  $\alpha_L = 1$ ,  $\alpha_R = 0$  erhält man damit die Wahrscheinlichkeiten, das System 'links' bzw. 'rechts' zu finden, als

$$w_L(t) \equiv |\langle L|\Psi(t)\rangle|^2 = \cos^2(tT_c)$$
  

$$w_R(t) \equiv |\langle R|\Psi(t)\rangle|^2 = \sin^2(tT_c).$$
(2.344)

**Satz 22.** Die oszillierenden Wahrscheinlichkeiten  $w_L(t)$ ,  $w_R(t)$  beim Zweiniveau-System werden als **quantenmechanische Oszillationen** bezeichnet. Ihre Frequenz hängt nur von der Energiedifferenz der zwei Eigenzustände des Hamiltonians  $\hat{H}$  ab.

AUFGABE 1a: Interpretiere die zwei Parameter  $\varepsilon$ ,  $T_c$  im Hamiltonian des Zweiniveau-Systems, Gl. (2.341). Schreibe hierzu die Pauli-Matrizen in Bra-Ket- Notation mit den Basis-Kets  $|L\rangle$  ('links') und  $|R\rangle$  ('rechts').

AUFGABE 1b: Betrachte den Spezialfall  $\varepsilon = 0$ . Berechne den Zeitentwicklungsoperator U(t) mittels *Diagonalisierung* des Hamiltonians und mittels der *Exponentialreihe*.

AUFGABE 1c: Berechne für  $\varepsilon = 0$  die Wahrscheinlichkeiten  $w_L(t)$ ,  $w_L(t)$  mit Anfangszuständen  $|\Psi(t=0)\rangle = |L\rangle$ ,  $|\Psi(t=0)\rangle = |R\rangle$ , und  $|\Psi(t=0)\rangle = |GZ\rangle$ , wobei  $|GZ\rangle$  der Grundzustand des Hamiltonians ist.

AUFGABE 1d: Zeige, daß die Frequenz der quantenmechanischen Oszillationen nur von der Energiedifferenz der zwei Eigenzustände des Hamiltonians  $\hat{H}$  abhängt ( $\varepsilon$ ,  $T_c$  beliebig).

#### 2.11.4 Schrödinger- und Heisenbergbild

Wir wissen bereits, wie Erwartungswerte in der QM berechnet werden. Wie ist die Zeitentwicklung von Erwartungswerten?

**Satz 23.** Sei  $|\Psi(t)\rangle = U(t)|\Psi(t=0)\rangle$  die Lösung der SG mit Anfangsbedingung  $|\Psi(t=0)\rangle$  und  $\hat{A}$  eine Observable. Dann drückt sich der Erwartungswert  $\langle A \rangle_t \equiv \langle \Psi(t) | \hat{A} | \Psi(t) \rangle$  von  $\hat{A}$  zur Zeit t äquivalent in zwei Darstellungen aus,

$$\langle A \rangle_t = \langle \Psi(t) | \hat{A} | \Psi(t) \rangle, \quad | \Psi(t) \rangle = U(t) | \Psi(t=0) \rangle, \quad \text{Schrödinger-Bild} \quad (2.345)$$
  
 
$$\langle A \rangle_t = \langle \Psi(0) | \hat{A}(t) | \Psi(0) \rangle, \quad \hat{A}(t) = U^{\dagger}(t) \hat{A} U(t), \quad \text{Heisenberg-Bild} \quad (2.346)$$

Beweis: Das Schrödinger-Bild ist nichts anderes als die Definition des Erwartungswerte mit dem *zeitentwickelten Zustand*  $|\Psi(t)\rangle = U(t)|\Psi(t = 0)\rangle$ . Das Heisenbergbild erhält man hieraus durch das Skalarprodukt

$$\langle A \rangle_t = \langle \Psi(t) | \hat{A} | \Psi(t) \rangle = (U(t) | \Psi(t=0) \rangle, AU(t) | \Psi(t=0) \rangle)$$

$$= (| \Psi(t=0) \rangle, U^{\dagger}(t) AU(t) | \Psi(t=0) \rangle) = (| \Psi(t=0) \rangle, \hat{A}(t)) | \Psi(t=0) \rangle)$$

$$(2.347)$$

durch 'Hinüberschieben' des Zeitentwicklers, der dann zu seinem adjungierten wird. QED.

Im Heisenberg-Bild zeitentwickeln sich die Observablen  $\hat{A}$ :

**Satz 24.** Sei  $\hat{H}$  ein Hamiltonoperator mit Zeitentwicklungsoperator U(t) Eine zeitentwickelte Observable  $\hat{A}$ 

$$\hat{A}(t) = U^{\dagger}(t)\hat{A}U(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{A}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}, \quad \hat{A}(0) = \hat{A}$$
(2.348)

heißt Heisenberg-Operator, sie erfüllt

$$i\hbar \frac{d}{dt}\hat{A}(t) = [\hat{A}(t), \hat{H}] = ([\hat{A}, \hat{H}])(t),$$
 Heisenberg-Bewegungsgleichung. (2.349)

Der Beweis erfolgt durch Differenzieren nach t. In der zweiten Gleichung wird dann ausgenutzt, daß man U(t) mit  $\hat{H}$  vertauschen darf (NACHPRÜFEN mit der Definition von U(t)),

$$[\hat{A}(t), \hat{H}] = U^{\dagger}(t)\hat{A}U(t)\hat{H} - \hat{H}U^{\dagger}(t)\hat{A}U(t) = U^{\dagger}(t)\hat{A}\hat{H}U(t) - U^{\dagger}(t)\hat{H}\hat{A}U(t)$$
  
=  $([\hat{A}, \hat{H}])(t).$  (2.350)

Daraus ergibt sich folgende Definition:

**Definition** Eine Erhaltungsgröße A ist eine Observable, die mit dem Hamiltonoperator H vertauscht,

$$[A, H] = 0. (2.351)$$

Aus den Heisenbergschen Bewegungsgleichungen folgt dann nämlich

$$A(t) = 0$$
, Konstante der Bewegung (2.352)

im Heisenberg-Bild ist A(t) = A dann also als Operator eine 'Konstante der Bewegung', die sich zeitlich nicht ändert.

AUFGABE a): Sei der Einteilchen-Hamiltonian  $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r)$  in d = 3 Dimensionen mit einem Zentralpotential V(r). Zeige, dass  $L^2$  und  $L_z$  Erhaltungsgrößen sind und miteinander vertauschen.

AUFGABE b): Sei der Einteilchen-Hamiltonian  $\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + V(x)$  in d = 1 Dimension. Stelle die Heisenbergschen Bewegungsgleichungen für Orts- und Impulsoperator und entsprechende Differentialgleichungen für deren Erwartungswerte (**Ehrenfest-Gleichungen**). Vergleiche diese Differentialgleichungen mit der klassischen Mechanik (Stichwort: Hamiltonsche Gleichungen).

## 2.12 \*Zusatzmaterial: Time-dependent Hamiltonians (I)

There are almost no exact analytical solutions when the Hamiltonian, H(t), is timedependent. A few exceptions do exist, however.

# 2.12.1 Spin $\frac{1}{2}$ in Magnetic Field

This case is, for example, extremely important for NMR (nuclear magnetic resonance). Even here the Hamiltonian  $\mathcal{H}(t)$  is in general not exactly soluble, its form is

$$\mathcal{H}(t) \equiv \mathbf{B}(t)\boldsymbol{\sigma} \equiv B_x(t)\hat{\sigma}_x + B_y(t)\hat{\sigma}_y + B_z(t)\hat{\sigma}_z$$
$$\equiv \begin{pmatrix} B_z(t) & B_{\parallel}^*(t) \\ B_{\parallel}(t) & -B_z(t) \end{pmatrix}, \quad B_{\parallel}(t) \equiv B_x(t) + iB_y(t), \quad (2.353)$$

where the Pauli-matrices are defined as

$$\hat{\sigma}_x \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y \equiv \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$
 (2.354)

Why is that so difficult? Let us write the Schrödinger equation

$$i\partial_t |\Psi(t)\rangle = \mathcal{H}(t)|\Psi(t)\rangle, \quad |\Psi(t)\rangle \equiv \begin{pmatrix} \psi_1(t)\\ \psi_2(t) \end{pmatrix}$$
  
$$\rightsquigarrow i\frac{d}{dt}\psi_1(t) = B_z(t)\psi_1(t) + B_{\parallel}^*(t)\psi_2(t)$$
  
$$i\frac{d}{dt}\psi_2(t) = B_{\parallel}(t)\psi_1(t) - B_z(t)\psi_2(t). \qquad (2.355)$$

We assume  $B_{\parallel} \neq 0$  and write (omit the *t*-dependence for a moment)

$$\begin{split} \psi_{1} &= \frac{i\dot{\psi}_{2} + B_{z}\psi_{2}}{B_{\parallel}} \\ i\ddot{\psi}_{2} &= \dot{B}_{\parallel}\psi_{1} + B_{\parallel}\dot{\psi}_{1} - \dot{B}_{z}\psi_{2} - B_{z}\dot{\psi}_{2} \\ &= \frac{\dot{B}_{\parallel}}{B_{\parallel}}[i\dot{\psi}_{2} + B_{z}\psi_{2}] - iB_{\parallel}[B_{z}\psi_{1} + B_{\parallel}^{*}\psi_{2}] - \dot{B}_{z}\psi_{2} - B_{z}\dot{\psi}_{2} \\ &= \frac{\dot{B}_{\parallel}}{B_{\parallel}}[i\dot{\psi}_{2} + B_{z}\psi_{2}] - iB_{z}[i\dot{\psi}_{2} + B_{z}\psi_{2}] - iB_{\parallel}B_{\parallel}^{*}\psi_{2} - \dot{B}_{z}\psi_{2} - B_{z}\dot{\psi}_{2} \\ &= i\frac{\dot{B}_{\parallel}}{B_{\parallel}}\dot{\psi}_{2} + \left[\frac{\dot{B}_{\parallel}}{B_{\parallel}}B_{z} - iB_{z}^{2} - i|B_{\parallel}|^{2} - \dot{B}_{z}\right]\psi_{2}. \end{split}$$
(2.356)

This is a second order ODE with time-dependent coefficients, which in general is not solvable in terms of known functions (it can of course be solved numerically quite easily).

# 2.12.1.1 Constant ${f B}$

In this case we must of course recover our usual two-level system:

$$i\ddot{\psi}_2 = -i[B_z^2 + |B_{\parallel}|^2]\psi_2 = -i|\mathbf{B}|^2\psi_2$$
 (2.358)

$$\rightsquigarrow \ddot{\psi}_2 + |\mathbf{B}|^2 \psi_2 = 0 \tag{2.359}$$

$$\rightsquigarrow \psi_2(t) = \psi_2(0) \cos |\mathbf{B}| t + \frac{\psi_2(0)}{|\mathbf{B}|} \sin |\mathbf{B}| t$$
 (2.360)

For constant  $\mathbf{B}$ , the eigenvalues of the Hamiltonian

$$\mathcal{H} \equiv \begin{pmatrix} B_z & B_{\parallel}^* \\ B_{\parallel} & -B_z \end{pmatrix}$$
(2.361)

are given by  $(B_z - \varepsilon)(-B_z - \varepsilon) - |B_{\parallel}|^2 = 0$  or  $\varepsilon_{\pm} = \pm \sqrt{B_z^2 + |B_{\parallel}|^2} = \pm |\mathbf{B}|$ . Therefore, Eq. (2.358) describes quantum mechanical oscillations with angular frequency of half the level splitting  $2|\mathbf{B}|$  between ground and excited state, in agreement with our specific example  $B_z = 0, B_{\parallel} = T_c$  from the previous section.

## 2.12.1.2 Rotating Field

This is defined as for constant field in z direction and an oscillating field in the x-y plane,

$$B_z(t) = B_0 = \text{const}, \quad B_{\parallel}(t) = B_1 e^{i\omega t}.$$
 (2.362)

Our equation for  $\psi_2$  thus becomes

This can be solved using the exponential ansatz method  $\psi_2(t) = ce^{-izt}$  which yields a quadratic equation for z,

$$z^{2} - \omega z + [\omega B_{0} - B_{0}^{2} - |B_{1}|^{2}] = 0$$

$$z_{\pm} = \frac{\omega}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\omega^{2} + 4B_{0}^{2} - 4\omega B_{0} + 4|B_{1}|^{2}} = \frac{\omega}{2} \pm \frac{1}{2} \Omega_{R}$$

$$\Omega_{R} \equiv \sqrt{(\omega - 2B_{0})^{2} + 4|B_{1}|^{2}}$$
Rabi-frequency. (2.364)

Note that the term  $2B_0$  in the Rabi-frequency is determined by the *level-splitting*  $\Delta \equiv 2B_0$  in absence of the time-dependent field  $B_{\parallel}(t)$ . The solution for  $\psi_2(t)$  (from which  $\psi_1(t)$  follows immediately) therefore is

$$\psi_{2}(t) = c_{1}e^{i\left(\frac{\omega}{2} + \frac{\Omega_{R}}{2}\right)t} + c_{2}e^{i\left(\frac{\omega}{2} - \frac{\Omega_{R}}{2}\right)t} = e^{i\frac{\omega}{2}t} \left[c_{1}'\cos\frac{\Omega_{R}}{2}t + c_{2}'\sin\frac{\Omega_{R}}{2}t\right].$$
(2.365)

We can choose, e.g., the initial condition  $\psi_2(0) = 1$  from which follows

$$\psi_{2}(t) = e^{i\frac{\omega}{2}t} \left[ \cos\frac{\Omega_{R}}{2}t + c_{2}'\sin\frac{\Omega_{R}}{2}t \right]$$

$$0 = \psi_{1}(0) = \frac{i\dot{\psi}_{2} + B_{z}\psi_{2}}{B_{\parallel}} \Big\|_{t=0} = \frac{-\frac{\omega}{2} + i\frac{\Omega_{R}}{2}c_{2}' + B_{0}}{B_{1}}$$

$$\rightsquigarrow c_{2}' = -i\frac{\omega - 2B_{0}}{\Omega_{R}}$$
(2.366)

This leads to

$$\begin{aligned} |\psi_{2}(t)|^{2} &= \cos^{2}\frac{\Omega_{R}}{2}t + \frac{(\omega - 2B_{0})^{2}}{\Omega_{R}^{2}}\sin^{2}\frac{\Omega_{R}}{2}t \\ &= \frac{(\omega - 2B_{0})^{2}}{\Omega_{R}^{2}} + \frac{4|B_{1}|^{2}}{\Omega_{R}^{2}}\cos^{2}\frac{\Omega_{R}}{2}t \quad \text{Rabi-Oscillations.} \end{aligned}$$
(2.367)

Note that the **quantum-mechanical oscillations** at constant **B** occur for a timeindependent Hamiltonian. The **Rabi-oscillations** occur in a time-dependent Hamiltonian containing a time-dependent term ('time-dependent field'). These two often get mixed up in the literature.

## 2.12.2 Landau-Zener-Rosen problem

This is another exactly solvable case for a two-level system. To be discussed later in the context of adiabatic and non-adiabatic transitions between energy levels.

# 2.13 Symmetrien in der Quantenmechanik

Symmetrien spielen in der Quantenmechanik eine vielleicht noch größere Rolle als in der klassischen Mechanik, wo wir sie bereits über das **Noether-Theorem** kennen gelernt hatten.

## 2.13.1 Translation

Sei  $|\Psi\rangle$  ein Zustand mit Wellenfunktion  $\Psi(\mathbf{r})$ . Wir verschieben die Wellenfunktion  $\Psi(\mathbf{r})$ räumlich um den Vektor  $\mathbf{a}$  (*aktive Transformation*) und erhalten den neuen Zustand  $|\Psi'\rangle$ mit Wellenfunktion  $\Psi'(\mathbf{r}) = \Psi(\mathbf{r} - \mathbf{a})$ . Wenn wir mehrere Zustände verschieben, sollen solche Translationen die Norm und das Skalarprodukt nicht ändern,

$$T: \Psi(\mathbf{r}) \to \Psi'(\mathbf{r}) = \Psi(\mathbf{r} - \mathbf{a})$$
  

$$\Phi(\mathbf{r}) \to \Phi'(\mathbf{r}) = \Phi(\mathbf{r} - \mathbf{a}), \quad \langle \Phi | \Psi \rangle = \langle \Phi' | \Psi' \rangle. \quad (2.368)$$

Nach einem Satz von E. Wigner funktioniert das genau dann, wenn die Zustände alle transformiert werden wie

$$|\Psi'\rangle = U|\Psi\rangle, \quad |\Phi'\rangle = U|\Phi\rangle$$
 (2.369)

mit demselben unitären oder anti-unitären Hilbertraum-Operator U. Für kontinuierliche Transformationen wie die obige Translation ist U unitär (Spiegelungen führen z.B. zu antiunitärem U). Damit haben wir für die obige Translation

$$U_{\mathbf{a}}\Phi(\mathbf{r}) = \Phi(\mathbf{r} - \mathbf{a}). \tag{2.370}$$

Wir bestimmen  $U_{\mathbf{a}}$  durch Entwickeln für infinitesimal kleines  $\mathbf{a}$ ,

$$\Phi(\mathbf{r} - \mathbf{a}) = \Phi(\mathbf{r}) - \mathbf{a}\nabla\Phi(\mathbf{r}) + \dots \rightsquigarrow U_{\mathbf{a}} = 1 - \mathbf{a}\nabla + \dots$$
$$U_{\mathbf{a}} = 1 - \frac{i\mathbf{a}\mathbf{p}}{\hbar} + \dots \qquad (2.371)$$

mit dem Impulsoperator  $\mathbf{p} = (\hbar/i)\nabla$  als Generator räumlicher Translationen. Für endliches **a** folgt dann durch Exponentieren mittels  $\lim_{N\to\infty} (1 + x/N)^N = e^x$  zu

$$U_{\mathbf{a}} = \exp\left(-\frac{i\mathbf{a}\mathbf{p}}{\hbar}\right). \tag{2.372}$$

Anwenden von  $U_{\mathbf{a}}$  auf eine Funktion  $\Phi(\mathbf{r})$  liefert mit der Definition der Taylor-Entwicklung genau die verschobene Funktion  $U_{\mathbf{a}}\Phi(\mathbf{r}) = \Phi(\mathbf{r} - \mathbf{a})!$  Die  $U_{\mathbf{a}}$  bilden wieder eine Lie-Gruppe, der kontinuierliche Parameter ist hier die Verschiebung  $\mathbf{a}$ . Man sagt, die Symmetrie 'räumliche Translation' um den Vektor  $\mathbf{a}$  wird im Hilbertraum *dargestellt*, und zwar durch die Lie-Gruppe der unitären Translations-Operatoren  $U_{\mathbf{a}}$ . Die Generatoren der räumlichen Translationen erfüllen die (trivialen) Vertauschungsrelationen

$$[p_i, p_j] = 0, \quad i = 1, 2, 3. \tag{2.373}$$

AUFGABE: Betrachte den unverschobenen Oszillator, H, und den verschobenen harmonischen Oszillator  $H_{\lambda}$  in 1d, Eq.(2.180).

1. Zeige durch räumliche Translation, dass verschobene und unverschobene Eigenzustände zusammenhängen gemäss

$$|n\rangle_{\lambda} = X_{\lambda}|n\rangle, \quad X_{\lambda} \equiv e^{\lambda(a-a^{\dagger})}$$

$$(2.374)$$

mit dem unitären Verschiebeoperator (displacement operator)  $X_{\lambda}$ .

2. Transformiere mit Hilfe von  $X_{\lambda}$  die Eigenwertgleichung des unverschobenen Oszillators,  $H|n\rangle = E_n|n\rangle$ , in die des verschobenen Oszillators,  $H_{\lambda}|n\rangle_{\lambda} = E_n|n\rangle_{\lambda}$  um.

3. Beweise  $a + \lambda = X_{\lambda} a X_{\lambda}^{\dagger}$ . Hierbei ist die nested commutator expansion

$$e^{S}Oe^{-S} = O + [S, O] + \frac{1}{2!}[S, [S, O]] + \frac{1}{3!}[S, [S, [S, O]]] + \dots$$
 (2.375)

nützlich, die durch Herleitung einer DGL erster Ordnung für  $f(x) \equiv e^{xS} \hat{O} e^{-xS}$  und Taylor-Entwicklung in x bewiesen wird.

## 2.13.2 Rotationen

Jetzt machen wir das gleiche für Rotationen: Wir rotieren eine Wellenfunktion  $\Psi(\mathbf{r})$ räumlich um die Achse **n** und den Winkel  $\theta$  (*aktive Transformation*) und erhalten den neuen Zustand  $|\Psi'\rangle$  mit Wellenfunktion  $\Psi'(\mathbf{r}) = \Psi(R^{-1}\mathbf{r})$ , wobei  $R^{-1}$  die Rückrotation darstellt. Wiederum fordern wir

$$U_{\mathbf{R}}\Psi(\mathbf{r}) = \Psi(R^{-1}\mathbf{r}), \quad U_{\mathbf{R}} \quad \text{unitär.}$$
 (2.376)

Eine infinitesimale Rotation R z.B. um die z-Achse (gegen den Uhrzeigersinn, positiver infinitesimaler Winkel  $\theta$ ) lautet

$$x \to x - \theta y, \quad y \to y + \theta x, \quad z \to z,$$
 (2.377)

und damit

$$\Psi(R^{-1}\mathbf{r}) = \Psi(x+\theta y, y-\theta x, z) = \Psi(\mathbf{r}) + \theta \left(y\partial_x - x\partial_y\right)\Psi(\mathbf{r}) + \dots$$

$$U_{\mathbf{R}} = 1 - \frac{i\theta L_z}{\hbar} + \dots$$
(2.378)

mit der z-Komponente  $L_z$  des Bahn-Drehimpulsoperators L! Für Drehungen um beliebige Achsen **n** und Winkel  $\theta$  hat man

$$U_{\mathbf{R}} = \exp\left(-\frac{i\theta\mathbf{n}\mathbf{L}}{\hbar}\right),\tag{2.379}$$

d.h. der Bahn-Drehimpulsoperator ist der **Erzeuger räumlicher Rotationen**. Wiederum gilt: Anwenden von  $U_{\mathbf{R}}$  auf eine Funktion  $\Phi(\mathbf{r})$  liefert mit der Definition der Taylor-Entwicklung genau die zurück-rotierte Funktion, Gl. (2.376). Die  $U_{\mathbf{R}}$  bilden wieder eine Lie-Gruppe, der kontinuierliche Parameter ist hier (bei fester Drehachse) der Winkel  $\theta$ . Man sagt, die Symmetrie 'räumliche Drehung' um den Winkel  $\theta$  wird im Hilbertraum *dargestellt*, und zwar durch die Lie-Gruppe der unitären Rotations-Operatoren  $U_{\mathbf{R}}$ .

Bei Drehungen um beliebige Achsen  $\mathbf{n}$  erfüllen die Generatoren der räumlichen Drehungen die Vertauschungsrelationen

$$[L_j, L_k] = i\varepsilon_{jkl}L_l, \tag{2.380}$$

siehe Gl. (2.277).

## 2.13.3 'Drehung der Stern-Gerlach-Apparatur' (II)

Die zwei Spinoren

$$|\uparrow, \mathbf{e}_z\rangle, \quad |\downarrow, \mathbf{e}_z\rangle \tag{2.381}$$

mit  $m = \pm 1/2$  sind Eigenzustände von  $S_z$  und damit Eigenzustände des Zeeman-Terms  $H_{\sigma B} \equiv -g_e \frac{e}{2mc} \hbar \sigma \mathbf{B}$  in der Pauli-Gleichung für Magnetfeld  $\mathbf{B} = (0, 0, B)$  in z-Richtung. Jetzt drehen wir das Magnetfeld in eine beliebige Richtung **n**. Dann brauchen wir die Eigenzustände von

$$\mathbf{n}\boldsymbol{\sigma}, \quad \mathbf{n} = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta),$$
 (2.382)

die wir bereits berechnet hatten:

$$|\uparrow,\mathbf{n}\rangle = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2}\\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2} \end{pmatrix}, \quad |\downarrow,\mathbf{n}\rangle = \begin{pmatrix} -\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2}\\ \cos\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2} \end{pmatrix}.$$
 (2.383)

Die Eigenwertgleichung

$$S_3|m,\mathbf{e}_z\rangle = m|m,\mathbf{e}_z\rangle \tag{2.384}$$

gilt auch in einem System mit Magnetfeld in **n**-Richtung, in das wir uns von der z-Achse durch Drehung um die Achse

$$\mathbf{n}' = (-\sin\phi, \cos\phi, 0) \tag{2.385}$$

und den Winkel  $\theta$  drehen (Bild!). Dazu multiplizieren wir die Eigenwertgleichung mit (zu bestimmenden) unitären Operatoren (2 mal 2 Matrizen)  $U_{\mathbf{n}'}(\theta)$ ,

$$U_{\mathbf{n}'}(\theta)S_3U_{\mathbf{n}'}^{\dagger}(\theta)U_{\mathbf{n}'}(\theta)|m, \mathbf{e}_z\rangle = mU_{\mathbf{n}'}(\theta)|m, \mathbf{e}_z\rangle$$
  
$$\leftrightarrow \frac{1}{2}\mathbf{n}\boldsymbol{\sigma}|m, \mathbf{n}\rangle = m|m, \mathbf{n}\rangle, \quad m = \pm \frac{1}{2}$$
(2.386)

$$U_{\mathbf{n}'}(\theta)S_3U_{\mathbf{n}'}^{\dagger}(\theta) \equiv \frac{1}{2}\mathbf{n}\boldsymbol{\sigma}, \quad U_{\mathbf{n}'}(\theta)|m, \mathbf{e}_z\rangle \equiv |m, \mathbf{n}\rangle.$$
(2.387)

Direkter Vergleich liefert (AUFGABE, eindeutig bis auf eine Phase)

$$U_{\mathbf{n}'}(\theta) = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) - i\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\mathbf{n}'\boldsymbol{\sigma} = \exp\left(-i\frac{\theta}{2}\mathbf{n}'\boldsymbol{\sigma}\right).$$
 (2.388)

Hier ist  $U_{\mathbf{n}'}(\theta)$  nur für spezielle Rotationen konstruiert, es gilt aber allgemein

$$U_{\mathbf{n}}(\theta) = \exp\left(-i\frac{\theta}{2}\mathbf{n}\boldsymbol{\sigma}\right). \tag{2.389}$$

AUFGABE: a) Zeige  $U_{\mathbf{n}}(2\pi) = -1$ : man sagt, die Darstellung von Rotationen mit den Spin-Matrizen ist *doppelwertig* b) Berechne die Mittelwerte von  $S_x$ ,  $S_y$ , und  $S_z$  in den Zuständen  $|m, \mathbf{n}\rangle, m = \uparrow, \downarrow$ .

### 2.13.4 Symmetrien und Erhaltungsgrößen

Wir haben gesehen, daß bestimmte Transformationen von Hilbertraum-Zuständen die Skalarprodukte invariant lassen. Solche Transformationen nennt man **Symmetrien**. Am Beispiel der Translationen und der Rotationen hatten wir Symmetrien durch unitäre Hilbertraum-Operatoren dargestellt. Allgemein werden kontinuierliche Symmetrien S in der QM durch unitäre Operatoren U(S) dargestellt. Wenn die Symmetrien eine Gruppe bilden (Symmetriegruppe), wie es z.B. bei den Translationen und den Rotationen der Fall ist, so bilden auch die unitären Operatoren U(S) eine Gruppe (Lie-Gruppe). Deren Generatoren sind selbst-adjungierte Operatoren  $\hat{G}$  (also Observablen), die wir durch Taylor-Entwicklung erhalten:

$$U(S) = \hat{1} - i\varepsilon\hat{G} + \dots, \tag{2.390}$$

wobei die explizite Form von  $\varepsilon$  und  $\hat{G}$  von der betrachteten Symmetrie abhängt.

Was passiert mit Symmetrien U(S) unter der Zeitentwicklung in der Schrödinger-Gleichung? Sei der Hamiltonian  $\hat{H}$  gegeben. Dann schreiben wir

$$i\hbar\partial_t |\Psi(t)\rangle = \hat{H}|\Psi(t)\rangle \rightsquigarrow i\hbar\partial_t U(S)|\Psi(t)\rangle = U(S)\hat{H}U^{\dagger}(S)U(S)|\Psi(t)\rangle,$$
 (2.391)

wie wir es bereits früher z.B. bei der 'Drehung der Stern-Gerlach-Apparatur' gemacht haben. Der Symmetrie-transformierte Zustand genügt einer SG mit dem transformierten Hamiltonian

$$\hat{H}' \equiv U(S)\hat{H}U^{\dagger}(S). \tag{2.392}$$

Falls nun  $U(S)\hat{H} = \hat{H}U(S)$ , gilt  $\hat{H}' = \hat{H}$ , und der Symmetrie-transformierte Zustand  $U(S)|\Psi(t)\rangle$  genügt der SG mit *demselben* Hamiltonian  $\hat{H}' = \hat{H}$ : die Zeitentwicklung ist in diesem Fall für beide Zustände dieselbe! Beide Zustände,  $|\Psi(t)\rangle$  und  $U(S)|\Psi(t)\rangle$ , sind also physikalisch völlig äquivalent:

**Definition** Ein Physikalisches System mit Hamiltonian  $\hat{H}$  besitzt eine Symmetrie S, falls

$$[U(S), \hat{H}] = 0. (2.393)$$

Da man U(S) infinitesimal aus seinem Generator  $\hat{G}$  erzeugen kann, gilt

$$\begin{bmatrix} U(S), \hat{H} \end{bmatrix} = 0 \rightsquigarrow \left( \hat{1} - i\varepsilon \hat{G} + \dots \right) \hat{H} - \hat{H} \left( \hat{1} - i\varepsilon \hat{G} + \dots \right) = 0$$
  
$$\rightsquigarrow \quad [\hat{G}, \hat{H}] = 0. \tag{2.394}$$

Wegen der Heisenberg-Bewegungsgleichung bedeutet diese Gleichung aber auch gleichzeitig, daß  $\hat{G}$  eine Erhaltungsgröße, d.h. eine Konstante der Bewegung ist. Damit haben wir eine Aussage, die dem Noether-Theorem der klassischen Mechanik entspricht:

**Satz 25.** Ein quantenmechanisches Systems mit Hamiltonian  $\hat{H}$  habe eine physikalische Symmetrie S, die durch eine Observable  $\hat{G}$  erzeugt werde. Dann ist  $\hat{G}$  eine Erhaltungsgröße.

Translations-Symmetrie hat man z.B. bei einem freien Teilchen (kein Potential): Der Hamiltonian ist translations-invariant, er vertauscht mit den Erzeugern der Translationen, d.h. den drei Komponenten des Impulsoperators, die Erhaltungsgrößen sind.

Bei räumlichen Rotationen erzeugt beispielsweise die Drehimpuls-Komponente  $\hat{L}_z$ räumliche Drehungen um die z-Achse. Für das Wasserstoff-Problem ('QM Kepler') gilt  $[\hat{H}, \hat{L}_z] = 0$ : der Hamiltonian ist wegen des Zentralpotentials *Rotations-invariant*. Eine Drehung um die z-Achse ist eine physikalische Symmetrie mit Erhaltungsgröße  $\hat{L}_z$ .

# 3. WEITERER AUFBAU DER QUANTENMECHANIK

# 3.1 Messungen (I)

## 3.1.1 Zusammenstellung der Axiome der QM

Wir fassen die wesentlichen Ergebnisse zusammen (Kopenhagener Deutung):

- 1. Ein quantenmechanisches System wird durch einen Zustands-Vektor  $|\Psi\rangle$  in einem separablen Hilbertraum  $\mathcal{H}$  beschrieben.
- 2. Die Zeitentwicklung eines Zustands  $|\Psi(t)\rangle$  wird durch einen Hamiltonoperator  $\hat{H}$  generiert

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle, \quad \text{Schrödinger-Gleichung.}$$
(3.1)

3. Ein Teilchen der Masse m, das sich in einem Potential  $V(\mathbf{x})$  bewegt, hat eine Wellenfunktion im Ortsraum  $\Psi(\mathbf{x}, t) \equiv \langle \mathbf{x} | \Psi(t) \rangle$ . Sie erfüllt die Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{x},t) = \left[-\frac{\hbar^2\Delta}{2m} + V(\mathbf{x})\right]\Psi(\mathbf{x},t).$$
(3.2)

Hierbei ist  $|\Psi(\mathbf{x},t)|^2 d^3 x$  die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen zur Zeit t im Volumenelement  $d^3 x$  um den Punkt  $\mathbf{x}$  zu detektieren. Die Wahrscheinlichkeit  $P(\Omega)$ , das Teilchen in einem endlichen Volumen  $\Omega$  zu finden, ist durch das räumliche Integral gegeben:

$$P(\Omega) = \int_{\Omega} d^3 x |\Psi(\mathbf{x}, t)|^2.$$
(3.3)

Es gilt die Normierungsbedingung

$$\int_{R^3} d^3 x |\Psi(\mathbf{x}, t)|^2 = 1.$$
(3.4)

4. Der Ort **x** entspricht in der Quantenmechanik dem **Operator** 'Multiplikation mit **x**', und der Impuls **p** entspricht dem Differential-Operator  $-i\hbar\nabla$ ,

$$\mathbf{x} \to \hat{\mathbf{x}}, \quad \mathbf{p} \to \frac{\hbar}{i} \nabla.$$
 (3.5)

Man bezeichnet diese Vorschrift auch als Korrespondenzprinzip.

5. Physikalische Messgrößen (Observablen) werden durch selbstadjungierte Hilbertraum-Operatoren  $\hat{A}$  beschrieben. Der Erwartungswert  $\langle \hat{A} \rangle_{|\psi\rangle}$  der entsprechenden Messgröße  $\hat{A}$  für ein System im normierten Zustand  $|\psi\rangle$  ist durch das Skalarprodukt

$$\langle \hat{A} \rangle_{|\psi\rangle} = \langle \psi | \hat{A} \psi \rangle \tag{3.6}$$

gegeben. Weiterhin habe die Observable  $\hat{A}$  Eigenvektoren  $|\lambda\rangle$ , die im Hilbertraum  $\mathcal{H}$  ein vollständiges Orthonormalsystem bilden. Die möglichen Messwerte von  $\hat{A}$  sind dann ihre Eigenwerte  $\lambda$ . Sie werden mit der Wahrscheinlichkeit  $p_{\lambda} \equiv |\langle \lambda | \psi \rangle|^2$  gemessen. Tritt *Entartung* auf, d.h. gibt es mehrere  $|\lambda_i\rangle$  zu einem  $\lambda$ , so ist diese Wahrscheinlichkeit durch  $p_{\lambda} = \sum_i |\langle \lambda_i | \psi \rangle|^2$  zu ersetzen.

6. Unmittelbar nach der Messung einer Observablen  $\hat{A}$  befindet sich das System in einem Eigenzustand  $|\lambda\rangle$  zum gemessenen Eigenwert  $\lambda$  (Reduktion des Wellenpakets) durch *Projektion* auf den Unterraum zum Eigenwert  $\lambda$ .

Beispiel zum letzten Axiom: Wasserstoff-Problem (ohne Spin) - gemessen werden die Energie $\hat{H}$ im normierten Zustand

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \left( |n=0, l=0, m=0\rangle + |n=1, l=1, m=0\rangle + |n=1, l=1, m=1\rangle \right).$$
(3.7)

Falls das Messergebnis  $E_{n=1}$  lautet, kollabiert  $|\Psi\rangle$  durch die Messung auf

$$|\Psi'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |n=1, l=1, m=0\rangle + |n=1, l=1, m=1\rangle \right).$$
(3.8)

Insbesondere die beiden letzten Axiome der **'Kopenhagener Deutung'** der QM sind 'schwer verdaulich' - im Folgenden werden wir untersuchen, ob und wie man hier in den letzten 80 Jahren etwas weitergekommen ist.

## 3.1.2 Projektionsoperatoren. Spektralsatz

Zunächst definieren wir den Begriff 'Projektion' genauer.

**Definition** Ein Projektionsoperator (Projektor) P ist ein Operator mit

$$P^2 = P. (3.9)$$

Projektionsoperatoren sind nützlich für die *Spektraldarstellung* von Observablen  $\hat{A}$ . Zunächst gilt in endlichdimensionalen Hilberträumen  $\mathcal{H}$  (NIELSSEN, CHUANG)

**Satz 26.** Normale Operatoren  $\hat{A}$ , d.h. solche mit  $\hat{A}^{\dagger}\hat{A} = \hat{A}\hat{A}^{\dagger}$ , können mit Hilfe von Projektionsoperatoren dargestellt werden als

$$\hat{A} = \sum_{n} \lambda_n \hat{P}_n, \tag{3.10}$$
wobei  $\lambda_n$  die Eigenwerte von  $\hat{A}$  sind und  $\hat{P}_n$  den Projektor auf den Unterraum zum Eigenwert  $\lambda_n$  bezeichnet. Es gilt

$$\hat{P}_n \hat{P}_m = \delta_{nm} \hat{P}_n$$
, Orthogonalität (3.11)

$$\sum_{n} \hat{P}_{n} = \hat{1}, \quad \text{Zerlegung der Eins} . \tag{3.12}$$

Insbesondere gilt die Spektraldarstellung also für Observablen (selbstadjungierte Operatoren) sowie für unitäre Operatoren. In unendlichdimensionalen Hilberträumen gilt ein ähnlicher Spektralsatz.

Die Projektoren haben eine einfache Darstellung in der Dirac-Notation: ist der Unterraum von  $\lambda_n$  eindimensional, d.h. ist  $\lambda_n$  nicht entartet, so gilt

$$\hat{P}_n = |n\rangle\langle n|. \tag{3.13}$$

Ist der Unterraum von  $\lambda_n$  hingegen d-dimensional, d.h. ist  $\lambda_n$  d-fach entartet, so gilt

$$\hat{P}_n = \sum_{i=1}^d |n, i\rangle \langle n, i|, \qquad (3.14)$$

wobei die Kets  $|n, i\rangle$  eine Orthonormalbasis des Unterraums zu  $\lambda_n$  sind. Im BEISPIEL des Wasserstoffproblems (ohne Spin) sind die  $|nlm\rangle$  ein VOS des Gesamt-Hilbertraums. Für die Quantenzahlen l und m gilt l = 0, ..., n - 1 sowie  $-l \leq m \leq l$ . Der Projektor auf den Unterraum zur Energie  $E_n$  lautet deshalb

$$\hat{P}_n = \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^{l} |nlm\rangle \langle nlm|.$$
(3.15)

Wir re-formulieren nun das Axiom zur Messung in der QM mit Hilfe von Projektoren:

• Bei einer Messung der Observablen  $\hat{A} = \sum_n \lambda_n \hat{P}_n$  im Zustand  $|\Psi\rangle$  erhält man den Eigenwert  $\lambda_n$  mit Wahrscheinlichkeit  $w_n \equiv \langle \Psi | \hat{P}_n | \Psi \rangle$ . Der Zustand reduziert sich dabei auf den Zustand

$$\frac{\hat{P}_n|\Psi\rangle}{w_n^{1/2}}, \quad w_n \equiv \langle \Psi|\hat{P}_n|\Psi\rangle.$$
 (3.16)

Ist der Unterraum von  $\lambda_n$  *d*-dimensional, so gilt explizit mit Gl. (3.14),

$$w_n = \langle \Psi | \sum_{i=1}^d |n, i \rangle \langle n, i | \Psi \rangle = \sum_{i=1}^d | \langle n, i | \Psi \rangle |^2.$$
(3.17)

Man erkennt hieran auch noch einmal, welche zentrale Rolle das *Skalarprodukt* im Formalismus der QM spielt.

# 3.1.3 Verträglichkeit von Messungen

Wie können wir eine möglichst vollständige Information über den zu messenden Zustand  $|\Psi\rangle$  erhalten? Sei z.B.  $|\Psi\rangle = \sum_{nlm\sigma} c_{nlm\sigma} |nml\sigma\rangle$  ein Zustand des Elektrons im Wasserstoff-Problem. Wir führen hintereinander folgende Messungen aus:

- Messung der Energie  $\hat{H} \rightsquigarrow$  Projektion auf Unterraum zur Quantenzahln.
- Messung des Drehimpulsquadrats  $\hat{L}^2 \rightsquigarrow$  Projektion auf Unterraum zur Quantenzahl l.
- Messung der Komponente  $\hat{L}_z \rightsquigarrow$  Projektion auf Unterraum zur Quantenzahl m.
- Messung der Spinkomponente  $\hat{\sigma}_z \rightsquigarrow$  Projektion auf Unterraum zur Quantenzahl  $\sigma$ .

Die vier Observablen kommutieren miteinander,

$$[\hat{H}, \hat{L}^2] = [\hat{H}, \hat{L}_z] = [\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0, \quad [., \hat{\sigma}_z] = 0, \tag{3.18}$$

(wobei der Spin mit allen anderen vertauscht), und haben deshalb ein gemeinsames System von Eigenfunktionen  $|nml\sigma\rangle$ . Bei der Messung kommen nacheinander die folgenden Projektoren zum Einsatz:

$$\hat{P}_{1} = \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^{l} \sum_{\sigma} |nlm\sigma\rangle \langle nlm\sigma|, \quad \text{Wert } n \text{ gemessen}$$
(3.19)

$$\hat{P}_2 = \sum_{m=-l}^{\infty} \sum_{\sigma} |nlm\sigma\rangle \langle nlm\sigma|, \quad \text{Wert } l \text{ gemessen}$$
 (3.20)

$$\hat{P}_3 = \sum_{\sigma} |nlm\sigma\rangle \langle nlm\sigma|, \quad \text{Wert } m \text{ gemessen}$$
 (3.21)

$$\hat{P}_4 = |nlm\sigma\rangle\langle nlm\sigma|, \quad \text{Wert } \sigma \text{ gemessen}$$
 (3.22)

Bei Umdrehen der obigen Reihenfolge der Messungen lauten die Projektoren hingegen

$$\hat{P}_1 = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^{l} |nlm\sigma\rangle \langle nlm\sigma|, \quad \text{Wert } \sigma \text{ gemessen}$$
(3.23)

$$\hat{P}_2 = \sum_{\substack{n=0\\\infty}}^{\infty} \sum_{l=0}^{n-1} |nlm\sigma\rangle \langle nlm\sigma|, \quad \text{Wert } m \text{ gemessen}$$
(3.24)

$$\hat{P}_3 = \sum_{n=0}^{\infty} |nlm\sigma\rangle \langle nlm\sigma|, \quad \text{Wert } l \text{ gemessen}$$
 (3.25)

$$\hat{P}_4 = |nlm\sigma\rangle\langle nlm\sigma|, \quad \text{Wert } n \text{ gemessen }.$$
 (3.26)

Entsprechend für andere Reihenfolgen, bei denen man immer mit einer Projektion auf den Zustand  $|nlm\sigma\rangle$  zu den vier gemessenen Quantenzahlen  $n, l, m, \sigma$  endet. Man spricht

deshalb von **simultaner Messbarkeit** von Quantenzahlen. Wir fassen das in einer Definition zusammen:

**Definition** Eine Menge von paarweise vertauschbaren Observablen, für welche die Eigenräume bei einer simultanen Messung eindimensional sind, heißt ein *vollständiger Satz verträglicher Observablen*.

### 3.1.4 Beispiel: Projektoren bei Qubits

Wir führen folgende Sprechweise ein:

**Definition** Ein **Qubit** ist ein quantenmechanisches System mit Hilbertraum  $\mathbb{C}^2$ .

Konkret können wir uns immer ein Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen ('Spin- $\frac{1}{2}$ ') vorstellen. Wir erinnern uns an die Eigenwertgleichungen Gl. (2.383),

$$(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{n})|\uparrow,\mathbf{n}\rangle = |\uparrow,\mathbf{n}\rangle$$
(3.27)

$$(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{n})|\downarrow,\mathbf{n}\rangle = -|\downarrow,\mathbf{n}\rangle. \tag{3.28}$$

Damit definieren wir folgende Projektions-Operatoren:

$$E(\mathbf{n},+) \equiv \frac{1}{2} \left( \hat{1} + \mathbf{n}\boldsymbol{\sigma} \right), \quad \text{Projection auf} \uparrow$$
 (3.29)

$$E(\mathbf{n}, -) \equiv \frac{1}{2} \left( \hat{1} - \mathbf{n}\boldsymbol{\sigma} \right), \quad \text{Projection auf } \downarrow.$$
 (3.30)

Es gilt z.B.

$$E(\mathbf{n},+)(\alpha|\uparrow,\mathbf{n}\rangle+\beta|\downarrow,\mathbf{n}\rangle) = \frac{1}{2}(\alpha+\alpha)|\uparrow,\mathbf{n}\rangle+\frac{1}{2}(\beta-\beta)|\downarrow,\mathbf{n}\rangle$$
  
=  $\alpha|\uparrow,\mathbf{n}\rangle.$  (3.31)

Damit gilt: Die Wahrscheinlichkeit, im Qubit-Zustand  $|\Psi\rangle$  bei Messung in **n**-Richtung den Wert  $\uparrow$  bzw.  $\downarrow$  zu finden, ist durch

$$w_{\pm} = \langle \Psi | E(\mathbf{n}, \pm) | \Psi \rangle \tag{3.32}$$

gegeben. Diese Projektoren sind später bei der Diskussion der Bellschen Ungleichung zum Thema Verschränkung nützlich.

Man beachte, daß wir bis hierher immer noch 'um den heißen Brei' herum geredet und nicht erklärt haben, was eine Messung eigentlich ist bzw. wie sie modelliert werden sollte. Bevor wir hierzu Genaueres sagen können, müssen wir uns mit dem Begriff 'Information' auseinandersetzen.

### 3.2 Die Dichtematrix

Systemzustände haben wir bisher durch (normierte) Vektoren (Kets)  $|\Psi\rangle$  eines Hilbertraums beschrieben. Bei der Bildung von Erwartungswerten von Observablen A,

$$\langle A \rangle \equiv \langle \Psi | A | \Psi \rangle \tag{3.33}$$

kommt es auf einen Phasenfaktor  $e^{i\alpha}$  mit reellem  $\alpha$  nicht an. Systemzustände werden deshalb genauer gesagt durch Äquivalenzklassen von Strahlen

$$e^{i\alpha}|\Psi\rangle, \alpha \in \mathbb{R}$$
 (3.34)

beschrieben. Man kann diesen Phasenfaktor loswerden, indem man zu Projektionsoperatoren übergeht:

**Definition** In einem Hilbertraum  $\mathcal{H}$  ist ein **reiner Zustand** durch einen Projektionsoperator

$$P_{\Psi} \equiv |\Psi\rangle\langle\Psi|, \quad |\Psi\rangle \in \mathcal{H} \tag{3.35}$$

zum Vektor  $|\Psi\rangle$  definiert.

Hier kürzt sich jetzt ein Phasenfaktor  $e^{i\alpha}$  in  $|\Psi\rangle$  heraus. Erwartungswerte von Observablen A im reinen Zustand  $P_{\Psi}$  definieren wir jetzt über die Spur-Operation:

**Definition** Der Erwartungswert der Observablen A im reinen Zustand  $P_{\Psi}$  ist

$$\langle A \rangle_{\Psi} = \operatorname{Tr} \left( P_{\Psi} A \right) = \operatorname{Tr} \left( |\Psi\rangle \langle \Psi|A \right),$$
(3.36)

wobei  $\operatorname{Tr} X$  die Spur des Operators X, gebildet mit einem VOS (vollständigem Orthonormalsystem) ist,

$$\operatorname{Tr} X = \sum_{n} \langle n | X | n \rangle.$$
(3.37)

Die Spur eines Operators ist basisunabhängig: gegeben seien zwei VOS  $|n\rangle$  und  $|\alpha\rangle$ ,

$$\sum_{n} |n\rangle\langle n| = \sum_{\alpha} |\alpha\rangle\langle \alpha| = 1$$
(3.38)

$$\Rightarrow \operatorname{Tr}(X) = \sum_{n} \langle n|X|n \rangle = \sum_{n,\alpha} \langle n|\alpha \rangle \langle \alpha|X|n \rangle =$$
 (3.39)

$$= \sum_{n,\alpha} \langle \alpha | X | n \rangle \langle n | \alpha \rangle = \sum_{\alpha} \langle \alpha | X | 1 | \alpha \rangle = \sum_{\alpha} \langle \alpha | X | \alpha \rangle.$$
(3.40)

Die Spur ist invariant unter zyklischer Vertauschung (AUFGABE),

$$Tr(AB) = Tr(BA). \tag{3.41}$$

AUFGABE: Zeige, dass  $\langle A \rangle_{\Psi}$  mit der üblichen Definition übereinstimmt, d.h. zeige  $\langle A \rangle_{\Psi} = \langle \Psi | A | \Psi \rangle$ .

#### 3.2.1 Gemischte Zustände

Die QM enthält durch die Kopenhagener Deutung ein intrinsisches Element an Stochastizität: Voraussagen für Messungen sind Aussagen über Wahrscheinlichkeiten, selbst wenn der Zustand  $|\Psi\rangle$  des Systems zu einer bestimmten Zeit t exakt bekannt ist.

Es gibt nun Fälle, wo durch Mangel an Information (z.B. unsere eigene 'Dummheit' oder die Unfähigkeit, an bestimmte Informationen zu gelangen) selbst der Zustand des Systems zu einer bestimmten Zeit t nicht exakt bekannt ist. Das ist wie in der klassischen Mechanik, wo man statt eines Punktes im Phasenraum nur eine gewisse Verteilung im Phasenraum angeben kann. Die Bestimmung dieser Verteilung ist Aufgabe der Statistik (Ensembletheorie, Thermodynamik). Wir definieren:

**Definition** Über ein quantenmechanisches System im Hilbertraum  $\mathcal{H}$  mit VOS (vollständigem Orthonormalsystem)  $|n\rangle$  liege nur unzureichende Information vor: Mit Wahrscheinlichkeit  $p_n$  befinde es sich im Zustand  $|n\rangle$ . Die Menge  $(p_n, |n\rangle)$  heisst **Ensemble** von reinen Zuständen. Dann ist der Erwartungswert einer Observablen A gegeben durch

$$\langle A \rangle \equiv \sum_{n} p_n \langle n | A | n \rangle, \quad \sum_{n} p_n = 1, \quad 0 \le p_n \le 1.$$
 (3.42)

Hiermit hat man jetzt zwei konzeptionell verschiedenartige Arten von Wahrscheinlichkeiten vorliegen

- Die Wahrscheinlichkeit  $p_n$ , die aus dem Mangel an 'klassischer' Information über das System herrührt.
- Die intrinsisch quantenmechanische Wahrscheinlichkeit, die sich in der Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Quantenmechanik ausdrückt. Der Zuständen  $|n\rangle$  kann z.B. im Ortsraum eine Wellenfunktion  $\Psi_n(x)$  besitzen, die eine Wahrscheinlichkeitsdichte  $|\Psi_n(x)|^2$  für das Auffinden eines Teilchens am Ort x definiert.

Beide Arten von Wahrscheinlichkeit können bei der Berechnung von Erwartungswerten nun mit Hilfe des Dichteoperators zusammengefaßt werden:

**Definition** Der **Dichteoperator** (Dichtematrix)  $\rho$  eines Ensembles  $(p_n, |n\rangle)$  ist

$$\rho \equiv \sum_{n} p_n |n\rangle \langle n|, \qquad (3.43)$$

d.h. eine Summe von Projektionsoperatoren auf die reinen Zustände  $|n\rangle$ . Es gilt

$$\langle A \rangle \equiv \sum_{m} p_m \langle m | A | m \rangle = \sum_{m} \sum_{n} p_m \langle m | n \rangle \langle n | A | m \rangle \tag{3.44}$$

$$= \sum_{m} \langle m\left(\sum_{n} p_{n} | n \rangle \langle n | \right) A | m \rangle = \operatorname{Tr}(\rho A).$$
(3.45)

Der Erwartungswert drückt sich also wieder mittels der **Spur** aus. Der Dichteoperator hat folgende Eigenschaften:

• Normierung: Für Dichteoperatoren  $\rho$  gilt

$$\operatorname{Tr}(\rho) = \sum_{n,m} p_n \langle m | n \rangle \langle n | m \rangle = 1.$$
(3.46)

• Hermitizität: Weiterhin in einer beliebigen Basis gilt für Dichteoperatoren  $\rho$ 

$$\langle \alpha | \rho | \beta \rangle = \sum_{n} p_n \langle \alpha | n \rangle \langle n | \beta \rangle = \sum_{n} p_n \langle \beta | n \rangle^* \langle n | \alpha \rangle^* = \langle \beta | \rho | \alpha \rangle^* \qquad (3.47)$$

$$\rightsquigarrow \rho = \rho^{\dagger}, \quad \rho \text{ ist Hermitesch }.$$
 (3.48)

• Positivität: Es gilt (AUFGABE)

$$\langle \psi | \rho | \psi \rangle \ge 0 \rightsquigarrow \rho \ge 0 \tag{3.49}$$

für beliebige Zustände  $\psi$ .

Es gilt weiterhin

**Satz 27.** Ein Operator  $\rho$  ist genau dann Dichteoperator zu einem Ensemble, wenn  $\operatorname{Tr}(\rho) = 1$  und  $\rho \geq 0$ .

Beweis: Sei  $\rho \geq 0$ , dann ist  $\rho$  auch Hermitesch (AUFGABE) und hat deshalb eine Zerlegung  $\rho = \sum_{l} \lambda_{l} |l\rangle \langle l|$  mit reellen Eigenwerten, die wegen der Positivität  $\lambda_{l} \geq 0$ sind, weshalb mit der Normierung  $\operatorname{Tr}(\rho) = 1 = \sum_{l} \lambda_{l}$  die Darstellung  $\rho = \sum_{l} \lambda_{l} |l\rangle \langle l|$ ein Ensemble  $(\lambda_{l}, |l\rangle)$  beschreibt. Die umgekehrte Richtung erfolgt aus Gl.(3.46), (3.49). QED.

Man beachte, dass ein Dichteoperator  $\rho$  ein Ensemble nicht eindeutig festlegt: Verschiedene Ensembles  $(\lambda_l, |l\rangle)$ ,  $(p_n, |n\rangle)$  können zu ein und demselbem  $\rho$  gehören (s.u.). In der  $(p_n, |n\rangle)$ -Darstellung  $\rho \equiv \sum_n p_n |n\rangle \langle n|$ , Gl. (3.43), haben wir eine *Diagonaldar*stellung, die sich auf die Basis  $|n\rangle$  bezieht und die in Matrixform als

$$\rho = \begin{pmatrix}
p_1 & 0 & 0 & \dots \\
0 & p_2 & 0 & \dots \\
0 & 0 & p_3 & 0 \\
0 & \dots & \dots & \dots
\end{pmatrix}$$
(3.50)

geschrieben wird - daher der Name Dichte*matrix*. Im Allgemeinen ist das bei einer unendlichdimensionalen Basis eine unendlichdimensionale Matrix.

Es gilt (AUFGABE) folgende Ungleichung:

$$\operatorname{Tr}(\rho^2) \le 1. \tag{3.51}$$

Insbesondere definiert man

$$\rho^2 = \rho, \quad \text{Tr}(\rho^2) = 1, \quad \text{reiner Zustand.}$$
(3.52)

$$\rho^2 \neq \rho, \quad \text{Tr}(\rho^2) < 1, \quad \text{gemischter Zustand.}$$
(3.53)

Ein reiner Zustand hat die Form  $\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ , d.h. alle Wahrscheinlichkeiten  $p_n$  sind Null bis auf die eine, die eins ist und zum Projektor  $|\Psi\rangle\langle\Psi|$  gehört.

# 3.2.2 Spezialfall Spin 1/2: die Bloch-Sphäre

Der Dichteoperator  $\rho$  ist in diesem Fall eine hermitische 2 mal 2 Matrix mit Spur 1. Es gilt folgendes Theorem:

**Satz 28.** Es gibt eine 1-zu-1-Beziehung zwischen allen Dichtematrizen  $\rho$  eines Spin 1/2 und den Punkten der Einheitskugel (**Bloch-Sphäre**')  $|\mathbf{p}| \leq 1$ ,

$$\rho \equiv \frac{1}{2} \left( \hat{1} + \mathbf{p}\boldsymbol{\sigma} \right) \tag{3.54}$$

mit einem reellen dreikomponentigem Vektor  $\mathbf{p}$  und dem Vektor  $\boldsymbol{\sigma}$  der Pauli-Matrizen. Die reinen Zustände entsprechen dem Rand der Bloch-Sphäre  $|\mathbf{p}| = 1$ . Allgemein gilt für die Erwartungwerte der Spinkomponenten  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$ ,  $\sigma_z$  in einem (gemischten oder reinen) Zustand  $\rho$ ,

$$\langle \sigma_i \rangle \equiv \operatorname{Tr}(\rho \sigma_i) = p_i, \quad i = x, y, z.$$
 (3.55)

Zum Beweis: Mit den Eigenwerten  $\lambda_1$ ,  $\lambda_2$  von  $\rho$  gilt

$$\lambda_1 \lambda_2 = \det \rho = \frac{1}{4} \left( 1 - \mathbf{p}^2 \right). \tag{3.56}$$

Damit gilt: a)  $\rho \ge 0$  positiv (semi)definit  $\rightsquigarrow \lambda_1 \lambda_2 \ge 0 \rightsquigarrow |\mathbf{p}| \le 1$ . b)  $|\mathbf{p}| \le 1 \rightsquigarrow \lambda_1 \lambda_2 \ge 0$ , wegen  $\lambda_1 + \lambda_2$  können nicht beide  $\lambda_i$  negativ sein  $\rightsquigarrow \lambda_1 \ge 0, \lambda_2 \ge 0 \rightsquigarrow \rho \ge 0$ . Also:  $\rho$  ist Dichtematrix  $\leftrightarrow |\mathbf{p}| \le 1$ .

Für  $|\mathbf{p}| = 1$  ist  $\mathbf{p}$  ein Einheitsvektor - dann gilt (AUFGABE)

$$(\mathbf{p}\boldsymbol{\sigma})^2 = \hat{\mathbf{1}}, \quad |\mathbf{p}| = 1 \tag{3.57}$$

In diesem Fall hat man explizit

$$\rho^{2} = \frac{1}{2} \left( \hat{1} + \mathbf{p}\boldsymbol{\sigma} \right) \frac{1}{2} \left( \hat{1} + \mathbf{p}\boldsymbol{\sigma} \right)$$
$$= \frac{1}{4} \left( \hat{1} + 2\mathbf{p}\boldsymbol{\sigma} + (\mathbf{p}\boldsymbol{\sigma})^{2} \right) = \frac{1}{2} \left( \hat{1} + \mathbf{p}\boldsymbol{\sigma} \right) = \rho, \qquad (3.58)$$

d.h.  $\rho$ ist ein reiner Zustand, also ein Projektions<br/>operator. Weiterhin gilt die Gleichung (AUFGABE)

$$\frac{1}{2}\operatorname{Tr}\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij}, \quad i = 1, 2, 3, \tag{3.59}$$

aus der man mit  $\text{Tr}\sigma_i = 0$  direkt

$$\operatorname{Tr}(\rho\sigma_i) = \frac{1}{2}\operatorname{Tr}\left(\left(\hat{1} + p_1\sigma_1 + p_2\sigma_2 + p_3\sigma_3\right)\sigma_i\right) = p_i \tag{3.60}$$

folgert. QED.

Wir wollen uns die zwei Extremfälle von Spin 1/2-Zuständen nochmal genauer anschauen:

#### 3.2.2.1 Reiner Zustand mit $|\mathbf{p}| = 1$

In diesem Fall beschreibt die Dichtematrix also einen reinen Zustand  $\rho$  (Projektionsoperator) mit  $\rho^2 = \rho$ . Dann gilt wegen  $(\mathbf{p}\boldsymbol{\sigma})^2$  wieder

$$(\mathbf{p}\boldsymbol{\sigma})\rho = (\mathbf{p}\boldsymbol{\sigma})\frac{1}{2}(\hat{1} + \mathbf{p}\boldsymbol{\sigma}) = \frac{1}{2}(\mathbf{p}\boldsymbol{\sigma} + \hat{1}) = \rho.$$
 (3.61)

Unser reiner Zustand ist also gerade der Projektor

$$\rho = \rho(\mathbf{p}) = |\uparrow, \mathbf{p}\rangle\langle\uparrow, \mathbf{p}|, \quad |\mathbf{p}| = 1, \tag{3.62}$$

denn  $(\mathbf{p}\boldsymbol{\sigma})|\uparrow,\mathbf{p}\rangle = |\uparrow,\mathbf{p}\rangle$  ist ja gerade die Eigenwertgleichung für den Spin-Zustand mit 'spin-up' für die SG-Apparatur in **p**-Richtung. Die Einheits-Vektoren **p** mit  $|\mathbf{p}| = 1$ auf der Oberfläche der Blochsphäre beschreiben also Eigenzustände  $|\uparrow,\mathbf{p}\rangle$  mit 'spin-up' für die SG-Apparatur in **p**-Richtung. Für die Richtung  $\mathbf{p} = \mathbf{e}_z$  haben wir dann z.B. die explizite Darstellung

$$\rho \equiv |\uparrow \mathbf{e}_z \rangle \langle \uparrow \mathbf{e}_z | = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}_z, \qquad (3.63)$$

wobei wir mit dem Index  $_z$  an der Matrix die Basis kennzeichnen. An dieser Darstellung erkennen wir noch einmal, daß es sich um einen Ensemble handelt, in dem wir mit Wahrscheinlichkeit  $w_{\uparrow} = 1$  den Zustand  $|\uparrow \mathbf{e}_z\rangle$  und mit Wahrscheinlichkeit  $w_{\downarrow} = 0$ den Zustand  $|\downarrow \mathbf{e}_z\rangle$  antreffen. Das heißt aber natürlich nicht, daß damit alle Messergebnisse deterministisch festgelegt wären: Nur wenn wir den Spin  $\sigma_z$  in z-Richtung messen und diese Messung z.B. mit vielen identisch präparierten Systeme, die durch das  $\rho$ , Gl. (3.63), beschrieben werden, wiederholen, finden wir stets das Ergebnis 'spin-up'. Bei einer Messung von  $\sigma_x$  in x-Richtung finden wir mit diesem Zustand die zwei Messwerte 'spin-up' und 'spin-down', die den zwei Eigenwerten von  $\sigma_x$  entsprechen: Es gilt ja (NACHPRÜFEN!)

$$|\uparrow \mathbf{e}_{z}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow \mathbf{e}_{x}\rangle + |\downarrow \mathbf{e}_{x}\rangle\right), \qquad (3.64)$$

und die entsprechenden quantenmechanischen Wahrscheinlichkeiten sind jeweils  $\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 = \frac{1}{2}$ .

Die Dichtematrix eines reinen Zustands hat nun allerdings keineswegs stets die einfache Gestalt Gl. (3.63): Für den reinen Zustand 'Spin-up' in x-Richtung haben wir beispielsweise

$$\rho \equiv |\uparrow \mathbf{e}_x \rangle \langle \uparrow \mathbf{e}_x | = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}_z, \qquad (3.65)$$

wie man mit

$$|\uparrow \mathbf{e}_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow \mathbf{e}_z\rangle + |\downarrow \mathbf{e}_z\rangle\right)$$
(3.66)

durch Ausmultiplizieren findet. In der z-Basis ist die Dichtematrix für diesen Zustand also voll besetzt.

### 3.2.2.2 Gemischter Zustand mit $|\mathbf{p}| = 0$

In diesem Fall beschreibt die Dichtematrix einen gemischten Zustand  $\rho = \frac{1}{2}\hat{1}$ , der durch die Mitte der Blochsphäre representiert wird. Wir wollen diesen Zustand in einer Basisdarstellung schreiben. Mit den Basis-Kets  $|\uparrow \mathbf{e}_z\rangle$ ,  $|\downarrow \mathbf{e}_z\rangle$  für Stern-Gerlach-Apparatur in z-Richtung schreibt sich  $\rho$  als

$$\rho = \frac{1}{2} |\uparrow \mathbf{e}_z \rangle \langle \uparrow \mathbf{e}_z | + \frac{1}{2} |\downarrow \mathbf{e}_z \rangle \langle \downarrow \mathbf{e}_z | = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}_z, \qquad (3.67)$$

wobei wir mit dem Index $_z$  die Basis kennzeichnen. Interessant ist nun, daß wir diesen (gemischten) Zustand $\rho$ genauso gut als

$$\rho = \frac{1}{2} |\uparrow \mathbf{e}_x \rangle \langle \uparrow \mathbf{e}_x | + \frac{1}{2} |\downarrow \mathbf{e}_x \rangle \langle \downarrow \mathbf{e}_x | = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}_x, \qquad (3.68)$$

d.h. als Gemisch bezüglich der Basis für die *x*-Richtung der SG-Apparatur schreiben können! Genauso geht das für eine Basis  $|\uparrow \mathbf{n}\rangle$ ,  $|\downarrow \mathbf{n}\rangle$ , die sich auf eine beliebige Richtung  $\mathbf{n}$  bezieht (AUFGABE). Für diesen Zustand ist also überhaupt keine Spin-Richtung ausgezeichnet!

### 3.2.3 Zeitentwicklung, Liouville-von-Neumann-Gleichung

Jetzt betrachten wir die *unitäre Zeitentwicklung eines Zustands*  $\rho$ , die einfach aus der Schrödingergleichung folgt:

$$i\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = H|\Psi(t)\rangle \rightsquigarrow |\Psi(t)\rangle = U(t)|\Psi(0)\rangle$$
(3.69)

$$i\frac{\partial}{\partial t}U(t) = HU(t) \tag{3.70}$$

$$U(t) = e^{-iHt}$$
, Zeitentwicklungsoperator. (3.71)

Es folgt nun

$$\rho(t) = \sum_{n} p_n |n(t)\rangle \langle n(t)| = \sum_{n} p_n U(t) |n(0)\rangle \langle n(0)|U^{\dagger}(t)$$
(3.72)

$$= U(t)\rho(0)U^{\dagger}(t), \qquad (3.73)$$

und die Zeitentwicklung des Zustands ist

$$i\frac{\partial}{\partial t}\rho(t) = HU(t)\rho(0)U^{\dagger}(t) - U(t)\rho(0)U^{\dagger}(t)H$$
(3.74)

= 
$$[H, \rho(t)]$$
, Liouville-von-Neumann-Gleichung. (3.75)

Da U(t) unitär, ist die Zeitentwicklung von  $\rho(t)$  unitär. Das wird sich ändern (s.u.), wenn wir Information aus  $\rho(t)$  'herausreduzieren' (reduzierte Dichtematrix). Die Liouville-von-Neumann-Gleichung ist der **Ausgangspunkt der Nichtgleichgewichts-Quanten**statistik. Aus  $\rho(t) = U(t)\rho(0)U^{\dagger}(t)$  folgt weiterhin

$$[\rho(0), H] = 0 \rightsquigarrow \rho(t) = \rho(0) \quad \forall t, \tag{3.76}$$

d.h. falls der Zustand  $\rho$  mit dem Hamiltonian für eine bestimmte Zeit (t = 0 hier) vertauscht, ist er für alle Zeiten konstant (auch t < 0)! <sup>1</sup> Deshalb die

**Definition** Ein **Gleichgewichtszustand** eines durch einen Hamiltonian H beschriebenen Systems ist ein Zustand  $\rho$ , der mit H vertauscht.

# 3.2.4 \* Ergänzung: Entropie, thermische Zustände

Man definiert die **von-Neumann-Entropie** eines Zustands  $\rho$  als

$$S = -k_B \operatorname{Tr} \left(\rho \ln \rho\right) = -k_B \sum_n p_n \ln p_n.$$
(3.77)

Hierbei hat man im letzten Schritt die Diagonaldarstellung von  $\rho = \sum_{n} p_n |n\rangle \langle n|$  benutzt, sowie die Funktion eines Operators X in Diagonaldarstellung,

$$X = \sum_{n} x_n |n\rangle \langle n| \rightsquigarrow f(X) = \sum_{n} f(x_n) |n\rangle \langle n|.$$
(3.78)

(überprüfe mit Taylor-Entwicklung von f). Es gilt

$$S = 0$$
, reiner Zustand (3.79)

$$S > 0$$
, gemischter Zustand. (3.80)

Die von-Neumann-Entropie, die ja nur von den Basis-unabhängigen Eigenwerten  $p_n$  der Dichtematrix abhängt, ist also ein Maß für die 'Gemischtheit' eines Zustands  $\rho$ .

Für thermische Gleichgewichts-Zustände werden die Wahrscheinlichkeiten  $p_n$ in der *Quantenstatistik* bestimmt. Für das 'Wärmebad-Ensemble' (kanonisches Ensemble) eines Systems mit Hamiltonoperator H und Eigenwertgleichung  $H|n\rangle = E_n|n\rangle$ haben wir

$$\rho = \sum_{n} \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} |n\rangle \langle n| = \frac{1}{Z} e^{-\beta H}, \quad Z = \text{Tr}e^{-\beta H}.$$
(3.81)

Hierbei ist die **Exponentialfunktion eines Operators** einfach über die Potenzreihe des Operators definiert, und

$$\beta = \frac{1}{k_B T}, \quad k_B \text{ Boltzmann-Konstante}$$
 (3.82)

mit der Gleichgewichts-Temperatur T.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> vgl. mit holomorphen Funktionen: f(z) = const auf einem (kleinen) Gebiet der komplexen Ebene  $\Rightarrow f(z) = \text{const}$  überall.

# 3.3 Zusammengesetzte Systeme

Ein quantenmechanisches System kann aus N Teilsystemen bestehen (Engl. 'N-partite') und wird dann durch das Tensorprodukt der Hilberträume der Teilsysteme beschrieben,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N. \tag{3.83}$$

Daraus ergibt sich der größte Bruch mit der klassischen Physik: das Auftreten von Verschränkung (s.u.).

#### 3.3.1 Bipartite Systeme

Der wichtigste Fall sind zunächst bipartite Systeme (N = 2),

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B. \tag{3.84}$$

Den einfachsten Fall hatten wir bereits bei der Beschreibung des Spins im Hilbertraum der Spinoren kennengelernt: Hier war einer der Hilberträume der HR der Bahn-Wellenfunktionen, der andere der HR der Spin-Wellenfunktionen (zweikomponentige Vektoren).

Der nächste Fall ist der, in dem man tatsächlich zwei verschiedene physikalische Systeme, die auch miteinander wechselwirken dürfen, in einem gemeinsamen Rahmen beschtreiben möchte. Als Beispiel betrachten wir zwei Beobachter A und B, die jeweils ein Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen ('Spin- $\frac{1}{2}$ ') vor sich haben. Die gesamte Wellenfunktion beider Spins läßt sich dann nach folgender Basis entwickeln:

$$|0\rangle_A \otimes |0\rangle_B, \quad |1\rangle_A \otimes |0\rangle_B, \quad |0\rangle_A \otimes |1\rangle_B, \quad |1\rangle_A \otimes |1\rangle_B, \tag{3.85}$$

wobei

$$|0\rangle_A \equiv |\uparrow, \mathbf{e}_z\rangle_A, \quad |1\rangle_A \equiv |\downarrow, \mathbf{e}_z\rangle_A$$

$$(3.86)$$

die Basisvektoren des Spinraums  $\mathbb{C}^2$  (bezüglich einer Stern-Gerlach-Apparatur in z-Richtung) sind, und entsprechend für Beobachter B.

Ein allgemeiner Zustand für das System aus zwei Qubits schreibt sich dann als

$$|\Psi\rangle = \sum_{ab=0}^{1} c_{ab}|a\rangle \otimes |b\rangle \equiv c_{00}|00\rangle + c_{01}|01\rangle + c_{10}|10\rangle + c_{11}|11\rangle.$$
(3.87)

Im letzten Schritt haben wir hier bereits die Abkürzungen

$$|0\rangle_A \otimes |0\rangle_B \equiv |00\rangle \tag{3.88}$$

etc. eingeführt, um Schreibarbeit zu sparen.

Wir betrachten nun den Fall höherdimensionaler Hilberträume. Häufige Anwendungen treten bei der Beschreibung von *Dissipation und Dekohärenz* auf. Hierfür benötigt man, wie in der Thermodynamik, ein Gesamtsystem, das sich aus zwei Anteilen zusammensetzt: System und Bad. Sei das Gesamtsystem im reinen Zustand  $|\Psi\rangle$ , den wir wie folgt zerlegen:

$$|\Psi\rangle = \sum_{ab} c_{ab} |a\rangle \otimes |b\rangle \tag{3.89}$$

wobei  $|a\rangle$  ein VOS in  $\mathcal{H}_A$  und  $|b\rangle$  ein VOS in  $\mathcal{H}_B$ . Die Matrix c ist dabei i. A. rechteckig,

$$c \leftrightarrow \begin{pmatrix} c_{11} & \dots & \dots & c_{1N} \\ c_{21} & \dots & \dots & c_{2N} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ c_{M1} & \dots & \dots & c_{MN} \end{pmatrix}, \quad dim(\mathcal{H}_A) = M, \quad dim(\mathcal{H}_B) = N, \tag{3.90}$$

denn die Dimensionen der Hilberträume brauchen ja nicht übereinzustimmen.

### 3.3.2 Reduzierte Dichtematrix

Jetzt kommt mit dem Begriff der reduzierten Dichtematrix der eigentliche Auftritt der Dichtematrix als unverzichtbares Konzept in der Quantenmechanik. Die reduzierte Dichtematrix spielt eine zentrale Rolle bei der Quantifizierung von Informationsverlust, Verschränkung, Dekohärenz bis hin zum Messprozess.

Im zusammengesetzten System A + B wollen wir uns nur für die Information über das System A interessieren, d.h. Erwartungswerte aller Observablen  $\hat{A}$  des Systems A, aber nicht die von B. Diese **reduzierte** Information liegt z.B für einen Beobachter Avor, der keinen Zugang zum System B hat bzw. keine Möglichkiet, etwas über B zu erfahren. Im Falle eines System-Bad Hilbertraums,  $\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_B$ , kann das umgebende Bad z.B.zwar an das System gekoppelt, ansonsten aber unzugänglich sein.

Wir nehmen wieder an, daß sich das Gesamtsystem durch eine Wellenfunktion  $|\Psi\rangle = \sum_{ab} c_{ab} |a\rangle \otimes |b\rangle$ , Gl. (3.89), beschrieben wird, sich also in einem reinen Zustand befindet. Die Erwartungswerte einer Observablen in A sind dann wie immer einfach durch die Skalarprodukte gegeben,

$$\langle A \rangle = \langle \Psi | A \otimes 1 | \Psi \rangle$$
, Observable operiert nur in  $\mathcal{H}_A$  (3.91)

$$= \sum_{aba'b'} c^*_{ab} c_{a'b'} \langle b| \otimes \langle a|A \otimes 1|a' \rangle \otimes |b' \rangle = \sum_{aba'} c^*_{ab} c_{a'b} \langle a|A|a' \rangle$$
(3.92)

$$\equiv \operatorname{Tr}_{A}(\rho_{A}A), \quad \rho_{A} \equiv \sum_{aba'} c_{ab}^{*} c_{a'b} |a'\rangle \langle a|.$$
(3.93)

Hiermit wird der **reduzierte Dichteoperator**  $\rho_A$  des Teilsystems A definiert, dessen Kenntnis die Berechnung sämtlicher Erwartungswerte in A ermöglicht. Die Spur Tr<sub>A</sub> wird dabei nur im Teilraum A ausgeführt! Es gilt

$$\rho_A = \operatorname{Tr}_B\left(|\Psi\rangle\langle\Psi|\right) = \sum_{aba'b'} c^*_{ab} c_{a'b'} \operatorname{Tr}_B\left(|a'\rangle\otimes|b'\rangle\langle b|\otimes\langle a|\right)$$
(3.94)

$$= \sum_{aba'} c^*_{ab} c_{a'b} |a'\rangle \langle a| = \sum_{aa'} \left(cc^{\dagger}\right)_{a'a} |a'\rangle \langle a| \qquad (3.95)$$

$$(cc^{\dagger}) = \begin{pmatrix} c_{11} & \dots & \dots & c_{1N} \\ c_{21} & \dots & \dots & c_{2N} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ c_{M1} & \dots & \dots & c_{MN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{11} & \dots & c_{M1} \\ c_{12}^{*} & \dots & c_{M2}^{*} \\ \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots \\ c_{1N}^{*} & \dots & c_{MN}^{*} \end{pmatrix}.$$
 (3.96)

Weiterhin gilt (AUFGABE)

$$\rho_A = \rho_A^{\dagger}, \quad \text{Tr}_A \rho_A = 1, \quad \rho_A \ge 0.$$
(3.97)

Deshalb definiert  $\rho_A$  tatsächlich einen Dichteoperator in  $\mathcal{H}_A$ .

Wie sieht das konkret aus? Wir nehmen als BEISPIEL ein System aus zwei Qubits A und B, das sich im Zustand

$$|\Psi\rangle \equiv a|00\rangle + b|11\rangle \equiv a|0\rangle_A \otimes |0\rangle_B + b|1\rangle_A \otimes |1\rangle_B$$
(3.98)

befinde. Für die Koeffizienten  $a, b \in \mathbb{C}$  muß wegen der Normierung

$$|a|^2 + |b|^2 = 1 \tag{3.99}$$

gelten. Die Dichtematrix in A folgt zu

$$\rho_A = |a|^2 |0\rangle \langle 0|_A + |b|^2 |1\rangle \langle 1|_A = \begin{pmatrix} |a|^2 & 0\\ 0 & |b|^2 \end{pmatrix}.$$
(3.100)

Den Spezialfall $a=b=1/\sqrt{2}$ schauen wir uns noch etwas genauer an. Der Gesamtzustand sei

$$|\Psi\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow \mathbf{e}_z \rangle_A \otimes |\uparrow \mathbf{e}_z \rangle_B + |\downarrow \mathbf{e}_z \rangle_A \otimes |\downarrow \mathbf{e}_z \rangle_B\right).$$
(3.101)

Wir haben hier jeweils  $\mathbf{e}_z$  in den Vektoren geschrieben, um die Basis mit 'Stern-Gerlach-Apparatur' in z-Richtung zu bezeichnen. Die Dichtematrix  $\rho_A$  lautet

$$\rho_A = \frac{1}{2} |\uparrow \mathbf{e}_z \rangle_A \langle\uparrow \mathbf{e}_z | + \frac{1}{2} |\downarrow \mathbf{e}_z \rangle_A \langle\downarrow \mathbf{e}_z | = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$
(3.102)

In der Blochsphäre ist das ein Zustand Gl. (3.54) mit  $\mathbf{p} = 0$ , d.h. genau im Ursprung. Interessant ist nun, daß wir diesen (gemischten) Zustand  $\rho_A$  genauso gut als

$$\rho_A = \frac{1}{2} |\uparrow \mathbf{e}_x \rangle_A \langle\uparrow \mathbf{e}_x | + \frac{1}{2} |\downarrow \mathbf{e}_x \rangle_A \langle\downarrow \mathbf{e}_x |, \qquad (3.103)$$

d.h. als Gemisch bezüglich der Basis für die *x*-Richtung der SG-Apparatur schreiben können, und genauso für jede beliebige Richtung **n** (AUFGABE). Für den Beobachter A ist also überhaupt keine Spin-Richtung ausgezeichnet! Er hat einen Spin-Zustand  $\rho_A$ , bei dessen Messung in einer beliebige Richtung **n** jeweils Spin  $\uparrow$  und Spin  $\downarrow$  mit den gleichen Wahrscheinlichkeiten  $\frac{1}{2}$  auftreten.

### 3.3.3 Reine und verschränkte Zustände

**Definition** Zustände  $|\Psi\rangle$  eines bipartiten Systems  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$  heissen **reine Tensoren** (separabel), falls sie sich in der Form

$$|\Psi\rangle = |\phi\rangle_A \otimes |\phi'\rangle_B$$
, reiner Tensor (3.104)

mit (normierten)  $|\phi\rangle_A \in \mathcal{H}_A$  und  $|\phi'\rangle_B \in \mathcal{H}_B$  schreiben lassen. Zustände  $|\Psi\rangle$ , die sich nicht als reine Tensoren schreiben lassen, heissen **verschränkt**.

Wenn  $|\Psi\rangle$  separabel ist, folgt für die zugehörigen reduzierten Dichteoperatoren

$$\rho_A = \operatorname{Tr}_B |\phi\rangle_A \otimes |\phi'\rangle_B \langle \phi'| \otimes \langle \phi| \tag{3.105}$$

$$= |\phi\rangle_A \langle \phi| \times \mathrm{Tr}_B |\phi'\rangle_B \langle \phi'| = |\phi\rangle_A \langle \phi| \qquad (3.106)$$

$$\rightsquigarrow \rho_A^2 = \rho_A, \quad |\Psi\rangle \text{ separabel } \rightsquigarrow \rho_A \text{ rein.}$$
 (3.107)

Entsprechend ist dann auch  $\rho_B$  rein. Wenn  $|\Psi\rangle$  verschränkt ist, gilt nicht mehr  $\rho_A^2 = \rho_A$ , es muss also  $\text{Tr}_A \rho_A^2 < 1$  gelten und deshalb

 $|\Psi\rangle$  verschränkt  $\rightsquigarrow \rho_A$  Gemisch und  $\rho_B$  Gemisch.

Wir werden weiter unten die physikalischen Konsequenzen der Verschränkung diskutieren.

AUFGABE 1 a) Betrachte das 2-Qubit (zwei Systeme A und B),

$$|\Psi\rangle \equiv a|00\rangle + b|11\rangle \equiv a|0\rangle_A \otimes |0\rangle_B + b|1\rangle_A \otimes |1\rangle_B \tag{3.108}$$

$$\rightsquigarrow \rho_A = |a|^2 |0\rangle \langle 0|_A + |b|^2 |1\rangle \langle 1|_A, \qquad (3.109)$$

wobei  $\rho_A$  die reduzierte Dichtematrix für A ist. Für welche a, b ist  $|\Psi\rangle$  verschränkt ? AUFGABE 1b) Betrachte das 2-Qubit

$$|\Psi\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |11\rangle) \tag{3.110}$$

Berechne hierfür die reduzierte Dichtematrix  $\rho_A$ . Ist  $|\Psi\rangle$  verschränkt?

AUFGABE 2. Ein Spin  $\frac{1}{2}$  (System A) sei an ein 'Wärmebad' (System B) mit N Zuständen gekoppelt. Das Gesamtsystem befinde sich im normierten Zustand

$$|\Psi\rangle \equiv |\uparrow\rangle \otimes (\alpha_1|1\rangle + \dots + \alpha_N|N\rangle) + |\downarrow\rangle \otimes (\beta_1|1\rangle + \dots + \beta_N|N\rangle)$$
(3.111)

mit komplexen Koeffizienten, die als N-komponentige Vektoren  $\vec{\alpha}$  und  $\vec{\beta}$  zusammengefaßt werden.

a) Drücken Sie die reduzierte Dichtematrix  $\rho_A$  für System A mittels der Vektoren  $\vec{\alpha}$  und  $\vec{\beta}$  aus.

b) Berechnen Sie die Eigenwerte  $\lambda_{\pm}$  von  $\rho_A$  und überprüfen Sie, daß  $\rho_A$  tatsächlich eine Dichtematrix ist.

c) Diskutieren Sie für reelle  $\vec{\alpha}$  und  $\vec{\beta}$  mit  $|\vec{\alpha}| = |\vec{\beta}$  die Abhängigkeit der von-Neumann Entropie  $S \equiv -\text{Tr}(\rho_A \ln \rho_A)$  vom Winkel zwischen  $\vec{\alpha}$  und  $\vec{\beta}$ . Wann ist der Zustand  $|\Psi\rangle$  verschränkt?

### 3.3.4 \*Ergänzung: Die Schmidt-Zerlegung

Ausgehend von einem reinen Zustand  $|\Psi\rangle$  eines bipartiten Systems  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$  erhält man die reduzierten Dichtematrizen  $\rho_A$  (für System A) und  $\rho_B$  (für System B). Wie hängen  $\rho_A$  und  $\rho_B$  miteinander zusammen, und wie lassen sie sich charakterisieren? Wir beginnen mit einem

**Satz 29.** Jeder Zustand (Tensor)  $|\Psi\rangle$  eines bipartiten Systems  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$  kann zerlegt werden als

$$|\Psi\rangle = \sum_{n} \lambda_n |\alpha_n\rangle \otimes |\beta_n\rangle, \quad \lambda_n \ge 0, \tag{3.112}$$

wobei  $\{|\alpha\rangle\}$  ein VOS in  $\mathcal{H}_A$  und  $\{|\beta\rangle\}$  ein VOS in  $\mathcal{H}_B$  ist.

Beweis: Zunächst für dim $(\mathcal{H}_A) = \dim(\mathcal{H}_B) = N$  (endlichdimensional). Ein Tensor lässt sich immer schreiben als  $|\Psi\rangle = \sum_{ab} c_{ab} |a\rangle \otimes |b\rangle$  mit  $\{|a\rangle\}$  ein VOS in  $\mathcal{H}_A$  und  $\{|b\rangle\}$  ein VOS in  $\mathcal{H}_B$ . Wir zerlegen die quadratische Matrix C (Elemente  $c_{ab}$ ) mit der Singulärwertzerlegung (singular value decomposition) (s.u.),

$$C = UDV, \quad U, V \text{ unitär}, D = diag(\lambda_1, ..., \lambda_N), \lambda_n \ge 0 \text{ diagonal.}$$
 (3.113)

Man hat dann

$$|\alpha_n\rangle \equiv \sum_{a} U_{an}|a\rangle, \quad |\beta_n\rangle \equiv \sum_{b} V_{nb}|b\rangle$$
 (3.114)

$$\rightsquigarrow |\Psi\rangle = \sum_{abn} U_{an} D_{nn} V_{nb} |a\rangle \otimes |b\rangle = \sum_{n} \lambda_n |\alpha_n\rangle \otimes |\beta_n\rangle, \qquad (3.115)$$

wie behauptet. QED. Hier ist noch das

**Satz 30.** Singulärwertzerlegung: Jede quadratische Matrix A lässt sich zerlegen als

$$A = UDV, \quad U, V \text{ unitär}, \ D = diag(\lambda_1, ..., \lambda_N), \lambda_n \ge 0 \text{ diagonal.}$$
 (3.116)

Die Diagonalelemente von D heissen die singulären Werte der Matrix A.

Bemerkung: diese Zerlegung ist allgemeiner als die Spektralzerlegung für hermitesche Matrizen  $H, H = UDU^{\dagger}$  mit diagonalem (aber nicht unbedingt positivem) D und unitärem U und kann auch einfach auf rechteckige Matrizen erweitert werden. Literatur: NIELSEN/CHUANG.

Diskussion der Schmidt-Zerlegung:

• Man hat also statt der doppelten Summe  $|\Psi\rangle = \sum_{ab} c_{ab} |a\rangle \otimes |b\rangle$  nur eine einfache Summe  $|\Psi\rangle = \sum_{n} \lambda_n |\alpha_n\rangle \otimes |\beta_n\rangle, \quad \lambda_n \ge 0.$ 

• Folgerung für die reduzierten Dichtematrizen  $\rho_A$  (für System A) und  $\rho_B$  (für System B):

$$\rho_A = \sum_n \lambda_n^2 |\alpha_n\rangle \langle \alpha_n|, \quad \rho_B = \sum_n \lambda_n^2 |\beta_n\rangle \langle \beta_n|, \qquad (3.117)$$

d.h. die reduzierten Dichtematrizen in beiden Teilsystemen haben dieselben Eigenwerte  $\lambda_n^2$ ! Die Kenntniss von  $\rho_A$  und  $\rho_B$  ist allerdings nicht ausreichend, um den Zustand  $|\Psi\rangle$  zu rekonstruieren: die Information über die Phasen der  $|\alpha_n\rangle$ ,  $|\beta_n\rangle$  ist in  $\rho_A$  und  $\rho_B$  nicht enthalten!

- Für zwei verschiedene Ausgangszustände  $|\Psi\rangle$  und  $|\Psi'\rangle$  erhält man i.A. Schmidt-Zerlegungen mit verschiedenen VOS in  $\mathcal{H}_A$  und  $\mathcal{H}_B$ . Die VOS  $\{|\alpha\rangle\}$  und  $\{|\beta\rangle\}$  in der Schmidt-Zerlegung  $|\Psi\rangle = \sum_n \lambda_n |\alpha_n\rangle \otimes |\beta_n\rangle$  hängen also ganz vom Ausgangszustand  $|\Psi\rangle$  ab.
- Die von-Neumann-Entropie  $S = -k_B \sum_n \lambda_n^2 \ln \lambda_n^2$  ist dieselbe für beide Zustände  $\rho_A$  und  $\rho_B$ .
- Für dim $(\mathcal{H}_A) \neq \dim(\mathcal{H}_B)$  gibt es in genau der gleichen Weise eine Schmidt-Zerlegung, nur dass einige der  $\lambda_n$  dann Null sein können.
- Die Anzahl der von Null verschiedenen Eigenwerte  $\lambda_n$  in der Schmidt-Zerlegung von  $|\Psi\rangle$  heisst **Schmidt-Zahl**  $n_S$ . Für  $n_S = 1$  ist der Zustand  $|\Psi\rangle$  separabel, für  $n_S > 1$  ist er verschränkt.

# 3.4 Dekohärenz

## 3.4.1 Einführung

Wir bezeichnen ein System in einem reinen Zustand  $|\Psi\rangle\langle\Psi|$  als quantenmechanisch kohärent oder kurz kohärent. Es gibt Basisdarstellungen, z.B.

$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha} c_{\alpha} |\alpha\rangle$$
, kohärente Überlagerung (Superposition) (3.118)

nach einer VOS-Basis  $|\alpha\rangle$ . Ist in dieser Darstellung mehr als einer der Koeffizienten  $c_{\alpha} \neq 0$ , so hat man prinzipiell die Möglichkeit, *Interferenzterme* zu beobachten, beispielsweise bei Ortswellenfunktionen als

$$\Psi(x) = c_0 \Psi_0(x) + c_1 \Psi_1(x)$$
  

$$\rightsquigarrow |\Psi(x)|^2 = |c_0|^2 |\Psi_0(x)|^2 + |c_1|^2 |\Psi_1(x)|^2 + \underbrace{2\text{Re}\left(c_0 c_1^* \Psi_0(x) \Psi_1^*(x)\right)}_{Interferenterm}.$$
 (3.119)

Beim Doppelspaltexperiment ist der Interferenzterm für das charakteristische Beugungsmuster verantwortlich. Als **Dekohärenz** bezeichnet man dann einen Prozess, durch den der Interferenzterm unwirksam gemacht wird und als Konsequenz das charakteristische Beugungsmuster verloren geht.

Dieser Prozess kann in der Quantenmechanik für allgemeine Situationen (nicht nur für das Doppelspaltexperiment) im Rahmen von System-Bad-Theorien systematisch und mikroskopisch beschrieben werden. Beispiele reichen von der Kernspin-Resonanz (NMR) über die Atom- und Molekülspektroskopie bis hin zu makroskopischen Überlagerungszuständen ('Schrödingers Katze'). Dabei wird das Gesamtsystem ('Universum') in ein 'System' mit Hamiltonian  $\mathcal{H}_{S}$  und ein 'Bad' (Umgebung) mit Hamiltonian  $\mathcal{H}_{SB}$  aufgeteilt,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\rm S} + \mathcal{H}_{\rm B} + \mathcal{H}_{\rm SB},\tag{3.120}$$

die miteinander über eine Wechselwirkung  $\mathcal{H}_{SB}$  gekoppelt sind. Das Gesamtsystem wird dann z.B. durch einen reinen Zustand mit Ket  $|\Psi\rangle$  beschrieben, der Zustand des Systems ist hingegen ein Gemisch, das durch einen reduzierten Dichteoperator  $\rho_{S}(t)$  beschrieben wird. Dem Experimentator liegt dann nur die in  $\rho_{S}(t)$  enthaltene Information und nicht die gesamte Information  $|\Psi\rangle$  über das 'Universum' vor. Dieser *Informationsverlust* ist dann für das Auftreten von Dekohärenz verantwortlich. Wie schnell und wie stark der Interferenzverlust erfolgt, hängt vom Gesamtsystem  $\mathcal{H}$  und damit von sehr vielen Bedingungen ab.

Sei das Gesamtsystem im reinen Zustand  $|\Psi\rangle$ . Wir betrachten ein System mit nur zwei Zuständen  $|0\rangle$  und  $|1\rangle$  sowie ein Bad mit N Zuständen  $|b\rangle$  und zerlegen den Gesamtzustand wie in Gl. (3.89),

$$|\Psi\rangle = \sum_{b=1}^{N} (c_{0b}|0\rangle \otimes |b\rangle + c_{1b}|1\rangle \otimes |b\rangle)$$
(3.121)

$$\rightsquigarrow \rho_{\rm S} \equiv \sum_{aa'=0,1} \sum_{b=1}^{N} c_{ab}^* c_{a'b} |a'\rangle \langle a| = \sum_{b=1}^{N} \begin{pmatrix} |c_{0b}|^2 & c_{0b}^* c_{1b} \\ c_{1b}^* c_{0b} & |c_{1b}|^2 \end{pmatrix}$$
(3.122)

Für eine erste, qualitative Diskussion machen nun eine weitere Annahme, nämlich über die Form der  $c_{0b}(t)$ ,  $c_{0b}(t)$  als Funktion der Zeit:

$$c_{0b}(t) = ce^{i\phi_b(t)}, \quad c_{1b}(t) = ce^{i\phi'_b(t)}, \quad c = \frac{1}{\sqrt{2N}}$$
 (3.123)

$$\phi_b(0) = \phi'_b(0) = 0 \tag{3.124}$$

mit irgendwelchen *Phasen*  $\phi_b^{(')}(t)$ , die vom Bad und der Wechselwirkung mit dem Bad bestimmt werden. Damit stimmt die Normierung,

$$\operatorname{Tr}\rho_{\mathrm{S}}(t) = \langle 0|\rho_{\mathrm{S}}(t)|0\rangle + \langle 1|\rho_{\mathrm{S}}(t)|1\rangle = \sum_{b=1}^{N} (|c_{0b}|^{2} + |c_{0b}|^{2}) = 1, \qquad (3.125)$$

und man hat

$$\rho_{\rm S}(t) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & r(t) \\ r^*(t) & 1 \end{pmatrix}, \quad r(t) \equiv \frac{1}{N} \sum_{b=1}^{N} e^{-i(\phi_b(t) - \phi'_b(t))}.$$
(3.126)

Die Phasen  $\phi_b(t)$  werden für jedes *b* unterschiedlich sein und sich im Laufe der Zeit *t* unterschiedlich schnell entwickeln. Selbst obwohl anfänglich bei t = 0 alle  $\phi_b(0)$  und  $\phi'_b(0)$  identisch Null sind, summiert man nach einer endlichen Zeit *t* im *Interferenzterm* r(t) eine große Anzahl von Phasenfaktoren, die wild fluktuieren und sich für große *N* letztendlich effektiv wegmitteln,

$$r(t) \to 0$$
, für große Zeiten t. (3.127)

Der Dichteoperator des Systems (in der  $|0\rangle$ ,  $|1\rangle$ -Basis) geht dadurch von einem reinem Zustand zur Zeit t = 0 mit Ket  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$  zu einem völlig inkohärenten Gemisch mit maximaler Entropie über

$$\rho_{\rm S}(0) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \to \rho_{\rm S}(t) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \text{für große Zeiten } t.$$
(3.128)

Einen solchen Fall von System-Bad-Wechselwirkung, bei der sich nur die Außerdiagonal-Terme (Interferenzterme), aber nicht die Diagonalterme (Populationen) der Dichtematrix verändern, nennt man *reine Dephasierung* (engl. 'dephasing').

#### 3.4.2 Mikroskopische Dekohärenz-Modelle

Aufgabe der Quantenmechanik ist es nun, über das obige phänomenologische Modell hinauszugehen und realistische Berechnungen zur Dephasierung vorzulegen.

# 3.5 Messungen (II)

Messungen sind in der Quantenmechanik durch das Projektions-Axiom und die 'Reduktion des Wellenpakets' axiomatisiert: Eine Observable  $\hat{A}$  habe ein vollständiges System von Eigenvektoren  $|\alpha\rangle$  zum Eigenwert  $\alpha$ . Ein System sei im Zustand  $|\Psi\rangle$  mit der Fourier-Entwicklung

$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha} c_{\alpha} |\alpha\rangle. \tag{3.129}$$

Das Postulat besagt, daß bei einer Messung von  $\hat{A}$  das Resultat einer der Eigenwerte  $\alpha$  ist, der mit Wahrscheinlichkeit  $|c_{\alpha}|^2$  eintritt, wobei sich der Zustand unmittelbar nach der Messung in dem betreffenen Eigenzustand  $|\alpha\rangle$  befindet ('Reduktion des Wellenpakets'). Bei einer zweiten, unmittelbar folgenden Messung ist das System bereits in dem Eigenzustand  $|\alpha\rangle$ . Das Ergebnis der zweiten Messung reproduziert dann das Ergebnis der ersten.

# 3.5.1 Verschiedene Arten von Messungen

Man möchte genauer verstehen, was bei einer Messung eigentlich passiert, und zwar auch aus ganz praktischen Gründen: Moderne Experimente erlauben z.B. das Beobachten einzelner Ionen oder das Zählen einzelner Elektronen oder Photonen. Insbesondere stellt sich z.B. die Frage, wie gut ein Messgerät prinzipiell eigentlich messen kann.

Man unterscheidet zwei Typen von Messungen:

- Messungen ohne Rückwirkung auf die zu messende Größe.
- Messungen mit Rückwirkung auf die zu messende Größe.

Wir definieren:

**Definition** Eine Rückwirkungs-freie Messung (QND-Messung, engl. **QND** measurement, quantum non-demolition measurement) einer Observablen  $\hat{A}$  hat eine Zeitentwicklung, bei der  $\hat{A}$  eine Konstante der Bewegung ist, d.h. bei der sich der Heisenberg-Operator  $\hat{A}(t)$  zeitlich nicht ändert. Alle anderen Messungen heißen 'nicht-QND-Messungen' oder Messungen mit Rückwirkung.

Diese Definition geht von einer dynamischen Beschreibung des Messprozesses im Rahmen der Quantenmechanik mit Hilfe eines Gesamt-Hamiltonoperators  $\mathcal{H}$  aus, der die Zeitentwicklung der Messgröße  $\hat{A}(t)$  bestimmt und den Messaufbau inclusive Messapparatur beschreibt. Es ist also

$$[\hat{A}, \mathcal{H}] = 0 \leftrightarrow \text{Messung von } \hat{A} \text{ ist QND.}$$
(3.130)

QND-Messungen sind wegen der fehlenden Rückwirkung auf das System häufig konzeptionell am einfachsten zu beschreiben. Sie entsprechen in der mikroskopischen Beschreibung oft einfachen, exakt lösbaren Dekohärenz-Modellen. Für weitere Literatur vgl. auch BREUER/PETRUCCIONE ('The Theory of Open Quantum Systems').

### 3.5.2 Modell für eine Messung

Wir wollen die Messung wie in Gl. (3.120) im Rahmen einer *System-Bad-Theorie* beschreiben, wobei das System mit dem Messgerät wechselwirkt. Die Wechselwirkung zwischen System und Messgerät legt die Art der Messung fest.

Wir betrachten hierfür ein einfaches Modell, definiert durch

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\rm S} + \mathcal{H}_{\rm M} + \mathcal{H}_{\rm SM}$$
  
$$\mathcal{H}_{\rm S} = \frac{\omega_0}{2} \sigma_z, \quad \text{System: Spin-}\frac{1}{2}, \text{ Energiedifferenz } \omega_0 \qquad (3.131)$$

$$\mathcal{H}_{\rm M} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$
, Messgerät: harmonischer Oszillator (3.132)

$$\mathcal{H}_{\rm SM} = g\sigma_z x$$
, Wechselwirkung. (3.133)

(andere und genauere Modelle sind möglich). Falls  $\sigma_z$  gemessen wird, ist die Messung wegen  $[\sigma_z, \mathcal{H}] = 0$  also QND. Falls  $\sigma_x$  gemessen wird, ist die Messung wegen  $[\sigma_x, \mathcal{H}] \neq 0$  also nicht QND. Die Wechselwirkung  $\mathcal{H}_{SM}$  beschreibt eine Verschiebung des Oszillators

um +gx, falls der Spin-Zustand  $|\uparrow\rangle$  ist, und eine Verschiebung des Oszillators um -gx, falls der Spin-Zustand  $|\downarrow\rangle$  ist, denn

$$\mathcal{H}_{\rm SM}|\uparrow\rangle = +gx|\uparrow\rangle, \quad \mathcal{H}_{\rm SM}|\downarrow\rangle = -gx|\downarrow\rangle. \tag{3.134}$$

Zur Zeit t = 0 sei das System im Spin-Zustand  $|\uparrow\rangle$  und das Messgerät, d.h. der Oszillator, im Grundzustand  $|n = 0\rangle$ . Der Gesamtzustand (System und Messgerät) ist dann

$$|\Psi(0)\rangle = |\uparrow\rangle \otimes |n=0\rangle. \tag{3.135}$$

Wegen  $\sigma_z |\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle$  läßt die Zeitentwicklung den Spin stets im Zustand  $|\uparrow\rangle$ .

Wir betrachten zur Vereinfachung einen langsamen Messprozess, bei dem die Wechselwirkung g(t) langsam *adiabatisch* hochgefahren wird, so daß

$$g(t=0) = 0, \quad g(t \to \infty) = g > 0.$$
 (3.136)

Dann ist der Hamiltonian  $\mathcal{H} = \mathcal{H}(t)$  zeitabhängig, und die Schrödingergleichung lautet

$$i\partial_t |\Psi(t)\rangle = \mathcal{H}|\Psi(t)\rangle$$
  
$$\rightsquigarrow i\partial_t \langle \uparrow |\Psi(t)\rangle = \left(\frac{\omega_0}{2} + \mathcal{H}_{\mathrm{M}} + g(t)x\right) \langle \uparrow |\Psi(t)\rangle, \qquad (3.137)$$

wobei  $\langle \uparrow | \Psi(t) \rangle$  der Oszillator-Anteil ist (der Spin bleibt immer im Zustand  $| \uparrow \rangle$ ). Der Grundzustand  $|GZ\rangle_{\mathcal{H}(t=0)}$  des Oszillator-Hamiltonians  $\mathcal{H}(t=0)$  wird in den Grundzustand  $|GZ\rangle_{\mathcal{H}(t=0)}$  des nach *links* (wegen +g(t)x) verschobenen Oszillator-Hamiltonians  $\mathcal{H}(t=\infty)$  überführt (*adiabatisches Theorem*, dazu mehr in Lehrbüchern). Es gilt insgesamt

$$|\uparrow\rangle \otimes |GZ\rangle_{\mathcal{H}(t=0)} \to |\uparrow\rangle \otimes |GZ\rangle_{\mathcal{H}(t=\infty)} = |\uparrow\rangle \otimes |z = -g\rangle.$$
(3.138)

Der Endzustand des Oszillators ist dann also der kohärente Zustand  $|z = -g\rangle$  in der Basis des unverschobenen Oszillators, vgl. Gl. (2.188). Entsprechend ist für einen Spin-Anfangszustand  $|\downarrow\rangle$  die Schrödingergleichung

$$i\partial_t |\Psi(t)\rangle = \mathcal{H}|\Psi(t)\rangle$$
  
$$\rightsquigarrow i\partial_t \langle \downarrow |\Psi(t)\rangle = \left(-\frac{\omega_0}{2} + \mathcal{H}_{\mathrm{M}} - g(t)x\right) \langle \downarrow |\Psi(t)\rangle, \qquad (3.139)$$

wobei jetzt  $\downarrow |\Psi(t)\rangle$  der Oszillator-Anteil ist (der Spin bleibt immer im Zustand  $|\downarrow\rangle\rangle$ ). Der Grundzustand  $|GZ\rangle_{\mathcal{H}(t=0)}$  des Oszillator-Hamiltonians  $\mathcal{H}(t=0)$  wird wieder in den Grundzustand  $|GZ\rangle_{\mathcal{H}(t=0)}$  des jetzt nach *rechts* (wegen -g(t)x) verschobenen Oszillator-Hamiltonians  $\mathcal{H}(t=\infty)$  überführt, d.h.

$$|\downarrow\rangle \otimes |GZ\rangle_{\mathcal{H}(t=0)} \to |\downarrow\rangle \otimes |GZ\rangle_{\mathcal{H}(t=\infty)} = |\downarrow\rangle \otimes |z=+g\rangle.$$
(3.140)

Die zwei Spinzustände des Systems sind somit mit den Endzuständen des 'Messgerätes' (Oszillator) korreliert. Diese Endzustände sind räumlich verschobene Wellenfunktionen, die bei hinreichend starker Verschiebung räumlich voneinander aufgelöst werden können. Solche Zustände nennt man auch Zeigerzustände (pointer states).

### 3.5.3 Messung und Verschränkung

Interessant ist jetzt die Messung einer Superposition: Sei der Spin-Anfangszustand

$$|\Psi_0\rangle \equiv \alpha |\uparrow\rangle_z + \beta |\downarrow\rangle_z \tag{3.141}$$

mit Normierung  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ . Das Projektionspostulat, das ja keine Aussage über den Ablauf des Messprozesses macht, gibt Wahrscheinlichkeit  $|\alpha|^2$  bzw.  $|\beta|^2$  für spin-up bzw. spin-down.

Wir wenden auf den Spin-Anfangszustand  $|\Psi_0\rangle$  unser adiabatisches Modell Gl. (3.131) an. Wegen der Linearität der Schrödingergleichung wird der Anfangszustand mit dieser Superposition dann folgendermaßen adiabatisch überführt:

$$(\alpha|\uparrow\rangle + \beta|\downarrow\rangle) \otimes |GZ\rangle_{\mathcal{H}(t=0)} \to \frac{1}{\sqrt{N}} (\alpha|\uparrow\rangle \otimes |z=-g\rangle + \beta|\downarrow\rangle \otimes |z=g\rangle). \quad (3.142)$$

Hierbei ist N ein Normierungsfaktor, denn die kohärenten Zustände  $|z = g\rangle$  und  $|z = -g\rangle$ sind nicht orthogonal (AUFGABE). Zur Zeit t = 0, also bevor die Messung beginnt, ist der Zustand des Systems durch die reduzierte Dichtematrix

$$\rho_{\rm S} = \operatorname{Tr}_{\rm osc} |\Psi_0\rangle \otimes |GZ\rangle_{\mathcal{H}(t=0)} \langle \Psi_0| \otimes \langle GZ|_{\mathcal{H}(t=0)} = |\Psi_0\rangle \langle \Psi_0|$$
$$= \begin{pmatrix} |\alpha|^2 & \alpha\beta^* \\ \alpha^*\beta & |\beta|^2 \end{pmatrix}$$
(3.143)

(reiner Zustand).

Der Endzustand des Systems hingegen ist nun nicht mehr in Spin- und Oszillator-Anteil separabel: durch den Messprozess sind Spin- (System-) und Oszillator- (Messgerät-) Anteil miteinander verschränkt worden, der Zustand ist ein verschränkter Zustand, vgl. unsere Definition in Gl. (3.104). Die reduzierte Dichtematrix des Systems (Spin) erhalten wir aus

$$\rho_{\rm S}^{\rm end} = \frac{1}{N} \operatorname{Tr}_{\rm osc} \left( \alpha \right| \uparrow \right) \otimes |z = -g\rangle + \beta |\downarrow\rangle \otimes |z = g\rangle \left( \alpha^* \langle \uparrow | \otimes \langle z = -g | + \beta^* \langle \downarrow | \otimes \langle z = g | \rangle \right) \\
= \frac{1}{N} \alpha \alpha^* \langle z = -g | z = -g \rangle |\uparrow\rangle \langle \uparrow | + \frac{1}{N} \beta \beta^* \langle z = g | z = g \rangle |\downarrow\rangle \langle \downarrow | \\
+ \frac{1}{N} \alpha \beta^* \langle z = g | z = -g \rangle |\uparrow\rangle \langle \downarrow | + \frac{1}{N} \beta \alpha^* \langle z = -g | z = g \rangle |\downarrow\rangle \langle \uparrow |.$$
(3.144)

Wenn g hinreichend groß ist, dann sind die Überlapp-Matrixelemente zwischen den nach links und nach rechts verschobenen Oszillator-Grundzuständen  $|z = \pm g\rangle$  exponentiell klein und der Normierungsfaktor  $N \approx 1$ . Die reduzierte Dichtematrix geht also durch den Messprozess über von  $\rho_{\rm S}$  in  $\rho_{\rm S}^{\rm end}$ ,

$$\rho_{\rm S} = \begin{pmatrix} |\alpha|^2 & \alpha\beta^* \\ \alpha^*\beta & |\beta|^2 \end{pmatrix} \to \rho_{\rm S}^{\rm end} \approx \begin{pmatrix} |\alpha|^2 & 0 \\ 0 & |\beta|^2 \end{pmatrix}$$
(3.145)

in der Spin-Basis in z-Richtung. Die Dichtematrix des Systems nach der Messung wird also durch einen gemischten Zustand beschrieben, der auf der Diagonalen die Wahrscheinlichkeiten  $|\alpha|^2$  bzw.  $|\beta|^2$  enthält, spin-up bzw. spin-down zu finden. Die Fourierkoeffizienten des zu messenen Zustands  $|\Psi_0\rangle$  erscheinen als Betragsquadrate auf den Diagonalen. Dieses Ergebnis ist also konsistent mit dem Projektionspostulat.

Weiterhin gilt für die Wahrscheinlichkeiten für spin-up in der z- und der x-Basis (Speziallfall  $\alpha = \beta = \frac{1}{2}$ .

$$w_{\uparrow,z}(\rho_{\rm S}) = \frac{1}{2} \rightarrow w_{\uparrow,z}(\rho_{\rm S}^{\rm end}) = \frac{1}{2},$$
 (3.146)

wie es sein sollte, denn es handelt sich ja um eine QND-Messung von  $\sigma_z$ . Dahingegen ist

$$w_{\uparrow,x}(\rho_{\rm S}) = 1 \rightarrow w_{\uparrow,x}(\rho_{\rm S}^{\rm end}) = \frac{1}{2},$$

$$(3.147)$$

d.h. der Wert der Observablen  $\sigma_x$  (spin-up in x-Richtung mit Wahrscheinlichkeit eins) wird durch die Messung zerstört (spin-up und down in x-Richtung werden gleichwahrscheinlich): Die Messung ist nicht QND bezüglich  $\sigma_x$ .

#### 3.5.4 Information und Kollaps

Die Dichtematrix  $\rho_S$  gibt die Wahrscheinlichkeiten für die zwei Möglichen Messwerte an und beschreibt den Zustand des Spins *vor* dem Ablesen der Messwerte, die man dann ja noch nicht kennt: Deshalb hat man ein Gemisch.

Sobald man das Messgerät abgelesen hat, weiss man, ob der Oszillator nach rechts bzw. links verschoben ist und hat damit den Spinzustand: entweder spin-up oder spindown. Das ist natürlich analog zur Stern-Gerlach-Apparatur. Nach der Messung ist der Spin also in einem der beiden *reinen* Zustände  $|\uparrow\rangle\langle\uparrow|$  oder  $|\downarrow\rangle\langle\downarrow|$ . Es gilt also

$$\rho_{\rm S} = \begin{pmatrix} |\alpha|^2 & 0\\ 0 & |\beta|^2 \end{pmatrix}, \quad \text{vor dem Ablesen}$$
(3.148)

$$\rho_{\rm S}^c = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{oder} \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \text{nach dem Ablesen} . \tag{3.149}$$

Der Zustand  $\rho_{\rm S}^c$  nach dem Ablesen ist *konditioniert* durch die Information, die man durch das Ablesen erhält. Der 'Kollaps' des Wellenpakets, der sich durch den Übergang  $\rho_{\rm S} \rightarrow \rho_{\rm S}^c$ ausdrückt, ist hiermit also letztlich in den Akt des 'Ablesens' verschoben worden. Man hat das zentrale 'Dilemma' der QM, d.h. die Frage, wo und wie der Kollaps passiert ('im Gehirn des Beobachters'?), durch die Dichte-Matrix und Messtheorie-Maschinerie soweit also auch nicht besser in den Griff bekommen. REBHAN benutzt den Begriff 'erste Reduktion' ( $\rho_{\rm S}$ ) und 'zweite Reduktion' ( $\rho_{\rm S}^c$ ), um die beiden Fälle in Gl. (3.148) voneinander abzugrenzen.

Die konditionierte Dichtematrix  $\rho_{\rm S}^c$ ,Gl. (3.148), kann man jetzt z.B. verwenden, um eine erneute Messung von  $\sigma_z$  durchzuführen: dabei wird sich nichts mehr am Messergebnis ändern, denn wegen der speziellen Wahl unseres QND- Messaufbaus bleibt ein Spin, der einmal im reinen Zustand  $|\uparrow, \mathbf{e}_z\rangle$  ist, für immer in diesem Zustand (entsprechend für  $|\downarrow, \mathbf{e}_z\rangle$ ). Die Messung ändert nichts mehr am Zustand.

Anders ist das mit einem Spin im Zustand  $|\uparrow, \mathbf{e}_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow, \mathbf{e}_z\rangle + |\downarrow, \mathbf{e}_z\rangle)$ , d.h. ein Spin-up in *x*-Richtung, der unserem Anfangszustand in Gl. (3.142) mit  $\alpha = \beta = \frac{1}{\sqrt{2}}$ entspricht: wie wir gesehen haben, geht dieser Zustand durch die Messung in das Gemisch  $\rho_S$  über: die Messung ändert den Zustand drastisch. In beiden Fällen handelt es sich um eine QND-Messung, aber je nach 'hineingestecktem' Anfangszustand beeinflußt die Messung diesen Zustand oder nicht. Die QND-*Observable*  $\sigma_z$  hingegen ändert sich nicht durch die Messung, es gilt z.B. für den Erwartungswert

$$\langle \sigma_z \rangle_t = \text{const}, \quad \text{für alle Zeiten } t.$$
 (3.150)

Wenn wir statt  $\sigma_z$  nun  $\sigma_x$  messen, handelt es sich nicht mehr um eine QND Messung wegen  $[\mathcal{H}, \sigma_x] \neq 0$ . Für den Anfangszustand  $|\uparrow, \mathbf{e}_x\rangle$  gilt z.B.  $\langle \sigma_x \rangle_{t=0} = 1$ , wohingegen  $\langle \sigma_x \rangle_{t=\infty} = 0$ .

# 3.6 Verschränkung

Wir diskutieren im Folgenden eine der erstaunlichsten Folgerungen aus der Quantentheorie: das Auftreten von Korrelationen zwischen Messergebnissen bei Messungen, die mit verschränkten Zuständen durchgeführt werden. Diese Korrelationen sind nicht-lokal und treten z.B. auch für Beobachter auf, die Lichtjahre weit voneinander entfernt sind. Sie sind rein quantenmechanischer Natur und können in einer klassischen Theorie nicht erklärt werden.

#### 3.6.1 Korrelationen in Spin-Singlett-Zuständen

(Literatur: J. J. SAKURAI "Modern Quantum Mechanics", Benjamin 1985). Wir gehen von zwei Spin- $\frac{1}{2}$ -Zuständen aus, die auf zwei Teilchen A und B lokalisiert sind. Bei den Teilchen kann es sich z.B. um Elektronen handeln, die zunächst zusammengeführt werden. Wir interessieren uns im Folgenden nur für den Spinanteil der gesamten Wellenfunktion der zwei Teilchen. Die beiden Spins sollen z.B. in einem Singlett-Zustand

$$|S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow, \hat{z}\rangle_A \otimes |\downarrow, \hat{z}\rangle_B - |\downarrow, \hat{z}\rangle_A \otimes |\uparrow, \hat{z}\rangle_B\right)$$
(3.151)

(Vorlesung Atom- und Molekülphysik) präpariert werden. Die Teilchen (Elektronen) A und B werden jetzt getrennt, dabei sollen die Spinfreiheitsgrade vollständig unverändert bleiben. Diese Art von Präparation ist i.a. nicht ganz einfach, aber prinzipiell möglich. Anstelle des Spin-Freiheitsgrades der Elektronen kann man auch den *Polarisations-Freiheitsgrad von Photonen* benutzten: mit Photonen sind in der Tat auch die ersten Experimente zum Nachweis der Verschränkung durchgeführt worden (A. Aspect). Statt des Freiheitsgrades 'Spin' hat man dann gewissermassen einen 'Pseudo-Spin', der aber nach wie vor in einem zweidimensionalen Hilbertraum beschrieben werden kann. Wir wollen im Folgenden der Anschaulichkeit halber mit 'richtigen' Spins weitermachen, die wir z.B. mit einer Stern-Gerlach-Apparatur messen können.

Zwei Beobachter A (Alice) und B (Bob) sollen nun jeweils ihr Teilchen A und B mit sich nehmen und sich dann weit voneinander entfernen. Die räumliche Wellenfunktionen der Teilchen entfernen sich dann natürlich ebenso voneinander. Der Spinanteil hingegen lebt ja in seinem eigenen Spin-Hilbertraum,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B = \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2 \tag{3.152}$$

und wird durch die räumliche Trennung der beiden Teilchen nicht beeinflußt.

Die beiden Spins sind miteinander verschränkt: die Bobs und Alices reduzierte Dichtematrizen sind gemischte Zustände, wir können leicht nachrechnen, dass

$$\rho_B = \operatorname{Tr}_A|S\rangle\langle S| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0\\ 0 & 1 \end{pmatrix}_B, \quad \rho_A = \operatorname{Tr}_B|S\rangle\langle S| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0\\ 0 & 1 \end{pmatrix}_A, \quad (3.153)$$

d.h. jeder der beiden hat für seinen Spin einen maximal gemischten Zustand vorliegen. Wir wissen bereits, dass z.B. Bob bei einer Messung mit einer Stern-Gerlach-Apparatur mit gleicher Wahrscheinlichkeit  $\frac{1}{2}$  spin-up und spin-down findet, und zwar für beliebige Richtung **n** der Apparatur - keine Spin-Richtung ist ausgezeichnet. Wir nehmen jetzt an , dass A und B viele Exemplare gleichartig präparierter Spins vorliegen haben. Dann findet Bob z.B. bei jeder Messung stets eine zufällige Folge von spin-ups oder spin-downs, und das unabhängig von der Richtung **n**. Dennoch sind die Messergebnisse, die Bob findet, *nicht* unabhängig von dem, was Alice mit ihren Spins tut. Dazu betrachten wir folgende Messung:

• A misst ihren Spin in  $\hat{z}$ -Richtung. Der Gesamtzustand Gl. (3.151), der ja eine Superposition von zwei Anteilen ist, muss dann kollabieren ('Reduktion des Wellenpakets'). Findet A z.B. spin-up  $|\uparrow, \hat{z}\rangle_A$ , so wird der Spin-Zustand Gl. (3.151) auf den Anteil mit 'spin-up' für Alice projiziert, d.h.

$$|S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow, \hat{z}\rangle_A \otimes |\downarrow, \hat{z}\rangle_B - |\downarrow, \hat{z}\rangle_A \otimes |\uparrow, \hat{z}\rangle_B\right) \to |\uparrow, \hat{z}\rangle_A \otimes |\downarrow, \hat{z}\rangle_B, \quad (3.154)$$

und damit ist der Gesamtzustand separiert und Bobs Spin-Anteil festgelegt, d.h. Bob muss bei Messung in  $\hat{z}$ -Richtung  $|\downarrow, \hat{z}\rangle_B$  messen. Natürlich läßt sich nicht vorausssagen, ob Alice spin-up oder down messen wird. Wir wissen aber, daß Bob immer 'das Gegenteil' von Alices Ergebnis finden wird.

Bis hierher ist das noch nicht besonders aufregend, denn es geht noch nicht über die klassische Physik hinaus: wir vergleichen hierzu mit einem einfachen klassisches Experiment, analog zu dem quantenmechanischen oben, bei dem sich eine weisse ('spin up') und eine schwarze ('spin down') Kugel zunächst in einem gemeinsamen Kasten befinden und dann 'ohne hinzusehen' in Einzelkästen getrennt von A und B weggeschleppt werden: wenn A ihren Kasten öffnet, weiss sie, was B hat und umgekehrt! Das Interessante an dem *quantenmechanischen* Fall mit dem Zustand Gl. (3.151) ist nun aber, daß Alice und Bob eine beliebige, für beide gleiche Richtung **n** festlegen können und dann genau das Gleiche passiert: A findet immer das Gegenteil von dem, was B misst. Mathematisch sieht man das an der Darstellung

$$|\uparrow, \hat{n}\rangle = \cos\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2}|\uparrow, \hat{z}\rangle + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2}|\downarrow, \hat{z}\rangle$$
  
$$|\downarrow, \hat{n}\rangle = -\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2}|\uparrow, \hat{z}\rangle + \cos\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2}|\downarrow, \hat{z}\rangle.$$
(3.155)

Aus dieser Darstellung folgt nämlich

$$\begin{split} |\uparrow, \hat{n}\rangle|\downarrow, \hat{n}\rangle - |\downarrow, \hat{n}\rangle|\uparrow, \hat{n}\rangle &= \\ (\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2}|\uparrow\rangle + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2}|\downarrow\rangle)(-\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2}|\uparrow\rangle + \cos\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2}|\downarrow\rangle) \\ - (-\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2}|\uparrow\rangle + \cos\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2}|\downarrow\rangle)(\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2}|\uparrow\rangle + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2}|\downarrow\rangle) \\ &= (\cos^{2}\frac{\theta}{2} + \sin^{2}\frac{\theta}{2})|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle - (\cos^{2}\frac{\theta}{2} + \sin^{2}\frac{\theta}{2})|\downarrow\rangle|\uparrow\rangle \\ &= |\uparrow\rangle_{z}|\downarrow\rangle_{z} - |\downarrow\rangle_{z}|\uparrow\rangle_{z}, \end{split}$$
(3.156)

d.h. der Zustand Gl. (3.151) hat in jeder Basis bzgl. einer festgelegten Richtung **n** die gleiche Form, er ist isotrop im Raum der Spins. Im Beispiel der zwei klassischen Kugeln hieße das, daß man nicht nur ein 'Farbpaar' weiss-schwarz, sondern beliebig viele 'gegenteilige Farbpaare' bekäme, je nach Messrichtung.

Messen beide Beobachter nun andererseits in *verschiedenen* Richtungen, so kann man z.B. folgendes bekommen:

 A misst ihren Spin in *ẑ*-Richtung. Bob misst in *x̂*-Richtung und bekommt up oder down mit je Wahrscheinlichkeit 1/2, völlig unabhängig von A's Resultat. Denn die Zustände | ↑, *ẑ*⟩<sub>B</sub>, | ↓, *ẑ*⟩<sub>B</sub> haben ja, geschrieben in der *x*-Basis, jeweils die gleichen Amplituden für spin-up und down in *x*-Richtung.

Zusammenfassend finden wir also, daß Bobs Messergebnisse davon abhängen, wie und ob Alice misst. Die Resultate von Bobs und Alices Messungen sind jeweils eine zufällige Folge von ups oder downs: in beiden Fällen werden die Resultate der Messungen durch die jeweilige reduzierte Dichtematrix  $\rho_{A/B}$  bestimmt, die ja keinerlei Präferenz für up oder down oder für eine bestimmte Richtung aufweist. Wenn Alice gemessen hat, ist die reduzierte Dichtematrix für Bob das gleiche  $\rho_A = \frac{1}{2}\hat{1}$ , denn er kennt ja Alices Messergebnis nicht und weiss nur, daß beide Ergebnisse die gleiche Wahrscheinlichkeit  $\frac{1}{2}$  haben. Wenn A und B 10000 Exemplare vom Spinzustand  $|S\rangle$  haben, wird B bei seinen Messungen (egal in welche Richtung) also immer nur eine zufällige Folge von up oder down finden, und A genauso. Erst wenn sich die beiden zusammensetzen und ihre Messergebnisse vergleichen, werden sie Korrelationen zwischen ihren Messwerten finden.

Das Unbehagen an diesem Phänomen liegt jetzt an Folgendem: Es läßt sich zwar keine Information (schon gar nicht mit Überlichtgeschwindigkeit) durch diese Messungen (und die damit verbundenen Kollapse der Gesamtwellenfunktion) übertragen. Die Messergebnisse in jedem einzelnen der beiden Systeme sind ja immer nur eine Folge zufälliger Werte. Der Kollaps der Gesamtwellenfunktion allerdings geschieht instantan, und damit wird durch die Geschehnisse (Messungen) im System A instantan festgelegt, was in B passiert! Alice kollabiert durch ihre Messung den Gesamtzustand des Spins und präpariert damit den Zustand in Bobs System, obwohl beide so weit voneinander räumlich entfernt sein können, dass sie sich *raumartig voneinander getrennt* befinden.

Obwohl sich hieraus also *kein* Widerspruch zur Relativitätstheorie ergibt, war z.B. Albert Einstein war mit dieser Tatsache unzufrieden und forderte

**Definition** "Einstein-Lokalität": Für ein EPR-Paar sollte die 'gesamte Physik' in B nur lokal durch den Spin B gegeben sein und z.B nicht davon abhängen, was in A passiert (z.B. davon, was und ob A misst). Eine vollständige Beschreibung der Physik in B sollte ergeben, dass der Spin B nicht mehr mit Spin A korreliert ist.

Nach diesem Kriterium ist die Quantenmechanik eine unvollständige Beschreibung der Natur.

**Definition** Ein Paar zweier verschränkter Spins wie in Gl. (3.151) heisst **Einstein-Podolsky-Rosen (EPR)**-Paar (benannt nach einer berühmten Veröffentlichung hierzu). <sup>2</sup>.

Versteckte-Variablen-Theorien versuchen, hier einen Ausweg zu finden:

**Definition** "Versteckte-Variablen-Theorie für Spin": Ein Spin  $\uparrow$  in  $\hat{n}$ -Richtung wird in Wirklichkeit durch einen Zustand  $|\uparrow \hat{n}, \{\lambda\}\rangle$  beschrieben, wobei  $\{\lambda\}$  uns noch unbekannte Parameter sind. Wäre  $\{\lambda\}$  bekannt, so wären alle Messwerte des Spins deterministisch. Weil  $\{\lambda\}$  unbekannt ist, erhalten wir in der QM zufällige Messwerte.

Es gibt jetzt allerdings Ungleichungen, mit denen Versteckte-Variablen-Theorien experimentell getestet werden können (Bellsche Ungleichungen).

## 3.6.2 Bellsche Ungleichungen

Wir diskutieren hier eine Variante für unser Spin-Singlett  $|S\rangle$ : Alice misst ihren Spin in  $\hat{n}$ -Richtung. Erhält sie  $|\downarrow, \hat{n}\rangle_A$ , so ist Bobs Spin im Zustand  $|\uparrow, \hat{n}\rangle_B$ , wobei

$$|\uparrow, \hat{n}\rangle_{B} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2} \\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2} \end{pmatrix} = \cos\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2}|\uparrow, \hat{z}\rangle_{B} + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2}|\downarrow, \hat{z}\rangle_{B}$$
(3.157)

vgl. Gl.(2.383). Misst Bob seinen Spin in  $\hat{z}$ -Richtung, so findet er up mit Wahrscheinlichkeit  $\cos^2 \frac{\theta}{2}$  und down mit Wahrscheinlichkeit  $\sin^2 \frac{\theta}{2}$ , es gilt also

$$W(\downarrow_A,\downarrow_B) = W(\uparrow_A,\uparrow_B) = \frac{1}{2}\sin^2\frac{\theta}{2}$$
(3.158)

$$W(\downarrow_A,\uparrow_B) = W(\uparrow_A,\downarrow_B) = \frac{1}{2}\cos^2\frac{\theta}{2}, \qquad (3.159)$$

Population	Particle 1	Particle 2
N	$(\hat{a} + , \hat{b} + , \hat{c} +)$	$(\hat{a} - , \hat{b} - , \hat{c} - )$
$N_1$	$(\hat{a} + , \hat{b} + , \hat{c} -)$	$(\hat{a} - , \hat{b} - , \hat{c} + )$
$N_3$	$(\hat{a}+,\hat{b}-,\hat{c}+)$	$(\hat{a} - , \hat{b} + , \hat{c} - )$
N <sub>4</sub>	$(\hat{a} + , \hat{b} - , \hat{c} -)$	$(\hat{a} - , b + , \hat{c} +)$
$N_5$	$(\hat{a}-,b+,\hat{c}+)$	(a+,b-,c-)
$N_6$	$(\hat{\mathbf{a}}-,\mathbf{b}+,\hat{\mathbf{c}}-)$	(a+,b-,c+)
N <sub>7</sub>	(a-, b-, c+) (a-, b-, c-)	$(\hat{a} + \hat{b} + \hat{c} + \hat{c})$
/N <sub>8</sub>	(a-,0,,C)	( ) )

**TABLE 3.2.** Spin-component Matching in the Alternative Theories

Fig. 3.1: (Aus Sakurai, 'Modern Quantum Mechanics')

wobei der Faktor 1/2 die Wahrscheinlichkeit ist, dass Alice up (bzw. down) misst.

Wie wären die entsprechenden Wahrscheinlichkeiten in einer Versteckte-Variablen-Theorie? Alice und Bob mögen ihren Spin in insgesamt einer der drei Richtungen  $\hat{a}$ ,  $\hat{b}$ ,  $\hat{c}$ messen. Versteckte Variablen legen fest, ob dabei + (Spin up) oder – (Spin down) herauskommt. Die Variablen sind unbekannt, man kann aber eine Einteilung in 8 Zustände vornehmen. In jedem dieser 8 Zustände ist das Messergebnis festgelegt, wir wissen aber nicht, welchen der 8 wir messen (siehe Figur). Hier treten 8 relative Häufigkeiten

$$p_i \equiv \frac{N_i}{\sum_{i=1}^8 N_i}, \quad 0 \le p_i \le 1, \quad i = 1, ..., 8.$$
 (3.160)

auf. Wenn das Gesamtsystem z.B. im Zustand 3 ist, erhält Alice (particle 1) bei Messung in einer von ihr gewählten Richtung immer einen Wert (z.B. + für  $\hat{a}$ ), der unabhängig davon ist, was Bob macht.

Wir können jetzt Wahrscheinlichkeiten  $P(\hat{a}+;\hat{b}+)$  etc. angeben, z.B.

$$P(\hat{a}+;b+) = p_3 + p_4 \tag{3.161}$$

durch Nachschauen in der Tabelle. Entsprechend

$$P(\hat{a}+;\hat{c}+) = p_2 + p_4, \quad P(\hat{c}+;\hat{b}+) = p_3 + p_7.$$
(3.162)

Wegen  $p_i \ge 0$  gilt trivialerweise  $p_3 + p_4 \le p_3 + p_4 + p_2 + p_7$  oder

$$P(\hat{a}+;\hat{b}+) \le P(\hat{a}+;\hat{c}+) + P(\hat{c}+;\hat{b}+).$$
(3.163)

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Phys. Rev. **47**, 777 (1935).

Das ist bereits eine Form der Bellschen Ungleichungen. Wir vergleichen nun mit der quantenmechanischen Vorhersage:  $P(\hat{a}+;\hat{b}+)$  entspricht  $W(\uparrow \hat{a}+;\uparrow \hat{b}+) = \frac{1}{2}\sin^2\frac{\theta_{ab}}{2}$ , wobei  $\theta_{ab}$  der Winkel zwischen  $\hat{a}$  und  $\hat{b}$  ist. Wir zeigen nun: die quantenmechanischen (gemeinsamen) Wahrscheinlichkeiten  $W(\uparrow \hat{a}+;\uparrow \hat{b}+)$  verletzen die Bellschen Ungleichungen, GL. (3.163). Es reicht, das mit einer bestimmten Wahl der Achsen  $\hat{a}, \hat{b}, \hat{c}$  zu zeigen:  $\hat{c}$  symmetrisch zwischen  $\hat{a}$  und  $\hat{b}$ ,

$$\theta = \theta_{ac} = \theta_{cb}, \quad \theta_{ab} = 2\theta. \tag{3.164}$$

Mit P = W hätte man

$$W(\uparrow \hat{a}+;\uparrow \hat{b}+) \leq W(\uparrow \hat{a}+;\uparrow \hat{c}+) + W(\uparrow \hat{c}+;\uparrow \hat{b}+)$$
  

$$\leftrightarrow \frac{1}{2}\sin^{2}\frac{\theta_{ab}}{2} \leq \frac{1}{2}\sin^{2}\frac{\theta_{ac}}{2} + \frac{1}{2}\sin^{2}\frac{\theta_{cb}}{2}$$
  

$$\leftrightarrow \sin^{2}\theta \leq = 2\sin^{2}\frac{\theta}{2} \quad \text{Widerspruch} \quad (3.165)$$

Widerspruch z.B. für  $\theta = \frac{\pi}{3}$ ,

$$\theta = \frac{\pi}{3} \quad \rightsquigarrow \quad \sin \theta = \frac{\sqrt{3}}{2}, \quad \sin^2 \theta = \frac{3}{4}$$
$$\quad \rightsquigarrow \quad \sin \frac{\theta}{2} = \frac{1}{2}, \quad 2\sin^2 \frac{\theta}{2} = \frac{1}{2}. \tag{3.166}$$

Daraus folgt, das die Quantenmechanik nicht mit den Bellschen Ungleichungen vereinbar ist. Die Bellschen Ungleichungen können andererseits experimentell überprüft werden; bisher fand man stets eine Verletzung der Bellschen Ungleichungen (erste Experimente mit Photonen: A. Aspect, 80er Jahre), also keinen Widerspruch zur Quantenmechanik.

Es erscheint erstaunlich, dass sich so tiefe Fragen wie Lokalität, versteckte Variablen, Verschränkung etc. auf eine so triviale mathematische Ungleichung wie Gl. (3.166) kondensieren lassen - das zeigt aber eben auch den Erfolg der naturwissenschaftlichen Vorgehensweise<sup>3</sup>. Weitere Literatur: NIELSEN/CHUANG. Zur BOHMSCHEN Quantenmechanik siehe weiter unten.

Weitere Anwendungen wie Teleportation etc.: Seminarvorträge bzw. NIELSEN/CHUANG oder andere Lehrbücher.

## 3.7 Zeitunabhängige Störungstheorie

Gegeben sei ein Hamiltonian

$$H = H_0 + H_1 \tag{3.167}$$

in Hilbertraum  $\mathcal{H}$  mit diskretem Spektrum. Das Eigenwertproblem von  $H_0$  sei bereits gelöst,

$$H_0|i,\nu\rangle = \varepsilon_i|i,\nu\rangle, \quad i = 1, 2, ...; \quad \nu = 1, 2, ..., d_i,$$
(3.168)

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> vgl. hierzu auch den Artikel von R. P. Feynman, 'Simulating Physics with Computers', Int. J. Theor. Phys. **21**, 467 (1982).

wobei  $d_i$  die Entartung des *i*-ten Eigenwertes sei. Die Kets  $|i, \nu\rangle$  seien ein VOS in  $\mathcal{H}$  mit

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2 \oplus \mathcal{H}_3..., \tag{3.169}$$

also einer Zerlegung in orthogonale Teilräume zu den Eigenwerten  $\varepsilon_i$ .

Aufgabe: Lösung des Eigenwertproblems

$$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle. \tag{3.170}$$

in  $\mathcal{H}$ . Idee: wir betrachten  $H_1$  als 'kleine Störung' von  $H_0$ , die zu einer 'kleinen Änderung' der  $\varepsilon_i$  und  $|i, \nu\rangle$  führt.

#### 3.7.1 Projektor-Methode

Lit.: SCHERZ. Wir wollen die durch  $H_1$ verursachte Korrektur der Energie $\varepsilon_b \neq 0$ bestimmen. Wir haben also

$$H_0|b\nu\rangle = \varepsilon_b|b\nu\rangle, \quad \nu = 1, 2, ..., d$$

$$(3.171)$$

mit dem *d*-fach entarteten, bekannten Eigenwert  $\varepsilon_b$  im Teilraum  $\mathcal{H}_b$ , der von den bekannten  $|b\nu\rangle$  aufgespannt wird. Alles Folgende bezieht sich auf diesen festen Teilraum und die feste Energie  $\varepsilon_b$ .

Von der Eigenwertgleichung  $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$  ziehen wir auf beiden Seiten die bekannte Energie  $\varepsilon_b$  ab,

$$(\underbrace{H_0 - \varepsilon_b \hat{1}}_{\equiv h_0} + H_1) |\Psi\rangle = (\underbrace{E - \varepsilon_b}_{\equiv \varepsilon}) |\Psi\rangle, \qquad (3.172)$$

erhalten also

$$h_0|\Psi\rangle = (\varepsilon - H_1)|\Psi\rangle.$$
 (3.173)

Diese Gleichung möchte man gerne iterativ lösen, indem man umschreibt

$$|\Psi\rangle = R_0(\varepsilon - H_1)|\Psi\rangle = R_0(\varepsilon - H_1)R_0(\varepsilon - H_1)|\Psi\rangle = ..., \qquad (3.174)$$

die linke Seite immer wieder in die rechte Seite einsetzt und dann nach Potenzen des Störoperators  $H_1$  sortiert. Die dabei auftretende **Resolvente**  $R_0$  wäre naiv gesehen einfach das Inverse von  $h_0 = H_0 - \varepsilon_b$ ; dieses Inverse existiert so aber nicht, denn  $h_0$  gibt auf den Zuständen im Unterraum  $\mathcal{H}_b$  ja Null!

Der Trick besteht jetzt darin, gerade diese 'gefährlichen' Anteile aus der Gleichung 'herauszuprojizieren'. Das geschieht folgendermaßen: Wir definieren einen Projektor Pauf den Unterraum  $\mathcal{H}_b$  und sein Komplement  $Q \equiv 1 - P$  mit folgenden Eigenschaften,

$$P \equiv \sum_{\nu=1}^{d} |b\nu\rangle \langle b\nu|, \quad Q \equiv 1 - P, \quad PQ = QP = 0$$
(3.175)

Es gilt (AUFGABE)

$$[H_0, P] = [h_0, P] = [H_0, Q] = [h_0, Q] = 0.$$
(3.176)

Deshalb folgt aus Gl. (3.173) und  $[h_0, Q] = 0$ 

$$h_0 Q |\Psi\rangle = Q h_0 |\Psi\rangle = Q(\varepsilon - H_1) |\Psi\rangle.$$
(3.177)

Der Operator  $h_0$  lässt sich jetzt im Teilraum  $\mathcal{H} \ominus \mathcal{H}_b$  invertieren,

$$h_0^{-1} = \frac{1}{H_0 - \varepsilon_b} = -\frac{1}{\varepsilon_b} \frac{1}{1 - \frac{H_0}{\varepsilon_b}}$$
(3.178)

(formale Potenzreihe wie bei geometrischer Reihe): würde man  $h_0^{-1}$  auf einen Vektor aus  $\mathcal{H}_b$  loslassen, würde man durch Null teilen und die Inverse wäre nicht definiert, für alle anderen Vektoren aus  $\mathcal{H} \ominus \mathcal{H}_b$  ist die Inverse ist definiert - solche Vektoren sind genau von der Form  $Q|\Psi\rangle$ . Damit folgt aus Gl. (3.177)

$$Q|\Psi\rangle = h_0^{-1}Q(\varepsilon - H_1)|\Psi\rangle \rightsquigarrow Q|\Psi\rangle = R(\varepsilon_b)(\varepsilon - H_1)|\Psi\rangle$$
(3.179)

$$R(\varepsilon_b) \equiv Q \frac{1}{H_0 - \varepsilon_b} Q$$
, Resolvente (Pseudo-Inverse). (3.180)

Hierbei haben wir auch von links Q heranmultipliziert, um sicherzustellen, dass auch die Operation auf Dirac-Bras definiert ist, z.B.  $\langle \Psi | Q h_0^{-1} Q$ .

Im letzten Schritt schreiben wir jetzt noch um,

$$Q|\Psi\rangle = R(\varepsilon_b)(\varepsilon - H_1)|\Psi\rangle$$
  

$$\rightsquigarrow |\Psi\rangle = P|\Psi\rangle + R(\varepsilon_b)(\varepsilon - H_1)|\Psi\rangle$$
  

$$= P|\Psi\rangle + R(\varepsilon_b)(\varepsilon - H_1) [P|\Psi\rangle + R(\varepsilon_b)(\varepsilon - H_1)|\Psi\rangle]$$
  

$$= \sum_{n=0}^{\infty} [R(\varepsilon_b)(\varepsilon - H_1)]^n P|\Psi\rangle.$$
(3.181)

Bis hierhin ist zwar alles nur eine formal exakte Umformung, Gl. (3.181) ist aber der Ausgangspunkt für eine mathematisch sinnvolle Störungsentwicklung.

### 3.7.2 Auswertung für die Eigenwerte

Wir wenden den Projektor P auf die umgestellte Ausgangsgleichung Gl. (3.173)

$$\varepsilon |\Psi\rangle = (h_0 + H_1)|\Psi\rangle \tag{3.182}$$

an und erhalten

$$\varepsilon P|\Psi\rangle = P(h_0 + H_1)|\Psi\rangle = h_0 P|\Psi\rangle + PH_1|\Psi\rangle = PH_1|\Psi\rangle, \qquad (3.183)$$

denn  $P|\Psi\rangle$  liegt ja in  $\mathcal{H}_b$  und wird deshalb von  $h_0 \equiv H_0 - \varepsilon_b 1$  annulliert. Damit hat man

$$\varepsilon P|\Psi\rangle = PH_1 \sum_{n=0}^{\infty} \left[ R(\varepsilon_b)(\varepsilon - H_1) \right]^n P|\Psi\rangle.$$
(3.184)

Die Energie-Korrektur $\varepsilon$ schreiben wir jetzt als

$$\varepsilon = \varepsilon^{(1)} + \varepsilon^{(2)} + \varepsilon^{(3)} + \dots, \qquad (3.185)$$

wobei der Korrektur-Anteil  $\varepsilon^{(i)}$  von der Ordnung  $O(H_1)$  sein soll. Formal kann man auch eine Taylor-Reihe ansetzen

$$H = H_0 + \lambda H_1, \quad \varepsilon = \lambda \varepsilon^{(1)} + \lambda^2 \varepsilon^{(2)} + \lambda^3 \varepsilon^{(3)} + \dots$$
(3.186)

und Koeffizientenvergleich in Potenzen von  $\lambda$  machen.

# 3.7.2.1 Erste Ordnung Störungstheorie: Energien

In niedrigster (erster) Ordnung in  $H_1(\lambda)$  erhält man

$$\varepsilon^{(1)}P|\Psi\rangle = PH_1P|\Psi\rangle$$
 (3.187)

$$\sum_{\nu=1}^{d} |b\nu\rangle \langle b\nu| \left[ H_1 \sum_{\nu'=1}^{d} |b\nu'\rangle \langle b\nu'| - \varepsilon^{(1)} \right] |\Psi\rangle = 0$$
(3.188)

$$\sum_{\nu'=1}^{d} \langle b\mu | H_1 | b\nu' \rangle \langle b\nu' | \Psi \rangle - \varepsilon^{(1)} \langle b\mu | \Psi \rangle = 0, \qquad (3.189)$$

wobei wir im letzten Schritt mit  $\langle b\mu |$  skalar von links multipliziert haben. Wir erhalten also eine Eigenwertgleichung im Unterraum  $\mathcal{H}_b$  für die Hermitesche d mal d Matrix  $PH_1P$ , deren Lösung d Eigenwerte  $\varepsilon^{(1)}$  und d Eigenvektoren  $|\Psi\rangle$  liefert.

Im Spezialfall d = 1 (keine Entartung) hat man einfach

$$\langle b|H_1|b\rangle\langle b|\Psi\rangle - \varepsilon^{(1)}\langle b|\Psi\rangle = 0, \qquad (3.190)$$

was auf das außerordentlich wichtige Resultat (PRÜFUNG!)

$$\varepsilon^{(1)} = \langle b|H_1|b\rangle, \quad 1. \text{ Ordnung Störungstheorie ohne Entartung}$$
(3.191)

führt. Die ungestörte Energie  $\varepsilon_b$  zum ungestörten Zustand  $|b\rangle$  verschiebt sich also um das Diagonalmatrixelement des Störoperators,

$$\varepsilon_b \to \varepsilon_b + \langle b | H_1 | b \rangle,$$
 (3.192)

der Eigenwert wird verschoben. Im Fall d > 1 wird die *d*-fache Entartung des Eigenwerts  $\varepsilon_b$  ganz oder nur teilweise aufgehoben,

$$\varepsilon_b \to \varepsilon_b + \varepsilon_{\nu}^{(1)}, \nu = 1, 2, ..., d,$$

$$(3.193)$$

wobei die Anzahl der Lösungen  $\varepsilon^{(1)}$  von der Stör-Matrix  $PH_1P$  abhängt: 'die Linie spaltet auf'.

# 3.7.2.2 Zweite Ordnung Störungstheorie: Energien

In zweiter Ordnung in  $H_1(\lambda)$  erhält man

$$(\varepsilon^{(1)} + \varepsilon^{(2)} + ...)P|\Psi\rangle = PH_1P|\Psi\rangle + PH_1 \left[ R(\varepsilon_b)(\varepsilon^{(1)} + \varepsilon^{(2)} + .... - H_1) \right] P|\Psi\rangle$$
  
 
$$\sim (\varepsilon^{(1)} + \varepsilon^{(2)})P|\Psi\rangle = PH_1P|\Psi\rangle - PH_1R(\varepsilon_b)H_1P|\Psi\rangle.$$
 (3.194)

Man beachte, dass in der letzten Gleichung auf der rechten Seite die Skalare $\varepsilon^{(1)}+\varepsilon^{(2)}+\dots$ wegen

$$R(\varepsilon_b)P = Q \frac{1}{H_0 - \varepsilon_b} QP = 0$$
(3.195)

wegfallen, denn QP = 0. Man hat also für die zweite Ordnung analog zur ersten Ordnung  $\varepsilon^{(2)}P|\Psi\rangle = -PH_1R(\varepsilon_b)H_1P|\Psi\rangle (3.196)$ 

$$\rightarrow -\sum_{\nu=1}^{a} \langle b\mu | H_1 R(\varepsilon_b) H_1 | b\nu \rangle \langle b\nu | \Psi \rangle - \varepsilon^{(2)} \langle b\mu | \Psi \rangle = 0,$$
 (3.197)

die zweite Korrektur ist i. A. also wieder aus der Lösung eines d mal d Eigenwertproblems zu erhalten. Explizit hat man für die entsprechend zu diagonalisierende Matrix

$$-H_1 R(\varepsilon_b) H_1 = -H_1 Q \frac{1}{H_0 - \varepsilon_b} Q \sum_i \sum_{\nu=1}^{d_i} |i\nu\rangle \langle i\nu| H_1$$
(3.198)

$$= -H_1 Q \frac{1}{H_0 - \varepsilon_b} \sum_{i \neq b} \sum_{\nu=1}^{d_i} |i\nu\rangle \langle i\nu| H_1$$
(3.199)

$$= -H_1 Q \frac{1}{\varepsilon_i - \varepsilon_b} \sum_{i \neq b} \sum_{\nu=1}^{d_i} |i\nu\rangle \langle i\nu| H_1$$
(3.200)

$$= \sum_{i \neq b} \sum_{\nu=1}^{d_i} \frac{H_1 |i\nu\rangle \langle i\nu| H_1}{\varepsilon_b - \varepsilon_i}.$$
(3.201)

(3.202)

Im Fall d = 1 (keine Entartung) wird das wesentlich übersichtlicher: man bekommt

$$\sum_{i \neq b} \langle b | \frac{H_1 | i \rangle \langle i | H_1}{\varepsilon_b - \varepsilon_i} | b \rangle \langle b | \Psi \rangle - \varepsilon^{(2)} \langle b | \Psi \rangle = 0$$
(3.203)

$$\rightsquigarrow \varepsilon^{(2)} = \sum_{i \neq b} \frac{\langle b | H_1 | i \rangle \langle i | H_1 | b \rangle}{\varepsilon_b - \varepsilon_i} = \sum_{i \neq b} \frac{|\langle b | H_1 | i \rangle|^2}{\varepsilon_b - \varepsilon_i}.$$
 (3.204)

Dieses ist wiederum ein wichtiges Resultat. Insbesondere sieht man: ist die ungestörte Energie  $\varepsilon_b$  die Grundzustandsenergie, so führt der Term zweiter Ordnung in der Störungstheorie zu einer negativen Korrektur, d.h. zu einer Absenkung der Energie. Das ist insbesondere dann wichtig, wenn z.B. durch Auswahlregeln der Term erster Ordnung Null ist.

#### 3.7.3 Auswertung für die Zustände

Wir betrachten wiederum einen *d*-fach entarteten Eigenwert  $\varepsilon_b$  von  $H_0$ ,  $H_0|b\nu\rangle = \varepsilon_b|b\nu\rangle$ , mit einer ON-Basis  $|b\nu\rangle$  im Teilraum  $\mathcal{H}_b$ . Wir schreiben

$$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \tag{3.205}$$

$$(H_0 + H_1)(|\Psi_0\rangle + |\Psi_1\rangle + ...) = (\varepsilon_b + \varepsilon^{(1)} + \varepsilon^{(2)} + ...)(|\Psi_0\rangle + |\Psi_1\rangle + ...)(3.206)$$

### 3.7.3.1 Erste Ordnung Störungstheorie für die Zustände, d = 1 (keine Entartung)

Dieser Fall ist der einfachste. Wir haben  $|\Psi_0\rangle = |b\rangle$ . Wir sortieren alle Beiträge, die erster Ordnung in  $H_1$  sind:

$$(H_0 + H_1)(|b\rangle + |\Psi_1\rangle) = (\varepsilon_b + \varepsilon^{(1)})(|b\rangle + |\Psi_1\rangle + \dots)$$
(3.207)

$$\langle i|(H_0 + H_1)(|b\rangle + |\Psi_1\rangle) = \langle i|(\varepsilon_b + \varepsilon^{(1)})(|b\rangle + |\Psi_1\rangle + \dots), \quad i \neq b \quad (3.208)$$

$$\rightsquigarrow \langle i|H_1|b\rangle + \varepsilon_i \langle i|\Psi_1\rangle = \varepsilon_b \langle i|\Psi_1\rangle \tag{3.209}$$

$$\langle i|\Psi_1\rangle = \frac{\langle i|H_1|b\rangle}{\varepsilon_b - \varepsilon_i} \tag{3.210}$$

Die Korrektur  $|\Psi_1\rangle$  besteht also aus Komponenten, die orthogonal zu  $|b\rangle$  sind. Der Zustand  $|\Psi\rangle$  ist also (ohne Normierung)

$$|\Psi\rangle = \left(|b\rangle + \sum_{i \neq b} |i\rangle\langle i|\Psi_1\rangle + \dots\right) = \left(\hat{1} + \sum_{i \neq b} \frac{|i\rangle\langle i|}{\varepsilon_b - \varepsilon_i} H_1 + \dots\right)|b\rangle \quad (3.211)$$

### 3.7.3.2 Erste Ordnung Störungstheorie für die Zustände, d > 1 (Entartung)

Das ist letztlich auch nicht schwieriger. Statt im eindimensionalen, von  $|\Psi_0\rangle = |b\rangle$  aufgespannten Unterraum arbeitet man jetzt im Unterraum  $\mathcal{H}_b$ . Als Basis nimmt man die d Eigenzustände  $|\Psi_{0\rho}\rangle$  aus der Bestimmung der Eigenenergien in erster Ordnung,

$$\varepsilon^{(1)}P|\Psi_{0\rho}\rangle = PH_1P|\Psi_{0\rho}\rangle. \tag{3.212}$$

Jetzt benutzen wir unsere allgemeine Gleichung (3.181),

$$|\Psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \left[ R(\varepsilon_b)(\varepsilon - H_1) \right]^n P |\Psi\rangle = P |\Psi\rangle + R(\varepsilon_b)(\varepsilon - H_1) P |\Psi\rangle + \dots \quad (3.213)$$

und schreiben

$$Q(|\Psi_{0\rho}\rangle + |\Psi_{1\rho}\rangle + ...) = QP|\Psi\rangle + QR(\varepsilon_b)(\varepsilon - H_1)P|\Psi_{0\rho}\rangle + ...$$
(3.214)

$$\rightsquigarrow Q|\Psi_{1\rho}\rangle = -R(\varepsilon_b)H_1P|\Psi_{0\rho}\rangle, \qquad (3.215)$$

wobei wir QP = 0, QR = R und RP = 0 ausgenutzt haben. Zu jedem  $|\Psi_{0\rho}\rangle$  gibt es also Komponenten  $Q|\Psi_{1\rho}\rangle$ , die orthogonal zu  $\mathcal{H}_b$  sind. Ausgeschrieben und in erster Ordnung in  $H_1$  lauten sie

$$Q|\Psi_{1\rho}\rangle = \sum_{i\neq b} \sum_{\nu=1}^{d_i} \frac{|i\nu\rangle\langle i\nu|}{\varepsilon_b - \varepsilon_i} H_1 P|\Psi_{0\rho}\rangle.$$
(3.216)

Die Komponenten von  $|\Psi_{1\rho}\rangle$  in  $\mathcal{H}_b$  bleiben frei wählbar - selbst die Kets  $|\Psi_{0\rho}\rangle$  hängen ja bereits als Eigenvektoren von  $PH_1P$  nicht-linear von den Parametern in  $H_1$  ab. Zweckmässigerweise setzt man die Komponenten von  $|\Psi_{1\rho}\rangle$  in  $\mathcal{H}_b$  gleich Null und hat damit

$$|\Psi_{\rho}\rangle = \left(\hat{1} - R(\varepsilon_b)H_1\right)P|\Psi_{0\rho}\rangle + \dots$$
(3.217)

$$= \left(\hat{1} - \sum_{i \neq b} \sum_{\nu=1}^{d_i} \frac{|i\nu\rangle\langle i\nu|}{\varepsilon_b - \varepsilon_i} H_1\right) P|\Psi_{0\rho}\rangle + \dots$$
(3.218)

AUFGABEN: 1. Berechne die Eigenwerte des effektiven Hamiltonoperators des Doppelmuldenpotentials,

$$H \equiv \frac{\varepsilon}{2}\sigma_z + T_c\sigma_x, \quad T_c > 0, \tag{3.219}$$

a) für  $\varepsilon \neq 0$  störungstheoretisch in  $T_c$  bis zur zweiten Ordnung.

b) für  $\varepsilon = 0$  mit entarteter Störungstheorie in  $T_c$ . Vergleiche mit der exakten Lösung (Taylorentwicklung!). Begründe das Ergebnis von b).

c) Berechne die Eigenzustände störungstheoretisch in  $T_c$  bis zur ersten Ordnung.

2. Berechne die Eigenwerte des anharmonischen Oszillators in d = 1,

$$H = \frac{p^2}{2M} + \frac{1}{2}M\omega^2 x^2 + \lambda x^4, \quad \lambda > 0$$
 (3.220)

a) störungstheoretisch in  $\lambda$  bis zur ersten Ordnung (Hinweis: Verwendung von Leiteroperatoren).

b) (Zusatzaufgabe) zu höherer Ordnung durch Entwicklung eines Codes (MATHE-MATICA).

3. Berechnen Sie die Eigenwerte des Rabi-Hamiltonians

$$H = \frac{\Delta}{2}\sigma_z + g\sigma_x(a+a^{\dagger}) + \Omega a^{\dagger}a. \qquad (3.221)$$

störungstheoretisch in g soweit Sie kommen.

#### 3.7.4 Parametrische Abhängigkeit von Spektren

Wir nehmen einen Hamiltonian an, der von einem Parameter  $\lambda$  abhängt (kann stehen für Magnetfeld, elektrisches Feld, etc.).

#### 3.7.4.1 Niveauaufspaltung

Wir nehmen folgende Form an:

$$H(\lambda) \equiv H_0(\lambda) + V. \tag{3.222}$$

Als Funktion von  $\lambda$  können sich bestimmte Niveaus  $\varepsilon_a(\lambda)$  und  $\varepsilon_b(\lambda)$  des ungestörten  $H_0(\lambda)$  an einer Stelle  $\lambda_c$  kreuzen (SKIZZE). Was ist der Effekt der Störung V auf die Niveaus in der Nähe von  $\lambda_c$ ? Seien  $\varepsilon_a(\lambda)$  und  $\varepsilon_b(\lambda)$  für  $\lambda \neq \lambda_c$  nichtentartet. Für  $\lambda \neq \lambda_c$  sagt uns die zweite Ordnung Störungstheorie

$$\varepsilon_a \rightarrow \varepsilon_a + \langle a|V|a \rangle + \sum_{i \neq a} \frac{|\langle a|V|i \rangle|^2}{\varepsilon_a - \varepsilon_i} + O(V^3)$$
(3.223)

$$\varepsilon_b \rightarrow \varepsilon_b + \langle b|V|b\rangle + \sum_{i \neq b} \frac{|\langle b|V|i\rangle|^2}{\varepsilon_b - \varepsilon_i} + O(V^3)$$
(3.224)

Nahe  $\lambda_c$  wird die Energiekorrektur durch die kleinsten Nenner des zweite-Ordnung-Terms dominiert,

$$\varepsilon_a \rightarrow \varepsilon_a + \frac{|\langle a|V|b\rangle|^2}{\varepsilon_a - \varepsilon_b} + \dots$$
(3.225)

$$\varepsilon_b \rightarrow \varepsilon_b + \frac{|\langle b|V|a\rangle|^2}{\varepsilon_b - \varepsilon_a} + \dots$$
 (3.226)

In der Nähe von  $\lambda_c$  wird also das tiefere Niveau weiter nach unten geschoben, das höhere Niveau weiter nach oben: die Niveaus stossen sich ab (*Niveau-Abstossung, engl. level repulsion*. Für  $\lambda \to \lambda_c$  wird diese Störungstheorie allerdings sehr schlecht, da die Ausdrücke wegen der immer kleiner werdenden Energie-Nenner divergieren.

An der Stelle  $\lambda_c$  muss man entartete Störungstheorie machen. Im von  $|a\rangle$ ,  $|b\rangle$  aufgespannten zweidimensionalen Unterraum muss man dann

$$\varepsilon^{(1)}P|\Psi\rangle = PVP|\Psi\rangle \tag{3.227}$$

lösen, d.h. die 2 mal 2 Matrix  $V_{ij}$  (Matrixelemente  $V_{aa}$ ,  $V_{ab}$ ,  $V_{ba}$ ,  $V_{bb}$ ) diagonalisieren.

#### 3.8 Quantenmechanik und Klassische Mechanik

### 3.8.1 Die WKB-Näherung

(MERZBACHER. LANDAU/LIFSHITZ.) Wir betrachten die eindimensionale stationäre Schrödinger-Gleichung zur Energie E,

$$\Psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x))\Psi(x) = 0$$
(3.228)

und wollen eine Näherungslösung mit dem Ansatz

$$\Psi(x) = e^{iu(x)} \tag{3.229}$$

finden, der durch den Fall eines konstanten Potentials V(x) = V mit  $\Psi(x) = e^{\pm ikx}$ und konstantem Wellenvektor k, d.h. u(x) = kx, motiviert ist. Analog zum Fall eines konstanten Potentials definieren wir

$$k(x) \equiv \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))}, \quad E > V(x)$$
 (3.230)

$$k(x) \equiv -i\kappa(x), \quad \kappa(x) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}(V(x) - E), \quad E < V(x). \tag{3.231}$$

Einsetzen liefert

$$iu''(x) - [u'(x)]^2 + k^2(x) = 0. (3.232)$$

Das ist eine nichtlineare DGL - es kann aber ein Approximationsverfahren wie folgt entwickelt werden:

Zunächst ist u''(x) = 0 für ein Teilchen im konstanten Potential, und wir nehmen an, daß dieser Term für langsam variierende Potentiale V(x) vernachlässigt werden kann. Das führt sofort auf

$$[u_0'(x)]^2 = k^2(x), (3.233)$$

was völlig analog zur **Eikonal-Gleichung** der klassischen Mechanik (vgl. MECHANIK-Skript Kap. 5.2)

$$[W'(x)]^{2} = 2m(E - V(x))$$
(3.234)

ist, wenn wir die Wirkungsfunktion W(x) mit  $\hbar u_0(x)$  identifizieren!

Eine bessere Näherung erhalten wir durch Iteration der exakten Gleichung

$$u'(x) = \pm \sqrt{k^2(x) + iu''(x)}, \qquad (3.235)$$

indem wir auf der rechten Seite die Näherung  $u_0(x)$  einsetzen,

$$u_1'(x) = \pm \sqrt{k^2(x) + iu_0''(x)} = \pm \sqrt{k^2(x) \pm ik'(x)},$$
(3.236)

wobei 'Konvergenz' dann bedeutet, daß sich  $u_1$  und  $u_0$  bereits nicht mehr groß unterscheiden, d.h.

$$|k'(x)| \ll |k^2(x)|. \tag{3.237}$$

Dann kann man die Wurzel entwickeln und hat

$$u_{1}'(x) \approx \left(\pm k(x) + \frac{i}{2k(x)}k'(x)\right) \rightsquigarrow u_{1}(x) \approx \pm \int^{x} dx'k(x') + \frac{i}{2}\log k(x)$$
  
$$\rightsquigarrow \Psi(x) \approx \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \exp\left[\pm i \int^{x} dx'k(x')\right], \quad \text{WKB-Näherung.}$$
(3.238)
Die Bedingung Gl. (3.237) kann man für E > V(x) mit Hilfe einer effektiven Wellenlänge  $\lambda(x) = \frac{2\pi}{k(x)}$  umschreiben in

$$\lambda(x) \left| \hbar k'(x) \right| \ll \left| \hbar k(x) \right|, \qquad (3.239)$$

d.h. die Änderung des Impulses  $p(x) = \hbar k(x)$  über eine Wellenlänge  $\lambda(x)$  des Teilchens muß sehr viel kleiner als der Impuls selber sein. An den klassischen Umkehrpunkten des Potentials, die durch die Bedingung

$$E = V(x) \tag{3.240}$$

definiert werden, ist diese Bedingung sicherlich nicht mehr erfüllt.

Zusammenfassend hat man also in der WKB-Näherung jeweils zwei linear unabhängige Lösungen,

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \left( c_1 \exp\left[i \int^x dx' k(x')\right] + c_2 \exp\left[-i \int^x k(x') dx'\right] \right), \quad E > V(x)$$
  

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}} \left( c_1 \exp\left[-\int^x dx' \kappa(x')\right] + c_2 \exp\left[\int^x \kappa(x') dx'\right] \right), \quad E < V(3)$$

Jetzt stellt sich allerdings die Frage, was an den Umkehrpunkten x = a des Potentials passiert und wie die WKB-Wellenfunktion über den gesamten Bereich E < V(x) und E > V(x) hinweg 'zusammengebaut' wird (LANDAU, MERZBACHER). Dazu sei x > ader klassisch verbotene Bereich mit E < V(x) rechts vom Umkehrpunkt a des Potentials. Für  $a \leq x$  hat man dann

$$\Psi(x) = \frac{c}{2\sqrt{\kappa(x)}} \exp\left[-\int_a^x dx' \kappa(x')\right], \quad a \lesssim x, \quad (3.242)$$

wobei jetzt nur die exponentiell abfallende Lösung auftauchen darf. Nahe x = a gelten die WKB-Approxmationen nicht, man kann dort aber das Potential V(x) linearisieren und die Schrödinger-Gleichung exakt zu lösen versuchen. Man kann dann zeigen, daß dann die Wellenfunktion Gl. (3.242) links vom Umkehrpunkt, d.h. im klassisch erlaubten Bereicht, übergeht in

$$\Psi(x) = \frac{c}{\sqrt{k(x)}} \cos\left[\left|\int_x^a k(x')dx'\right| - \frac{\pi}{4}\right], \quad V(x) < E, \quad (3.243)$$

wobei das  $\frac{\pi}{4}$  aus dem Wurzel-Vorfaktor

$$\sqrt{\kappa(x)} \propto \sqrt{\sqrt{x-a}}$$
 (3.244)

stammt, in dem das Argument x - a aus der Linearisierung von V(x) kommt und beim Vorzeichenwechsel beim Durchgang durch x = a dann ein  $(-1)^{1/4} = e^{-i\pi/4}$  erscheint. Weiterhin gilt die Darstellung Gl. (3.243) unabhängig davon, ob der klassisch erlaubte Bereich rechts oder links vom Umkehrpunkt a liegt.

## 3.8.2 WKB und die Bohr-Sommerfeld-Quantisierung

(LANDAU). Wie im Kapitel 'Wirkungs- und Winkelvariablen' in der MECHANIK betrachten wir eine periodische Bewegung in einer Dimension mit Hamiltonian

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$
(3.245)

im Potential V(x), das zwei Umkehrpunkte a und b < a habe, so daß die klassische Bewegung in  $b \le x \le a$  verlaufe. Wir wenden die Darstellung Gl. (3.243) jetzt auf die beiden Umkehrpunkte a und b an - dann müssen die zwei Darstellungen

$$\Psi(x) = \frac{c}{\sqrt{k(x)}} \cos\left[\left|\int_{x}^{a} k(x')dx'\right| - \frac{\pi}{4}\right]$$
  

$$\Psi(x) = \frac{c'}{\sqrt{k(x)}} \cos\left[\left|\int_{x}^{b} k(x')dx'\right| - \frac{\pi}{4}\right]$$
(3.246)

im Intervall [b, a] übereinstimmen. Das bedeutet konkret für die Argumente der Kosinus-Funktion

$$x = a \quad \rightsquigarrow \quad \int_{b}^{a} k(x')dx' - \frac{\pi}{4} = \pm \left(\frac{\pi}{4} + n\pi\right), n \in \mathbb{Z}, \tag{3.247}$$

wobei sich die Konstanten c und c' um ein Vorzeichen unterscheiden können. Der Fall + ergibt mit  $p(x) = \hbar k(x)$  damit gerade

$$\frac{1}{\pi} \int_{b}^{a} k dx = n + \frac{1}{2}$$
  
$$\rightsquigarrow \frac{1}{2\pi\hbar} \oint p(x) dx = n + \frac{1}{2}, \quad \text{Bohr-Sommerfeld-Quantisierung}, \qquad (3.248)$$

und damit hat man die Quantisierungsvorschrift der 'Älteren Quantenmechanik' für ein periodisches System mit einem Freiheitsgrad wiedergewonnen.

Auf dem Weg von x = b nach x = a wächst das Argument des Kosinus von  $-\frac{\pi}{4}$  auf  $\int_{b}^{a} k(x')dx' - \frac{\pi}{4} = \frac{\pi}{4} + n\pi$ : die Quantenzahl n ist gibt also die Anzahl der Nullstellen (Knoten) des Kosinus, also unserer semi-klassischen Wellenfunktion  $\Psi(x)$  an, so wie es auch in der exakten quantenmechanischen Lösung der Fall ist *(Knotensatz)*.

Weiterhin ist das Ringintegral  $\oint p(x)dx$  gerade die von der klassischen Trajektorie umschlossene Fläche im Phasenraum. Diese Fläche ist also gleich  $2\pi\hbar \times (n + \frac{1}{2})$ , wobei n = 0 dem Grundzustand, n = 1 dem ersten angeregten Zustand etc. entspricht. Die angeregten Zustände entsprechen im Phasenraum jeweils einer *Phasenraum-Zelle* mit der Fläche  $2\pi\hbar$ . Ein Volumenelement  $\delta x \delta p$  im Phasenraum entspricht also  $\delta x \delta p/(2\pi\hbar)$ quantenmechanischen Zuständen. Dieses Argument wird später in der STATISTISCHEN MECHANIK wichtig.

## 3.8.3 Feynman's Pfadintegral

Feynman's Pfadintegral ist einer der klarsten und schönsten Wege, die Verbindung zwischen klassischer Mechanik und Quantenmechanik herzustellen. Ausgangspunkt ist die Schrödingergleichung in Ortsdarstellung, z.B. in der einfachsten 1*d* Form mit einem Teilchen im Potential V(x),

$$i\hbar\partial_t\Psi(x,t) = H\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_{xx}\Psi(x,t) + V(x)\Psi(x,t), \qquad (3.249)$$

die man formal als Anfangswertproblem mit Hilfe des Zeitentwicklungsoperators (Propagators) lösen kann,

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' G(x,t;x',t_0) \Psi(x',t_0)$$
(3.250)

$$G(x,t;x',t_0) = \langle x | e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)} | x' \rangle.$$
(3.251)

Durch einfache formale Manipulationen (z.B. FEYNMAN, SCHULMAN, KLEINERT) läßt sich der Propagator als **Pfadintegral** schreiben,

$$G(x,t;x',t_0) = \int \mathcal{D}x e^{\frac{i}{\hbar}S[x]}, \quad S[x] \equiv \int_{t_0}^t dt' L[x(t'),\dot{x}(t')], \quad (3.252)$$

wobei die Integration über alle Trajektorien ('Pfade') x(t') im Ortsraum läuft, die zur Zeit  $t_0$  bei x' beginnen und zur Zeit t bei x enden. Die Operation  $\mathcal{D}x$  ist ein formaler Grenzwertprozess, der auf die Berechnung eines N-dimensionalen Integrals im Limes  $N \to \infty$  hinausläuft. Dabei ist S[x] die diesem Pfad entsprechende klassische **Wirkungsfunktion** mit der klassischen **Lagrange-Funktion**  $L[x(t'), \dot{x}(t')]$ . Wesentlich ist hierbei, daß zum Pfadintegral *alle* Pfade beitragen und nicht nur der Pfad  $x_{cl}(t')$ , der aus dem klassischen Prinzip der kleinsten Wirkung

$$\frac{\delta S[x]}{\delta x} = 0 \tag{3.253}$$

folgt. Den klassischen Pfad  $x_{cl}(t')$  kann man allerdings als Ausgangspunkt einer semiklassischen Entwicklung benutzen, bei der quadratische Quantenfluktuationen um  $x_{cl}(t')$ explizit berechnet werden.

## 3.8.4 Poisson-Klammern und Kommutatoren

Ein weiterer, allerdings mehr formaler Zusammenhang folgt aus den Heisenbergschen Bewegungsgleichungen Gl. (2.349)

$$i\hbar \frac{d}{dt}\hat{A}(t) = [\hat{A}(t), \hat{H}] = \left([\hat{A}, \hat{H}]\right)(t) + \frac{\partial\hat{A}}{\partial t},$$
 Heisenberg-Bewegungsgleichung, (3.254)

die hier um den Term  $\frac{\partial \hat{A}}{\partial t}$ , der aus einer möglichen expliziten Zeitahängigeit des Operators  $\hat{A}$  folgt, erweitert wurde. Wir betrachten zum Vergleich die Zeitableitungen einer klassischen Funktion  $g(\mathbf{q}, \mathbf{p})$  im Phasenraum der Orts- und Impuls-Koordinaten  $(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ . Wir erinnern uns (SKRIPT MECHANIK): Die totale zeitliche Änderung einer auf dem Phasenraum  $\Gamma$  definierten Funktion

$$g: \Gamma \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}, \quad (\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) \to g(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$$
 (3.255)

entlang einer Kurve (Phasenraumtrajektorie) in  $\Gamma$  läßt sich mit Hilfe der Hamiltonschen Gleichungen schreiben als

$$\frac{d}{dt}g = \frac{\partial g}{\partial \mathbf{q}}\dot{\mathbf{q}} + \frac{\partial g}{\partial \mathbf{p}}\dot{\mathbf{p}} + \frac{\partial g}{\partial t} = \frac{\partial g}{\partial \mathbf{q}}\frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial g}{\partial \mathbf{p}}\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} + \frac{\partial g}{\partial t}$$

$$= \{H, g\} + \frac{\partial g}{\partial t},$$
(3.256)

mit der Poisson-Klammer

$$\{f,g\} \equiv \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \frac{\partial g}{\partial \mathbf{q}} - \frac{\partial f}{\partial \mathbf{q}} \frac{\partial g}{\partial \mathbf{p}} \equiv \sum_{i=1}^{J} \left( \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial q_i} - \frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial p_i} \right), \qquad (3.257)$$

die für zwei beliebige Funktionen f, g im Phasenraum definiert ist. Wir wiederholen die wichtige Aussage

$$\frac{d}{dt}g = \{H,g\} + \frac{\partial g}{\partial t}, \quad \text{Zeitentwicklung mit Poisson-Klammer}, \quad (3.258)$$

Die Poisson-Klammer hat die Eigenschaft

$$\{f,g\} = -\{g,f\},$$
 Antisymmetrie (3.259)

$$\{\alpha f + \beta g, h\} = \alpha \{f, h\} + \beta \{g, h\}, \quad \text{Linearität}$$
(3.260)

$$\{\alpha, f\} = 0 \tag{3.261}$$

$$\{fg,h\} = f\{g,h\} + \{g,h\}f, \quad \text{Produktregel}$$
(3.262)

$$0 = \{f, \{g, h\}\} + \{g, \{h, f\}\} + \{h, \{f, g\}\},$$
Jacobi-Identitä(3.263)

Die obigen Gleichungen definieren eine (nicht-assosiative) mathematische Struktur, die als **Lie-Algebra** bezeichnet wird. Der **Kommutator**  $[A, B] \equiv AB - BA$  von Matrizen oder Operatoren in der Quantenmechanik erfüllt völlig analoge die algebraischen Regeln einer Lie-Algebra.

## 3.8.5 Unkonventionelle Methoden: Bohmsche Quantenmechanik

Zum Abschluß wollen wir noch kurz eine alternative, allerdings von den meisten Physikern nicht akzeptierte Interpretation der QM erwähnen, nämlich die Bohmsche Quantenmechanik, die als eine Art nichtlokale versteckte-Variablen-Theorie aufgefaßt werden kann (REBHAN). Ausgangspunkt ist ein Umschreiben der Wellenfunktion (hier 1d) in 'Polarkoordinaten' als

$$\Psi(x,t) = A(x,t)e^{iS(x,t)/\hbar}$$
(3.264)

mit einer Amplitude A(x,t) und einer Phase S(x,t), für die aus der SG zwei gekoppelte Gleichungen folgen,

$$\partial_t S + \frac{(\partial_x S)^2}{2m} + V(x) - \frac{\hbar^2 \partial_{xx} A}{2mA} = 0$$
  
$$\partial_t A + \frac{\partial_x S \partial_x A}{m} + \frac{A \partial_{xx} S}{2m} = 0, \qquad (3.265)$$

ein Ansatz, der bereits auf MADELUNG (1926) zurückgeht. Die Hamilton-Jacobi-Gleichung folgt hier zunächst aus der ersten Gleichung im Limes  $\hbar \to 0$ . Der Zusatzterm  $-\frac{\hbar^2 \partial_{xx} A}{2mA}$  zum Potential V(x) der ersten Gleichung wird dann als Quantenpotential bezeichnet. BOHM bezeichnet das Feld A(x,t) dann als ein Informationsfeld, durch das die Wellenfunktion  $\Psi(x,t)$  dann im Sinne de BROGLIEs zu einem Führungsfeld ('Pilotwelle') eines ansonsten klassischen, durch eine Trajektorie x(t) im Konfigurationsraum beschriebenen Teilchens wird. Die Trajektorie folgt dann wie bei Hamilton-Jacobi aus der Impulsgleichung  $\mathbf{p}(t) = \nabla S(\mathbf{x}, t)$ , also (hier wieder d = 1)

$$m\dot{x}(t) = \partial_x S(x, t), \qquad (3.266)$$

und wird bestimmt, indem man zunächst die SG, d.h. das System Gl. (3.265) löst und dann x(t). Im Gegensatz zur Newtonschen Mechanik wird hier durch den Anfangsort die Trajektorie schon eindeutig festgelegt. Allerdings kann man das Anfangswertproblem nur sinnvoll physikalisch lösen, d.h. ohne in einen Widerspruch zur Heisenbergschen Orts-Impuls-Unschärferelation zu geraten, durch folgenden 'Trick': Man nimmt eine statistische Verteilung der Ausgangspunkte x zur Anfangszeit  $t_0$  gemäßt der W-Dichte  $|\Psi(x, t_0)|^2$  an.

Offensichtlich ist damit die Bohmsche Theorie so konstruiert, daß sie nicht von vorneherein in direkten Widerspruch zur 'konventionellen' Quantenmechanik und damit zu (bisherigen) experimentellen Ergebnissen gelangt.

Durch ihre Fixierung auf den Begriff der Trajektorie erscheint mir die Bohmsche Quantenmechanik als schwerfällig. Mir ist z.B. die Behandlung von Feldern nicht klar, die ja in der normalen Quantentheorie i.A. so schnell und erfolgreich vonstatten geht (Beispiel: Quantisierung von Schwingungsmoden/Phononen). Ein 'ungutes Gefühl' vieler Physiker kommt vielleicht auch daher, daß in der Bohmschen QM eigentlich überhaupt 'nichts richtig Interessantes ausgerechnet wird' (vgl. Feynman's Kritik an der Stringtheorie).

# 3.9 Zum Weiterstudium

Die QM ist ein riesiges Gebiet der Theoretischen Physik. Im Folgenden sollen kurz einige Hinweise für weitere Themen gegeben werden, die wir ausgelassen haben bzw. mit denen man sich selbst weiterbeschäftigen kann.

Im Vergleich zu manchen anderen Vorlesungen haben wir einige 'Standard'-Teile der QM weggelassen, um dafür etwas mehr Zeit für wichtige Grundlagen wie z.B. Verschränkung und die Dichtematrix zu gewinnen. Häufig in QM I behandelte Themen sind

- Weitere Anwendungen in einer Dimension: Potentialtopf endlicher Tiefe,...
- Ausführliche Diskussion des Wasserstoff-Problems.
- Streutheorie (Grundlagen), Streuquerschnitt etc.
- Zeitabhängige Störungstheorie, Fermis Goldene Regel,...
- Mathematischer Aufbau, mehr zu Operatoren, Selbstadjungiertheit, Spektralsatz

Diese und andere Punkte haben wir nur teilweise bzw. gar nicht behandelt.

Weitere Vertiefungen gibt es dann natürlich in den Vorlesungen zur weiterführenden Quantenmechanik. Interessierte können natürlich schon selbst einmal etwas weiterschauen, bzw. auch mit Hinblick auf evtl. Bachelor-Arbeiten (in unserer oder anderen Gruppen) mich direkt fragen, was nützlich sein könnte.