31.01.21

Quantenmechanik

1. Grundlagen der Quantenmechanik

1.1 Auf den Spuren Erwin Schrödingers

1.1.1 Die Schrödinger-Gleichung:

Die von Erwin Schrödinger entwickelte „Wellenmechanik" ging ~~aus~~ von der Hypothese aus, dass ~~kas~~ klassische Punktteilchen ~~eigen~~ Eigenschaften von klassischen Wellen besitzen (Welle-Teilchen-Dualismus). Eine klassishe Welle mit Frequenz ω und Wellenvektor $\vec{k}$ wird durche eine Dispersionsrelation $\omega(\vec{k})$ beschrieben, ein strukturloses, freies, klassisches Punktteilchen mit Energie E, ~~und~~ Impuls $\vec{p}$ und Masse M durch eine Hamilton-Funktion $E \equiv H(\vec{p}) = \vec{p}^2/(2M)$.

Die Relationen zwischen Wellen und Teichen sind nach Planck, Einstein und de Broglie beschrieben durch:

$$\omega = \frac{E}{\hbar} \qquad \vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$$

Das ~~planckes~~ Plancke Wirkungsquantum hat den exakten Wert $h = 6{,}62607015 \cdot 10^{-34}\,\mathrm{Js}$ mit $\hbar = h/(2\pi)$.

Unterliegt das Wellenfeld $\psi(\vec{x},t)$, welches dem Punktteilchen zugeordnet wird, dem ~~Sp~~ Superpositionsprinzip, so gilt nach den Planck-Einstein- und de Broglie-Relation:

$$\psi(\vec{x},t) \equiv \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{k}\; \tilde{\psi}(\vec{k})\, e^{-i[\omega(\vec{k})t - \vec{k}\cdot\vec{x}]}$$

$$= \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{k}\; \tilde{\psi}(\vec{k})\, e^{-i[(\vec{p}\hbar)^2/(2M\hbar) - \vec{k}\cdot\vec{x}]} \qquad \cancel{(1.2)} \qquad (1.2)$$

Daraus folgt die <u>zeitabhängige Schrödinger-Gleichung</u>:

$$i\hbar\left(\frac{\partial t}{\partial t}\psi\right)(\vec{x},t) = \left(-\frac{\hbar^2\vec{\nabla}^2}{2M}\psi\right)(\vec{x},t) \qquad \cancel{(1.3)} \qquad (1.3)$$

Durch die Definition von Impuls- und Hamilton-Operator:

$$(\vec{P}\psi)(\vec{x},t) := -i\hbar(\vec{\nabla}\psi)(\vec{x},t) \qquad \text{Impulsoperator}$$

$$(\hat{H}\psi)(\vec{x},t) := \vec{P}/(2M) \qquad \text{Hamilton-Operator}^*$$

Kann die Schrödinger-Gleichung auch deutlich kürzer wie folgt geschrieben werden:

$$i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t}\psi\right)(\vec{x},t) = (\hat{H}\psi)(\vec{x},t)$$

* Für ein freies Teilchen.

Analog zur Beschreibung eines freien, klassischen, Punktteilchens kann bspw. ein Teilchen mit Ladung q in einem ~~et~~ elektromagnetischen Feld mit Viererpotential $(A_0(\vec{x},t), \vec{A}(\vec{x},t))$, d.h.

$$\vec{E}(\vec{x},t) = -\left(\frac{\partial}{\partial t}\vec{A}\right)(\vec{x},t) - (\vec{\nabla} A_0)(\vec{x},t)$$

$$\vec{B}(\vec{x},t) = (\vec{\nabla} \times \vec{A})(\vec{x},t)$$

beschrieben werden. ~~Dieser Ha~~ Der Hamilton-Operator für dies Potential lautet:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{\vec{P}} - q\vec{A}(\hat{\vec{x}},t)\right)^2 + qA_0(\hat{\vec{x}},t) \qquad \cancel{(1.11)} \qquad (1.11)$$

Für ein Punktteilchen in einem allgemeinen Potential $V(\vec{x},t)$ gilt der Hamilton-Operator:

$$\hat{H} = \hat{\vec{P}}^2/(2m) + V(\vec{x},t)$$

Die Schrödinger-Gleichung ~~iste~~ ist eine partielle DGL erster Ordnung in der Zeit, wodurch die Wellenfunktion ~~$\psi(t)$~~ $\psi(\vec{x},t)$ für $t \geq t_0$ mit ~~einem~~ einer Anfangsfunktion $\psi(\vec{x},t_0)$ eindeutig bestimmt ist.

Aus dem Hamilton-Operator (1.11) lässt sich aus der Schrödinger-Gleichung die Beziehung

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2\right)(\vec{x},t) + (\vec{\nabla}\cdot\vec{j})(\vec{x},t) = 0$$

mit

$$\vec{j}(\vec{x},t) = \frac{1}{2m}\Big\{\psi^*(\vec{x},t)\left[-i\hbar\vec{\nabla} - q\vec{A}(\vec{x},t)\right]\psi(\vec{x},t) + \psi(\vec{x},t)\left[i\hbar\vec{\nabla} - q\vec{A}(\vec{x},t)\right]\psi^*(\vec{x},t)\Big\}$$

herleiten. Daraus ergibt sich ~~der E~~ folgender Erhaltungssatz (die Wahrscheinlichkeitserhaltung):

$$\frac{d}{dt}\int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x}\,|\psi|^2(\vec{x},t) = 0 \qquad \cancel{(1.14)} \qquad (1.14)$$

Diese Erhaltung legt eine statistische Interpretation von $\psi(\vec{x},t)$, bzw. $|\psi(\vec{x},t)|^2$, nahe.

Tatsächlich kann experimentell bei einem Beugungsexperiment mit einem Elektronenstrahl ~~f~~ festgestellt werden, dass ab einer Unterschreitung einer bestimmten Intensität keine Beugungsmuster mehr auftreten. Stattdessen treffen die Teilchen ~~un~~ zufällig ~~Sta~~ auf dem Schirm auf. ~~B~~ Wird dies über einen längeren Zeitraum beobachtet, so ergibt ~~sicht~~ sich eine statistische Verteilung, das Beugungsmuster.

Die statistische Interpretation:

Der Kern der modernen Quantentheorie verbindet die Schrödinger-Gleichung (die Beschreibung der Dynamik) mit der statistischen Interpretation von $\psi(\vec{x},t)$, welche auf Max Born zurück geht.

In dieser Interpretation legt $\psi(\vec{x},t)$ den Zustand der statistischen Gesamtheit fest. Diese Gesamtheit besteht aus ~~Kopien von~~ Quanten, an denen ein Experiment (z.B. eine Ortsmessung) durchgeführt wird. Die statistische Gesamtheit legt dann alle statistischen Eigenschaften (z.B. Mittelwerte) fest. Jedoch sind die Resultate einzelner Messungen i.A. nicht vorhersagbar. Diese stochastischen Eigenschaften sind intrinsische Eigenschaften der Physik und nicht auf Unkenntnis, wie in der statistischen Physik, zurückführbar. Der quantenmechanische Zufall ist also irreduzibel.

Die ~~Wahrs~~ Wahrscheinlichkeit, ein durch $\psi(\vec{x},t)$ beschriebenes Quant ~~an~~ zum Zeitpunkt t bei einer Ortsmessung im Gebiet $G \subseteq \mathbb{R}^3$ zu finden, ~~hat~~ ist gegeben durch

$$\int_G d^3\vec{x}\,|\psi|^2(\vec{x},t) \qquad \text{wobei} \qquad \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x}\,|\psi|^2(\vec{x},t) = 1.$$

Durch den Erhaltungssatz (1.14) ist dann sichergestellt, dass sich das Quant ~~immer~~ „immer irgendwo" befindet. Der Wert ~~der~~ der Wellenfunktion $\psi(\vec{x},t)$ wird dann als Wahrscheinlichkeitsamplitude interpretiert. Durch die Definition der Wahrscheinlichkeit beschreiben $\psi(\vec{x},t)$ und $e^{i\varphi}\psi(\vec{x},t)$ mit $\varphi \in \mathbb{R}$ die gleiche statistische Gesamtheit. ~~Folglich~~ Folglich beschreiben unterschiedliche Wellenfunktionen nicht zwingenderweise auch verschiedene quantenmechanische Zustände.

Der Zustand einer quantenmechanischen Gesamtheit, $\psi(\vec{x},t)$, beschreibt alle statistischen Mittelwerte eines Systems, z.B. Ort, Impuls und Energie:

- Der mittlere Ort eines Quants im Zustand $\psi(\vec{x},t)$ ist mit dem multiplikativem Ortsoperator $\hat{\vec{x}}\,\psi := \vec{x}\,\psi$ gegeben ~~durch~~ durch:

$$\langle \hat{\vec{x}} \rangle_t = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x}\; \psi^*(\vec{x},t)(\hat{\vec{x}}\,\psi)(\vec{x},t)$$

- Der mittlere (kanonische) Impuls ist gegeben durch:

$$\langle \hat{\vec{P}} \rangle_t = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x}\; \psi^*(\vec{x},t)(\hat{\vec{P}}\,\psi)(\vec{x},t)$$

~~Allgemein wird eine physikalische Variable durch einen linearen Operator $\hat{F}(\hat{\vec{x}},\hat{\vec{P}})$ charakterisiert.~~

- Allgemein wird eine physikalische Variable durch einen linearen Operator $\vec{F}(\vec{X},\vec{P})$ charakterisiert. Der Mittelwert dieses Operator ist gegeben durch:

$$\langle \hat{F}(\hat{\vec{X}},\hat{\vec{P}})\rangle_t = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x}\ \psi^*(\vec{x},t)\left(\hat{F}(\hat{\vec{X}},\hat{\vec{P}})\psi\right)(\vec{x},t)$$

Da der Mittelwert physikalischer Variablen reell sein soll, muss $\langle \hat{F}\rangle_t = \langle \hat{F}\rangle_t^*$ gelten. Dies wird dar hermitesche lineare Operatoren garantiert.

Dabei ist zu beachten, dass die linearen Operatoren im Allgemeinen nicht kommutieren, d.h. mit dem <u>Kommutator</u>

$$[\hat{A},\hat{B}] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

gilt i.A. $[\hat{F}_1,\hat{F}_2] \neq 0$.

<u>Wahrscheinlichkeitsamplituden in der Impulsdarstellung:</u> 1.1.3

Durch eine Fouriertransformation kann ein ~~qua~~ (normierter) quantenmechanischer Zustand $\psi(\vec{x},t)$ in der Impulsdarstellung $\tilde{\psi}(\vec{p},t)$ dargestellt werden:

$$\psi(\vec{x},t) = \mathcal{F}^{-1}_{\tilde{\psi}}(\vec{x},t) = (2\pi\hbar)^{-3/2}\int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{p}\ \tilde{\psi}(\vec{p},t)\, e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar}$$

$$\tilde{\psi}(\vec{p},t) = \mathcal{F}_{\psi}(\vec{p},t) = (2\pi\hbar)^{-3/2}\int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x}\ \psi(\vec{x},t)\, e^{-i\vec{x}\cdot\vec{p}/\hbar}$$

Über diese beiden Darstellungen können alle relevanten physikalischen ~~M~~ Mittelwerte berechnet werden. Für Orts- und Impulsoperator gilt insbesondere:

$$\mathcal{F}_{\hat{\vec{X}}\psi}(\vec{p},t) = (i\hbar\vec{\nabla}\tilde{\psi})(\vec{p},t)$$
$$\mathcal{F}_{\hat{\vec{P}}\psi}(\vec{p},t) = \vec{p}\,\tilde{\psi}(\vec{p},t) \qquad \cancel{(1.2.4)} \qquad (1.2.4)$$

Das heißt der Ortsoperator wird ein Differentialoperator und der Impulsoperator wird rein ~~Mu~~ multiplikativ in der Impulsdarstellung.*

In der Impulsdarstellung ~~gelten~~ gilt die statistische Interpretation analog zur ~~Orst~~ Ortsdarstellung, d.h. die Wahrscheinlichkeit, den Impuls $\vec{p}$ bei einer Messung im Gebiet $G \subseteq \mathbb{R}^3$ zu finden, ist gegeben ~~als~~ durch

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{p}\,|\tilde{\psi}|^2(\vec{p},t) \qquad \text{wobei:} \qquad \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{p}\,|\tilde{\psi}|^2(\vec{p},t) = 1.$$

* Daher die Benennung der beiden Darstellungen.

Mathematische Strukturelemente der Quantenmechanik 1.2

Zur exakten ~~Be~~ mathematischen Beschreibung ~~d~~ der Quantenmechanik werden einige mathematische Elemente benötigt, die in diesem Abschnitt eingeführt werden.

Reine Quantenzustände sind Elemente eines Hilbertraums: 1.2.1

In der Quantenmechanik werden Elemente des Raumes der ~~Lebesgue-Integrablen~~ quadratisch Lebesgue-Integrablen und normierbaren Funktionen über dem $\mathbb{R}^3$ betrachtet, wobei ~~die~~ die Werte der Amplituden $\psi(\vec{x},t)\in\mathbb{C}$ komplex sein können:

$$L_2(\mathbb{R}^3) := \left\{ \psi(\vec{x}) \;\middle|\; \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x}\, |\psi(\vec{x})|^2 < \infty \right\}$$

Der Raum $L_2(\mathbb{R}^3)$ ist ~~er dab~~ ein Vektorraum über den Körper der komplexen Zahlen $\mathbb{C}$, wobei Addition und Multiplikation von Funktionen mit komplexen Zahlen wie üblich definiert sind.

Das Skalarprodukt (φ,ψ) des Raumes wird definiert durch:

$$(\varphi,\psi) := \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x}\, \varphi^*(\vec{x})\psi(\vec{x}) \equiv \langle\varphi|\psi\rangle$$

Es gilt also:

$$(\varphi,\psi) = (\psi,\varphi)^*,$$

$$(\varphi, c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1(\varphi,\psi_1) + c_2(\varphi,\psi_2),$$

$$(c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2,\psi) = c_1^*(\varphi_1,\psi) + c_2^*(\varphi_2,\psi),$$

$$(\varphi,\varphi) \geq 0 \quad \text{mit} \quad (\varphi,\varphi) = 0 \;\Leftrightarrow\; \varphi = 0.$$

Durch das Skalarprodukt wird mit $\|\varphi\| = \sqrt{(\varphi,\varphi)}$ eine Norm induziert.

Es gilt außerdem:

- Zwei Vektoren φ,ψ heißen orthogonal gdw. $(\varphi,\psi)=0$.
- Eine Menge $\{e_i\}$ von Vektoren heißt Orthonormalsystem (ON-System) gdw. $e_i e_j = \delta_{ij}$.
- Der Vektorraum $L_2(\mathbb{R}^3)$ ist bzgl. $\|\cdot\|$ vollständig.
- Der Vektorraum $L_2(\mathbb{R}^3)$ ist von abzählbar unendlicher Dimension.

Ein Raum mit diesen Eigenschaften heißt <u>(separabler) Hilbertraum</u>. Der mit $L_2(\mathbb{R}^3)$ assoziierte Hilbertraum wird im Folgenden mit $\mathcal{H}$ bezeichnet.

Diracsche Bra- und Ket-Notation: In der Notation von Paul Dirac werden Elemente (Vektoren) des Hilbertraums als Ket-Vektor $|\psi\rangle$ notiert (die Zeichen innerhalb der Klammern bezeichnen dabei den Namen des Objekts und haben i.A. keine tiefere Bedeutung). Ein Bra $\langle\psi|$ bezeichet in der Dirac-Notation die Menge der linearen Abbildungen

$$\langle\psi|\cdot \equiv (\psi,\cdot) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x}\ \psi^*(\vec{x})\cdot,$$

welche Elemente aus dem Vektorraum V nach $\mathbb{C}$ abbilden. Die Menge aller dieser linearen Abbildungen bilden den zu V dualen Vektorraum V^*. Dem Produkt aus einem Bra- und einem Ket-Vektor $\langle\varphi|\psi\rangle$ ist über das Skalarprodukt (φ,ψ) eine komplexe Zahl zugeordnet.

Darstellung von Vektoren in ON-Basen: Sei $\{|e_i\rangle, i\in I\}$ eine ON-Basis eines Hilbertraums. Dann gilt die <u>Vollständigkeitsrelation</u>

$$\mathbb{1} = \sum_{i\in I} |e_i\rangle\langle e_i|$$

mit dem Einheits-/Identitätsoperator $\mathbb{1}$. Dieser kann genutzt werden, um einen beliebigen Vektor $|\psi\rangle$ in der ON-Basis darzustellen:

$$|\psi\rangle = \mathbb{1}|\psi\rangle = \left[\sum_{i\in I}|e_i\rangle\langle e_i|\right]|\psi\rangle = \sum_{i\in I}|e_i\rangle\underbrace{\langle e_i|\psi\rangle}_{c_i:=} \equiv \sum_{i\in I} c_i|e_i\rangle$$

Der Vektor $|\psi\rangle$ wird dann durch die Koeffizienten $\{c_i, i\in I\}$ charakerisiert. Ähnlich dazu kann das Skalarprodukt in der Basis dargestellt werden:

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\varphi|\mathbb{1}|\psi\rangle = \sum_{i\in I}\underbrace{\langle\varphi|e_i\rangle}_{c_i}\underbrace{\langle e_i|\psi\rangle}_{d_i} = \sum_{i\in I} c_i\, d_i \qquad (1.33)$$

Verallgemeinert kann auch eine kontinuierliche ON-Basis, bspw. die „Ortsbasis" $\{|x\rangle \mid x\in\mathbb{R}^3\}$, verwendet werden. Es gelten dann die verallgemeinerten Orthonormalitäts- und Vollständigkeitsrelationen:

$$\langle\vec{x}|\vec{x}'\rangle = \delta(\vec{x}-\vec{x}')$$

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x}\,|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}| = \mathbb{1}$$

Analog zu (1.33) lässt sich das Skalarprodukt $\langle\varphi|\psi\rangle$ auch in der Komponentendarstellung einer verallgemeinerten ON-Basis darstellen:

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\varphi|\mathbb{1}|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x}\,\langle\varphi|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|\psi\rangle \equiv \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x}\ \varphi^*(\vec{x})\psi(\vec{x})$$

Hierbei wurde die Darstellung $\varphi(\vec{x}) := \langle\vec{x}|\varphi\rangle$ bzw. $\psi(\vec{x}) := \langle\vec{x}|\psi\rangle$ verwendet.

Diese „Ortsbasis" stellt eine überabzählbare und nicht normierte Basis dar, d.h. die Elemente der Basis $\{|\vec{x}\rangle\}$ sind nicht Teil des Hilbertraums $\mathcal{H}$!

Analog lässt sich auch eine Impulsbasis $\{|\vec{p}\rangle\}$ definieren, wobei der Basiswechse wie folgt ~~gese def~~ geschieht:

$$\langle\vec{x}|\psi\rangle = \langle\vec{x}|\mathbb{1}|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{p}\,\langle\vec{x}|\vec{p}\rangle\underbrace{\langle\vec{p}|\psi\rangle}_{=\tilde{\psi}(\vec{p})} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{p}\,\langle\vec{x}|\vec{p}\rangle\tilde{\psi}(\vec{p})$$

Für die Konsistenz mit der Fouriertransformation zum Wechsel von Orts- in Impulsdarstellung muss somit

$$\langle\vec{x}|\vec{p}\rangle = (2\pi\hbar)^{-3/2}\, e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar}$$

gelten. Es gilt somit:

$$\langle\vec{x}|\psi\rangle = (2\pi\hbar)^{-3/2}\int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{p}\;\tilde{\psi}(\vec{p})\,e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar}$$

In der Orts-, bzw. Impulsdarstellung, werden Orts- und Impulsoperator jeweils multiplikativ:

$$\hat{\vec{X}}|\vec{x}\rangle = \vec{x}|\vec{x}\rangle \qquad \hat{\vec{P}}|\vec{p}\rangle = \vec{p}|\vec{p}\rangle$$

Lineare Operatoren in Hilberträumen: 1.2.2

Wie bereits diskutiert werden in der Quantenmechanik lineare Operatoren in $\mathcal{H}$ genutzt, um physikalische Variablen zu beschreiben. In diesem Abschnitt werden allgemeine, nicht auf die Quantenmechanik bezogene, Eigenschaften linearer Operatoren diskutiert.

- Ein Operator $\hat{A}$ ~~is~~ über einen Vektorraum V ist <u>linear</u>, wenn er Ket-Vektoren aus V wie folgt abbildet:

  $$\hat{A}\left(c_1|\varphi\rangle + c_2|\psi\rangle\right) = c_1\hat{A}|\varphi\rangle + c_2\hat{A}|\psi\rangle$$

  dagegen ist ein Operator $\hat{A}$ <u>antilinear</u>, wenn gilt:

  $$\hat{A}\left(c_1|\varphi\rangle + c_2|\psi\rangle\right) = c_1^*\hat{A}|\varphi\rangle + c_2^*\hat{A}|\psi\rangle$$

- Mit $(\hat{A}\hat{B})|\psi\rangle := \hat{A}(\hat{B}|\psi\rangle)$ lässt sich ein assozatives, i.A. aber nicht kommutatives, Produkt definieren. Die Nicht-Kommutativität des Produkts wird durch ~~dem~~ den <u>Kommutator</u> charakterisiert:

  $$[\hat{A},\hat{B}] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

~~Unter einer~~

- In Bezug auf eine gegebene ON-Basis $\{|e_i\rangle, i \in I\}$ in V kann ~~der~~ ein Operator $\hat{A}$ auch als Matrix mit den Matrixelementen A_{ij} dargestellt werden:

$$\hat{A} = \mathbb{1}\hat{A}\mathbb{1} = \sum_{i,j\in I} |e_i\rangle \underbrace{\langle e_i|\hat{A}|e_j\rangle}_{A_{ij}:=} \langle e_j| = \sum_{i,j\in I} |e_i\rangle\langle e_j| A_{ij} \qquad (1.43)$$

Die ~~Basis~~ basisunabhängige Gleichung $\hat{A}|\psi\rangle = |\psi'\rangle$ mit den Vektorkoeffizienten c_i, c_i' für $|\psi\rangle, |\psi'\rangle$ ist somit äquivalent zu der Relation

$$\hat{A}|\psi\rangle = \sum_{i,j\in I} |e_i\rangle A_{ij} \langle e_j|\psi\rangle = \sum_{i,j\in I} |e_i\rangle A_{ij} c_j \stackrel{!}{=} \sum_{i\in I} |e_i\rangle c_i' = |\psi'\rangle$$

$$\Longrightarrow \quad c_i' = \sum_{j\in I} A_{ij} c_j$$

wodurch die Beziehung zu der üblichen Matrix-Vektor-Multiplikation wiederhergestellt ist.

Das äußere Produkt zwischen einem Bra- und einem Ket-Vektor ist definiert als:

$$(|e_i\rangle\langle e_j|)|\psi\rangle = (|e_i\rangle \otimes \langle e_j|)|\psi\rangle := (\langle e_j|\psi\rangle)|e_i\rangle$$

- Der adjungierte Operator $\hat{A}^\dagger$ zu $\hat{A}$ ist definiert durch die Eigenschaft

$$(\varphi, \hat{A}\psi) \equiv (\hat{A}^\dagger\varphi, \psi). \qquad (1.46)$$

Für die Matrixdarstellung folgt aus (1.46):

$$(A^\dagger)_{ij} = \langle e_i|\hat{A}^\dagger|e_j\rangle = (e_i, \hat{A}^\dagger e_j) = (\hat{A}e_i, e_j) = (e_j, \hat{A}e_i)^* = \langle e_j|\hat{A}|e_i\rangle^* = A_{ji}^*$$

- Ein Operator $\hat{A}$ heißt ~~selbst~~ selbstadjungiert (hermitesch), wenn $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ gilt.

- Eigenwerte- und ~~V~~vektoren: Ein Ket-Vektor $|a\rangle$ ~~hi~~heißt Eigenvektor zum Eigenwert a gdw.

$$\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$$

gilt. Gehören (bis auf einen Vorfaktor) mehr als ein Eigenvektor zu einem Eigenwert a, so heißt dieser entartet. Es ist zu beachten, dass die Eigenvektoren eines Operators auf dem Hilbertraum nicht zwangsweise ~~Eigen~~ Elemente des Hilbertraums sind (bspw. die verallgemeinerten Eigenvektoren des Ortsoperators).

- Die <u>Spur</u> $Tr(\hat{A})$ eines Operators $\hat{A}$ in einer ON-Basis $\{|e_i\rangle\}$ ist definiert als:

$$Tr(\hat{A}) := \sum_{i\in I} \langle e_i|\hat{A}|e_i\rangle \equiv \sum_{i\in I} A_{ii}$$

Die Spur ist dabei allerdings unabhängig von der Wahl der Basis. Die Spur ist unter zyklischen Vertauschungen invariant:

$$Tr(\hat{A}\ \hat{B}\ \hat{C}) = Tr(\hat{C}\ \hat{A}\ \hat{B}) = Tr(\hat{B}\ \hat{C}\ \hat{A})$$

- Ein Operator $\hat{U}$ heißt <u>unitär</u> gdw. $\hat{U}\hat{U}^+ = \hat{U}^+\hat{U} = \mathbb{1}$ gilt. Ein solcher Operator lässt das ~~Ska~~ Skalarprodukt invariant, d.h. es gilt:

$$(\varphi, \psi) = (\hat{U}\varphi, \hat{U}\psi) = (\varphi, \hat{U}^+ U\psi) = (\hat{U}^+ U\varphi, \psi)$$

- Ein Operator $\hat{A}$ heißt <u>normal</u> gdw. $[\hat{A}, \hat{A}^+] = 0$ gilt. Es gilt, dass genau die normalen Operatoren in $\mathcal{H}$ diagonalisierbar sind, d.h. es existiert eine ON-Basis $\{|e_i\rangle, i\in I\}$, sodass gilt:

$$\hat{A} = \sum_{i\in I} a_i |e_i\rangle\langle e_i|$$

Beispiele für normale Operatoren sind hermitesche und unitäre Operatoren.

Selbstadjungierte Operatoren: 1.2.3

Dieser Abschnitt behandelt selbstadjungierte Operatoren $\hat{A}$ und ihre Eigenschaften im Hilbertraum $\mathcal{H}$.

- Die <u>Eigenwerte</u> selbstadjungierter Operatoren sind reell und die <u>Eigenvektoren</u> unterschiedlicher Eigenwerte sind diagonal.

- Aus den (verallgemeinerten) Eigenvektoren eines selbstadjungierten Operators lässt sich immer eine ON-Basis konstruieren. Für die Eigenvektoren von $\hat{A}$, d.h. $\hat{A}|e_{mj}\rangle = a_m|e_{mj}\rangle$, $j = 1, 2, \cdots, d(m)$ mit der Entartung $d(\cdot)$, gelten die Orthonormalitäts- und Vollständigkeitsrelationen:

$$\delta_{mm'}\delta_{jj'} = \langle e_{mj}|e_{m'j'}\rangle$$
$$\mathbb{1} = \sum_m \underbrace{\sum_{j=1}^{d(m)} |e_{mj}\rangle\langle e_{mj}|}_{\hat{P}_m :=}$$

~~Für~~ Für verallgemeinerte (kontinuierliche) Eigenwerte und Vektoren müssen die Kronecker-Deltas durch Delta-Distributionen und die Summen durch Integrale ersetzt werden.

Die <u>Projektionsoperatoren</u> $\{\hat{P}_m\}$ bilden ein vollständiges System von Projektionsoperatoren mit ~~dem Spektr~~ dem Spektrum $Sp(\hat{P}_m) = \{0, 1\}$. Es gilt also:

$$\hat{P}_m = \hat{P}_m^+$$

$$\hat{P}_m \hat{P}_{m'} = \delta_{mm'} \hat{P}_m$$

$$\sum_m \hat{P}_m = \mathbb{1}$$

- Die Eigenwerte und Projektionsoperatoren eines selbstadjungierten Operators können genutzt werden, um die <u>Spektraldarstellung</u> des Operators zu erhalten:

$$\hat{A} = \hat{A}\,\mathbb{1} = \sum_m \sum_{j=1}^{d(m)} \underbrace{\hat{A}|e_{mj}\rangle}_{=a_m|e_{mj}\rangle}\langle e_{mj}| = \sum_m a_m \underbrace{\sum_{j=1}^{d(m)} |e_{mj}\rangle\langle e_{mj}|}_{\hat{P}_m :=} = \sum_m a_m \hat{P}_m$$

- Die Spektraldarstellung eines Operators kann auch genutzt werden, um <u>Funktionen linearer selbstadjungierter Operatoren</u> zu definieren:

$$f(\hat{A}) = \sum_m f(a_m)\hat{P}_m$$

Ein Beispiel davon ist die <u>Exponentialfunktion</u>:

Sei $\hat{A} = \sum_m a_m \hat{P}_m$ mit $\sum_m \hat{P}_m = \mathbb{1}$, dann ist die Exponentialfunktion definiert durch:

$$\hat{U}(s) := e^{is\hat{A}} \equiv \sum_m e^{is\hat{A}}\,\hat{P}_m = \sum_m \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(isa_m)^n}{n!}\hat{P}_m = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(is\hat{A})^n}{n!}$$

Es gilt:

- $\hat{U}(s)$ ist unitär, d.h. es gilt $e^{is\hat{A}} e^{-is\hat{A}} = \mathbb{1}$.

- Die Transformation $\hat{U}(s)$ hat den Generator

$$-i \frac{d}{ds}\hat{U}(s)\Big|_{s=0} = \hat{A}.$$

$\hat{U}(s) = e^{is\hat{A}}$ ist also die eindeutige Lösung der Differentialgleichung

$$\left(\frac{d}{ds}\hat{U}\right)(s) = i\,\hat{A}\,\hat{U}(s)$$

zum Anfangswert $\hat{U}(s=0) = \mathbb{1}$.

- Die Menge $\{\hat{U}(s) \mid s \in \mathbb{R}\}$ bildet mit Multiplikation und Addition eine abelsche Gruppe, d.h.

$$\hat{U}(s_1 + s_2) = \hat{U}(s_1)\hat{U}(s_2) = \hat{U}(s_2)\hat{U}(s_1)$$

Umgekehrt gilt der <u>Satz von Stone</u>: „Zu jeder ~~Uni~~ unitären Darstellung einer stetigen abelschen Gruppe existiert ~~eine~~ ein eindeutig bestimmter selbstadjungierter Operator."

- Für zwei selbstadjungierte Operatoren $\hat{A}, \hat{B}$ ~~mit $[\hat{A},\hat{B}]=0$~~ existiert eine gemeinsame ON-Basis in der beide Operatoren diagonal ~~sind~~ werden gdw. die Operatoren kommutieren, d.h. der Kommutator $[\hat{A},\hat{B}]$ verschwindet.

- Selbstadjungierte Operatoren $\{\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots\}$ bilden ein <u>vollständiges System kommutierender Operatoren</u> (v.S.k.O.) genau dann, wenn gilt:

    - Die Operatoren kommutieren paarweise.

    - Es existiert eine eindeutig bestimmte gemeinsame ON-Eigenbasis, deren Elemente durch die Eigenwerte dieser Operatoren eindeutig bestimmt (indiziert) sind.

  Daraus folgt u.a., dass ein Operator, der mit allen ~~Elementen~~ Operatoren eines v.S.k.O. kommutiert, eine Funktion dieser Operatoren sein muss.

Der Dichteoperator: Nach der Spektraldarstellung des Ortsoperators,

$$\hat{\vec{X}} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x}\, |\vec{x}\rangle \vec{x} \langle \vec{x}|,$$

gilt für seinen Mittelwert im Zustand $|\psi\rangle_t$:

$$\langle \hat{\vec{X}} \rangle_t = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x}\, \vec{x}\, |\psi(\vec{x})|^2 = {}_t\langle\psi| \Big(\underbrace{\int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x}\, |\vec{x}\rangle \vec{x} \langle \vec{x}|}_{=\hat{\vec{X}}} \Big) |\psi\rangle_t$$

$$= \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x}\, \langle x|\psi\rangle_t\, \vec{x}\, {}_t\langle \psi|\vec{x}\rangle$$

$$= \mathrm{Tr}\Big(\underbrace{|\psi\rangle_t {}_t\langle\psi|}_{\hat{\rho}(t)} \hat{\vec{X}} \Big) \equiv \mathrm{Tr}(\rho(t)\hat{\vec{X}})$$

Dabei charakterisiert der <u>Dichteoperator</u> $\hat{\rho}(t)$ einen normierten (reinen) Quantenzustand eindeutig. Der allgemeinst mögliche Dichteoperator beschreibt einen gemischten Zustand durch eine konvexe Summe reiner Zustände:

$$\hat{\rho}(t) = \sum_{i\in I} p_i |\psi_i\rangle_t {}_t\langle\psi_i| \quad \text{mit} \quad \sum_{i\in I} p_i = 1 \quad \text{und} \quad p_i \geq 0$$

Die Zustände $\{\psi_i, i \in I\}$ müssen dabei normiert, aber nicht orthogonal sein. Es gilt allgemein:

$$\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}^+(t) \qquad \text{(Selbstadjungiertheit)}$$

$$\hat{\rho}(t) \geq 0 \qquad \text{(Positivität)}$$

$$\mathrm{Tr}(\hat{\rho}(t)) = 1 \qquad \text{(Wahrscheinlichkeitserhaltung)}$$

Für reine Zustände gilt zusätzlich $\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}^2(t)$ (Idempotenz).

Für den Mittelwert von $\hat{\vec{P}}$ gilt analog: $\langle \hat{\vec{P}} \rangle_t = \mathrm{Tr}(\hat{\rho}(t)\hat{\vec{P}})$.

Die Postulate der Quantenmechanik 1.3

In diesem Abschnitt werden die ~~Grundlegenden~~ Grundsätze der Quantentheorie von (strukturlosen) Einquantensystemen diskutiert. Diese Postulate beschreiben die Verzahnung der folgenden ~~Quantenphänomäne~~ Quantenphänomene:

- Die Diskretisierung (Quantelung) der Werte bestimmter physikalischer Variablen (z.B. die innere Energie von Atomen, Molekülen und Atomkernen).
- Quanteninterferenz (vgl. z.B. Beugung von Neutronen an Kristallen).
- Der intrinsische und irreduzible ~~Charak~~ statistische Charakter physikalischer Phänomene (vgl. Beugungsexperimente bei hinreichend kleinen Strahlenintensitäten).

Physikalische Variablen 1.3.1

In der theoretischen Quantenmechanik werden physikalische Variablen durch selbstadjungierte Operatoren im Hilbertraum $\mathcal{H}$ beschrieben. Die Eigenwerte eines Operators legen die möglichen Werte fest, die die zugeordnete physikalische Variable annehmen kann. Das Eigenwertproblem hat somit eine zentrale Bedeutung in der Quantenmechanik.

Die Zuordnung der Operatoren zu physikalischen Variablen wird durch Korrespondenzregeln festgelegt. Die Zuordnung erfolgt dabei in zwei Schritten:

- Aufstellen einer klassischen Beschreibung im Phasenraum im Rahmen der Hamiltonschen Mechanik.
- Ersetzung der Phasenraumkoordinaten x_α, p_α durch die selbstadjungierten Operatoren $\hat{X}_\alpha, \hat{P}_\alpha$. Dabei werden die kanonischen Kommutatorrelationen (Heisenberg-Algebra) verwendet:

$$[\hat{X}_\alpha, \hat{X}_\beta] = [\hat{P}_\alpha, \hat{P}_\beta] = 0, \qquad [\hat{X}_\alpha, \hat{P}_\beta] = i\hbar\,\delta_{\alpha\beta}\,\mathbb{1} \qquad (1.72)$$

Darüberhinaus wird gefordert, dass die kartesischen Komponenten $\{\hat{X}_1, \hat{X}_2, \hat{X}_3\}$ ein v.S.k.O. bilden.

- Die Ersetzungsregeln $x_\alpha \to \hat{X}_\alpha$, $p_\alpha \to \hat{P}_\alpha$ gelten nur bei der Wahl eines orthogonalen ~~k~~ Inertialsystems, d.h. sie können nicht einfach in krummlinigen Koordinatensystemen angewandt werden.
- Aus der Heisenberg-Algebra folgt, dass nicht alle physikalischen Variablen gleichzeitig diagonalisiert werden können, d.h. es existiert keine gemeinsame Eigenbasis!

- Die Korrespondenzbedingungen sind nicht eindeutig.
- Für Spinfreiheitsgrade ist eine solche kanonische Quantisierung nicht möglich, d.h der Spin besitzt kein klassisches Äquivalent.
- Die Kommutatorrelationen (1.72) werden durch die Operatoren

$$\hat{\vec{X}} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x}\,|\vec{x}\rangle\vec{x}\langle\vec{x}| \qquad \hat{\vec{P}} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{p}\,|\vec{p}\rangle\vec{p}\langle\vec{p}|$$

mit $\langle\vec{x}|\vec{p}\rangle = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar}$ erfüllt. Dabei gilt:

$$\langle\vec{x}|\hat{\vec{P}}|\psi\rangle = -i\hbar(\vec{\nabla}\psi)(\vec{x}) \qquad \langle\vec{p}|\hat{\vec{P}}|\psi\rangle = i\hbar(\nabla\tilde{\psi})(\vec{p})$$

$$\langle\vec{x}|\hat{\vec{X}}|\psi\rangle = \vec{x}\,\psi(\vec{x}) \qquad \langle\vec{p}|\hat{\vec{X}}|\psi\rangle = \vec{p}\,\tilde{\psi}(\vec{p})$$

- Ein Beispiel für physikalische Variablen sind vollständeige Systeme von Projektionsoperatoren $\{\hat{P}_\alpha\}$ mit

$$\hat{P}_\alpha\hat{P}_\beta = \delta_{\alpha\beta}\hat{P}_\alpha, \qquad \sum_\alpha \hat{P}_\alpha = \mathbb{1} \qquad \Longrightarrow [\hat{P}_\alpha,\hat{P}_\beta] = 0$$

Für $Tr(\hat{P}_\alpha)=1$ bilden sie ein v.S.k.O.. Die Eigen~~werte~~vektoren bilden dann eine ON-Basis des Hilbertraums $\mathcal{H}$. Die möglichen Eigenwerte sind $\{0,1\}$, weshalb die Projektionsoperatoren in der „Quantenlogik" von besonderem Interesse sind.

Zustände: 1.3.2

Quantenmechanische Zustände werden durch nicht-negative <u>Dichteoperatoren</u> beschrieben. Der Zustand ρ ~~hi~~ heißt <u>rein</u>, falls ein ~~$|\psi\rangle\in\mathcal{H}$~~ $|\psi\rangle\in\mathcal{H}$ existiert mit $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$. Andernfalls heißt ρ <u>gemischter</u> Zustand. Dabei gilt das ~~Sp~~ <u>Superpositionsprinzip</u>, d.h. ~~ist~~ sind $|\psi_1\rangle\langle\psi_1|$ und $|\psi_2\rangle\langle\psi_2|$ zwei reine Zustände, dann ist auch $|\psi\rangle\langle\psi|$ mit $|\psi\rangle = c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle$ ein reiner Zustand, sofern $|c_1|^2+|c_2|^2=1$ gilt. Der allgemeinste ~~Ge~~ gemischte Zustand hat die Form

$$\hat{\rho} = \sum_i p_i|\psi_i\rangle\langle\psi_i| \qquad \text{mit} \quad \sum_i p_i = 1, \quad p_i \geq 0$$

wobei stehts $\rho \geq 0$ und $Tr(\rho) = 1$ ~~gilt~~ gilt.

Der <u>Erwartungswert</u> einer physikalischen ~~Variabl~~ Variablen $\hat{A}$ mit Spektraldarstellung $\hat{A} = \sum_i a_i\hat{P}_i$ ist gegeben durch

$$\langle\hat{A}\rangle = Tr(\hat{\rho}\,\hat{A}) = \sum_i a_i Tr(\hat{\rho}\,\hat{P}_i)$$

Dabei stellen $\{a_i\}$ die möglichen Messwerte und $Tr(\hat{\rho}\,\hat{P}_i)$ die jeweiligen Messwahrscheinlichkeiten dar.

Bemerkungen:

- Über die Spektraldarstellung wird eine, bei nicht-Entartung sogar eindeutige ON-Basis definiert. In dieser Basis ergibt die Projektion des Zustandes auf einen Eigenvektor ~~die~~ die Wahrscheinlichkeitsamplituden, die den experimentell beobachteten Wahrscheinlickeiten entsprechen. In einem reinen Zustand gibt es immer eine physikalische Variable, deren Messung immer den selben Messwert (mit Wahrscheinlichkeit 1) liefert.

- Die Grundsätze ~~des~~ des Dichteoperators umfassen auch die statistische Physik, wobei in dieser Orts- und Impulsoperator kommutieren. Daher sind in der ~~zugo~~ zugeordneten ON-Basis alle physikalischen ~~Zustände~~ Variablen und Zustände diagonal. Dann kann der Vektorraum $\mathcal{H}$ durch eine Punktmenge (z.B. Phasenraum) ersetzt werden.

Präparation von Quantenzuständen: 1.3.3

Das Messpostulat beschreibt die Änderung des Zustandes ρ durch eine Messung wie folgt: Wenn vor einer Messung der Zustand $\hat{\rho}_0$ vorlag, und ~~das~~ als Ergebnis einer Messung eine Eigenschaft $\hat{P}_i$ gemessen wurde, so liegt unmittelbar nach der Messung der folgende Zustand vor:

$$\hat{\rho} = \frac{\hat{P}_i \hat{\rho}_0 \hat{P}_i}{\mathrm{Tr}(\hat{\rho}_0 \hat{P}_i)}$$

Dieses Messergebnis tritt mit der Wahrscheinlichkeit $\mathrm{Tr}(\hat{\rho}_0 \hat{P}_i)$ auf.

- Der Zustand $\hat{\rho}$ erfüllt die Bedingung ~~Tr~~ $\mathrm{Tr}(\hat{\rho}\hat{P}_i)=1$, d.h. die Eigenschaft $\hat{P}_i$ liegt (unmittelbar nach der Messung) mit Sicherheit vor.

- Gilt $\mathrm{Tr}(\hat{P}_i)=1$, so gilt $\hat{\rho}=\hat{P}_i$, d.h. bei dieser Messung geht jede Kenntniss über den Zustand $\hat{\rho}_0$ verloren.

Dynamik abgeschlossener Quantensysteme:

Die zeitliche Entwicklung eines Quants wird durch einen unitären Operator $\hat{U}(t)$ beschrieben, der die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung erfüllt:

$$i\hbar \frac{d}{dt}\hat{U}(t, t_0) = \hat{H}(t)\hat{U}(t, t_0) \quad \text{mit} \quad \hat{U}(t_0, t_0) = \mathbb{1}$$

$$\Longrightarrow \quad i\hbar \frac{d}{dt}|\psi\rangle_t = \hat{H}(t)|\psi\rangle_t \quad \text{mit} \quad |\psi\rangle_t = \hat{U}(t, t_0)|\psi\rangle_{t_0}$$

Für ein isoliertes System ist der Hamilton-Operator zeitunabhängig.

Für die zeitliche Entwicklung des Dichteoperators folgt daraus:

$$\hat{\rho}(t) = \sum_{i\in I} p_i\, \hat{U}(t, t_0)|\psi_i\rangle_{t_0 t_0}\langle\psi_i|\hat{U}^+(t, t_0), \quad p_i \geq 0, \quad \sum_{i\in I} p_i = 1$$

$$i\hbar \frac{d}{dt}\hat{\rho}(t) = [\hat{H}(t), \hat{\rho}(t)] \qquad \text{(von Neumann-Gleichung)}$$

Die Koeffizienten p_i sind dabei zeitunabhängig!

Der zeitabhängige Mittelwert eines Operators im Zustand $\hat{\rho}(t)$ ist daher gegeben durch:

$$\langle\hat{A}\rangle_t = \mathrm{Tr}\left(\hat{U}(t, t_0)\hat{\rho}(t_0)\hat{U}^+(t, t_0)\hat{A}\right) \tag{1.83}$$

Durch die Dualität zwischen Zuständen und physikalischen Variablen kann die Zeitentwicklung unterschiedlich beschrieben werden. Zwei „Bilder" der Zeitentwicklung sind:

1. Das <u>Schrödinger-Bild</u>:
   Hier sind die physikalischen Variablen zeit<u>un</u>abhängig und die Zustände zeitabhängig. Dies ist das bisher betrachtete Bild.

2. Das <u>Heisenberg-Bild</u>:
   Hier sind die physikalischen Variablen zeitabhängig und die Zustände zeit<u>un</u>abhängig. Die Zeitentwicklung und die Mittelwerte werden beschrieben durch:

   $$\hat{A}(t, t_0) = \hat{U}^+(t, t_0)\hat{A}\,\hat{U}(t, t_0)$$

   $$\langle\hat{A}\rangle_t = \mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}(t_0)\hat{A}(t, t_0)\right) \equiv \mathrm{Tr}\left(\hat{U}(t, t_0)\hat{\rho}(t_0)\hat{U}^+(t, t_0)\hat{A}\right)$$

   Diese Relation ergibt sich durch zyklische Vertauschung der Parameter in der Spur in (1.83). Es gilt die <u>Heisenbergsche Bewegungsgleichung</u>:

   $$-i\hbar\left(\frac{d}{dt}\hat{A}\right)(t, t_0) = [\hat{H}, \hat{A}(t, t_0)]$$

Gemäß dieser Postulate gibt es zwei Arten der Zustandsänderung: Die <u>unitäre Zeitentwicklung</u> (Dynamik) und die <u>nichtunitäre Änderung</u> in Folge einer Messung. Diese Änderung ist die Folge der durch die Messung verursachten Informationsänderung. Das dies (im Gegensatz zur statistischen Physik) auch bei reinen Zuständen auftritt, spiegelt den intrinsischen statistischen Charakter der Quantenmechanik wieder.

Dynamik eines Punktquants in äußeren Potentialen 2

Für ein strukturloses Punktquant in einem äußeren lokalen ~~Potenti~~ Potential lautet der Hamilton-Operator:

$$\hat{H} = \frac{\overset{3}{P}^2}{2m} + V(\overset{3}{X}, t)$$

Dabei gilt $V(\overset{3}{X}, t)|\vec{x}\rangle = V(\vec{x}, t)|\vec{x}\rangle$.

Die Schrödinger-Gleichung 2.1

Stationäre Energieeigenzustände und Zeitentwicklung 2.1.1

Ein stationärer Energieeigenzustand $|\psi\rangle_E$ löst die Eigenwertgleichung

$$\hat{H}|\psi\rangle_E = E|\psi\rangle_E \tag{2.5}$$

die auch zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung genannt wird. Ist der Zustand $|\psi\rangle_E$ selbst normierbar, so stellt er einen möglichen physikalischen Zustand dar, welcher zeitunabhängig, d.h. stationär, ist. Aus nicht normierbaren, aber beschränkten, Energieeigenzuständen kann durch eine Linearkombination wieder ein physikalischer (normierbarer), aber i.A. zeitabhängiger, Zustand (ein „Wellenpaket") ~~konstu~~ konstruiert werden.

Nach dem Spektralsatz für selbstadjungierte Operatoren stellen alle Lösungen der Eigenwertgleichung (2.5) eine (verallgemeinerte) ON-Basis ~~dar~~ $\{|\psi\rangle_E\}$ in $\mathcal{H}$ dar, d.h.

$$\hat{H} = \sum_{i\in I} E_i |\psi\rangle_{E_i E_i}\langle\psi| + \int_{E_<}^{E_>} dE\, E\, |\psi\rangle_{E\,E}\langle\psi| \tag{2.6}$$

es gelten die (verallgemeinerten) Orthonormalitäts- und Vollständigkeitsrelationen:

$$\delta_{ij} = {}_{E_i}\langle\psi|\psi\rangle_{E_j}$$

$$\delta(E - E') = {}_E\langle\psi|\psi\rangle_{E'}$$

$$\mathbb{1} = \sum_{i\in I} |\psi\rangle_{E_i E_i}\langle\psi| + \int_{E_<}^{E_>} dE\, |\psi\rangle_{E\,E}\langle\psi|$$

Die Menge der Eigenwerte, $Sp(\hat{H}) = \{E_i | i \in I\} \cup [E_<, E_>]$, ~~heißt~~ heißt Spektrum von $\hat{H}$. Das Spektrum besteht i.A. aus einem ~~dis~~ diskreten und einem ~~kontini~~ kontinuierlichen Anteil (dem Kontinuum). ~~Elem~~ ~~Die Eigenwerte des diskreten Spe~~ Die Eigenvektoren des diskreten Spektrums ~~st~~ sind selbst Elemente des Hilbertraums und stellen gebundene Zustände* dar. Die Eigenvektoren des Kontinuums sind nicht Teil des Hilbertraums, stellen aber eine verallgemeinerte ON-Basis dar. Sie charakterisieren ungebundene Zustände.*

* Bzw. gebundene/ungebundene Bewegungen.

Ist der Hamilton-Operator $\hat{H}$ zeitunabhängig, so ~~lautet~~ hat der unitäre Zeitentwicklungsoperator die Form

$$\hat{U}(t) = \exp\left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{H}\, t \right\}.$$

Aus dem Spektralsatz (2.6) folgt daher für die Darstellung der Zeitentwicklung:

$$|\psi\rangle_t = e^{-i\hat{H}/t} |\psi\rangle_{t=0} = \sum_{i \in I} e^{-iE_i t/\hbar} |\psi\rangle_{E_i E_i}\langle\psi|_{t=0} + \int_{E_<}^{E_>} dE\, |\psi\rangle_{EE}\langle\psi|\psi\rangle_{t=0}$$

Selbstadjungierte Operatoren im Hilbertraum $\mathcal{H} = L_2(\mathbb{R}^3)$:

Ein ~~Ch~~ linearer Operator $\hat{A}$ in $\mathcal{H}$ heißt selbstadjungiert, wenn gilt:

$$\hat{A} = \hat{A}^+, \quad \text{d.h.} \quad (\hat{A}\, \psi, \varphi) \equiv (\psi, \hat{A}^+ \varphi) = (\psi, \hat{A}\, \varphi)$$

$$|\psi\rangle, |\varphi\rangle \in D_{\hat{A}} = D_{\hat{A}^+} \quad \text{mit } D_{\hat{A}} \text{ dicht in } \mathcal{H} \text{ mit}$$

$$D_{\hat{A}} = \{ |\varphi\rangle \in \mathcal{H} \mid \forall |\psi\rangle \in D_{\hat{A}}\ \exists |\phi\rangle \in \mathcal{H} : (\hat{A}\, \varphi, \psi) = (\psi, \phi) \}$$

~~Bei~~ Beispiele:

- Impulsoperator: In der Ortsdarstellung ist der Impulsoperator gegeben durch $\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$.

  Eine notwendige Bedingung für die Selbstadjungiertheit von $\vec{P}$ lautet: ~~Für ein beliebiges~~ Für alle $\vec{a}$ und alle $\varphi, \psi \in D_{\vec{P}}$ gilt:

  $$\int_{\partial\mathbb{R}^3} d\vec{f} \cdot \vec{a}(\varphi^* \psi)(\vec{x})$$

  D.h. für die Selbstadjungiertheit von $\vec{P}$ müssen notwendigerweise alle Randterme verschwinden.

  Der Definitonsbereich $D_{\vec{P}}$ von $\vec{P}$ kann aus der Bedingung $(\vec{P}\psi, \vec{P}\psi) = 1$, d.h. $\vec{P}|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, hergeleitet werden. Er lautet:

  $$D_{\vec{P}} = \{ \psi(\vec{x}) \mid \psi(\vec{x}) \in \mathcal{H} \ \wedge\ -i\hbar(\vec{\nabla}\psi)(\vec{x}) \in \mathcal{H} \}.$$

- Operator ~~dere~~ der kinetischen Energie: $\hat{H} = \vec{P}^2/(2m)$

  Notwendig für die Selbstadjungiertheit von $\hat{H}$ ist:

  $$\int_{\partial\mathbb{R}^3} d\vec{f} \cdot \left\{ \varphi^*(\vec{x}) \left(-\frac{\hbar}{2m} \vec{\nabla}\varphi \right)(\vec{x}) \right\} = 0$$

  Daraus ergeben sich u.a. Regularitätsbedingungen für die radiale Abhängigkeit von Zustandsfunktionen $\psi(\vec{x})$ bei $r=0$, z.B.:

  $$\psi(\vec{x}) \xrightarrow[r \to 0]{} \frac{A}{r^n} f(\theta, \varphi) \quad \Longrightarrow \quad n < \frac{1}{2}$$

Allgemeine Charakteristika eindimensionaler Dynamik 2.2

Im Folgenden wird das eindimensionale (verallgemeinerte) ~~Eigenwer~~ Eigenwertproblem für den Hamilton-Operator

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

für ein beliebiges, konstantes, lokales Potential $V(\hat{x})$ ~~d.h~~, d.h. $V(\hat{x})|x\rangle = V(x)|x\rangle$, behandelt.

Klassische Bewegungstypen: 2.2.1

In einem vorgegebenen Potential $V(x)$ gilt in der ~~kas~~ klassischen Mechanik die Hamilton-Funktion

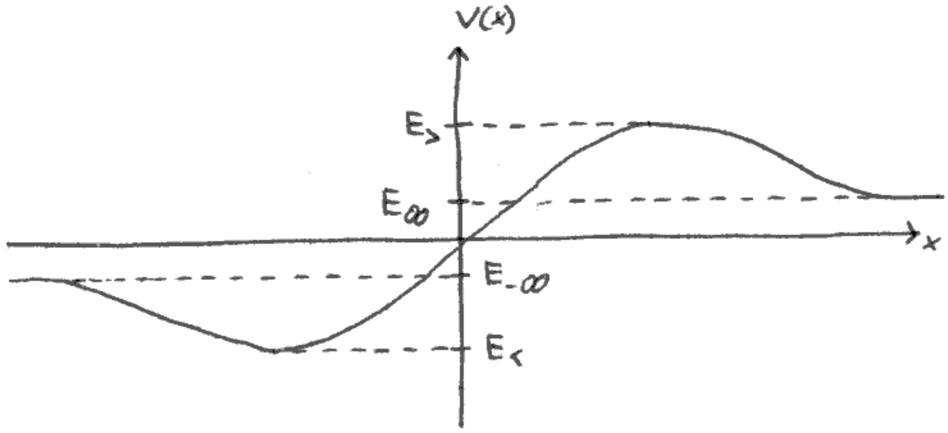
$$H(p, x) = \frac{p^2}{2m} + V(x) = E$$

mit der Gesamtenergie E. Es gilt $\frac{d}{dt}H(p,x) = 0$, d.h. die Hamilton-Funktion ist eine Erhaltungsgröße. Daraus ergeben sich die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen:

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m} = \frac{1}{m}\sqrt{2m(E - V(x))} =: t(x; E)$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} \cancel{= -\frac{\partial V}{\partial x}} = -\frac{dV}{dx}$$

Ein typischer Verlauf des Potentials $V(x)$ ist bspw.:



Mit den charakteristischen Energien $E_<$, $E_>$, $E_{-\infty}$, E_∞ lassen sich die folgenden Bewegungstypen identifizieren:

$E < E_<$	Keine Bewegung möglich.
$E_< \leq E < E_{-\infty}$	Nur gebundene Bewegungen.
$E_{-\infty} \leq E < E_>$	Nur unbeschränkte Bewegungen. Läuft ein Teilchen von links auf das Potential zu, so wird es reflektiert.
$E_\infty \leq E < E_>$	Nur unbeschränkte Bewegungen. Läuft ein Teilchen von rechts auf das Potential zu, so wird es reflektiert.
$E_> \leq E$	Nur unbeschränkte Bewegungen, keine Reflexion.

Spektrum und Stetigkeitsbedingungen: 2.2.2

Für ein stetiges Potential lässt sich immer eine ~~Lös~~ Lösung des Eigenwertproblems

$$\hat{H}|\psi\rangle_E = E|\psi\rangle_E$$

finden, für die ~~$|\psi\rangle_E$, $|\psi\rangle_E'$ und~~ $\psi_E(x)$, $\psi_E'(x)$ und $\psi_E''(x)$ stetig ~~sind~~ sind und für die $|\psi_E(x)| \leq C$ für alle $x \in \mathbb{R}$ und ein $C \in \mathbb{R}$ gilt. Das Spektrum von $\hat{H}$ ~~besteht dabei noch immer aus~~ kann dabei noch immer aus einem diskreten und einem kontinuierlichen Teil bestehen. Auch für die Elemente des Kontinuums gilt $|\psi_E(x)| \leq C$, sie sind jedoch nicht Teil des Hilbertraums.

Eindimensionale Potentiale und Singularitäten: Sei $V(x)$ unstetig bei $x = x_0$. Dann ist durch die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung offensichtlich auch $\psi_E''(x)$ unstetig an der Stelle $x = x_0$. Aus der integralen Form der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung folgt:*

$$\int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} dx \, \frac{d^2}{dx^2}\psi_E(x) = -\frac{2m}{\hbar^2}\int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} dx \, [E - V(x)]\psi_E(x)$$

$$\Rightarrow \lim_{\epsilon \to 0} \left[\psi_E'(x_0+\epsilon) - \psi_E'(x_0-\epsilon)\right] = \frac{2m}{\hbar^2}\psi_E(x) \lim_{\epsilon \to 0} \int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} dx \, V(x)$$

Es ergeben sich also zwei Fälle:

1. Für $\lim_{\epsilon\to 0}\int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} V(x)dx = 0$ ist $\psi_E'(x)$ stetig an der Stelle x_0.
2. Für $\lim_{\epsilon\to 0}\int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} V(x)dx \neq 0$ ist $\psi_E'(x)$ unstetig an der Stelle x_0.

In beiden Fällen bleibt jedoch $\psi_E(x)$ stetig.

* Unter der Voraussetzung dass $\psi_E(x)$ weiterhin stetig ist an der Stelle x_0.

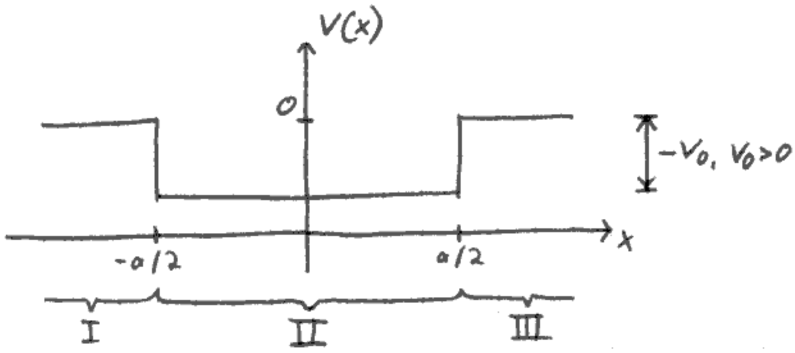
~~E~~ Eindimensionale Dynamik in einem Potentialtopf

2.3

In diesem Abschnitt wird das ~~vera~~ verallgemeinerte Eigenwertproblem für ein idealisiertes, ~~Potential $V(\vec{x})$ untersucht~~, stückweise konstantes, Potential $V(\vec{x})$ betrachtet, d.h.

$$\hat{H}|\psi\rangle_E = E|\psi\rangle_E \quad \text{mit} \quad \hat{H} = \frac{\hat{\vec{P}}^2}{2\mu} + V(\vec{x}) \tag{2.23}$$

mit beschränktem $|\psi_E(x)|$ in $\mathbb{R}$. Das Potential verläuft wie folgt:



Es ~~lä~~ lässt sich wie folgt beschreiben

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{falls } |x| \leq \frac{a}{2} \\ 0 & \text{falls } |x| > 0 \end{cases}$$

Das Potential ist ~~somm~~ also symmetrisch in x, d.h. $V(x) = V(-x)$. Daraus ergibt sich, dass auch $\psi_E(-x)$ eine Lösung von (2.23) sein muss, wenn ~~ψ_E~~ $\psi_E(x)$ eine Lösung ist. Dies kann durch den ~~Ram~~ <u>Paritätsoperator</u> $\hat{T}$ mit

$$(\hat{T}\psi)(x) := \psi(-x)$$

charakterisiert werden. Es gilt $[\hat{H}, \hat{T}] = 0$, d.h. $\hat{T}$ kommutiert mit dem Hamilton-Operator und jeder Energieeigenzustand kann als gemeinsamer Eigenzustand von $\hat{H}$ und $\hat{T}$ gewählt werden. Da $\hat{T}^2 = \mathbb{1}$ gilt, ist das Spektrum von $\hat{T}$ gegeben durch $Sp(\hat{T}) = \{+1, -1\}$. Dabei ~~nenne~~ nennen wir $+1 \rightarrow$ gerade Parität und $-1 \rightarrow$ ungerade Parität. Es gibt somit zwei Arten von Energieeigenzuständen: Gerade (+) und ungerade (-):

$$u_+(-x) = u_+(x)$$

$$u_-(-x) = -u_-(x)$$

Gebundene Zustände:

2.3.1

Im Energiebereich $E \in [-V_0, 0)$ treten als charakteristisches Quantenphänomen nur diskrete Energiewerte und damit nur gebundene Zustände auf.

Da das Potential keine unendlichen Sprünge/~~Unste~~ ~~Ust~~ Unstetigkeitsstellen aufweist, müssen sowohl $u(x)$ als auch $u'(x)$ an allen Stellen, insb. bei $|x| = a/2$, stetig sein. Die zu lösenden Differentialgleichungen, die sich aus der Eigenwertgleichung ergeben, lauten:

$$
\begin{aligned}
|x| \le \tfrac{a}{2}: \quad & u'' + k^2 u = 0, \quad k := \sqrt{\tfrac{2m}{\hbar^2}(E + V_0)} \\
|x| > \tfrac{a}{2}: \quad & u'' - \omega^2 u = 0, \quad \omega := \sqrt{\tfrac{2m}{\hbar^2}|E|}
\end{aligned}
\tag{2.25}
$$

Jede dieser Differentialgleichungen hat je eine gerade (u_+) und eine ungerade (u_-) Lösung. Durch die vorausgesetzte Stetigkeit in u an den Stellen $|x| = a/2$ ergibt sich:

$$
\begin{aligned}
u_+(x) &= \begin{cases} A_+ \cos(k x) & \text{falls } |x| \le \frac{a}{2} \\ A_+ \cos\left(\frac{1}{2} k a\right) e^{\omega\left(\frac{a}{2} - |x|\right)} & \text{falls } |x| > \frac{a}{2} \end{cases} \\
u_-(x) &= \begin{cases} A_- \sin(k x) & \text{falls } |x| \le \frac{a}{2} \\ A_- \sin\left(\frac{1}{2} k a\right) e^{\omega\left(\frac{a}{2} - |x|\right)} \operatorname{sgn}(x) & \text{falls } |x| > \frac{a}{2} \end{cases}
\end{aligned}
\tag{2.26}
$$

Durch die Forderung der Stetigkeit von $u'(x)$ an der Stelle $|x| = a/2$ ~~ergit~~ ergeben sich die folgenden Bedingungen an die Koeffizienten k und ω:

$$
\tan\left(\frac{ka}{2}\right) = \frac{\omega}{k} \qquad \cot\left(\frac{ka}{2}\right) = -\frac{\omega}{k}
\tag{2.27}
$$

Diese Bedingungen sind notwendig für die Existenz nichttrivialer Koeffizienten A_+, A_-, d.h. $A_+, A_- \neq 0$. Die Relationen liefern die <u>Quantisierungsbedingungen</u>. Diese können auch geschrieben werden als:

$$
\begin{aligned}
+: \quad & \frac{\cos^2\left(\frac{ka}{2}\right)}{\left(\frac{ka}{2}\right)^2} = \frac{1}{V_0} \frac{\hbar^2}{2m(a/2)^2} =: C = \frac{\text{Lokalisierungsenergie}}{V_0} \\
-: \quad & \frac{\sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)}{\left(\frac{ka}{2}\right)^2} = \frac{1}{V_0} \frac{\hbar^2}{2m(a/2)^2}
\end{aligned}
\tag{2.28}
$$

Dabei bezeichnet die Größe

$$
\frac{\hbar^2}{2m(a/2)^2}
$$

die <u>Lokalisierungsenergie</u>. Der Wert C bezeichnet die „Topfgröße".

Allgemeine Eigenschaften des Eigenwertproblems am Potentialtopf:

- Für jede Topfgröße C existiert mindestens ein gebundener Zustand u_+.
- Je größer (breiter) der Topf ist, desto mehr gebundene Zustände gibt es.
- Gerade und ungerade Eigenzustände wechseln sich aufgrund der Phasenverschiebung von sin/cos ab.
- Die Energiniveaus sind nicht entartet.
- Der Grundzustand ist immer symmetrisch für $V(x) = V(-x)$.
- Mit wachsender Energie nimmt die Anzahl der Nullstellen der Energieeigenfunktionen zu, dies wird auch Knotensatz genannt.
- Für einen unendlich tiefen Topf ($V_0 \to \infty$, $E + V_0$ endlich) gilt:

$$\frac{ka}{2} = n\frac{\pi}{2}, \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad \Leftrightarrow \quad \cancel{ka = n\pi} \quad ka = n\pi$$

In semi-klassischer Näherung gilt die Bohr-Sommerfeldsche ~~Quantisier~~ Quantisierungsbedingung

$$\int_{x_<}^{x_>} dx \sqrt{2m(E - V(x))/\hbar^2} = (n + \tfrac{1}{2})\pi.$$

Dabei sin $x_<$ und $x_>$ die beiden Umkehrpunkte, für die $V(x_<) = V(x_>) = E$ gilt. Diese Näherung ist gültig im Grenzfall

$$\left|\frac{d\lambda}{dx}(x)\right| \ll 1$$

mit der lokalen de Broglie-Wellenlänge $\lambda(x) = h/p(x)$ und dem lokalen (kanonischen) Impuls $p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}$.

Kontinuumszustände:

Im Energiebereich $E \geq 0$ gibt es Kontinuumszustände, d.h. es werden beschränkte Lösungen des Eigenwertproblems gesucht. Analog zu den gebundenen Lösungen können diese aus lokalen Lösungen in den drei Bereichen I, II, III zusammengesetzt ~~werd~~ werden:

$$\psi_{I}(x) = A_+ \exp\left\{ i\,\omega\left(x + \frac{a}{2}\right)\right\} + A_- \exp\left\{ -i\,\omega\left(x + \frac{a}{2}\right)\right\}$$

$$\psi_{II}(x) = B_+ \exp\left\{ i\,k\left(x - \frac{a}{2}\right)\right\} + B_- \exp\left\{ -i\,k\left(x - \frac{a}{2}\right)\right\}$$

$$\psi_{III}(x) = C_+ \exp\left\{ i\,\omega\left(x - \frac{a}{2}\right)\right\} + C_- \exp\left\{ -i\,\omega\left(x - \frac{a}{2}\right)\right\}$$

$$\Rightarrow \quad \psi(x) = \begin{cases} \psi_{I}(x) & \text{falls} \quad x < -\frac{a}{2} \\ \psi_{II}(x) & \text{falls} \quad |x| \leq \frac{a}{2} \\ \psi_{III}(x) & \text{falls} \quad \frac{a}{2} < x \end{cases}$$

Vier der sechs Koeffizienten $A_\pm$, $B_\pm$, $C_\pm$ werden durch die Stetigkeitsbedingungen an $\psi(x)$, $\psi'(x)$ an den Stellen $|x| = \frac{a}{2}$ festgelegt. Durch die verbleibenden ~~ko~~ zwei Koeffizienten können für jede Energie zwei linear unabhängige Lösungen konstruiert werden, die z.B. durch $C_- = 0$ oder $A_+ = 0$ charakterisiert ~~werden~~ sind.

Für Lösungen der <u>zeitunabhängigen</u> Schrödinger-Gleichung gilt offensichtlich $\frac{d}{dt}|\psi|^2 = 0$ und damit nach der differenziellen Form der Wahrscheinlichkeitserhaltung $\vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$. Daraus lässt sich, bspw. für $C_- = 0$, die folgende Relation ~~#~~ herleiten:

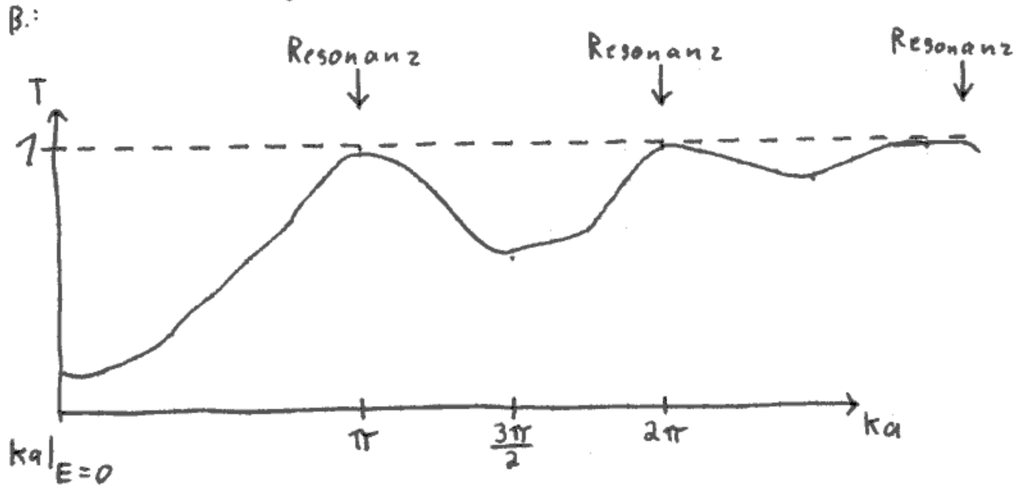
$$1 = \underbrace{|A_-|^2/|A_+|^2}_{R:=} + \underbrace{|C_+|^2/|A_+|^2}_{T:=} = R + T \qquad (2.3.3)$$

Dabei ~~heißt~~ ist R der <u>Reflexionskoeffizient</u> und T der <u>Transmissionskoeffizient</u>. Es gilt ~~offensichtli~~ offensichtlich $R, T \geq 0$. Der Reflexionskoeffizient beschreibt die Wahrscheinlichkeit, dass ein von links zulaufendes Teilchen reflektiert wird, der Transmissionskoeffizient dass es nach recht transmittiert. Diese <u>Reflexion über dem Potentialtopf</u> ist ein charakteristisches Quantenphänomen. Es gilt:

$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4\,E(E + V_0)} \sin^2\left(a \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0)}\right)} \qquad (2.3.4)$$

Bei ~~einem~~ einer klassischen Streuung am ~~Potential to~~ Potentialtopf gilt $R = 0$ und $T = 1$.

Der Transmissionskoeffizient T ist durch (2.34) von der Energie des Teilchens, E, ~~abhäg~~ abhängig. Ein typischer Verlauf von T ist z.B.:



Die Stellen, an denen $T = 1$ gilt, heißen <u>Resonanzen</u>.

Es existieren auch Reflexionsfreie Potentiale, für die $T=1$ für alle Kontinuumsenergien E gilt. Diese haben die Form

$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{2mL^2}\frac{n(n+1)}{\cosh^2(x/L)}$$

mit beliebigen $n \in \mathbb{N}$, $L \in \mathbb{R}$.

Bemerkungen:

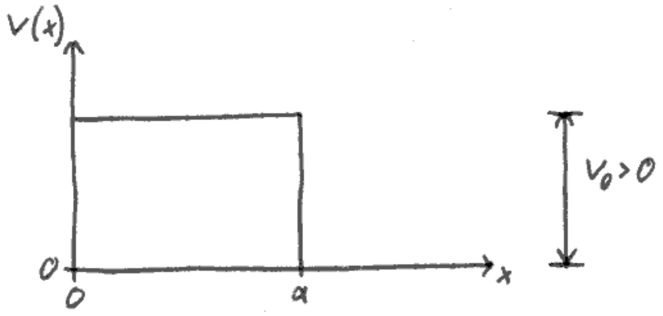
- Im Allgemeinen muss ein Streuexperiment zeitabhängig, d.h. als Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung, beschrieben werden.

- Streut jedoch ein hinreichend monoenergetisches Wellenpaket an einem Potential, so kann der Vorgang näherungsweise durch Lösen der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung beschrieben werden. Dies entspricht einer experimentellen Situation, in der der Streuvorgang energetisch aber nicht zeitlich aufgelöst ist. Die Resonanzen äußern sich dann bspw. als Maxima in der Energieabhängigkeit von Streuquerschnitten.

- Streut ein nicht hinreichend monoenergetisches Wellenpaket, so ist eine zeitabhängige Beschreibung erforderlich. Die Resonanzen äußern sich dann bspw. in Zeitverzögerungen.

Eindimensionale Dynamik an einer Potentialbarriere

In diesem Abschnitt wird ein Potential der Form



betrachtet. Es wird durch die Formel

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{falls} \quad 0 \leq x \leq a \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

beschrieben. Dieses Potential wird Potentialbarriere genannt und es treten nur ungebundene Bewegungen auf. ~~Der zu~~ Die zulässigen Energien liegen im Bereich $E \geq 0$. Im Energiebereich $E < V_0$ tritt ein neuer quantenmechanischer Effekt, der Tunneleffekt auf. Zur quantitativen Beschreibung wird in (2.34) das Potential V_0 durch $-V_0$, d.h. $V_0 \to -V_0$, ersetzt. Der Transmissionskoeffizient geht dann in den Tunnelkoeffizienten über:

$$T = \frac{|C_+|^2}{|A_+|^2} = \left[1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sinh^2\left(a \underbrace{\sqrt{\frac{2M}{\hbar^2}(V_0 - E)}}_{\tilde{k} :=}\right)\right]^{-1} \qquad (2.36)$$

Wird $a\tilde{k}$ groß, d.h. $1 \ll a\tilde{k}$, wird der Tunnelkoeffizient exponentiell klein, d.h. im Grenzfall gilt:

$$T \to \exp\left\{-2a\sqrt{\frac{2M}{\hbar^2}(V_0 - E)}\right\}\left[\frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2}\right] \ll 1$$

Beispielsweise gilt für $E = 1\,eV$, $V_0 = 2\,eV$, $a = 10^{-10}\,m$:

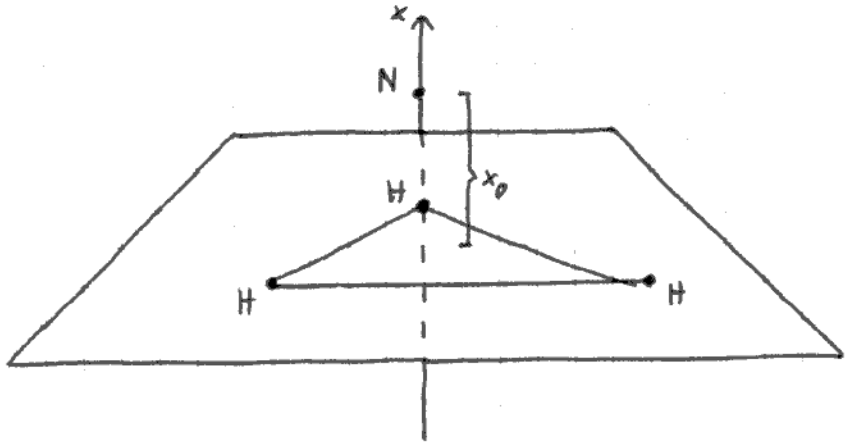
Elektron, $M_e = 9{,}11 \cdot 10^{-31}\,kg \implies T \approx 0{,}777$

Proton, $M_p/M_e \approx 1836 \implies T \approx 1{,}16 \cdot 10^{-9}$

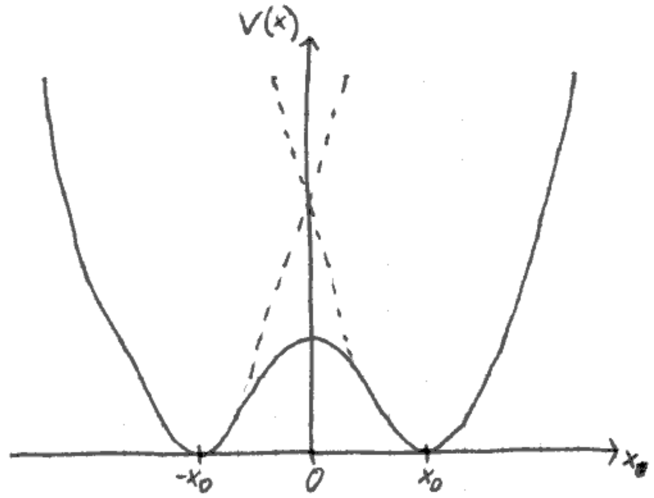
Während (für das gegebene Potential) die Wahrscheinlichkeit, dass ein Elektron tunnelt, nicht vernachlässigbar hoch ist, ist sie bereits für das „nur" 1836-mal ~~Ma~~ massenreichere Proton verschwindend gering.

Doppelminimumpotential – Modellmolekül – N-Minima-Potentiale

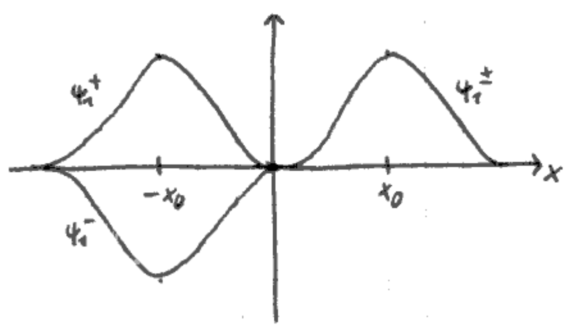
In diesem Abschnitt wird ein einfaches Modell des Moleküls NH_3 (Ammoniakmolekül) behandelt. Schematischer Aufbau von NH_3:



Das interatomare Potential des Stickstoffatoms hat die folgende Form:



Da das Potential symmetrisch ist, liegt eine Raumspiegelungssymmetrie $V(-x) = V(x)$ vor. Die Energieeigenzustände können daher als gerade und ungerade bzgl. dieser Symmetrie gewählt werden. Seien die beiden energetisch am tiefsten liegenden (orthogonalen und normierten) Energieeigenzustände $|\psi_1^+\rangle$ und $|\psi_1^-\rangle$ mit den ~~Ei~~ Eigenenergie $E_1^+ \le E_1^-$. Illustration von $|\psi_1^\pm\rangle$:



~~Aus~~

Aus den beiden Zuständen $|\psi_1^+\rangle$, $|\psi_1^-\rangle$ lassen sich zwei orthogonale Zustände konstruieren, die ein links, bzw. rechts, lokalisiertes Stickstoffatom beschreiben:

$$|\psi_L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\psi_1^+\rangle - |\psi_1^-\rangle\right) \qquad \text{(links lokalisiert)}$$

$$|\psi_R\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\psi_1^+\rangle + |\psi_1^-\rangle\right) \qquad \text{(rechts lokalisiert)}$$

Diese Zustände sind jedoch nicht mehr stationär. Die Zeitentwicklung des (anfänglich) linken Zustands ist gegeben als:

$$|\psi_L\rangle_t = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{-iE_1^+ t/\hbar}|\psi_1^+\rangle - e^{-iE_1^- t/\hbar}|\psi_1^-\rangle\right)$$

Die Wahrscheinlichkeit $|\langle\psi_L|\psi_L\rangle_t|^2$, das Stickstoffatom im links lokalisierten Zustand $|\psi_L\rangle$ zu finden, lautet:

$$|\langle\psi_L|\psi_L\rangle_t|^2 = \cos^2\left\{(E_1^+ - E_1^-)t/(2\hbar)\right\} \qquad (2.38)$$

Der nicht-stationäre Zustand oszilliert also mit Periode

$$T = \frac{2\hbar}{|E_1^+ - E_1^-|}.$$

Es gilt $\delta E = E_1^- - E_1^+ \approx 10^{-4}\,eV$, sodass die Periode der sogenannten <u>Maseroszillationen</u> beim NH_3-Molekül gegeben ist durch $T \approx 4 \cdot 10^{-11}\,s$.

Allgemeine Charakteristika von gebundenen Zuständen bei N-Minima-Potentialen:

- Die Energieeigenzustände bilden Energiebänder (Bänderstruktur).
- Die Breite der Bänder wird durch die Höhen und Breiten der Energiebarrieren bestimmt.
- Auch zwischen den Bändern können Energieeigenzustände auftreten. Diese entsprechen Zuständen, die um Störstellen lokalisiert sind. Diese stellen Abweichungen des Potentials von einer strengen Periodizität dar. Sie treten bspw. an Oberflächen von realen Festkörpern auf.

Der harmonische Oszillator 3

Der harmonische Oszillator ist ein ~~sehr~~ einfaches physikalisches System, welches viele Systeme (z.B. Pendel) im Falle von kleinen Auslenkungen ~~gut~~ in guter Näherung beschreibt. Im Falle eines einzelnen Freiheitsgrad ist der Hamilton-Operator gegeben durch:

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2M} + \frac{1}{2} M \omega^2 \hat{X}^2 \qquad (3.1)$$

Eine charakteristische Eigenschaft des harmonischen Oszillators ist, dass nur gebundene ~~Zust~~ Bewegungen möglich sind. Es ist somit ein rein diskretes Spektrum zu erwarten.

Algebraische Bestimmung des Spektrums 3.1

Die Eigenwerte des Hamilton-Operators (3.1) können aus der kanonischen Kommutatorrelation $[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar \mathbb{1}$ bestimmt werden. Dazu werden „Aufsteige-" und „Absteigeoperatoren" $\hat{a}^+$, bzw. $\hat{a}$, definiert:

$$\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{M\omega/\hbar}\,\hat{X} - i\sqrt{1/(M\hbar\omega)}\,\hat{P}\right) \qquad \text{(Aufsteigeop.)}$$

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{M\omega/\hbar}\,\hat{X} + i\sqrt{1/(M\hbar\omega)}\,\hat{P}\right) \qquad \text{(Absteigeop.)}$$

Diese Operatoren werden auch als <u>Leiteroperatoren</u> bezeichnet. Analog können die Operatoren $\hat{X}$, $\hat{P}$ als Linearkombination von $\hat{a}^+$ und $\hat{a}$ dargestellt werden:

$$\hat{X} = \sqrt{\hbar/(2M\omega)}\,(\hat{a} + \hat{a}^+)$$

$$\hat{P} = \sqrt{2M\hbar\omega}\,\frac{1}{2i}(\hat{a} - \hat{a}^+)$$

Aus der Relation $[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar\mathbb{1}$ folgt ~~dann~~ direkt $[\hat{a}, \hat{a}^+] = \mathbb{1}$. ~~Mit~~ Damit kann der Hamilton-Operator (3.1) dargestellt werden als:

$$\hat{H} = \hbar\omega\,\frac{1}{2}\left(\hat{a}\,\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a}\right) = \hbar\omega\left(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}\right) \qquad (3.4)$$

Es wird nun noch der Operator $\hat{N} := \hat{a}^+\hat{a}$ als Kombination der Leiteroperatoren definiert. Es gilt:

$$[\hat{N}, \hat{a}] = -\hat{a} \qquad [\hat{N}, \hat{a}^+] = \hat{a}^+ \qquad (3.5)$$

Nun wird das Spektrum von $\hat{N}$ konstruiert. Sei dazu $|n\rangle$ ein normierter Eigenzustand von $\hat{N}$ mit Eigenwert n, d.h. $\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$. Dann folgt durch Anwendung des Aufsteigeoperators $\hat{a}^+$ auf $|n\rangle$:

$$\begin{aligned}\hat{N}\,\hat{a}^+|n\rangle &= (\hat{N}\,\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{N} + \hat{a}^+\hat{N})|n\rangle = ([\hat{N}, \hat{a}^+] + \hat{a}^+\hat{N})|n\rangle \\ &= (\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{N})|n\rangle = \hat{a}^+(1 + \hat{N})|n\rangle = \hat{a}^+(1 + n)|n\rangle \\ &= (n+1)\,\hat{a}^+|n\rangle\end{aligned}$$

Somit ist auch $\hat{a}^+|n\rangle$ mit Eigenwert $(n+1)$ ein Eigenzustand von $\hat{N}$.

Analog folgt durch Anwendung von $\hat{a}$ auf $|n\rangle$:

$$\hat{N}\,\hat{a}|n\rangle = (\hat{N}\,\hat{a} - \hat{a}\,\hat{N} + \hat{a}\,\hat{N})|n\rangle = ([\hat{N},\hat{a}] + \hat{a}\,\hat{N})|n\rangle$$
$$= (-\hat{a} + \hat{a}\,\hat{N})|n\rangle = \hat{a}(-1 + \hat{N})|n\rangle = \hat{a}(-1+n)|n\rangle$$
$$= (n-1)\hat{a}|n\rangle$$

Es ist also auch $\hat{a}|n\rangle$ ein Eigenzustand mit Eigenwert $(n-1)$.

Es gilt:

$$\underbrace{\|\hat{a}|n\rangle\|^2}_{\geq 0} = \langle n|\hat{a}^+\hat{a}|n\rangle = \langle n|\hat{N}|n\rangle = n\underbrace{\langle n|n\rangle}_{=1} = n \quad\Longrightarrow\quad n \geq 0$$

Analog gilt:

$$\underbrace{\|\hat{a}^+|n\rangle\|^2}_{\geq 0} = \langle n|\hat{a}\,\hat{a}^+|n\rangle = \langle n|([\hat{a},\hat{a}^+] + \hat{a}^+\hat{a})|n\rangle = \langle n|(\cancel{\hat{N}}1 + \hat{N})|n\rangle$$
$$= (n+1)\underbrace{\langle n|n\rangle}_{=1} = n+1 \quad\Longrightarrow\quad n+1 \geq 0$$

Aus der Beziehung $n \geq 0$ folgt, dass $n \in \mathbb{N}_0$ gelten muss. Wäre ~~ε~~ $\varepsilon \in (0,1)$ ein Eigenwert von $\hat{N}$ mit Eigenzustand $|\varepsilon\rangle$, dann müsste nach den vorherigen Aussagen auch ~~$|\varepsilon$~~ $\hat{a}|\varepsilon\rangle$ ein Eigenzustand zum Eigenwert $(\varepsilon - 1) < 0$ sein. Es muss aber $(\varepsilon - 1) \geq 0$ gelten, da durch $\|\hat{a}|n\rangle\|^2 \geq 0$ jeder Eigenwert nicht-negativ sein muss. Da durch $\hat{a}^+$ und $\hat{a}$ nur ganzzahlige Schritte generiert werden, gilt somit ~~$Sp(\hat{N}) = \mathbb{N}_0$~~. $Sp(\hat{N}) = \mathbb{N}_0$.*

$\square$

Ein Unterschreiten des Eigenwerts $n=0$ wird durch die Relation $0 \leq \|\hat{a}|n\rangle\|^2 = n$ verhindert. Da ~~ein St~~ eine Norm Null ist gdw. sie auf den Nullvektor angewendet wird, gilt für den Eigenwert 0 mit zugehörigem Eigenvektor $|0\rangle$:

$$\|\hat{a}|0\rangle\|^2 = 0 \quad\Longleftrightarrow\quad \hat{a}|0\rangle = 0 \quad\Longrightarrow\quad \hat{a}^m|0\rangle = 0,\quad m \in \mathbb{N}.$$

Der Zustand $|0\rangle$ bzw. der Eigenwert 0 kann somit nicht unterschritten werden.

$\square$

Der Grundzustand $|0\rangle$ ~~, ist,~~ („die letzte Sprosse der Leiter") ist nicht entartet und ~~(in der Ortsbasis)~~ (bis auf ein Phase) eindeutig bestimmt:

$$\langle x|0\rangle = \left(\frac{M\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left\{-\frac{M\omega x^2}{2\hbar}\right\} \tag{3.8}$$

Aus diesen Folgerungen ergeben sich die wichtigen Aussagen, dass $Sp(\hat{N}) = \mathbb{N}_0$ und dass die ~~Eigenfunktionen von~~ Energieeigenwerte nicht entartet sind.

*Daraus folgt wegen $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{N} + \frac{1}{2}) \Rightarrow Sp(\hat{H}) = \{\hbar\omega(n+\frac{1}{2}) \mid n \in \mathbb{N}_0\}$.

Für den D-dimensionalen harmonischen Oszillator ~~ergibt~~ berechnet sich das Spektrum analog zu:

$$E_{n_1,\dots,n_D} = \sum_{j=1}^{D} \hbar\omega\left(n_j + \frac{1}{2}\right), \qquad n_j \in \mathbb{N}_0$$

Dabei werden mehrere Leiteroperatoren $\hat{a}_i$, $\hat{a}_i^+$ verwendet, für die gilt:

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^+] = \delta_{ij} \qquad [\hat{a}_i, \hat{a}_j] = [\hat{a}_i^+, \hat{a}_j^+] = 0$$

Anmerkung: Für den eindimensionalen harmonischen Oszillator ist die ~~Bo~~ semiklassische (Bohr-Sommerfeld'sche) Quantisierungsbedingung

$$\int_{x_<}^{x_>} dx \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\left(E - V(x)\right)} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi$$

mit $V(x_<) = V(x_>) = 0$ exakt.

Energieeigenzustände eines eindimensionalen harmonischen Oszillators 3.2

Aus den vorherigen Überlegungen folgt für normierte Eigenzustände $|n\rangle$ mit $\langle n|n\rangle = 1$:

$$\hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle, \qquad n \geq 0$$
$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle, \qquad n \geq 0 \qquad (3.11)$$

Dabei wurde die Phase von $|n\rangle$ so festgelegt, dass die Matrixelemente von $\hat{a}$, $\hat{a}^+$ reell sind. Es gelten die Orthonormalitäts- und Vollständigkeitsrelationen:

$$\delta_{nm} = \langle n|m\rangle$$
$$\mathbb{1} = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n|$$

Durch sukzessive Anwendung des Aufsteigeoperators $\hat{a}^+$ lässt sich jeder Zustand $|n\rangle$ aus dem Grundzustand $|0\rangle$ konstruieren:

$$|n\rangle = \frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle \qquad (3.14)$$

Für die Eigenzustände $|n\rangle$ gilt:

$$\hat{X}|n\rangle = \sqrt{\hbar/(2m\omega)}\left(\sqrt{n}\,|n-1\rangle + \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle\right)$$
$$x\langle x|n\rangle = \sqrt{\hbar/(2m\omega)}\left(\sqrt{n}\,\langle x|n-1\rangle + \sqrt{n+1}\,\langle x|n+1\rangle\right) \qquad (3.15)$$

Die Lösungen der Rekursionsformel (3.15) sind die normierten Zustände

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

mit $\xi := x\sqrt{M\omega/\hbar}$ und den Hermite-Polynomen

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

Die Hermite-Polynome erfüllen die Rekursionsformel

$$\alpha x H_n(\alpha x) = n H_{n-1}(\alpha x) + \frac{1}{2} H_{n+1}(\alpha x)$$

und besitzen die erzeugende Funktion

$$\exp\{-s^2 + 2sz\} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} H_n(z).$$

Für die Erwartungswerte von Orts- und Impulsoperator sowie deren Varianzen gilt:

$$\begin{aligned} \langle\hat{x}\rangle &= 0 \\ \langle\hat{p}\rangle &= 0 \\ (\Delta\hat{x})^2 &= \frac{\hbar}{M\omega}\left(n+\frac{1}{2}\right) \\ (\Delta\hat{p})^2 &= M\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) \end{aligned} \qquad (3.20)$$

~~Dabei ist~~ $\cancel{\langle(\hat{x}^2 = \langle(\hat{x}-\langle\hat{x}\rangle)^2\rangle}$.

Dabei ist $(\Delta\hat{x})^2 := \langle(\hat{x}-\langle\hat{x}\rangle)^2\rangle = \langle\hat{x}^2\rangle - \langle\hat{x}\rangle^2$. Es gilt

$$\Delta\hat{x}\,\Delta\hat{p} = \hbar\left(n+\frac{1}{2}\right),$$

d.h. nur der Grundzustand $|0\rangle$ mit $n=0$ ist ein Zustand ~~minim~~ minimaler Unschärfe.

~~Bemerkungen:~~

- ~~Für~~ $\cancel{\hat{A}=\hat{x},\ \hat{B}=\hat{p}}$ ~~gilt~~ $\cancel{(\Delta x)(\Delta p) \geq \frac{\hbar}{2}}$ ~~für alle Zustände. Dabei ist interessanterweise die untere Schranke unabhängig vom Zustand und vom betrachteten System. Zustände minimaler Unschärfe bzgl.~~ $\cancel{\hat{x}}$ ~~und~~ $\cancel{\hat{p}}$ ~~haben die Form~~

$$\cancel{\langle x|\psi\rangle = \frac{1}{(2\pi(\Delta x)^2)^{1/4}} \exp\left\{-\frac{(x-\langle\hat{x}\rangle)^2}{4(\Delta x)^2} + ix\frac{\langle\hat{p}\rangle}{\hbar}\right\}}$$

~~mit~~ $\cancel{\Delta x \Delta p = \hbar/2}$. ~~Die Lösungen sind für verschiedene Werte von~~ $\cancel{\langle\hat{x}\rangle, \langle\hat{p}\rangle, (\Delta x)^2}$ ~~nicht orthogonal, d.h. alle Zustände minimaler Unschärfe bzgl.~~ $\cancel{\hat{x}, \hat{p}}$ ~~sind rein.~~

Unschärferelation

3.3

Eine fundamentale Eigenschaft der Quantenmechanik ist die Nicht-kommutativität von physikalischen Variablen, bzw. deren Operatoren. Daher existiert keine gemeinsame („absolute") ~~Basis~~ Basis, in der alle ~~phy~~ ~~Ob~~ Observablen diagonal werden. Diese Eigenschaft wird durch die Unschärferelation charakterisiert.

Für zwei selbstadjungierte Operatoren $\hat{A}, \hat{B}$ gilt

$$(\Delta A)(\Delta B) \geq \frac{1}{2}\left|\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle\right| \tag{3.22}$$

mit den Unschärfen und Erwartungswerten

$$(\Delta A)^2 := \mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}\,(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle)^2\right) \qquad \langle\hat{A}\rangle := \mathrm{Tr}(\hat{\rho}\,\hat{A})$$

$$(\Delta B)^2 := \mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}\,(\hat{B} - \langle\hat{B}\rangle)^2\right) \qquad \langle\hat{B}\rangle := \mathrm{Tr}(\hat{\rho}\,\hat{B})$$

im (gemischten) Zustand $\hat{\rho}$.

Für einen reinen Zustand $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$ minimaler Unschärfe bzgl. $\hat{A}$ und $\hat{B}$ gilt mit $\hat{T} := \hat{A}_0 + i\mu\hat{B}_0$, $\hat{A}_0 := \hat{A} - \langle\hat{A}\rangle$, $\hat{B}_0 := \hat{B} - \langle\hat{B}\rangle$ und $\mu = i\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle/(2\langle\hat{B}_0^2\rangle)$:

$$\hat{T}^\dagger|\psi\rangle = 0 \qquad \Leftrightarrow \qquad \left(\hat{A}_0 \pm \frac{\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle}{2\langle\hat{B}_0^2\rangle}\hat{B}_0\right)|\psi\rangle = 0 \tag{3.27}$$

Sind alle Lösungen dieser Gleichung nicht orthogonal, d.h. $\langle\psi|\psi'\rangle \neq 0$, sind alle möglichen Zustände minimaler Unschärfe (bzgl. $\hat{A}$ und $\hat{B}$) rein.

Bemerkungen:

- Für $\hat{A} = \hat{X}$, $\hat{B} = \hat{P}$ gilt $(\Delta X)(\Delta P) \geq \frac{\hbar}{2}$, d.h. die untere Schranke für die Unschärfe ist unabhängig vom betrachteten System und dem vorliegenden Zustand. Reine Zustände minimaler Unschärfe erfüllen die Relation

$$\left(\hat{X} - \langle\hat{X}\rangle + i\,(\hat{P} - \langle\hat{P}\rangle)\frac{\hbar}{2(\Delta P)^2}\right)|\psi\rangle = 0$$

die durch die Zustände

$$\langle x|\psi\rangle = \frac{1}{(2\pi(\Delta X)^2)^{1/4}} \exp\left\{-\frac{(x - \langle\hat{X}\rangle)^2}{4(\Delta X)^2} + ix\frac{\langle\hat{P}\rangle}{\hbar}\right\}$$

mit $(\Delta X)(\Delta P) = \hbar/2$ gelöst wird. Die Lösungen sind für verschiedene Werte von $\langle\hat{X}\rangle$, $\langle\hat{P}\rangle$, (ΔX) nicht orthogonal, d.h. alle Zustände minimaler Unschärfe bzgl. $\hat{X}, \hat{P}$ sind rein.

- Es gibt auch die stärkere (und komplexere) Unschärferelation

$$(\Delta A)^2(\Delta B)^2 \geq \frac{1}{4}\left(\left|\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle\right|^2 + \left|\langle\hat{A}_0\hat{B}_0\rangle + \langle\hat{B}_0\hat{A}_0\rangle\right|^2\right).$$

Kohärente Zustände 3.4

Der ~~Gru~~ Grundzustand $|0\rangle$ des harmonischen Oszillators ist ein ~~Zustand~~ Zustand minimaler Unschärfe ~~ct~~ und bleibt dies in der Zeitentwicklung auch. Im Allgemeinen gibt es bei Quantensystemen solche Zustände nicht, d.h. es kann kein allgemeiner Formalismus gefunden werden, um ~~Zust~~ (im Bezug auf die Unschärfe) stationäre ~~Zust~~ Zustände minimaler Unschärfe zu finden. Bei dem harmonischen Oszillator gibt es sogar unendlich viele solcher Zustände! Sie werden als <u>kohärente Zustände</u> bezeichnet.

Konstruktion kohärenter Zustände: 3.4.1

Es wird zunächst der ~~Operator~~ unitäre Operator

$$\hat{D}(\alpha) := \exp\left\{ \alpha \hat{a}^+ - \alpha^* \hat{a} \right\} \qquad \text{mit} \quad \alpha \in \mathbb{C} \tag{3.32}$$

und den Auf- und Absteigeoperatoren $\hat{a}^+$, bzw. $\hat{a}$, betrachtet. Es gilt:

- $\hat{D}^+(\alpha) = \hat{D}^{-1}(\alpha) = \hat{D}(-\alpha)$
- $\hat{D}^+(\alpha)\,\hat{a}\,\hat{D}(\alpha) = \hat{a} + \alpha$
- $\hat{D}^+(\alpha)\,\hat{a}^+\hat{D}(\alpha) = \hat{a}^+ + \alpha^*$

Mit dem Operator $\hat{D}(\alpha)$ ist ein ~~kö~~ kohärenter Zustand $|\alpha\rangle$ definiert als:

$$|\alpha\rangle := \hat{D}(\alpha)|0\rangle \qquad \text{für} \quad \alpha \in \mathbb{C}$$

Eigenschaften kohärenter Zustände: {3.4.2}

- Es gilt: (3.38)

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$$

- In der Energiebasis $\{|n\rangle\}$ gilt:

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-|\alpha|^2/2} |n\rangle \tag{3.41}$$

- Kohärente Zustände $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$ sind nicht orthogonal:

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \exp\left\{ -\tfrac{1}{2}\left(|\alpha|^2 + |\beta|^2\right) + \alpha\beta^* \right\} \tag{3.44}$$

- Kohärente Zustände bilden eine nicht-orthogonale Basis des Hilbertraums $\mathcal{H} = L_2(\mathbb{R})$ mit der Vollständigkeitsrelation

$$\frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{C}} d^2\alpha \, |\alpha\rangle\langle\alpha| = \mathbb{1}. \tag{3.46}$$

- Infolge der Zeitentwicklung mit dem Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}(t) = \exp\{-i\hat{H}t/\hbar\}$ bleiben kohärente Zustände für alle Zeiten kohärent, d.h. es gilt:

$$e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\alpha\rangle = e^{-i\omega t/2}|\alpha e^{-i\omega t}\rangle \tag{3.48}$$

- In der Ortsdarstellung gilt

$$\langle x|\alpha\rangle = e^{i\varphi_\alpha} e^{ix\langle\hat{P}\rangle_\alpha/\hbar} \exp\left\{-\left[\frac{x-\langle\hat{X}\rangle_\alpha}{2\Delta X}\right]^2\right\} \left(\frac{M\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \tag{3.50}$$

mit $\varphi_\alpha := -\mathrm{Re}(\alpha)\mathrm{Im}(\alpha)$, $\langle\hat{X}\rangle_\alpha := \sqrt{\frac{2\hbar}{M\omega}}\,\mathrm{Re}(\alpha)$, $\langle\hat{P}\rangle_\alpha := \sqrt{2M\hbar\omega}\,\mathrm{Im}(\alpha)$,
~~$\Delta X =$~~ $\Delta X = \sqrt{\hbar/(2M\omega)}$.

- Zeitentwicklung einiger Mittelwerte (mit $\alpha \equiv |\alpha| e^{i\varphi}$):

$$\langle\hat{X}\rangle_t = \sqrt{\hbar/(2M\omega)}\, 2\,\mathrm{Re}(\alpha e^{-i\omega t})$$
$$= 2|\alpha|\sqrt{\hbar/(2M\omega)}\cos(\omega t - \varphi) \tag{3.52}$$

$$\langle\hat{P}\rangle_t = -2|\alpha|\sqrt{M\hbar\omega/2}\,\sin(\omega t - \varphi) \tag{3.53}$$

$$\left.\begin{aligned}(\Delta X)^2 &= \hbar/(2M\omega)\\ (\Delta P)^2 &= M\hbar\omega/2\end{aligned}\right\} (\Delta X)(\Delta P) = \frac{\hbar}{2} \quad \text{zeitunabhängig}$$

Die Zeitentwicklung der Mittelwerte ist ähnlich zu der klassischen Dynamik. Insbesondere gibt es bei kohärenten Zuständen kein „Zerfließen" als Folge der Zeitentwicklung.

Allgemein ~~gelten~~ gilt für den harmonischen Oszillator für alle Zustände für die Mittelwerte von Ort und Impuls:

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{P}\rangle_t = -M\omega^2\langle\hat{X}\rangle_t$$
$$\frac{d}{dt}\langle\hat{X}\rangle_t = \frac{1}{m}\langle\hat{P}\rangle_t$$

Diese Bewegungsgleichungen sind analog zu den klassischen Bewegungsgleichungen, d.h. $\langle\hat{X}\rangle_t$ und $\langle\hat{P}\rangle_t$ erfüllen die klassischen Bewegungsgleichungen.

<u>Beispiel:</u> Für ein makroskopisches Pendel mit $M = 1\,\mathrm{kg}$, $l = \frac{1}{10}\mathrm{m}$, $g \approx 10\,\mathrm{ms}^{-2}$, $\omega \equiv \sqrt{g/l} \approx 10\,\mathrm{s}^{-1}$ gilt für einen kohärenten Zustand:

$$\Delta X \approx \sqrt{5}\cdot 10^{-18}\,\mathrm{m} \qquad \Delta P \approx \sqrt{5}\cdot 10^{-17}\,\mathrm{kg\,m\,s^{-1}}$$

Symmetrien, Invarianzen, Erhaltungsgrößen 4

Symmetrietransformationen und Wigners Theorem 4.1

Eine Symmetrie ist die physikalische Ununterscheidbarkeit von

- verschiedenen Beschreibungen des selben Sachverhalts von verschiedenen Bezugssystemen aus (passive Interpretation), oder
- die Ununterscheidbarkeit nicht identischer Situationen von einem Bezugssystem aus ~~bt~~ betrachtet (aktive Interpretation).

Bei der passiven Interpretation wird die gleiche Situation von zwei verschiedenen Bezugssystemen aus beschrieben, d.h.:

	Labor 1		Labor 2
Zustand	$\hat{\rho} = \|\psi\rangle\langle\psi\|$	$\xrightarrow{\tau}$	$\hat{\rho}' = \|\psi'\rangle\langle\psi'\|$
physikalische Variable	$\hat{A} = \sum_i a_i \|i\rangle\langle i\|$	$\xrightarrow{\tau}$	$\hat{A}' = \sum_{i'} a_{i'} \|i'\rangle\langle i'\|$

Die betrachtete Transformation τ kann dabei zunächst beliebig sein. Die physikalischen Variablen $\hat{A}, \hat{A}'$ besitzen das gleiche Spektrum, d.h. die selben möglichen Messwerte, die zugeordneten Eigenzustände sind aber i.A. verschieden. Damit die Versuchsergebnisse ununterscheidbar sind, muss für alle reinen Quantenzustände $|\psi\rangle, |i\rangle$ sowie die durch die Transformation τ zugeordneten Zustände $|\psi'\rangle, |i'\rangle$ gelten:

$$|\langle i|\psi\rangle|^2 = |\langle i'|\psi'\rangle|^2$$

Bei der aktiven Interpretation werden unterschiedliche Situationen $(\hat{\rho}, \hat{A})$ und $(\hat{\rho}', \hat{A}')$ betrachtet, d.h.:

	Situation 1		Situation 2
Zustand	$\hat{\rho} = \|\psi\rangle\langle\psi\|$	$\xrightarrow{\tau}$	$\hat{\rho}' = \|\psi'\rangle\langle\psi'\|$
physikalische Variable	$\hat{A} = \sum_i a_i \|i\rangle\langle i\|$	$\xrightarrow{\tau}$	$\hat{A}' = \sum_{i'} a_{i'} \|i'\rangle\langle i'\|$

Die Transformation τ ist dabei derart, dass die Versuchsergebnisse übereinstimmen:

$$|\langle i|\psi\rangle|^2 = |\langle i'|\psi'\rangle|^2$$

Nach dem Theorem von E.P. Wigner (1931) gilt:

Jede Symmetrietransformation τ wird in der Quantentheorie durch einen unitären linearen oder unitären antilinearen Operator $\hat{U}(\tau)$ repräsentiert. Kontinuierliche Symmetrietransformationen müssen dabei durch unitäre lineare Operatoren dargestellt werden.

Für zwei ~~durche~~ durch eine Symmetrietransformation verknüpfte ON-Basissysteme $\{|i\rangle\}$ und $\{|i'\rangle\}$ gilt also:

$$|i'\rangle = \hat{U}(\tau)|i\rangle \quad \rightarrow \quad |\psi'\rangle = \hat{U}(\tau)|\psi\rangle$$

Translationen: Für eine Translation $\tau_{\vec{a}}$ definiert durch

$$\vec{x}' = \vec{x} + \vec{a} \qquad \vec{p}' = \vec{p}$$

muss als Symmetrietransformation gelten:

$$|\langle\vec{x}|\psi\rangle|^2 = |\langle\vec{x}'|\psi'\rangle|^2 \qquad |\langle\vec{p}|\psi\rangle|^2 = |\langle\vec{p}'|\psi'\rangle|^2$$

Diese Bedingung wird durch die $\underset{\text{unitäre}}{}$ lineare Transformation

$$\hat{U}(\vec{a}) = e^{-i\vec{\hat{P}}\cdot\vec{a}/\hbar} \tag{4.66}$$

erfüllt.

Rotationen: Für eine Rotation τ_R definiert durch

$$\vec{x}' = R(\vec{\omega})\vec{x} \qquad \vec{p}' = R(\vec{\omega})\vec{p}$$

mit der orthogonalen Drehmatrix $R(\vec{\omega})$* muss als Symmetrietransformation gelten:

$$|\langle\vec{x}|\psi\rangle|^2 = |\langle\vec{x}'|\psi'\rangle|^2 \qquad |\langle\vec{p}|\psi\rangle|^2 = |\langle\vec{p}'|\psi'\rangle|^2$$

Diese Bedingung wird durch die unitäre lineare Transformation

$$\hat{U}(\vec{\omega}) = e^{-i\vec{\hat{J}}\cdot\vec{\omega}/\hbar} \tag{4.70}$$

mit dem Bahndrehimpulsoperator $\vec{\hat{J}} = \vec{\hat{X}} \times \vec{\hat{P}}$ erfüllt. Dabei beschreibt $\vec{\omega}$ den Drehwinkel $|\vec{\omega}|$ und die Drehrichtung ~~$\vec{\omega}/|\vec{\omega}|$~~ $\vec{\omega}/|\vec{\omega}|$.

Für die Drehmatrix $R(\vec{\omega})$ gilt mit $\omega := |\vec{\omega}|$, $\vec{e} := \vec{\omega}/|\vec{\omega}|$:

~~$\vec{\omega}$)~~

$$R(\omega\vec{e}) = \cos(\omega)\mathbb{1} + \sin(\omega)\,\vec{e}\times\mathbb{1} + \vec{e}\otimes\vec{e}\,(1-\cos(\omega))$$

$$\Longrightarrow \quad R(\omega\vec{e})\vec{x} = \cos(\omega)\vec{x} + \sin(\omega)\,\vec{e}\times\vec{x} + (1-\cos(\omega))\,\vec{e}\,(\vec{e}\cdot\vec{x})$$

* Es gilt $R^{-1}(\vec{\omega}) = R(-\vec{\omega}) = R^T(\vec{\omega})$.

Für ein freies, strukturloses, klassisches, nicht-relativistisches Punktteilchen bildet die (eigentliche, orthochrone) Galilei Gruppe

$$t' = t + s$$

$$\vec{x}' = R(\vec{\omega})\vec{x} + \vec{a} + \vec{v}\, t$$

eine kontinuierliche Symmetriegruppe mit den zehn unabhängigen Parametern $(s, \vec{a}, \vec{v}, \vec{\omega})$.

Aus Wigners Theorem, der Forderung, dass die Symmetriegruppe auch für ein Quant gilt, und der Forderung, dass $\{\hat{X}_1, \hat{X}_2, \hat{X}_3\}$ ein v.S.k.O. bilden, ergibt sich die vollständige quantentheoretische Beschreibung eines solchen Punktquants. Insbesondere für Translationen in der Zeit (Parameter s) und ~~d~~ den eigentlichen Galilei-Transformationen (Parameter $\vec{v}$) gilt:

$$\hat{U}(s) = e^{i\hat{H}s/\hbar} \quad \text{mit} \quad \hat{H} = \vec{\hat{P}}^2/(2M)$$
$$\hat{U}(\vec{v}) = e^{i\vec{\hat{G}}\cdot\vec{v}/\hbar} \quad \text{mit} \quad \vec{\hat{G}} = M\vec{\hat{X}} - t\,\vec{\hat{P}} \qquad (4.74)$$

Bei den eigentlichen Galilei-Transformationen ist es wichtig, dass „nur"

$$|\langle\vec{x}|\psi\rangle|^2 = |\langle\vec{x} + \vec{v}\,t|\psi'\rangle|^2 \qquad |\langle\vec{p}|\psi\rangle|^2 = |\langle\vec{p} \pm M\vec{v}|\psi'\rangle|^2$$

gelten muss und keine Gleichheit der Wahrscheinlichkeitsamplituden. Diese wird bei den eigentlichen Galilei-Transformationen mit einer komplexen Phase $e^{i\varphi}$ multipliziert. Daraus folgt, dass die Galilei-Gruppe nur eine Symmetriegruppe ist, wenn keine Zustände verschiedener ~~Maßen~~ Massen* superponiert werden! Dies ist ein Spezialfall der Superauswahlregel (Abschnitt 5.6).

Invarianztransformationen 4.2

Eine Symmetrietransformation $\hat{U}(\tau)$ heißt Invarianztransformation, falls für den Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}(t)$ für alle Zeiten t zusätzlich gilt:

$$\hat{U}(\tau)\hat{U}(t) = \hat{U}(t)\hat{U}(\tau) \qquad (4.75)$$

Diese Kommutativität gewährleistet, dass die gesamte Dynamik symmetrisch bzgl. $\hat{U}(\tau)$ ist. Da die Zeitentwicklung selbst eine kontinuierliche Transformation ist, ist die Relation (4.75) äquivalent zu

$$[\hat{H}, \hat{U}(\tau)] = 0. \qquad (4.76)$$

Ist $\hat{U}(\tau) = e^{i\hat{V}\tau}$ mit dem Generator $\hat{V}$, dann sind (4.75) und (4.76) äquivalent zu

$$[\hat{H}, \hat{V}] = 0$$

* Die Phase ist Massenabhängig.

Erhaltungsgrößen, Invarianzen und Auswahlregeln

Im Heisenberg-Bild gilt für jede physikalische Variable $\hat{A}$:

$$\hat{A}(t) = \hat{U}^+(t)\hat{A}\,\hat{U}(t) \qquad \text{mit} \qquad i\hbar \frac{d}{dt}\hat{U}(t) = \hat{H}\,\hat{U}(t)$$

mit $\hat{U}(t_0) = \mathbb{1}$. Daher gilt im Heisenberg-Bild für $\hat{A}(t)$ die Heisenberg'sche Bewegungsgleichung

$$-i\hbar \frac{d}{dt}\hat{A}(t) = \left[\hat{H}, \hat{A}(t)\right]$$

Daher ist jede ~~physiklas~~ physikalische Variable die mit $\hat{H}$ kommutiert eine Erhaltungsgröße. Generatoren von kontinuierlichen Invarianzen sind daher immer Erhaltungsgrößen.

Für ein freies Punktquant gilt:

$\left[\hat{H}, \vec{P}\right] = 0 \quad \Longrightarrow$ Translationsinvarianz, Impulserhaltung

$\left[\hat{H}, \vec{J}\right] = 0 \quad \Longrightarrow$ Rotationsinvarianz, Drehimpulserhaltung

$\left[\hat{H}, \hat{H}\right] = 0 \quad \Longrightarrow$ zeitliche Translationsinvarianz, Energieerhaltung

$\left[\hat{H}, \vec{G}\right] \neq 0 \quad \Longrightarrow$ eigentliche Galilei-Transformationen sind zwar ~~Sym~~ Symmetrie- aber keine Invarianztransformationen

Für Erhaltungsgrößen gelten Auswahlregeln: Sei $\hat{A} = \sum_\alpha a_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha|$ und $[\hat{H}, \hat{A}] = 0$, dann ~~gilt~~ gilt

$$\langle\alpha|[\hat{A}, \hat{H}]|\alpha'\rangle = (a_\alpha - a_{\alpha'})\langle\alpha|\hat{H}|\alpha'\rangle = 0,$$

d.h. es gilt $\langle\alpha|\hat{H}|\alpha'\rangle = 0$ für $a_\alpha \neq a_{\alpha'}$. Eigenzustände, die verschiedenen Eigenwerten entsprechen, sind somit nicht dynamisch gekoppelt, d.h. die Variablen beeinflussen sich in der Zeitentwicklung.

Der Drehimpuls

Wie auch in der klassischen Physik ist der Drehimpuls eine relevante Größe bei der ~~Br~~ Beschreibung von Rotationen und die Drehimpulsoperatoren sind die Generatoren von Rotationen um eine raumfeste Achse.

Die Wirkung des Drehimpulsoperator $\hat{\vec{J}}$ ~~ist dabei eine Drehung~~ auf die Raumbasis $\{|\vec{x}\rangle\}$ ist dabei eine Drehung um eine feste Achse $\vec{\omega}$,

$$|R(\vec{\omega})\vec{x}\rangle = e^{-i\hat{\vec{J}}\cdot\vec{\omega}/\hbar}|\vec{x}\rangle,$$

bzw. einer Drehung des Zustands,

$$\langle\vec{x}'|\psi'\rangle = \langle\vec{x}'|e^{-i\hat{\vec{J}}\cdot\vec{\omega}/\hbar}|\psi\rangle = \langle R^{-1}(\vec{\omega})\,\vec{x}\,|\psi\rangle.$$

Lokal (d.h. für „kleine" Drehungen) gilt für die kartesischen Komponenten ~~L~~ $\hat{J}_k$ vom Drehimpulsoperator $\hat{\vec{J}}$ die Kommutatorrelation*

$$[\hat{J}_k, \hat{J}_l] = i\,\hbar\,\epsilon_{klm}\,\hat{J}_m.$$

Gilt $[\hat{H}, \hat{\vec{J}}]=0$, so ist die gesamte Dynamik ~~dreh~~ rotationsinvariant und der Drehimpuls ist erhalten.

Für ein strukturloses Punktquant gilt $\hat{\vec{J}}=\hat{\vec{X}}\times\hat{\vec{P}}$, d.h. der Bahndrehimpulsoperator ~~*~~ ist der einzige Generator für Rotationen. Im Allgemeinen existiert jedoch noch eine allgemeinere Form für den Generator von Rotationen, falls das Punktquant ~~w~~ noch einen weiteren Freiheitsgrad, den Spin, trägt.

* Es gilt die Einstein'sche Summenkonvention.

Algebraische Bestimmung der möglichen Eigenwerte und Eigenräume

5.1

Die möglichen Eigenwerte des allgemeinsten Drehimpulsoperators lassen sich aus den fundamentalen Kommutatorbeziehungen

$$[\hat{J}_k, \hat{J}_l] = \epsilon_{klm} i\hbar \hat{J}_m$$

bestimmen. Dazu werden die gemeinsamen Eigenwerten und -zustände von $\hat{\vec{J}}^2 := \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 + \hat{J}_3^2$ und ~~einem~~ einer anderen Kartesischen ~~Koordinat~~ Komponente des Drehimpulsoperators bestimmt. Dies ist möglich, da $\{\hat{\vec{J}}, \hat{J}_k\}$ für ein $k \in \{1, 2, 3\}$ ein v.S.k.O. bilden, d.h. es gilt

$$[\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_1] = [\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_2] = [\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_3] = 0. \tag{5.10}$$

Es werden ~~als~~ bspw. die gemeinsamen Eigenzustände von $\hat{\vec{J}}^2$ und $\hat{J}_3$ gesucht, d.h.

$$\cancel{\hat{\vec{J}}^2|} \qquad \hat{\vec{J}}^2 |\beta, m\rangle = \hbar^2 \beta |\beta, m\rangle$$

$$\cancel{\hat{J}_3|} \qquad \hat{J}_3 |\beta, m\rangle = \hbar\, m |\beta, m\rangle \qquad \text{mit} \quad \langle \beta, m | \beta, m\rangle \neq 0.$$

~~Es gi~~ Dabei gilt $\beta \geq m^2$:

$$\underbrace{\langle \beta, m | \hat{\vec{J}}^2 | \beta, m\rangle}_{=\hbar^2\beta\langle\beta,m|\beta,m\rangle} = \underbrace{\langle \beta, m | \hat{J}_1^2 | \beta, m\rangle}_{=\|\hat{J}_1|\beta,m\rangle\|^2 \geq 0} + \underbrace{\langle \beta, m | \hat{J}_2^2 | \beta, m\rangle}_{=\|\hat{J}_2|\beta,m\rangle\|^2 \geq 0} + \underbrace{\langle \beta, m | \hat{J}_3^2 | \beta, m\rangle}_{=\hbar^2 m^2\langle\beta,m|\beta,m\rangle}$$

$$\geq \hbar^2 m^2 \langle \beta, m | \beta, m\rangle \quad \Leftrightarrow \quad \beta \geq m^2$$

~~Nun~~ Nun werden Auf-/Absteigeoperatoren $\hat{J}_\pm := \hat{J}_1 \pm i \hat{J}_2$ definiert, für die die Kommutatorrelationen

$$[\hat{J}_3, \hat{J}_\pm] = \pm\hbar \hat{J}_\pm \qquad [\hat{J}_+, \hat{J}_-] = 2\hbar \hat{J}_3 \tag{5.13}$$

gelten. Dann gilt:

$$\hat{J}_3 \hat{J}_\pm |\beta, m\rangle = (\hat{J}_\pm \hat{J}_3 + [\hat{J}_3, \hat{J}_\pm]) |\beta, m\rangle = (\hat{J}_\pm \hat{J}_3 \pm \hbar \hat{J}_\pm) |\beta, m\rangle$$

$$= \hat{J}_\pm (\hat{J}_3 \pm \hbar) |\beta, m\rangle = \hat{J}_\pm (\hbar m \pm \hbar) |\beta, m\rangle$$

$$= \hbar (m \pm 1) \hat{J}_\pm |\beta, m\rangle$$

Die Auf- und Absteigeoperatoren $\hat{J}_\pm$ steigen also – wie schon beim harmonischen Oszillator – in ganzzahligen Schritten die Eigenwerte und -zustände auf und ab.

Sei nun ~~β~~ β fest und $m=j$ der maximale Wert von $m^2 \leq \beta$, dann muss die Anwendung des Aufsteigeoperators verschwinden, d.h. es muss

$$\hat{J}_+|\beta,j\rangle = 0$$

gelten. Da $\hat{J}_- 0 = 0$ gilt, muss auch $\hat{J}_-\hat{J}_+|\beta,j\rangle = 0$ gelten. Mit der Beziehung

$$\hat{J}_-\hat{J}_+ = (\hat{J}_1 - i\hat{J}_2)(\hat{J}_1 + i\hat{J}_2) = \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 - \hbar\hat{J}_3$$

gilt folglich (mit $|\beta,j\rangle \neq 0$):

$$0 = \hat{J}_-\hat{J}_+|\beta,j\rangle = (\hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 - \hbar\hat{J}_3)|\beta,j\rangle = (\hat{\vec{J}}^2 - \hat{J}_3^2 - \hbar\hat{J}_3)|\beta,j\rangle$$
$$= (\hbar^2\beta - \hbar^2 j^2 - \hbar^2 j)|\beta,j\rangle$$

$$\overset{|\beta,j\rangle \neq 0}{\Leftrightarrow} \quad 0 = \beta - j^2 - j \quad \Leftrightarrow \quad \beta = j(j+1)$$

Analog sei nun β fest und $m=k$ der ~~kleinste Wert von~~ minimale Wert von $m^2 \leq k$, dann muss die Anwendung des Absteigeoperators verschwinden, d.h. es muss

$$\hat{J}_-|\beta,k\rangle = 0$$

gelten. Es folgt:

$$0 = \hat{J}_+\hat{J}_-|\beta,k\rangle = (\underbrace{[\hat{J}_+,\hat{J}_-]}_{=2\hbar\hat{J}_3} + \hat{J}_-\hat{J}_+)|\beta,k\rangle = (2\hbar\hat{J}_3 + \hat{J}_-\hat{J}_+)|\beta,k\rangle$$
$$= (2\hbar\hat{J}_3 + \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 - \hbar\hat{J}_3)|\beta,k\rangle$$
$$= (2\hbar\hat{J}_3 + \hat{\vec{J}}^2 - \hat{J}_3^2 - \hbar\hat{J}_3)|\beta,k\rangle$$
$$\cancel{= (2\hbar^2 k + \hbar^2 k^2 \beta^2}$$
$$= (2\hbar^2 k + \hbar^2\beta - \hbar^2 k^2 - \hbar^2 k)|\beta,k\rangle$$
$$= (\hbar^2\beta - \hbar^2 k^2 + \hbar^2 k)|\beta,k\rangle$$

$$\overset{|\beta,k\rangle \neq 0}{\Leftrightarrow} \quad 0 = \beta - k^2 + k \quad \Leftrightarrow \quad \beta = (-k)(-k+1)$$

Zusammengesetzt muss also $j(j+1) = (-k)(-k+1)$ gelten. Diese Gleichung ist für $j \in \{-k, k-1\}$ ~~det~~ gültig. Da aber $j \geq k$ ~~ge~~ gelten muss (per Definition), ist nur $j=-k$ mit $k \leq 0$ eine gültige Lösung.*

Da nur ganzzahlige Schritte gemacht werden können, ~~gilt~~ gibt es schließlich nur Eigenwerte (β, m) mit $-j \leq m \leq j$, $\beta = j(j+1)$. Aus der Ganzzahligkeit der Schritte folgt schließlich (in ähnlicher Argumentation wie beim harmonischen Oszillator) $j = n/2$, $n \in \mathbb{N}_0$.

* Es muss $j \geq 0$ gelten wegen $j^2 + j = \beta \geq m^2$, $\beta, m \in \mathbb{R}$.

Beispiele für mögliche Eigenwerte:

$j = 0 \qquad m = 0$

$j = \frac{1}{2} \qquad m = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

$j = 1 \qquad m = -1, 0, 1$

$j = \frac{3}{2} \qquad m = -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$

$j = 2 \qquad m = -2, -1, 0, 1, 2$

$\vdots \qquad \vdots$

Jeder Wert $\beta = j(j+1)$ ist also $(2j+1)$-fach entartet. Da β durch j eindeutig bestimmt ist, wird ab jetzt die Notation $|jm\rangle$ ~~benutzt~~ genutzt. ~~äquivalent zu~~

Darstellung der Drehimpulsoperatoren 5.2

Es gilt:

$$\hat{J}_+ |j\, m\rangle = \hbar \sqrt{(j+m+1)(j-m)}\, |j\; m+1\rangle \tag{5.25}$$

$$\hat{J}_- |j\, m\rangle = \hbar \sqrt{(j-m+1)(j+m)}\, |j\; m-1\rangle \tag{5.26}$$

Außerdem sind die Drehimpulsoperatoren diagonal bzgl. der Quantenzahl j, d.h. es gilt:

$$\hat{J}_k = \sum_j \sum_{m,m'=-j}^{j} |j\, m\rangle\langle j\, m|\hat{J}_k|j\, m'\rangle\langle j\, m'| \tag{5.27}$$

Für jeden ~~[illegible]~~ Wert von $j = \frac{n}{2}, n \in \mathbb{N}_0$ gibt es somit einen $(2j+1)$-dimensionalen Darstellungsraum der Drehgruppe. Dieser Raum ist sogar irreduzibel, d.h. er besitzt keinen drehinvarianten (echten) Unterraum.

~~Wichtig: Bzgl. dem v.S.k.O. $\{\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_k\}$ ist nur $\hat{J}_k$ diagonal, die verbleibenden Komponenten des Drehimpulsoperators nicht!~~

Wichtig: Bzgl. m sind die Operatoren $\hat{\vec{J}}$ nicht diagonal!

Beispiele ~~für~~ von Darstellungen der Drehimpulsoperatoren im v.S.k.O. ~~{P}~~ $\{\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_3\}$, bzw. in der Eigenbasis von $\hat{\vec{J}}^2$ und $\hat{J}_3$:

$j = \frac{1}{2}$:

$$\hat{J}_1 = \frac{\hbar}{2}\underbrace{\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}}_{\hat{\sigma}_1 :=} \qquad \hat{J}_2 = \frac{\hbar}{2}\underbrace{\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}}_{\hat{\sigma}_2 :=} \qquad \hat{J}_3 = \frac{\hbar}{2}\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}}_{\hat{\sigma}_3 :=}$$

Für die <u>Pauli'schen Spinmatrizen</u> $\hat{\sigma}_i$, $i \in \{1, 2, 3\}$ gilt:

$$\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j = i\,\epsilon_{ijk}\,\hat{\sigma}_k + \delta_{ij} \quad \Longrightarrow \quad \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j = (-1)^{1-\delta_{ij}}\,\hat{\sigma}_j \hat{\sigma}_i$$

$j = 1$:

$$\hat{J}_1 = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\hat{J}_2 = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix}$$

$$\hat{J}_3 = \hbar\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

<u>Transformationsverhalten von Zuständen und Operatoren:</u>

Es gilt:

$$|\psi'\rangle = e^{-i\hat{\vec{J}}\cdot\vec{\omega}/\hbar}|\psi\rangle$$

$$\hat{A}' = e^{-i\hat{\vec{J}}\cdot\vec{\omega}/\hbar}\,\hat{A}\,e^{i\hat{\vec{J}}\cdot\vec{\omega}/\hbar}$$

<u>Skalaroperatoren:</u> Ein ~~St~~ skalarer Operator $\hat{A}$ ist invariant unter Rotationen, d.h. ~~es~~ es gilt $[\hat{\vec{J}}, \hat{A}] = 0$.

<u>Vektoroperator:</u> Ein Vektoroperator mit den Komponenten $\{\hat{A}_i, i \in \{1,2,3\}\}$ transformiert unter Drehungen wie der Ortsoperator, d.h.

$$e^{-i\hat{\vec{J}}\cdot\vec{\omega}/\hbar}\,\hat{A}_i\,e^{i\hat{\vec{J}}\cdot\vec{\omega}/\hbar} = \sum_{j=1}^{3} R^{-1}_{ij}(\vec{\omega})\,\hat{A}_j$$

mit der Drehmatrix $R(\vec{\omega})$. Äquivalent dazu ist $[\hat{J}_m, \hat{A}_k] = i\hbar\epsilon_{mkl}\hat{A}_l$.

<u>Tensoroperatoren 2. Stufe:</u> Ein Tensoroperator 2. Stufe mit den Komponenten $\{\hat{A}_{ij}, i,j \in \{1,2,3\}\}$ transformiert analog zu den Vektoroperatoren:

$$e^{-i\hat{\vec{J}}\cdot\vec{\omega}/\hbar}\,\hat{A}_{ij}\,e^{i\hat{\vec{J}}\cdot\vec{\omega}/\hbar} = \sum_{m,n=1}^{3} R^{-1}_{im}(\vec{\omega})\,R^{-1}_{jn}(\vec{\omega})\,\hat{A}_{mn}$$

Die Matrixelemente von Tensoroperatoren nullter, erster, zweiter und höherer Stufe haben bzgl. der Drehimpulseigenbasis eine besondere Struktur, die durch das Wigner-Eckert-Theorem beschrieben wird.

Der Spin 5.3

Es stellt sich heraus (in ~~A~~ Abschnitt 5.4), dass der Bahndrehimpulsoperator

$$\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{X}} \times \hat{\vec{P}}$$

nur ganzzahlige Werte von j annehmen kann, d.h. es gilt

$$\hat{\vec{J}} = \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{\substack{m=-j \\ m'=-j}}^{j} |j\ m\rangle\langle m\,j\,m| \hat{\vec{J}} |j\ m'\rangle\langle j\ m'|.$$

Halbzahlige Werte von j finden Anwendung bei der Beschreibung des inneren Drehimpulses, dem Spin, elementarer Quantensysteme. Das erste Quantensystem, bei dem ein solcher Spin entdeckt wurde, war das Elektron.

Der Spin des Elektrons: 5.3.1

Der quantisierte Spinfreiheitsgrad des Elektrons wurde erstmals im Experiment von Stern und Gerlach 1921 entdeckt. Dabei wurde eine diskrete Aufspaltung von Silberatomen in einem inhomogenen Magnetfeld beobachtet. Es zeigte sich, dass jedes Elektron ein elementares magnetisches Moment

$$\vec{m} = \underbrace{\frac{e\hbar}{2m_e}}_{\mu_B :=} g \frac{\hat{\vec{S}}}{\hbar} \qquad \hat{\vec{S}} = \frac{\hbar}{2}\hat{\vec{\sigma}}$$

besitzt ~~(mit~~ (mit $\mu_B/\hbar \approx 1{,}4\cdot 10^{10}$ Hz/Tesla). Der g-Faktor des Elektrons ist in erster Näherung $g=2$ (Quantenelektrodynamische Korrekturen liefern $g = 2{,}00232...$ $\rightarrow$ anomales magnetisches Moment des Elektrons). Bei der Beschreibung der Dynamik eines Elektrons muss daher immer der Freiheitsgrad des Spins berücksichtigt werden.

$\Longrightarrow$ Modifiziertes Postulat zur Beschreibung des Elektrons:

Anstatt $\{\hat{\vec{X}}\}$ bilden nun die Operatoren $\{\hat{\vec{X}}, \hat{\vec{S}}^2, \hat{S}_3\}$ ein v.S.K.O. für ein Elektron. Der Hilbertraum ist daher $\mathcal{H} = L_2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^2$.

Eine ON-Basis in $\mathcal{H}$ kann durch Bestimmung der gemeinsamen (uneigentlichen) Eigenzustände des v.S.K.O. ~~konstr~~ konstruiert werden, d.h.

$$\hat{\vec{X}}|\vec{x}\rangle|m_s\rangle = \vec{x}\,|\vec{x}\rangle|m_s\rangle, \quad \vec{x}\in\mathbb{R}^3$$

$$\hat{\vec{S}}^2|\vec{x}\rangle|m_s\rangle = \frac{3}{4}\hbar\,|\vec{x}\rangle|m_s\rangle$$

$$\hat{S}_3|\vec{x}\rangle|m_s\rangle = \hbar m_s|\vec{x}\rangle|m_s\rangle, \quad m_s = \pm\frac{1}{2}$$

wobei $|\vec{x}\rangle|m_s\rangle$, oder äquivalent $|\vec{x}\,m_s\rangle$, eigentlich für $|\vec{x}\rangle\otimes|m_s\rangle$ steht.

Der allgemeinste ~~Zust~~ reine Zustand ~~|ψ~~ $|\psi\rangle$ lässt sich daher darstellen als

$$|\psi\rangle = \sum_{m_s} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x}\, |\vec{x}\rangle |m_s\rangle \underbrace{\langle\vec{x}|\langle m_s|\psi\rangle}_{\psi_{m_s}(\vec{x}):=} .$$

Die Dynamik eines Elektrons ohne magnetisches Feld wird beschrieben durch den Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e}\hat{\vec{P}} \equiv \frac{1}{2m_e}\left(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{P}}\right)^2. \qquad (5.38)$$

Dabei ist die Notation $\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{P}}$ eine Abkürzung für $\sum_{i=1}^{3}\hat{\sigma}_i \otimes \hat{P}_i$.

Nach (5.38) ist $\hat{H}$ also unabhängig von $\hat{\vec{\sigma}}$, d.h. jede einzelne Spin-Komponente entwickelt sich unabhängig von den anderen.

In einem ~~elektrischen Magne~~ elektromagnetischen Feld gilt nach dem Prinzip der minimalen Kopplung

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{1}{2m_e}\left[\hat{\vec{\sigma}}\cdot\left(\hat{\vec{P}} - e\,\vec{A}(\hat{\vec{X}},t)\right)\right]^2 + e\,A_0(\hat{\vec{X}},t) \\ &\equiv \frac{1}{2m_e}\left[\hat{\vec{P}} - e\,\vec{A}(\hat{\vec{X}},t)\right]^2 - \frac{e\hbar}{2m_e}\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{B}(\hat{\vec{X}},t) + e\,A_0(\hat{\vec{X}},t)\end{aligned} \qquad (5.39)$$

mit dem Magnetfeld

$$\vec{B}(\vec{x},t) = \vec{\nabla}\times\vec{A}(\vec{x},t).$$

Elementare Quantenlogik von Spin-$\frac{1}{2}$-Systemen: 5.3.2

Für Spin-$\frac{1}{2}$-Systeme gelten einige ~~elementare~~ spezielle Relationen:

- Der Drehoperator hat (mit $\omega := |\vec{\omega}|$ und $\vec{e} := \vec{\omega}/\omega$) die ~~ep~~ explizite Form

$$e^{-i\hat{\vec{S}}\cdot\vec{\omega}/\hbar} = \cos\left(\frac{\omega}{2}\right) - i\,\vec{e}\cdot\hat{\vec{\sigma}}\,\sin\left(\frac{\omega}{2}\right) \qquad (5.41)$$

mit $\hat{\vec{S}} = \frac{\hbar}{2}\hat{\vec{\sigma}}$. Daraus lassen sich einfach die Elemente der Drehmatrix

$$D^{(j)}_{m'm}(\vec{\omega}) := \langle j\, m'|e^{-i\hat{\vec{J}}\cdot\vec{\omega}/\hbar}|j\, m\rangle$$

bestimmen. Es ist auch manchmal hilfreich, eine beliebige Drehung ~~an~~ mit Euler-Winkeln $(\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3)$ darzustellen:

$$e^{-i\hat{\vec{J}}\cdot\vec{\omega}/\hbar} = e^{-i\varphi_1\hat{J}_3/\hbar}\, e^{-i\varphi_2\hat{J}_2/\hbar}\, e^{-i\varphi_3\hat{J}_3/\hbar}$$

- Jeder allgemeine Zustand (Dichteoperator) $\hat{\rho}$ eines Spin-$\frac{1}{2}$-Systems lässt sich darstellen als

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \vec{s} \cdot \vec{\hat{\sigma}}). \qquad (5.4.4)$$

Dabei ist $\vec{s} = \mathrm{Tr}(\vec{\hat{\sigma}}\hat{\rho})$ und $|\vec{s}| \leq 1$ wegen $\mathrm{Tr}(\hat{\rho}^2) \leq \mathrm{Tr}(\hat{\rho}) = 1$. Für <u>reine</u> Zustände gilt insbesondere $|\vec{s}| = 1$. Für <u>gemischte</u> Zustände gilt $|\vec{s}| < 1$. Für orthogonale Zustände gilt $\vec{s}_1 = -\vec{s}_2 \Leftrightarrow \hat{\rho}_1 \cdot \hat{\rho}_2 = 0$.

Die Kugel, die sich im $\mathbb{R}^3$ aus der Bedingung $|\vec{s}| \leq 1$ ergibt, wird <u>Bloch-Sphäre</u> genannt. Die reinen Zustände liegen dabei auf der ~~Kugeloberfläche~~ Kugeloberfläche ($|\vec{s}| = 1$), gemischte Zustände innerhalb der Kugel ($|\vec{s}| < 1$). Orthogonale Zustände liegen sich gegenüber, d.h. $\vec{s}_1 = -\vec{s}_2$.

- <u>Messung und Präparation:</u> Sei anfänglich ein Zustand $\hat{\rho} = |\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\rangle\langle\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}|$ präpariert mit der 3-Achse als Quantisierungsachse. Anschließend wird der Spin in eine beliebige Richtung $\vec{e}\,' = R(\vec{\omega})\vec{e}_3$ gemessen. Mit welcher Wahrscheinlichkeit treten in dieser ~~Richtung~~ neuen Richtung die möglichen Messwerte $\pm\frac{\hbar}{2}$ auf?
Diese (und ähnliche) Fragen werden durch ~~das~~ dass <u>Messpostulat</u> aus Abschnitt 1.3.3 beantwortet.

Die Eigenzustände des Spins in der neuen Richtung

$$\vec{e}\,' \cdot \vec{\hat{S}} = \frac{\hbar}{2}\Big(e^{-i\vec{\hat{S}}\cdot\vec{\omega}/\hbar}|\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\rangle\langle\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}|e^{i\vec{\hat{S}}\cdot\vec{\omega}/\hbar} \cancel{e^{-i\vec{\hat{S}}\cdot\vec{\omega}/\hbar}|\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\rangle\langle\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}|}$$
$$- e^{-i\vec{\hat{S}}\cdot\vec{\omega}/\hbar}|\tfrac{1}{2}\,-\tfrac{1}{2}\rangle\langle\tfrac{1}{2}\,-\tfrac{1}{2}|e^{i\vec{\hat{S}}\cdot\vec{\omega}/\hbar}\Big) \qquad (5.4.6)$$

sind gegeben durch

$$|\varphi_\pm\rangle := e^{-i\vec{\hat{S}}\cdot\vec{\omega}/\hbar}|\tfrac{1}{2}\,\pm\tfrac{1}{2}\rangle = \cos\Big(\frac{|\vec{\omega}|}{2}\Big)|\tfrac{1}{2}\,\pm\tfrac{1}{2}\rangle - i\frac{1}{|\vec{\omega}|}\vec{\omega}\cdot\vec{\hat{\sigma}}\,|\tfrac{1}{2}\,\pm\tfrac{1}{2}\rangle\sin\Big(\frac{|\vec{\omega}|}{2}\Big) \qquad (5.4.7)$$

Daher tritt dass Messergebnis $+\frac{\hbar}{2}$ mit der Wahrscheinlichkeit

$$w_+ := |\langle\varphi_+|\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\rangle|^2 = \cos^2\Big(\frac{|\vec{\omega}|}{2}\Big) + \frac{1}{|\vec{\omega}|^2}(\vec{\omega}\cdot\vec{e}_3)^2\sin^2\Big(\frac{|\vec{\omega}|}{2}\Big) \qquad (5.4.8)$$

und dass Messergebnis $-\frac{\hbar}{2}$ mit der Wahrscheinlichkeit

$$w_- := |\langle\varphi_-|\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\rangle|^2 = \frac{1}{|\vec{\omega}|^2}\big((\vec{\omega}\cdot\vec{e}_1)^2 + (\vec{\omega}\cdot\vec{e}_2)^2\big)\sin^2\Big(\frac{|\vec{\omega}|}{2}\Big) \qquad (5.4.9)$$

~~auf~~ auf (<u>Messung mit Selektion</u>). Es gilt natürlich $w_+ + w_- = 1$.

<u>Ohne Selektion</u> der Messergebnisse wird durch eine Messung von $\vec{\hat{S}}\cdot\vec{e}\,'$ der Zustand

$$\hat{\rho}_1 = w_+|\varphi_+\rangle\langle\varphi_+| + w_-|\varphi_-\rangle\langle\varphi_-| \equiv \hat{P}_+\,\rho_0\,\hat{P}_+ + \hat{P}_-\,\rho_0\,\hat{P}_-$$

mit $\hat{P}_\pm := |\varphi_\pm\rangle\langle\varphi_\pm|$ präpariert.

Eine erneute Messung von $\hat{S}_3$ im Zustan ρ_1 (ohne Selektion) lieferte die Messwerte $\pm\frac{\hbar}{2}$ mit den Wahrscheinlichkeiten

$$W_+ := \langle \tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}|\rho_1|\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\rangle = w_+^2 + w_-^2 \qquad (5.51)$$

$$W_- := \langle \tfrac{1}{2}\,-\tfrac{1}{2}|\rho_1|\tfrac{1}{2}\,-\tfrac{1}{2}\rangle = 2\,w_+ w_- \neq 0, \qquad (5.52)$$

eine Messung des ursprünglichen ~~Zustör~~ ~~Zustands~~ von $\vec{S}\cdot\vec{e}\,'$ stört also den ursprünglichen Zustand, d.h. der Messwert $\hbar/2$ ist nicht mehr sicher!

Es existieren also nicht-identische Referenzsysteme, die durch unitäre Transformationen („Drehungen") ineinander überführt werden ~~können~~ können und die nicht kommutierenden Operatoren, z.B. $\vec{S}$, $\vec{S}\cdot\vec{e}\,'$, ~~zugeo~~ zugeordnet sind. Der selbe Quantenzustand kann ~~also~~ so in Bezug auf verschiedene physikalische Variablen unterschiedliche Eigenschaften aufweisen, die inkompatibel mit klassischen Betrachtungsweisen sein können.

- Für mehrere <u>unterscheidbare</u> Spin-$\frac{1}{2}$-Systeme gilt

$$\mathcal{H} = \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2 \otimes \cdots \otimes \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2,$$

falls nur die Spinfreiheitsgrade relevant sind.

Ein typisches Beispiel für ~~ein verschränktes~~ einen reinen Zweiteilchenzustand ist der verschränkte Zustand

$$\cancel{|\psi\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}(|\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\rangle|\tfrac{1}{2}}$$

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\rangle|\tfrac{1}{2}\,-\tfrac{1}{2}\rangle - |\tfrac{1}{2}\,-\tfrac{1}{2}\rangle|\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\rangle\right)$$

Dieser Quantenzustand kann nicht als Produkt zweier reiner Zustände dargestellt werden. Daher beschreibt er interessante, klassisch ~~nie~~ nicht erzeugbare, Korrelationen (vgl. mit Bell'schen Ungleichungen). Die Spinoperatoren, die sich auf verschiedene Spin-$\frac{1}{2}$-Systeme, bzw. Teilsysteme, beziehen, kommutieren miteinander, was ~~direkt~~ auch für unabhängige Freiheitsgrade gefordert werden muss.

Der Bahndrehimpuls

5.4

Für ein strukturloses Punktquant wurde gezeigt, dass der (Bahn-) drehimpulsoperator durch

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{X}} \times \hat{\vec{P}} \quad \longrightarrow \quad [\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{L}_k$$

gegeben ist. Interessanterweise sind die Eigenwerte dieses Operators ganzzahlig, d.h. es gilt

$$\hat{\vec{L}}^2 |j\ m\rangle = \hbar^2 j(j+1)|j\ m\rangle$$
$$\hat{L}_3 |j\ m\rangle = \hbar m |j\ m\rangle \qquad (5.56)$$

mit $j \in \mathbb{Z}_0$, ~~$-j \leq m \leq j$, $m \in \mathbb{Z}$~~. $m = -j, -j+1, \dots, j-1, j$.

Eigenschaften des Bahndrehimpulses:

- Der ~~L~~ Bahndrehimpulsoperator kommutiert mit $\hat{\vec{X}}^2$:

$$[\hat{\vec{L}}, \hat{\vec{X}}^2] = 0$$

- In Kugelkoordinaten (r, θ, φ) mit

$$x = r \sin\theta \cos\varphi$$
$$y = r \sin\theta \sin\varphi$$
$$z = r \cos\theta$$

~~gilt:~~ gilt

$$\hat{L}_3 = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi}$$
$$\hat{\vec{L}}^2 = -\frac{\hbar^2}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta}\right) - \frac{\hbar^2}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \qquad (5.65)$$
$$\hat{L}_\pm = \hbar e^{\pm i\varphi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta \frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

wobei $\hat{L}_\pm := \hat{L}_1 \pm i\hat{L}_2$ die Auf-/Absteigeoperatoren wie zur Bestimmung der Eigenwerte sind.

- Für die gemeinsamen Eigenwerte und Eigenzustände gilt dann in der Ortsdarstellung (in Kugelkoordinaten):

$$\hat{\vec{L}}^2 Y_l^m(\theta,\varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\theta,\varphi)$$
$$\hat{L}_3 Y_l^m(\theta,\varphi) = \hbar m Y_l^m(\theta,\varphi), \qquad l, m \text{ ganzzahlig}$$

mit den <u>Kugelflächenfunktionen</u> $Y_l^m(\theta,\varphi)$, die (bis auf eine Phase) eindeutig bestimmt sind.

Explizite Form der Kugelflächenfunktionen $Y_l^m(\theta,\varphi)$:

$$Y_l^m(\theta,\varphi)=\frac{(-1)^{l+m}}{2^l\, l!}\left\{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\right\}^{\frac{1}{2}} e^{im\varphi}\sin^m\theta\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^{l+m}\sin^{2l}\theta$$

Kugelflächenfunktionen bilden ein vollständiges ON-System für Funktionen auf der Kugeloberfläche, d.h.

$$\delta_{ll'}\delta_{mm'}=\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\pi}d\theta\,\sin\theta\; Y_{l'}^{m'*}(\theta,\varphi)Y_l^m(\theta,\varphi)$$

$$\delta(\theta-\theta')\delta(\varphi-\varphi')=\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\sin\theta\; Y_l^m(\theta,\varphi)Y_l^{m*}(\theta',\varphi')$$

Beispiele für konkrete l, m:

$$Y_0^0(\theta,\varphi)=(4\pi)^{-\frac{1}{2}}$$

$$Y_1^0(\theta,\varphi)=\sqrt{\tfrac{3}{4}\pi}\,\cos\theta$$

$$Y_1^{\pm1}(\theta,\varphi)=\mp\sqrt{\tfrac{3}{8}\pi}\; e^{\pm i\varphi}\sin\theta$$

- Jeder reine Zustand $|\psi\rangle$ in $\mathcal{H}=L_2(\mathbb{R}^3)$ kann durch Kugelflächenfunktionen dargestellt werden, d.h.

$$\langle\vec{x}|\psi\rangle\equiv\psi(\vec{x})=\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}u_{lm}(r)Y_l^m(\theta,\varphi)$$

mit

$$u_{lm}(r)=\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\pi}d\theta\,\sin\theta\;\psi(\vec{x})Y_l^{m*}(\theta,\varphi).$$

- Es gilt

$$\Delta\equiv\vec{\nabla}^2=\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}-\frac{1}{r^2}\hat{\vec{L}}^2/\hbar^2$$

mit dem Laplace-Operator Δ und dem Bahndrehimpulsoperator $\hat{\vec{L}}$. Dies ist hilfreich, da ~~für ei~~ im Hamilton-Operator eines nicht-relativistischen Teilchens immer der Operator $\hat{\vec{p}}^2\propto\Delta$ auftritt.

Für <u>zentralsymmetrische Potentiale</u>, d.h. für Hamilton-Operatoren der Form

$$\hat{H}=\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}+V(\hat{\vec{x}}^2),\qquad [\hat{H},\hat{\vec{L}}]=0,$$

bilden z.B. die Operatoren $\{\hat{H},\hat{\vec{L}}^2,\hat{L}_3\}$ ein v.S.k.O., d.h. ~~die~~ ~~es lassen sich Energieeigenzustände~~ die Energieeigenzustände lassen sich als ~~die~~ gemeinsame Eigenfunktionen dieser Operatoren konstruieren. Es ergibt sich

$$\hat{H}|\psi\rangle_E=E|\psi\rangle_E\quad\Longrightarrow\quad\langle\vec{x}|\psi\rangle_{Elm}=f_{El}(r)\,Y_l^m(\theta,\varphi)$$

wobei die Koeffizientenfunktionen $f_{El}(r)$ unabhängig sind von der magnetischen Quantenzahl m.

Dabei ~~gilt~~ muss für $f_{EL}(r)$ ~~g~~ folgende Eigenwertgleichung gelten:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{L(L+1)}{r^2}\right) + V(r) - E \right\} f_{EL}(r) = 0.$$

Bei Hamilton-Operatoren mit nur axialsymmetrischen Potential, d.h. z.B. $[\hat{H}, \hat{L}_1] = 0$ aber $[\hat{H}, \hat{L}_2] \neq 0$ ist der Entwicklungskoeffizient auch von m abhängig.

Zusätzlich muss für $f_{EL}(r)$ gelten, dass

$$f_{EL}(r) \xrightarrow[r \to 0]{} \frac{A}{r^n} \quad \text{mit } n < \frac{1}{2}$$

gilt, damit $\hat{H}$ selbstadjungiert ist.

Beispiel: ~~Da~~ Für das Elektron eines Wasserstoffatoms gilt für das Potential näherungsweise das Coloumb-Potential

$$V(r) = -\frac{Z e^2}{4 \pi \varepsilon_0 r}$$

mit der Kernladungszahl Z des Wasserstoffatoms, der Elementarladung e sowie der elektrischen Feldkonstante ε_0. Im diskreten Energiebereich ($E<0$, nur gebundene Zustände) lauten die Eigenwerte

$$E_n = -\frac{Z^2 \mu e^4}{2\hbar^2 (4\pi\varepsilon_0)^2} \frac{1}{(\underbrace{N + L + 1}_{n:=})^2}, \quad N, L \in \mathbb{N}_0$$

mit der reduzierten Masse μ des Wasserstoffatoms. Es gilt Näherungsweise $\mu \approx M_e$. Da die ~~Energini~~ Energieniveaus nur von $n = N + L + 1$ mit $N, L \in \mathbb{N}_0$ abhängen, tritt neben der „natürlichen" Entartung ~~in~~ durch m noch eine „zufällige" Entartung von E_n für verschiedene $N' \neq N$, $L' \neq L$, aber $N + L = N' + L'$, auf. Diese ~~Ent~~ Entartung ist zurückführbar auf eine weitere Symmetrie des Couloumb-Potentials, dem „Runge-Lenz-Vektor". Dieser ist eine weitere Erhaltungsgröße. Er beschreibt die Orientierung von Perihel und Aphel ~~zueino~~ zueinander. ~~Aus der~~ Die Erhaltung des Runge-Lenz-Vektors beschreibt somit, dass die Umlaufbahn eines Teilchens um das Kraftzentrum ~~raum~~ raumfest ist, d.h. die Ellipse rotiert ~~wie~~ nicht.

Ein Energieniveau ist somit vom Entartungsgrad n^2 (ohne Spin), bzw $2n^2$ (mit Spin):

$$\sum_{L=0}^{n-1}(2L+1) = 1 + \sum_{L=1}^{n-1}(2L+1) = 1 + 2\sum_{L=1}^{n-1} L + \underbrace{\sum_{L=1}^{n-1} 1}_{=n-1}$$

$$= n + 2\frac{(n-1)n}{2} = n + \cancel{2}(n-1)n = n^2$$

Mit Spin ergibt sich offensichtlich $2n^2$, da das Elektron ein Spin-$\frac{1}{2}$-System ist.

Addition zweier Drehimpulse

Es werden nun zwei Drehimpulsoperatoren $\hat{\vec{J}}^{(1)}, \hat{\vec{J}}^{(2)}$ betrachtet, die sich auf zwei verschiedene Freiheitsgrade (bspw. Spin und Bahndrehimpuls) beziehen, d.h. es gilt

$$\left[\hat{\vec{J}}^{(1)}, \hat{\vec{J}}^{(2)}\right] = 0.$$

Somit bilden die Operatoren $\left\{\left(\hat{\vec{J}}^{(1)}\right)^2, \hat{J}_3^{(1)}, \left(\hat{\vec{J}}^{(2)}\right)^2, \hat{J}_3^{(2)}\right\}$ ein v.S.k.O. für die ~~beiden~~ Darstellungsräume der beiden Drehimpulse, d.h. die Zustände

$$\left\{|j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle \;\middle|\; j_1, j_2 \text{ fest},\ -j_1 \le m_1 \le j_1,\ -j_2 \le m_2 \le j_2\right\}$$

bilden ein ON-System im Raum $R(j_1, j_2)$ der gemeinsamen Eigenzustände, wobei für die Dimension des Raumes gilt:

$$\operatorname{Dim} R(j_1, j_2) = (2 j_1 + 1)(2 j_2 + 1)$$

In diesem Raum lässt sich ein Gesamtdrehimpuls $\hat{\vec{J}}$ als Generator von Drehungen ~~als~~ definieren:

$$\hat{\vec{J}} := \hat{\vec{J}}^{(1)} + \hat{\vec{J}}^{(2)} \equiv \hat{\vec{J}}^{(1)} \otimes \mathbb{1}_2 + \cancel{\hat{\vec{J}}}\ \mathbb{1}_1 \otimes \hat{\vec{J}}^{(2)}$$

Nun werden die gemeinsamen Eigenwerte und -zustände von den Operatoren $\{\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_3\}$ in $R(j_1, j_2)$ bestimmt.

<u>Eigenwerte:</u> Für $\hat{J}_3$ gilt

$$\begin{aligned}
\hat{J}_3 |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle &= \left(\hat{J}_3^{(1)} + \hat{J}_3^{(2)}\right)|j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle \\
&= \hat{J}_3^{(1)} |j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle + |j_1 m_1\rangle \otimes \hat{J}_3^{(2)} |j_2 m_2\rangle \\
&= \hbar \underbrace{(m_1 + m_2)}_{M :=} |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle
\end{aligned}$$

~~Analog folgt für $\hat{\vec{J}}^2$:~~

$$\cancel{\hat{\vec{J}}^2 |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle = \left(\left(\hat{\vec{J}}^{(1)}\right)^2 + \left(\hat{\vec{J}}^{(2)}\right)^2\right) |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle}$$
$$\cancel{= \hbar^2 \left(j_1(j_1+1) + j_2(j_2+1)\right) |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle}$$

Für $\hat{\vec{J}}^2$ sind die möglichen Eigenwerte von der Form $\hbar^2 J(J+1)$, wobei J und M ganz- oder halbzahlig sind.

Zur Untersuchung der möglichen Werte von J und M ist es zunächst hilfreich, die Entartung des Eigenwerts M zu untersuchen.

M	Anzahl Zustände
$j_1 + j_2$	1
$j_1 + j_2 - 1$	2
$\vdots$	$\vdots$
$-(j_1 + j_2 - 1)$	2
$-(j_1 + j_2)$	1

Aus dieser Tabelle können die möglichen Werte von J konstruiert werden:

- Der Wert $M = j_1 + j_2$ ist möglich, damit folgt aus der ~~ab~~ algebraischen Behandlung des Drehimpulses, dass ein J mit $J = M = j_1 + j_2$ geben muss. Dieses J hat (nach der algebraischen Behandlung) eine Entartung von $(2J+1)$. Diese Eigenzustände spannen den Unterraum $R_{j_1+j_2}$ auf.

- Gemäß der Tabelle existiert ein zu $R_{j_1+j_2}$ orthogonaler ~~Unterraum~~ Zustand mit $M = j_1 + j_2 - 1$. Daher muss auch $J = j_1 + j_2 - 1$ vorkommen mit der ~~Ee~~ Entartung $(2J+1)$. Diese Zustände spannen den Unterraum $R_{j_1+j_2-1}$ auf.

- Weiterführung dieses Vorgehens ergibt

$$R(j_1, j_2) = R_{j_1+j_2} \oplus R_{j_1+j_2-1} \oplus \dots \oplus R_{|j_2-j_1|},$$

d.h. die möglichen Werte von J sind

$$J = j_1 + j_2,\ j_1 + j_2 - 1,\ \dots,\ |j_2 - j_1|.$$

Für $\operatorname{Dim} R(j_1, j_2)$ gilt wie erwartet:

$$\sum_{J=|j_2-j_1|}^{j_1+j_2} (2J+1) = \sum_{J=1}^{j_1+j_2} (2J+1) - \sum_{J=1}^{|j_2-j_1|-1} (2J+1)$$

$$= 2\sum_{J=1}^{j_1+j_2} J - 2\sum_{J=1}^{|j_2-j_1|-1} J + (j_1+j_2) - (|j_2-j_1| - 1)$$

$$= (j_1+j_2)(j_1+j_2+1) - (j_2-j_1-1)(j_2-j_1) + (j_1+j_2) - (j_2-j_1-1) = \dots = (2j_1+1)(2j_2+1)$$

Eigenzustände: Um eine ON-Eigenbasis von $R(j_1+j_2)$ zu finden, ~~wo~~ werden zunächst die Basen der Unterräume $R_{j_1+j_2}$ usw. gebildet. Daraus wird anschließend eine „globale" Basis konstruiert.

- ON-Basiszustände in $R_{j_1+j_2}$:
  ~~Als~~ Ausgangspunkt zur Konstruktion der Basis liefert der bekannte Zustand

$$\left|\underbrace{j_1+j_2}_{=J}\ \underbrace{j_1+j_2}_{=M}\right\rangle = |J\ M\rangle := |j_1\ j_1\rangle|j_2\ j_2\rangle$$

mit Hilfe des Leiteroperators

$$\hat{J}_- := \hat{J}_-^{(1)} + \hat{J}_-^{(2)}.$$

Anwendung von $\hat{J}_-$ auf $|J\ M\rangle$ ergibt den Zustand $\overbrace{|J\ M-1\rangle}^{\hbar\sqrt{2J}}$, es gilt aber auch:

$$\begin{aligned}\hat{J}_-|J\ M\rangle &\equiv \left(\hat{J}_-^{(1)} + \hat{J}_-^{(2)}\right)|j_1\ j_1\rangle|j_2\ j_2\rangle \\ &= \hbar\left(\sqrt{2j_1}\,|j_1\ j_1-1\rangle|j_2\ j_2\rangle + \sqrt{2j_2}\,|j_1\ j_1\rangle|j_2\ j_2-1\rangle\right) \\ &\stackrel{!}{=} \hbar\sqrt{2J}\,|J\ M-1\rangle\end{aligned}$$

~~Ein~~ Repetetive Anwendung von $\hat{J}_-$ führt schließlich (wie ~~so~~ schon bei der algebraischen Untersuchung des Drehimpulsoperators) auf eine ON-Basis von $R_{j_1+j_2}$.

- ON-Basiszustände in $R_{j_1+j_2-1}$:
  Ausgangspunkt bildet hier der einzige zu ~~$|J\ M\rangle$ ⊥ $|J\ M-1\rangle$~~ $|j_1+j_2\ \ j_1+j_2-1\rangle$ orthogonale ~~Zustand~~ normierte Zustand

$$\left|\overbrace{j_1+j_2-1}^{=J}\ \overbrace{j_1+j_2-1}^{=M}\right\rangle = \left[2(j_1+j_2)\right]^{-\frac{1}{2}}\left\{-\sqrt{2j_2}\,|j_1\ j_1-1\rangle|j_2\ j_2\rangle + \sqrt{2j_1}\,|j_1\ j_1\rangle|j_2\ j_2-1\rangle\right\}$$

Mehrmalige Anwendung von $\hat{J}_-$ liefert dann eine ON-Basis im Raum $R_{j_1+j_2-1}$.

- Unter der Phasenkonvention

$$\langle J\ J|j_1\ j_1\rangle|j_2\ J-j_1\rangle > 0$$

können die ON-Basiszustände für alle Räume R_J mit $J = j_1+j_2,\ j_1+j_2-1, \dots, |j_2-j_1|$ konstruiert werden. ~~es~~ Es gilt dann:

$$|J\ M\rangle = \sum_{m_1, m_2} |j_1\ m_1\rangle|j_2\ m_2\rangle \underbrace{\langle j_1\ m_1|\langle j_2\ m_2|J\ M\rangle}_{=\langle j_1 m_1; j_2 m_2|J M\rangle \in \mathbb{R}} \tag{5.90}$$

mit den reellen Clebsch-Gordan-Koeffizienten ~~$\langle j_1 m_1|\langle j_2 m_2|$~~

$$\langle j_1\ m_1; j_2\ m_2|J\ M\rangle \in \mathbb{R}.$$

Grundlegende Eigenschaften der Clebsch-Jordan-Koeffizienten:

- $\langle j_1 m_1; j_2 m_2 | J M\rangle \neq 0$ nur für $m_1 + m_2 = M$, $|j_2 - j_1| \leq J \leq j_1 + j_2$
- Die Transformation (5.90) ist unitär, d.h. es gilt

$$\delta_{JJ'}\delta_{MM'} = \sum_{m_1, m_2} \langle J' M' | j_1 m_1; j_2 m_2\rangle \langle j_1 m_1; j_2 m_2 | J M\rangle$$

$$\delta_{m_1 m_1'}\delta_{m_2 m_2'} = \sum_{J, M} \langle j_1 m_1'; j_2 m_2' | J M\rangle \langle J M | j_1 m_1; j_2 m_2\rangle$$

- $j_1 + j_2 + J \in \mathbb{N}$

Ein elementares Beispiel für Drehimpulskopplung: Für zwei gekoppelte Spin-$\frac{1}{2}$-Systeme, d.h. $j_1 = j_2 = \frac{1}{2}$, gilt

$$|1\ 1\rangle = |\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}\rangle |\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}\rangle$$

$$|1\ 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2}\rangle |\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}\rangle + |\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}\rangle |\tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2}\rangle\right)$$

$$|1\ -1\rangle = |\tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2}\rangle |\tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2}\rangle$$

$$|0\ 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-|\tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2}\rangle |\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}\rangle + |\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}\rangle |\tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2}\rangle\right)$$

Üblicherweise werden Zustände mit ~~J~~ $J=1$ Triplett-Zustände und Zustände mit $J=0$ Singulett-Zustände genannt.

Eine Superauswahlregel 5.6

Für jede Drehung um eine feste Drehachse $\vec{e}$ um den Winkel 2π gilt

$$\hat{R}(2\pi\vec{e})|j\ m\rangle \equiv e^{-i2\pi\vec{e}\cdot\vec{J}/\hbar}|j\ m\rangle = (-1)^{2j}|j\,m\rangle, \qquad (5.94)$$

d.h. eine System mit halbzahligem Spin muss zweimal um 2π gedreht werden, damit es wieder gleich „aussieht."

Wird für alle physikalischen ~~Variabl~~ Variablen $\hat{A}$ die Relation

$$\left[\hat{R}(2\pi\vec{e}), \hat{A}\right] = 0$$

gefordert, dann folgt daraus eine für alle physikalischen Variablen geltende Auswahlregel, die Superauswahlregel. Sie besagt, dass für $\hat{A}$ alle Matrixelemente ~~zwischei~~ zwischen Zuständen mit halb- ~~ung~~ und ganzzahligem Drehimpuls verschwinden, d.h. für $|+\rangle$ ganz-, und $|-\rangle$ halbzahlig gilt:

$$\langle + | \hat{A} | - \rangle = \langle - | \hat{A} | + \rangle = 0 \qquad (5.98)$$

Konsequenz der Superauswahlregel: Lineare Superpositionen zwischen Zuständen mit halb- und ganzzahligem Spin sind nicht beobachtbar und daher unphysikalisch.

Durch die Superauswahlregel wird das lineare Superpositionsprinzip in der Quantenmechanik (teilweise) außer Kraft gesetzt. Eine andere Regel der Quantentheorie fordert z.B., dass es keine Superpositionen zwischen Zuständen verschiedener Ladung gibt, z.B. eines Ein- und eines Zweielektronenzustands.

Beweis und Ähnliches

Grundlagen der Quantenmechaminik

2)
$$\psi(\vec{x},t) \equiv \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{k}\ \tilde{\psi}(\vec{k}) \exp\{-i[\omega(\vec{k})t - \vec{k}\cdot\vec{x}]\}$$
$$= \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{k}\ \tilde{\psi}(\vec{k}) \exp\{-i[E\,t/\hbar - \vec{k}\cdot\vec{x}]\}$$
$$= \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{k}\ \tilde{\psi}(\vec{k}) \exp\{-i[\vec{p}^2 t/(2M\hbar) - \vec{k}\cdot\vec{x}]\}$$
$$= \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{k}\ \tilde{\psi}(\vec{k}) \exp\{-i[(\vec{k}\hbar)^2 t/(2M\hbar) - \vec{k}\cdot\vec{x}]\}$$
$\square$

3)
Zum Beweis der Schrödinger-Gleichung wird $\psi(\vec{x},t)$ in diese eingesetzt:
$$i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t}\psi\right)(\vec{x},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{k}\ \tilde{\psi}(\vec{k}) \exp\{-i[(\vec{k}\hbar)^2 t/(2M\hbar) - \vec{k}\cdot\vec{x}]\}$$
$$= i\hbar\int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{k}\ \tilde{\psi}(\vec{k})\frac{\partial}{\partial t} \exp\{-i[(\vec{k}\hbar)^2 t/(2M\hbar) - \vec{k}\cdot\vec{x}]\}$$
$$= i\hbar\int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{k}\ \tilde{\psi}(\vec{k})\left(-i\frac{(\vec{k}\hbar)^2}{2M\hbar}\right) \exp\left\{-i\left[\frac{(\vec{k}\hbar)^2 t}{2M\hbar} - \vec{k}\cdot\vec{x}\right]\right\}$$
$$= \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{k}\ \tilde{\psi}(\vec{k})\frac{(\vec{k}\hbar)^2}{2M} \exp\left\{-i\left[(\vec{k}\hbar)^2\frac{t}{(2M\hbar)} - \vec{k}\cdot\vec{x}\right]\right\}$$
$$\left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2M}\psi\right)(\vec{x},t) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{k}\ \tilde{\psi}(\vec{k})\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\right)\nabla^2 \exp\{-i[(\vec{k}\hbar)^2 t/(2M\hbar) - \vec{k}\cdot\vec{x}]\}$$
$$= \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{k}\ \tilde{\psi}(\vec{k})\left(-i\frac{\vec{k}\hbar^2}{2M}\right)\cdot\nabla \exp\{-i[(\vec{k}\hbar)^2 t/(2M\hbar) - \vec{k}\cdot\vec{x}]\}$$
$$= \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{k}\ \tilde{\psi}(\vec{k})\frac{(\vec{k}\hbar)^2}{2M} \exp\{-i[(\vec{k}\hbar)^2 t/(2M\hbar) - \vec{k}\cdot\vec{x}]\}$$
$\square$

2 4)
$$\mathcal{F}_{\hat{\vec{p}}\psi}(\vec{p},t) = (2\pi\hbar)^{-3/2}\int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x}\ e^{-i\vec{x}\cdot\vec{p}/\hbar}(-i\hbar\vec{\nabla})\psi(\vec{x},t)$$
$$= (2\pi\hbar)^{-3/2}\underbrace{\left[e^{-i\vec{x}\cdot\vec{p}/\hbar}\psi(\vec{x},t)\right]_{-\infty}^{\infty}}_{\to 0} \cancel{+(2\pi\hbar)^{-3/2}\int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x}\ e^{-i\vec{x}\cdot\vec{p}/\hbar}\psi(\vec{x},t)}$$
$$\cancel{+\int_{\mathbb{R}^3}} \quad + (2\pi\hbar)^{-3/2}\int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x}\ e^{-i\vec{x}\cdot\vec{p}/\hbar}\,\vec{p}\,\psi(\vec{x},t)$$
$$= \vec{p}\,(2\pi\hbar)^{-3/2}\int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x}\ e^{-i\vec{x}\cdot\vec{p}/\hbar}\psi(\vec{x},t) = \vec{p}\,\tilde{\psi}(\vec{p},t)$$
$\square$

A

Theo 2 01.02.21

4 8) Invarianz der Spur unter der Basiswahl.

Seien $\{|e_i\rangle\}$, $\{|\tilde{e}_i\rangle\}$ zwei ON-Basen. Dann gilt:

$$\mathrm{Tr}(\hat{A}) = \sum_{i} \langle e_i|\hat{A}|e_i\rangle = \sum_i \langle e_i|\mathbb{1}\ \hat{A}\ \mathbb{1}|e_i\rangle$$
$$= \sum_{i,n,m} \underbrace{\langle e_i|\tilde{e}_n\rangle}_{\in \mathbb{C}}\underbrace{\langle\tilde{e}_n|\hat{A}|\tilde{e}_m\rangle}_{\in \mathbb{C}}\underbrace{\langle\tilde{e}_m|e_i\rangle}_{\in \mathbb{C}} = \sum_{i,n,m}\langle\tilde{e}_n|\hat{A}|\tilde{e}_m\rangle\langle\tilde{e}_m|\underbrace{e_i\rangle\langle e_i}_{=\mathbb{1}}|\tilde{e}_n\rangle$$
$$= \sum_{n,m}\langle\tilde{e}_n|\hat{A}\underbrace{|\tilde{e}_m\rangle\langle\tilde{e}_m|}_{=\mathbb{1}}\tilde{e}_n\rangle = \sum_n \langle\tilde{e}_n|\hat{A}|\tilde{e}_n\rangle = \mathrm{Tr}(\hat{A})$$

$\square$

5 5) Eigenwerte/-vektoren von selbstadjungierten Operatoren.

Sei $\hat{A} = \hat{A}^+$ selbstadjungiert mit den Eigenwerten $a_1, a_2 \in \mathbb{C}$, $a_1 \neq a_2$ und den zugehörigen Eigenvektoren $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle \in V$, $|\varphi_1\rangle \neq |\varphi_2\rangle$ mit $\langle\varphi_{1,2}|\varphi_{1,2}\rangle = 1$.
Dann gilt:

$$\cancel{\underbrace{\langle a_1|\hat{A}\, a_1\rangle}_{=a_1} = \underbrace{\langle\hat{A}\, a_1|a_1\rangle}_{=a_1^*}} \quad \cancel{\Rightarrow a_1 = a_1^*} \quad \cancel{\Rightarrow a_1 \in \mathbb{R}}$$

$$\underbrace{(\varphi_1, \hat{A}\varphi_1)}_{=a_1} = (\hat{A}^+\varphi_1, \varphi_2) = \underbrace{(\hat{A}\,\varphi_1, \varphi_2)}_{=a_1^*} \quad \Rightarrow \quad a_1 = a_1^* \quad \Rightarrow \quad a_1 \in \mathbb{R}$$

$$\left.\begin{aligned}(\varphi_1, \hat{A}\,\varphi_2) &= a_2(\varphi_1, \varphi_2)\\ (\hat{A}\,\varphi_1, \varphi_2) &= a_1(\varphi_1, \varphi_2)\end{aligned}\right\} \underbrace{(\varphi_1, \hat{A}\,\varphi_2) - (\hat{A}\,\varphi_1, \varphi_2)}_{=0} = \underbrace{(a_2 - a_1)}_{\neq 0}(\varphi_1, \varphi_2) \Rightarrow (\varphi_1, \varphi_2) = 0$$

$\square$

7 2)
$$\langle\vec{x}|[\hat{X}_\alpha, \hat{P}_\beta]|\psi\rangle = \langle\vec{x}|(\hat{X}_\alpha\hat{P}_\beta - \hat{P}_\beta\hat{X}_\alpha)|\psi\rangle$$
$$= \left(x_\alpha\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_\beta}\right) - \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_\beta}x_\alpha\right)\right)\psi(\vec{x})$$
$$= i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x_\beta}x_\alpha - x_\alpha\frac{\partial}{\partial x_\beta}\right)\psi(\vec{x})$$
$$= i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x_\beta}(x_\alpha\psi(\vec{x})) - x_\alpha\frac{\partial}{\partial x_\beta}\psi(\vec{x})\right)$$
$$= i\hbar\left(\delta_{\alpha\beta}\psi(\vec{x}) \cancel{+\frac{\partial}{\partial x_\beta}\psi(\vec{x})} + x_\alpha\frac{\partial}{\partial x_\beta}\psi(\vec{x}) - x_\alpha\frac{\partial}{\partial x_\beta}\psi(\vec{x})\right)$$
$$= i\hbar\,\delta_{\alpha\beta}\,\psi(\vec{x}) \quad \Rightarrow \quad [\hat{X}_\alpha, \hat{P}_\beta] = i\hbar\,\delta_{\alpha\beta}\,\mathbb{1}$$

$\square$

B

Dynamik eines Punktquants in äußeren Potentialen

9) Notwendige Bed. für $\vec{\hat{P}} = \vec{\hat{P}}^+$.

Für ein beliebiges Volumen $V \subseteq \mathbb{R}^3$, beliebige $\varphi, \psi \in \mathcal{H}$ und beliebige $\vec{a} \in \mathbb{R}^3$ gilt:

$$-i\hbar \int_V d^3\vec{x} \left(\vec{a} \cdot \vec{\nabla} \varphi^* \psi\right)(\vec{x}) = -i\hbar \left(\int_V d^3\vec{x}\, \varphi^*(\vec{x}) (\vec{a} \cdot \vec{\nabla} \psi)(\vec{x}) + \int_V d^3\vec{x}\, \psi(\vec{x}) (\vec{a} \cdot \vec{\nabla} \varphi^*)(\vec{x}) \right)$$

$$= \int_V d^3\vec{x}\, \varphi^*(\vec{x}) \Big(\vec{a} \cdot (\underbrace{-i\hbar \vec{\nabla}}_{=\vec{\hat{P}}} \psi)\Big)(\vec{x}) - \int_V d^3\vec{x}\, \psi(\vec{x}) \Big(\vec{a} \cdot (\underbrace{-i\hbar \vec{\nabla}}_{=\vec{\hat{P}}} \varphi)^*\Big)(\vec{x})$$

$$= \int_V d^3\vec{x}\, \varphi^*(\vec{x}) (\vec{a} \cdot \vec{\hat{P}} \psi)(\vec{x}) - \int_V d^3\vec{x}\, \psi(\vec{x}) (\vec{a} \cdot \vec{\hat{P}} \varphi)^*(\vec{x})$$

$$= 0 \qquad \text{(Durch Forderung der Selbstadjungiertheit.)}$$

Durch den Gauss'schen Integralsatz gilt nun:

$$\int_V d^3\vec{x} \left(\vec{a} \cdot \vec{\nabla} \varphi^* \psi\right)(\vec{x}) = \int_{\partial V} d\vec{f} \cdot \vec{a} \left(\varphi^* \psi\right)(\vec{x}) = 0$$

$\square$

25) Mit $\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + V(\hat{X})$, $\hat{P} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_1}$ und dem Potential

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{falls } |x| \le \frac{a}{2} \\ 0 & \text{falls } |x| > \frac{a}{2} \end{cases}$$

mit $V_0 > 0$ gilt mit $\hat{H}|\psi\rangle_E = E|\psi\rangle_E$ und $E \in [-V_0, 0)$:

$$\hat{H}|\psi\rangle_E = E|\psi\rangle_E \implies -\frac{\hbar^2}{2m} u''(x) + V(x) u(x) = E\, u(x)$$

$$:\Longleftrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} u'' + V(x) u = E u$$

Für $|x| \le \frac{a}{2}$: $\quad -\frac{\hbar^2}{2m} u'' - V_0 u = E u \iff u'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0) u = 0$

Für $|x| > \frac{a}{2}$: $\quad -\frac{\hbar^2}{2m} u'' = E u \iff u'' + \frac{2m}{\hbar^2} E u = 0$

Mit $k := \sqrt{2m(E+V_0)/\hbar^2}$ und $\omega := \sqrt{2m|E|/\hbar^2}$ ~~gilt wegen E<0:~~ lassen sich die DGLen wegen $E<0$ auch schreiben als:

$$u'' + k^2 u = 0 \qquad u'' - \omega^2 u = 0$$

$\square$

C

2 6) Es wird zunächst die DGL $u'' + k^2 u = 0$ mit $k := \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}(E+V_0)}$ gelöst. Dazu wird der Ansatz $u(x) = c\exp\{\lambda x\}$ verwendet, was auf folgende charakteristische Gleichung führt:

$$\lambda^2 + k^2 = 0 \quad \Longrightarrow \lambda = \pm i k$$

Daraus ergeben sich die folgenden beiden Lösungen, wobei A_+, A_- noch zu bestimmende Konstanten sind:

$$u_+^1(x) = A_+ \cos(k x) \qquad u_-^1(x) = A_- \sin(k x)$$

Nun wird die DGL $u'' - \omega^2 u = 0$ mit $\omega := \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}|E|}$ ~~gelöst~~ wie oben gelöst:

$$\lambda^2 - \omega^2 = 0 \quad \Longrightarrow \lambda = \pm \omega$$

Da die Lösung $\tilde{u}(x) = c e^{\omega x}$ mit $x \to \pm\infty$ nicht gegen Null abfällt, wird sie ~~verword~~ verworfen. Damit lautet die Lösung:

$$u_\pm^2(x) = B_\pm e^{\omega(\frac{a}{2} - |x|)}$$

Hierbei wurde die Lösung ~~zu~~ zweckmäßig bereits mit der Konstante $e^{\omega a/2}$ multipliziert. Nun wird noch die Stetigkeit in $u(x)$ verwendet, um die Konstanten $B_\pm$ zu bestimmen.

~~Für den geraden Fall, und $|x| \geq \frac{a}{2}$~~

Für den geraden Fall:

$$u_+^1(\pm \tfrac{a}{2}) = A_+ \cos(\pm \tfrac{1}{2} k a) = A_+ \cos(\tfrac{1}{2} k a) \stackrel{!}{=} u_+^2(\pm \tfrac{1}{2}) = B_+$$

Für den ungeraden Fall:

$$u_-^1(\pm \tfrac{a}{2}) = A_- \overset{\sin}{\cancel{\cos}}(\pm \tfrac{1}{2} k a) = \mathrm{sgn}(\pm \tfrac{1}{2} a) A_- \sin(\tfrac{1}{2} k a) \stackrel{!}{=} u_-^2(\pm \tfrac{1}{2}) = B_-$$

Da die Stelle $x = \pm\frac{a}{2}$ betrachtet wurde, gilt $\mathrm{sgn}(x) = \mathrm{sgn}(\pm\frac{a}{2})$.

Die Konstanten $B_\pm$ sind also gegeben durch:

$$B_+ = \qquad A_+ \cos(\tfrac{1}{2} k a)$$

$$B_- = \mathrm{sgn}(x) A_- \sin(\tfrac{1}{2} k a)$$

$\square$

D

2 7)

Zunächst werden die Funktionen $u_+(x)$ und $u_-(x)$ nach x abgeleitet:

$$u_+'(x) = \begin{cases} -A_+ \sin(k\,x)k & \text{falls } |x| \le \frac{a}{2} \\ -A_+ \cos(\frac{a}{2}k) e^{\omega(\frac{a}{2}-|x|)} \omega \,\mathrm{sgn}(x) & \text{falls } |x| > \frac{a}{2} \end{cases}$$

$$u_-'(x) = \begin{cases} A_- \cos(k\,x)k & \text{falls } |x| \le \frac{a}{2} \\ -A_- \sin(\frac{a}{2}k) e^{\omega(\frac{a}{2}-|x|)} \omega \,\cancel{\mathrm{sgn}(x)} & \text{falls } |x| > \frac{a}{2} \end{cases}$$

Stetigkeit von $u_+'(x)$ bei $|x| = \frac{a}{2}$:

$$u_+'(\pm\tfrac{a}{2}) = -A_+ \sin(\pm\tfrac{a}{2}k)k = \mp A_+ \sin(\tfrac{a}{2}k)k$$

$$\stackrel{!}{=} -A_+ \cos(\tfrac{a}{2}k)\omega\,\mathrm{sgn}(\pm\tfrac{a}{2}) = \mp A_+ \cos(\tfrac{a}{2}k)\omega$$

$$\Leftrightarrow \quad A_+ \sin(\tfrac{a}{2}k)k = A_+ \cos(\tfrac{a}{2}k)\omega \quad \Leftrightarrow \quad \tan\left(\frac{ka}{2}\right) = \frac{\omega}{k}$$

Stetigkeit von $u_-'(x)$ bei $|x| = \frac{a}{2}$:

$$u_-'(\pm\tfrac{a}{2}) = A_- \cos(\pm\tfrac{a}{2}k)k = A_- \cos(\tfrac{a}{2}k)k$$

$$\stackrel{!}{=} -A_- \sin(\tfrac{a}{2}k)\omega\,\cancel{\mathrm{sgn}}$$

$$\Leftrightarrow \quad A_- \cos(\tfrac{a}{2}k)k = -A_- \sin(\tfrac{a}{2}k)\omega \quad \Leftrightarrow \quad \cot\left(\frac{ka}{2}\right) = -\frac{\omega}{k}$$

$\square$

2 8)

Um die Quantisierungsbedingung für den geraden Fall (+) zu zeigen, wird die Beziehung $(\cos^2\alpha)^{-1} = \tan^2\alpha + 1$ verwendet:

$$\cos^2\frac{ka}{2} = \frac{1}{1+\tan^2\frac{ka}{2}} = \frac{1}{1+\omega^2/k^2} = \frac{k^2}{k^2+\omega^2}$$

Für die Größe $k^2+\omega^2$ gilt $k^2+\omega^2 = \frac{2m}{\hbar^2}V_0$. Es gilt also

$$\frac{k^2}{k^2+\omega^2} = \frac{E+V_0}{V_0}$$

Auf beiden Seiten durch $\left(\frac{ka}{2}\right)^2 = \frac{1}{2\hbar^2} m(E+V_0)a^2$ ergibt:

$$\frac{\cos^2\frac{ka}{2}}{\left(\frac{ka}{2}\right)^2} = \frac{E+V_0}{V_0}\cdot\frac{2\hbar^2}{m(E+V_0)a^2} = \frac{2\hbar^2}{V_0 m a^2} = \frac{\hbar^2}{2m(a/2)^2}\cdot\frac{1}{V_0}$$

Für den ungeraden Fall wird analog die Beziehung $(\sin^2\alpha)^{-1} = \cot^2\alpha + 1$ verwendet.

$\square$

E

3 3)

Da $\psi(x)$ eine Lösung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung ist, gilt $(\frac{d}{dt}\psi)(x)=0$ und somit $(\frac{d}{dt}|\psi|)(x)=0$. Aus der differentiellen Form der Wahrscheinlichkeitserhaltung folgt dann $\vec{\nabla}\cdot\vec{j}=0$. Somit ist ~~ca~~ auch das Volumenintegral darüber 0. Mit dem Gauss'schen Integralsatz ~~gi~~ gilt dann:

$$\cancel{0=\int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x}(\vec{\nabla}\cdot\vec{j})(\vec{x})=\int_{\partial\mathbb{R}^3} d(\vec{f}\cdot\vec{j})}$$

$$0=\int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x}(\vec{\nabla}\cdot\vec{j})=\int_{\partial\mathbb{R}^3} d\vec{f}\cdot\vec{j} \quad\Rightarrow\quad d\vec{f}\cdot\vec{j}\Big|_{\partial\mathbb{R}^3}=0$$

In dem betrachteten eindimensionalen Fall gilt also:

$$d\vec{f}\cdot\vec{j}\Big|_{\partial\mathbb{R}^3}=0 \quad\Rightarrow\quad 0=j\Big|_{\partial\mathbb{R}}=\lim_{x\to\infty} j(x)-\lim_{x\to-\infty} j(x)$$

Da nur ein Teilchen im Potentialtopf ohne Elektromagnetisches Feld betrachtet, hat j die folgende Form:

$$j=\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi\frac{\partial}{\partial x}\psi^*-\psi^*\frac{\partial}{\partial x}\psi\right)$$

Für den Grenzfall $j(\infty)$ wird $\psi_I(x)$, für $j(-\infty)$ die Funktion $\psi_{III}(x)$ verwendet. Dazu werden zunächst alle nötigen Werte berechnet. Sei dazu $\alpha:=i\omega(x+\frac{a}{2})$, $\beta:=i\omega(x-\frac{a}{2})$. Dann ~~gilt~~ gilt:

$$\psi_I(x)=A_+e^{\alpha}+A_-e^{-\alpha} \qquad \psi_I'(x)=i\omega(A_+e^{\alpha}-A_-e^{-\alpha})$$

$$\psi_I^*(x)=A_+^*e^{-\alpha}+A_-e^{\alpha} \qquad \psi_I'^*(x)=-i\omega(A_+^*e^{-\alpha}-A_-^*e^{\alpha})$$

$$\psi_{III}(x)=C_+e^{\beta}+C_-e^{-\beta} \qquad \psi_{III}'(x)=i\omega(C_+e^{\beta}-C_-e^{-\beta})$$

$$\psi_{III}^*(x)=C_+^*e^{-\beta}+C_-e^{\beta} \qquad \psi_{III}'^*(x)=-i\omega(C_+^*e^{-\beta}-C_-^*e^{\beta})$$

Als Beispiel wird $C_-=0$ verwendet. Dann gilt:

$$\psi_I\psi_I'^*=(A_+e^{\alpha}+A_-e^{-\alpha})(-i\omega(A_+^*e^{-\alpha}-A_-^*e^{\alpha}))$$
$$=-i\omega(|A_+|^2-A_+A_-^*e^{2\alpha}+A_+^*A_-e^{-2\alpha}-|A_-|^2)$$

$$\psi_I^*\psi_I'=(A_+e^{-\alpha}+A_-e^{\alpha})(i\omega(A_+^*e^{\alpha}-A_-^*e^{-\alpha}))$$
$$=i\omega(|A_+|^2+A_+^*A_-e^{2\alpha}-A_+A_-^*e^{-2\alpha}-|A_-|^2)$$

$$\Rightarrow\quad \psi_I\psi_I'^*-\psi_I^*\psi_I'=-2i\omega(|A_+|^2-|A_-|^2)$$

$$\Rightarrow\quad \frac{i\hbar}{2m}[\psi_I\psi_I'^*-\psi_I^*\psi_I']=\frac{\omega\hbar}{m}(|A_+|^2-|A_-|^2)$$

Analog gilt für ψ_{III}:

$$\psi_{III}\psi_{III}'^{*} = \cancel{-i\omega} - i\omega|C_+|^2$$

$$\psi_{III}^{*}\psi_{III}' = i\omega|C_+|^2$$

$$\Rightarrow \frac{i\hbar}{2m}\left[\psi_{III}\psi_{III}'^{*} - \psi_{III}^{*}\psi_{III}'\right] = \frac{\omega\hbar}{m}|C_+|^2$$

Da die beiden Ausdrücke konstant sind, sind sie gleichzeitig die Grenzwerte für $x \to \pm\infty$. Einsetzen in $j|_{\partial B} = 0$ ergibt:

$$0 = \lim_{x\to\infty} j(x) - \lim_{x\to-\infty} j(x)$$
$$= \frac{\omega\hbar}{m}\left[|C_+|^2 - \left(|A_+|^2 - |A_-|^2\right)\right]$$

$$\Leftrightarrow \quad 0 = |C_+|^2 - |A_+|^2 + |A_-|^2$$

$$\Leftrightarrow \quad 1 = \underbrace{\frac{|A_-|^2}{|A_+|^2}}_{R} + \underbrace{\frac{|C_+|^2}{|A_+|^2}}_{T}$$

$\square$

3 6)

Es gilt $\sin(i\alpha) = i\sinh(\alpha) \Rightarrow \sin^2(i\alpha) = -\sinh^2(\alpha)$. ~~Daraus~~ ~~fo~~ Damit geht (2.34) mit $V_0 \to -V_0$ in (2.36) über:

$$k = \sqrt{2m(E+V_0)/\hbar^2} \to k = \sqrt{2m(\underbrace{E - V_0}_{<0})/\hbar^2}$$
$$= i\sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2}$$

$$\Rightarrow \quad T = \left[1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0+E)}\sin^2(ak)\right]^{-1}$$

$$\to \quad T = \left[1 - \frac{V_0^2}{4E(-V_0+E)}\sinh^2(a|k|)\right]^{-1}$$

$$= \left[1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0-E)}\sinh^2(a|k|)\right]^{-1}$$

$\square$

3 8)

$$|\langle\psi_L|\psi_L\rangle_t|^2 = \left|\tfrac{1}{2}\left(\langle\psi_1^+| - \langle\psi_1^-|\right)\left(e^{-itE_1^+/\hbar}|\psi_1^+\rangle - e^{-itE_1^-/\hbar}|\psi_1^-\rangle\right)\right|^2$$
$$= \left|e^{-it(E_1^+ + E_1^-)/(2\hbar)} \cdot \tfrac{1}{2}\left(e^{-it(E_1^+ - E_1^-)/(2\hbar)} - e^{it(E_1^+ - E_1^-)/(2\hbar)}\right)\right|^2$$
$$= \underbrace{\left|e^{-it(E_1^+ + E_1^-)/(2\hbar)}\right|^2}_{=1} \cdot \left|\tfrac{1}{2}\left(e^{-it(E_1^+ - E_1^-)/(2\hbar)} - e^{it(E_1^+ - E_1^-)/(2\hbar)}\right)\right|^2$$
$$= \left|\cos\{t(E_1^+ - E_1^-)/(2\hbar)\}\right|^2$$
$$= \cos^2\left\{\frac{(E_1^+ - E_1^-)t}{2\hbar}\right\}$$

$\square$

Der harmonische Oszillator

4)

Sei $\alpha := m\omega/\hbar$, $\beta := 1/(m\hbar\omega)$.

$$\Rightarrow \quad \hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\alpha}\,\hat{X} - i\sqrt{\beta}\,\hat{P}\right)$$

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\alpha}\,\hat{X} + i\sqrt{\beta}\,\hat{P}\right)$$

$$\Rightarrow \quad [\hat{a}, \hat{a}^+] = \frac{1}{2}\left[\sqrt{\alpha}\,\hat{X} + i\sqrt{\beta}\,\hat{P},\ \sqrt{\alpha}\,\hat{X} - i\sqrt{\beta}\,\hat{P}\right]$$

$$= \frac{\alpha}{2}\underbrace{[\hat{X},\hat{X}]}_{=0} + \frac{\beta}{2}\underbrace{[\hat{P},\hat{P}]}_{=0} + \frac{i}{2\hbar}\underbrace{[\hat{P},\hat{X}]}_{=-i\hbar} - \frac{i}{2\hbar}\underbrace{[\hat{X},\hat{P}]}_{=i\hbar}$$

$$= \frac{i}{2\hbar}(-i\hbar) - \frac{i}{2\hbar}(i\hbar) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1$$

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{P}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{X}^2$$

$$= \frac{1}{2m}\left(-\frac{1}{2}m\hbar\omega\left(\hat{a} - \hat{a}^+\right)\right) + \frac{1}{2}m\omega^2\left(\frac{\hbar}{2m\omega}(\hat{a} + \hat{a}^+)^2\right)$$

$$= -\frac{\hbar\omega}{4}(\hat{a} - \hat{a}^+)^2 + \frac{\hbar\omega}{4}(\hat{a} + \hat{a}^+)^2$$

$$= \frac{\hbar\omega}{4}\left((\hat{a} + \hat{a}^+)^2 - (\hat{a} - \hat{a}^+)^2\right)$$

$$= \frac{\hbar\omega}{4}\left(\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a}\right)$$

$$= \frac{1}{2}\hbar\omega\left(\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a}\right)$$

$$= \frac{1}{2}\hbar\omega\left(\mathbb{1} + \hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}^+\hat{a}\right) = \hbar\omega\left(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}\right)$$

$\uparrow$

$[\hat{a}, \hat{a}^+] = \mathbb{1}$

$\Leftrightarrow \hat{a}\hat{a}^+ = \mathbb{1} + \hat{a}^+\hat{a}$

□

5)

$$[\hat{N}, \hat{a}] = [\hat{a}^+\hat{a}, \hat{a}] = \hat{a}^+\overbrace{[\hat{a}, \hat{a}]}^{=0} + \overbrace{[\hat{a}^+, \hat{a}]}^{=-1}\hat{a} = -\hat{a}$$

$$[\hat{N}, \hat{a}^+] = [\hat{a}^+\hat{a}, \hat{a}^+] = \hat{a}^+\underbrace{[\hat{a}, \hat{a}^+]}_{=1} + \underbrace{[\hat{a}^+, \hat{a}^+]}_{=0}\hat{a} = \hat{a}^+$$

□

Theo 2 06.02.21

8) Für den Grundzustand $|0\rangle$ gilt $\hat{a}|0\rangle \overset{!}{=} 0$, d.h. mit $\alpha := \sqrt{m\omega/\hbar}$:

$$\hat{a}|0\rangle = 0 \iff \left(\sqrt{m\omega/\hbar}\,\hat{\vec{x}} + i\sqrt{1/(m\hbar\omega)}\,\hat{\vec{p}}\right)|0\rangle = 0$$

$$\Rightarrow \left(\alpha x + \alpha^{-1}\frac{d}{dx}\right)\langle x|0\rangle = 0$$

$$\iff \alpha x\langle x|0\rangle + \alpha^{-1}\frac{d}{dx}\langle x|0\rangle$$

$$\iff \alpha^{-1}\frac{d}{dx}\langle x|0\rangle = -\alpha x\langle x|0\rangle$$

$$\iff (\langle x|0\rangle)^{-1} d\langle x|0\rangle = -\frac{m\omega}{\hbar} x\,dx$$

$$\Rightarrow \int(\langle x|0\rangle)^{-1} d\langle x|0\rangle = -\frac{m\omega}{\hbar}\int x\,dx$$

$$\iff \ln\langle x|0\rangle = -\frac{m\omega}{2\hbar}x^2 + c'$$

$$\iff \langle x|0\rangle = c\exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right\}$$

Normierung:

$$\|\langle x|0\rangle\|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, c^2 \exp\left\{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right\}$$

$$= c^2\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx\,\exp\left\{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right\}}_{=\sqrt{\frac{\hbar\pi}{m\omega}}} \overset{!}{=} 1$$

$$\iff c^2\sqrt{\hbar\pi/(m\omega)} = 1$$

$$\iff c^4 = \frac{m\omega}{\hbar\pi}$$

Somit lautet die ~~Lösung:~~ normierte Lösung:

$$\langle x|0\rangle = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right\}$$

□

11)

$$\|\hat{a}^+|n\rangle\|^2 = \langle n|\hat{a}\,\hat{a}^+|n\rangle = \langle n|([\hat{a},\hat{a}^+] + \hat{a}^+\hat{a})|n\rangle = \langle n|(1+\hat{N})|n\rangle = 1+n$$

$$\|\hat{a}^+|n\rangle\|^2 = \langle n+1|(n+1)|n+1\rangle = (n+1)\langle n+1|n+1\rangle = n+1 \quad ✓$$

$$\|\hat{a}|n\rangle\|^2 = \langle n|\hat{a}^+\hat{a}|n\rangle = \langle n|\hat{N}|n\rangle = n\langle n|n\rangle = n$$

$$\|\hat{a}|n\rangle\|^2 = \langle n-1|n|n-1\rangle = n\langle n-1|n-1\rangle = n \quad ✓$$

□

14)

IA: $|1\rangle = \frac{(\hat{a}^+)^1}{\sqrt{1!}}|0\rangle = \hat{a}^+|0\rangle = |1\rangle$

IS: $|n+1\rangle = \frac{(\hat{a}^+)^{n+1}}{\sqrt{(n+1)!}}|0\rangle = \frac{\hat{a}^+}{\sqrt{n+1}}\frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle \overset{IV}{=} \frac{\hat{a}^+}{\sqrt{n+1}}|n\rangle = |n+1\rangle$

□

I

20)

$$\hat{X} = \sqrt{\hbar/(2M\omega)}\,(\hat{a} + \hat{a}^+)$$

$$\hat{P} = \sqrt{2M\hbar\omega}\,(\hat{a} - \hat{a}^+)\frac{1}{2i}$$

$$\hat{X}^2 = \frac{\hbar}{2M\omega}(\hat{a} + \hat{a}^+)^2 = \frac{\hbar}{2M\omega}(\hat{a}^2 + (\hat{a}^+)^2 + \hat{a}\,\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a})$$

$$\cancel{\hat{P}^2 = 2M\hbar\omega(\hat{a}}$$

$$\hat{P}^2 = -\frac{1}{2}M\hbar\omega(\hat{a} - \hat{a}^+)^2 = \frac{1}{2}M\hbar\omega(-\hat{a}^2 - (\hat{a}^+)^2 + \hat{a}\,\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a})$$

$$\Rightarrow \langle\hat{X}^2\rangle = \langle n|\hat{X}^2|n\rangle = \frac{\hbar}{2M\omega}(\underbrace{\langle n|\hat{a}^2|n\rangle}_{=0} + \underbrace{\langle n|(\hat{a}^+)^2|n\rangle}_{=0} + \underbrace{\langle n|\hat{a}\,\hat{a}^+|n\rangle}_{=n+1} + \underbrace{\langle n|\hat{N}|n\rangle}_{=n})$$

$$= \frac{\hbar}{M\omega}(n + \frac{1}{2})$$

$$\langle\hat{P}^2\rangle = \langle n|\hat{P}^2|n\rangle = \frac{1}{2}M\hbar\omega(-\underbrace{\langle n|\hat{a}^2|n\rangle}_{=0} - \underbrace{\langle n|(\hat{a}^+)^2|n\rangle}_{=0} + \underbrace{\langle n|\hat{a}\hat{a}^+|n\rangle}_{=n+1} + \underbrace{\langle n|\hat{N}|n\rangle}_{=n})$$

$$= M\hbar\omega(n + \frac{1}{2})$$

$$\langle\hat{X}\rangle \hat{=} \langle n|\hat{X}|n\rangle \propto \langle n|\hat{a}|n\rangle + \langle n|\hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n}\underbrace{\langle n|n-1\rangle}_{=0} + \sqrt{n+1}\underbrace{\langle n|n+1\rangle}_{=0} = 0$$

$$\langle\hat{P}\rangle = \langle n|\hat{P}|n\rangle = 0$$

$$\Rightarrow (\Delta\hat{X})^2 = \langle\hat{X}^2\rangle - \langle\hat{X}\rangle^2 = \frac{\hbar}{M\omega}(n + \frac{1}{2})$$

$$(\Delta\hat{P})^2 = \langle\hat{P}^2\rangle - \langle\hat{P}\rangle^2 = M\hbar\omega(n + \frac{1}{2})$$

□

22) Siehe Seite K.

27)

Für Zustände minimaler Unschärfe bzgl. $\hat{A}, \hat{B}$ muss gelten:

$$Tr(\hat{\rho}\,\hat{T}\,\hat{T}^+) = \sum_\lambda p_\lambda \langle\lambda|\hat{T}\,\hat{T}^+|\lambda\rangle \overset{!}{=} 0$$

Dies ist äquivalent zu der Bedingung, dass $\hat{T}^+|\lambda\rangle = 0$ für alle $|\lambda\rangle$ mit $p_\lambda \neq 0$ gilt.

Fallunterscheidung:

1. Keine zwei Lösungen von $\hat{T}^+|\lambda\rangle$ sind orthogonal. Dann gilt wegen $\langle\lambda|\lambda'\rangle = \delta_{\lambda\lambda'}$ für genau ein $p_\lambda \neq 0 \Rightarrow \hat{\rho}$ ist rein.
2. Es gibt mindestens zwei orthogonale Lösungen $\Rightarrow \hat{\rho}$ ist nicht zwangsweise rein.

□

2 2)

Seien $\hat{A}, \hat{B}$ zwei selbstadjungierte Operatoren. Seien außerdem:

$$\hat{A}_0 := \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle$$

$$\hat{B}_0 := \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle$$

$$\cancel{\rho = \sum_\lambda p_\lambda \lambda\lambda}$$

$$\hat{\rho} = \sum_\lambda p_\lambda |\lambda\rangle\langle\lambda|, \quad \langle \lambda | \lambda' \rangle = \delta_{\lambda\lambda'}$$

Sei außerdem $\hat{C} := -i[\hat{A}, \hat{B}]$ mit $\hat{C} = \hat{C}^\dagger$. Für einen beliebigen Operator $\hat{T}$ gilt:

$$Tr(\hat{\rho}\, \hat{T}\, \hat{T}^\dagger) = \sum_\lambda \langle \lambda | \hat{\rho}\, \hat{T}\, \hat{T}^\dagger | \lambda \rangle = \sum_\lambda \underset{\geq 0}{p_\lambda} \underbrace{\langle \lambda | \hat{T}\, \hat{T}^\dagger | \lambda \rangle}_{= \| \hat{T}^\dagger |\lambda\rangle \|^2 \geq 0} \geq 0$$

Sei $\hat{T} := \hat{A}_0 + i\mu \hat{B}_0$ mit $\mu \in \mathbb{R}$. Dann gilt:

$$\hat{T}\, \hat{T}^\dagger = \hat{A}_0^2 + \mu^2 \hat{B}_0^2 + i\mu \hat{B}_0 \hat{A}_0 - i\mu \hat{A}_0 \hat{B}_0$$

$$= \hat{A}_0^2 + \mu^2 \hat{B}_0^2 - i\mu [\hat{A}_0, \hat{B}_0]$$

$$\Longrightarrow Tr(\hat{\rho}\, \hat{T}\, \hat{T}^\dagger) = \langle \hat{A}_0^2 \rangle + \mu^2 \langle \hat{B}_0^2 \rangle - i\mu \langle [\hat{A}_0, \hat{B}_0] \rangle \geq 0$$

Die linke Seite der Ungleichung wird minimal, wenn $\frac{\partial}{\partial\mu} Tr(\hat{\rho}\hat{T}\hat{T}^\dagger) = 0$ gilt:

$$\frac{\partial}{\partial\mu} Tr(\hat{\rho}\, \hat{T}\, \hat{T}^\dagger) = 2\mu \langle \hat{B}_0^2 \rangle - i \langle [\hat{A}_0, \hat{B}_0] \rangle \overset{!}{=} 0$$

$$\Longrightarrow \quad \mu = \frac{i \langle [\hat{A}_0, \hat{B}_0] \rangle}{2 \langle \hat{B}_0^2 \rangle}$$

Es gilt $[\hat{A}_0, \hat{B}_0] = [\hat{A}, \hat{B}]$ und $\langle \hat{A}_0^2 \rangle = (\Delta A)^2$, $\langle \hat{B}_0^2 \rangle = (\Delta B)^2$. Einsetzen in die ~~Ung~~ Ungleichung führt auf die zu beweisende Unschärferelation:

$$\langle \hat{A}_0^2 \rangle + \mu^2 \langle \hat{B}_0^2 \rangle - i\mu \langle [\hat{A}_0, \hat{B}_0] \rangle \geq 0$$

$$\Longleftrightarrow (\Delta A)^2 + \mu^2 (\Delta B)^2 - i\mu \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \geq 0$$

$$\Longrightarrow (\Delta A)^2 - \frac{\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle^2}{4(\Delta B)^2} + \frac{\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle^2}{2(\Delta B)^2} \geq 0$$

$$\Longleftrightarrow \quad (\Delta A)^2 \cdot (\Delta B)^2 \geq \frac{1}{4} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle^2$$

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

$\square$

2 7) Siehe seite J.

3 2) Eigenschaften von $\hat{D}(\alpha)$.

Baker-Campbell-Hausdorff-Beziehung: Für $\hat{A}, \hat{B}$ mit $[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]] = [\hat{B},[\hat{A},\hat{B}]] = 0$ gilt:

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} e^{-[\hat{A},\hat{B}]/2} = e^{\hat{B}} e^{\hat{A}} e^{[\hat{A},\hat{B}]/2}$$

Mit α, $[\alpha\hat{a}^+, -\alpha^*\hat{a}] = [\alpha^*\hat{a}, \alpha\hat{a}^+] = |\alpha|^2[\hat{a},\hat{a}^+] = |\alpha|^2$ gilt:

$$\hat{D}(\alpha) = e^{-|\alpha|^2/2} e^{\alpha\hat{a}^+} e^{-\alpha^*\hat{a}} = e^{|\alpha|^2/2} e^{-\alpha^*\hat{a}} e^{\alpha\hat{a}^+}$$

<u>$\hat{D}^+(\alpha) = \hat{D}(-\alpha)$:</u>

$$\hat{D}^+(\alpha) = e^{\alpha^*\hat{a} - \alpha\hat{a}^+}$$

$$\hat{D}(-\alpha) = e^{-\alpha\hat{a}^+ + \alpha^*\hat{a}} = e^{\alpha^*\hat{a} - \alpha\hat{a}^+}$$

<u>$\hat{D}^{-1}(\alpha) = \hat{D}(-\alpha)$:</u>

$\cancel{\hat{D}^{-1}(\alpha}$

$$\hat{D}(\alpha)\hat{D}(-\alpha) = e^{|\alpha|^2/2} \underbrace{e^{-\alpha^*\hat{a}} e^{\alpha\hat{a}^+} e^{-\alpha\hat{a}^+} e^{\alpha^*\hat{a}}}_{=\mathbb{1}} e^{-|\alpha|^2/2} = \mathbb{1}$$

$\hat{D}(-\alpha)\hat{D}(\alpha) = \mathbb{1}$ analog...

<u>$\hat{D}^+(\alpha)\hat{a}\hat{D}(\alpha)$:</u>

$$\hat{D}^+(\alpha)\hat{a}\hat{D}(\alpha) = e^{\alpha^*\hat{a}} \underbrace{e^{-\alpha\hat{a}^+}\hat{a}\, e^{\alpha\hat{a}^+}}_{I(\alpha):=} e^{-\alpha^*\hat{a}} \equiv e^{\alpha^*\hat{a}} I(\alpha) e^{-\alpha^*\hat{a}}$$

Für $I(\alpha)$ gilt die Differentialgleichung

$$\frac{dI}{d\alpha} = -e^{-\alpha\hat{a}^+}\hat{a}^+\hat{a}\, e^{\alpha\hat{a}^+} + e^{-\alpha\hat{a}^+}\hat{a}\,\hat{a}^+ e^{\alpha\hat{a}^+}$$

$$= e^{-\alpha\hat{a}^+}\underbrace{[\hat{a},\hat{a}^+]}_{=\mathbb{1}} e^{\alpha\hat{a}^+} = e^{-\alpha\hat{a}^+} e^{\alpha\hat{a}^+} = \mathbb{1} \quad \Longrightarrow \quad I(\alpha) = \alpha + c$$

Mit dem Anfangswert $I(0) \overset{!}{=} \hat{a}$ folgt $I(\alpha) = \hat{a} + \alpha$ und damit:

$$\hat{D}^+(\alpha)\hat{a}\hat{D}(\alpha) = e^{\alpha^*\hat{a}} I(\alpha) e^{-\alpha^*\hat{a}} = e^{\alpha^*\hat{a}}(\hat{a}+\alpha) = e^{-\alpha^*\hat{a}} = \hat{a} + \alpha$$

<u>$\hat{D}^+(\alpha)\hat{a}^+\hat{D}(\alpha)$:</u> Analog...

$\square$

~~3 8) $\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$~~

$$\cancel{\Rightarrow \quad \hat{U}^{\dagger}(\alpha) = \alpha \quad \hat{U}^{\dagger}(\alpha)\,\hat{a}|\alpha\rangle = \hat{U}^{\dagger}(\alpha)\,\hat{a}\,\alpha}$$

3 8) $\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$

Es gilt $\hat{U}^{\dagger}(\alpha)\,\hat{a}\,|\alpha\rangle = \hat{U}^{\dagger}(\alpha)\,\hat{a}\,\hat{U}(\alpha)|0\rangle = (\hat{a} + \alpha)|0\rangle = \alpha|0\rangle$. ~~Links vo~~ Von links mit $\hat{U}(\alpha)$ multiplizieren:

$$\underbrace{\hat{U}(\alpha)\,\hat{U}^{\dagger}(\alpha)}_{=\mathbb{1}}\,\hat{a}\,|\alpha\rangle = \underbrace{\hat{U}(\alpha)\,\alpha|0\rangle}_{=\alpha|\alpha\rangle} \quad \Leftrightarrow \quad \hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$$

$\square$

4 1) $|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\, e^{-|\alpha|^2/2}\,|n\rangle$

Seien die Koeffizienten (c_n) so, dass gilt

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle$$

wobei demnach $c_n = \langle n|\alpha\rangle$ gilt. Sie sind gegeben durch die Rekursionsbeziehung

$$\cancel{\langle n|\alpha\rangle = \langle n|\hat{U}(\alpha)|0\rangle}$$

$$\cancel{\langle n|\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\langle 0|\hat{a}^n|0\rangle}$$

$$\langle n|\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\langle 0|\hat{a}^n|\alpha\rangle = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\langle 0|\alpha\rangle \equiv \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\, c_0$$

wobei die Beziehung

$$|n\rangle = \frac{(\hat{a}^{\dagger})^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle \quad \Rightarrow \quad \cancel{\langle n| = \frac{\hat{a}^n}{\sqrt{n!}}} \quad \langle n| = \langle 0|\frac{\hat{a}^n}{\sqrt{n!}}$$

verwendet wurde. ~~Es~~ Durch Normierung von $|\alpha\rangle$ berechnet sich c_0:

$$\cancel{\langle\alpha|\alpha\rangle = |c_0|^2 \left(\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(\alpha^*)^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle\right)\left(\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha}{\sqrt{n!}}\right)}$$

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = |c_0|^2\left(\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(\alpha^*)^n}{\sqrt{n!}}\langle n|\right)\left(\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle\right)$$

$$= |c_0|^2 \sum_{n=0}^{\infty}\frac{|\alpha|^{2n}}{\sqrt{n!}}\langle n|n\rangle = |c_0|^2\sum_{n=0}^{\infty}\frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = |c_0|^2 e^{|\alpha|^2} \stackrel{!}{=} 1$$

$$\cancel{\Rightarrow \quad c_0 = e^{-|\alpha|^2/2}}$$

$$\Rightarrow \quad c_0 = e^{-|\alpha|^2/2}$$

Dabei wurde die Phase von $|\alpha\rangle$ so gewählt, dass $\langle 0|\alpha\rangle \geq 0$ ~~ge~~ gilt. Es gilt also:

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle$$

$\square$

4 4) $\langle\beta|\alpha\rangle = \exp\left\{-\frac{1}{2}\left(|\alpha|^2+|\beta|^2\right)+\alpha\beta^*\right\}$

Es gilt

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle$$
$$\langle\beta| = e^{-|\beta|^2/2}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{(\beta^*)^m}{\sqrt{m!}}\langle m|$$

daraus folgt:

$$\langle\beta|\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}(|\alpha|^2+|\beta|^2)}\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{\alpha^n\,(\beta^*)^n}{\sqrt{n!}\sqrt{m!}}\langle m|n\rangle$$
$$= e^{-\frac{1}{2}(|\alpha|^2+|\beta|^2)}\underbrace{\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(\alpha\beta^*)^n}{n!}\underbrace{\langle n|n\rangle}_{=1}}_{=e^{\alpha\beta^*}}$$
$$= \exp\left\{-\frac{1}{2}\left(|\alpha|^2+|\beta|^2\right)+\alpha\beta^*\right\}$$

$\square$

4 6) Siehe unten.

4 8) $e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\alpha\rangle = e^{-i\omega t/2}|\alpha e^{-i\omega t}\rangle$

Es gilt mit $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{N}+\frac{1}{2})$ und $\alpha \equiv re^{i\varphi}$:

$$e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\alpha\rangle = e^{-i\omega(\hat{N}+\frac{1}{2})t}|\alpha\rangle$$
$$= e^{-|\alpha|/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}e^{-i\omega(\hat{N}+\frac{1}{2})t}|n\rangle$$
$$= e^{-|\alpha|/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}e^{-i\omega(n+\frac{1}{2})t}|n\rangle$$
$$= e^{-i\omega t/2}e^{-|\alpha|/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\alpha e^{-i\omega t}\right)^n|n\rangle$$
$$= e^{-i\omega t/2}|e^{-i\omega t}\alpha\rangle$$

$\square$

~~5 0)~~

~~5 2)~~

~~5 3)~~

~~4 6)~~ $\cancel{\frac{1}{\pi}\int_{\mathbb{C}}d^2\alpha\,|\alpha\rangle\langle\alpha| = \mathbb{1}}$

$$\cancel{\frac{1}{\pi}\int_{\mathbb{C}}d^2\alpha\,|\alpha\rangle\langle\alpha| = \sum_{n,m=0}^{\infty}\frac{1}{\pi}\frac{|n\rangle\langle m|}{\sqrt{n!m!}}\int_0^{\infty}dr\,r\int_0^{2\pi}d\varphi\,e^{i\varphi(n-m)}r^{n+m}e^{-r^2}}$$
$$\cancel{=\sum_{n,m=0}^{\infty}\frac{\pi}{\pi}\frac{|n\rangle\langle m|}{\sqrt{n!m!}}2\int_0^{\infty}dr\,r\,r^{n+m}e^{-r^2}\delta_{nm}}$$
$$\cancel{=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}|n\rangle\langle n|\underbrace{2\int_0^{\infty}dr\,r\,r^{2n+1}e^{-r^2}}_{=n!} = \sum_{n=0}^{\infty}|n\rangle\langle n| = \mathbb{1}}$$

$\square$

Theo 2 09.02.21

4 b) $\frac{1}{\pi}\int_{\mathbb{C}} d^2\alpha\, |\alpha\rangle\langle\alpha| = \mathbb{1}$

Sei $\alpha \equiv r\, e^{i\varphi}$, dann gilt:

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle = e^{-r^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{n!}}\, e^{i\varphi n}\,|n\rangle\, r^n$$

$$\langle\alpha| = e^{-r^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{n!}}\, e^{-i\varphi n}\langle n|\, r^n$$

$$\Rightarrow |\alpha\rangle\langle\alpha| = e^{-r^2}\sum_{n,m=0}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{n!m!}}\, e^{i\varphi(n-m)}|n\rangle\langle m|\, r^{n+m}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{\pi}\int_{\mathbb{C}} d^2\alpha\, |\alpha\rangle\langle\alpha| = \sum_{n,m=0}^{\infty}\frac{1}{\pi}\sqrt{n!m!}^{-1}\int_0^{\infty} dr\, r \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi\, e^{i\varphi(n-m)}}_{=\delta_{nm}2\pi} r^{n+m}\, e^{-r^2}|n\rangle\langle m|$$

$$\cancel{= \sum_{n=0}^{\infty} 2\sqrt{n!n!}^{-1}\underbrace{\int_0^{\infty} dr\, r^{2n+1} e^{-r^2}}_{=n}|n\rangle\langle n|}$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} 2\,\frac{1}{n!}\underbrace{\int_0^{\infty} dr\, r^{2n+1} e^{-r^2}}_{=n!/2}|n\rangle\langle n|$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty}|n\rangle\langle n| = \mathbb{1}$$

$\square$

5 a)

5 2)

5 3)

Symmetrien, Invarianzen und Erhaltungsgrößen

~~6 6)~~

~~$\vec{x}\psi$~~

6 6) $\langle\vec{x}|\vec{p}\rangle = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar}$

$\langle\vec{p}|\psi'\rangle = \langle\vec{p}|\hat{U}(\vec{a})|\psi\rangle = \langle\vec{p}|e^{-i\vec{\hat{P}}\cdot\vec{a}/\hbar}|\psi\rangle = e^{-i\vec{p}\cdot\vec{a}/\hbar}\langle\vec{p}|\psi\rangle$

$\langle\vec{x}'|\psi'\rangle = \langle\vec{x}'|\mathbb{1}|\psi'\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{p}\,\langle\vec{x}'|\vec{p}\rangle\langle\vec{p}|\psi'\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{p}\,(2\pi\hbar)^{-3/2} e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}'/\hbar} e^{-i\vec{p}\cdot\vec{a}/\hbar}\langle\vec{p}|\psi\rangle$

$= (2\pi\hbar)^{-3/2}\int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{p}\; e^{i\vec{p}\cdot(\vec{x}'-\vec{a})/\hbar}\langle\vec{p}|\psi\rangle$

$= \langle\vec{x}' - \vec{a}|\psi\rangle = \langle\vec{x}|\psi\rangle$

Es gilt somit offensichtlich auch $|\langle\vec{x}'|\psi'\rangle|^2 = |\langle\vec{x}|\psi\rangle|^2$.

~~Ergi~~ Es gilt für p den Impuls:

$\langle\vec{p}'|\psi'\rangle = \langle\vec{p}'|e^{-i\vec{\hat{P}}\cdot\vec{a}/\hbar}|\psi\rangle = e^{-i\vec{p}'\cdot a/\hbar}\langle\vec{p}'|\psi\rangle = e^{-i\vec{p}'\cdot\vec{a}/\hbar}\langle\vec{p}|\psi\rangle$

Daraus folgt sofort $|\langle\vec{p}'|\psi'\rangle|^2 = |\langle\vec{p}|\psi\rangle|^2$.

7 a)

7 c)

Der Drehimpuls

3) Siehe Übung 8, Aufgabe 2a.

10)

Sei $\Gamma_{kl} := [\hat{J}_k^2, \hat{J}_l]$:

$$\Gamma = \begin{bmatrix} 0 & -(\hat{J}_2\hat{J}_3 + \hat{J}_3\hat{J}_2) & \hat{J}_2\hat{J}_3 + \hat{J}_3\hat{J}_2 \\ \hat{J}_1\hat{J}_3 + \hat{J}_3\hat{J}_1 & 0 & -(\hat{J}_1\hat{J}_3 + \hat{J}_3\hat{J}_1) \\ -(\hat{J}_1\hat{J}_2 + \hat{J}_2\hat{J}_1) & \hat{J}_1\hat{J}_2 + \hat{J}_2\hat{J}_1 & 0 \end{bmatrix} i\hbar$$

Es gilt bspw.:

$$[\hat{J}_1^2, \hat{J}_2] = \hat{J}_1[\hat{J}_1, \hat{J}_2] + [\hat{J}_1, \hat{J}_2]\hat{J}_1 = i\hbar(\hat{J}_1\hat{J}_3 + \hat{J}_3\hat{J}_1)$$

$$[\hat{J}_1^2, \hat{J}_3] = -i\hbar(\hat{J}_1\hat{J}_2 + \hat{J}_2\hat{J}_1)$$

$$[\hat{J}_2^2, \hat{J}_1] = -[\hat{J}_1, \hat{J}_2^2] = -i\hbar(\hat{J}_2\hat{J}_3 + \hat{J}_3\hat{J}_2)$$

Aus $\Gamma\vec{1} = \vec{0}$ folgt sofort $[\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_k] = 0$ für alle $k \in \{1,2,3\}$.

$\square$

13)

$$[\hat{J}_3, \hat{J}_\pm] = [\hat{J}_3, \hat{J}_1 \pm i\hat{J}_2] = [\hat{J}_3, \hat{J}_1] \pm i[\hat{J}_3, \hat{J}_2] = i\hbar\hat{J}_2 \pm \hbar\hat{J}_1 = \pm\hbar\hat{J}_\pm$$

$$[\hat{J}_+, \hat{J}_-] = [\hat{J}_1 + i\hat{J}_2, \hat{J}_1 - i\hat{J}_2] = -i[\hat{J}_1, \hat{J}_2] + i\underbrace{[\hat{J}_2, \hat{J}_1]}_{=-i\hbar\hat{J}_3} = 2\hat{J}_3$$

$\square$

25)
26)

Es gilt mit $\hat{J}_-\hat{J}_+ = \hat{\vec{J}}^2 - \hat{J}_3^2 - \hbar\hat{J}_3$ und $\hat{J}_+\hat{J}_- = \hat{\vec{J}}^2 - \hat{J}_3^2 + \hbar\hat{J}_3$:

$$\|\hat{J}_+|j\ m\rangle\|^2 = \langle j\ m|\hat{J}_-\hat{J}_+|j\ m\rangle = \langle j\ m|(\hat{\vec{J}}^2 - \hat{J}_3^2 - \hbar\hat{J}_3)|j\ m\rangle$$

$$= \hbar^2(\underset{=j(j+1)}{\underset{\uparrow}{\beta}} - m^2 - m)\underbrace{\langle j\ m|j\ m\rangle}_{=1} = \hbar^2((j+m+1)(j-m))$$

$$\|\hat{J}_-|j\ m\rangle\|^2 = \langle j\ m|\hat{J}_+\hat{J}_-|j\ m\rangle = \langle j\ m|(\hat{\vec{J}}^2 - \hat{J}_3^2 + \hbar\hat{J}_3)|j\ m\rangle$$

$$= \hbar^2(\underset{=j(j+1)}{\underset{\uparrow}{\beta}} - m^2 + m)\underbrace{\langle j\ m|j\ m\rangle}_{=1} = \hbar^2((j-m+1)(j+m))$$

$\square$

Theo 2 09.02.21

2 7)

~~Sei $j \neq j'$, $m \neq m'$~~ Sei $j \neq j'$, dann folgt mit $[\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_k] = 0$:

$$\langle j'\, m' | \hat{\vec{J}}^2 \hat{J}_k | j\, m\rangle = \langle j'\, m' | \hat{J}_k \hat{\vec{J}}^2 | j\, m\rangle$$

$$\Leftrightarrow \quad \hbar^2 j'(j'+1)\langle j'\, m' | \hat{J}_k | j\, m\rangle = \hbar^2 j(j+1)\langle j'\, m' | \hat{J}_k | j\, m\rangle$$

$$\overset{j \neq j'}{\Longrightarrow} \quad \langle j\, m' | \hat{J}_k | j\, m\rangle = 0$$

Somit sind die Diagonalelemente von $\hat{J}_K$ diagonal.

$\square$

~~2 9)~~

~~Sei $|+\rangle := |\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\rangle$, $|-\rangle := |\frac{1}{2}\,-\frac{1}{2}\rangle$, dann gilt mit $\hat{P}_1 = \frac{1}{2}(\hat{P}_+ + \hat{P}_-)$, $\hat{P}_2 = \frac{1}{2i}(\hat{P}_+ - \hat{P}_-)$:~~

$$\cancel{\hat{P}_3 = \frac{\hbar}{2}(|+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|) \longrightarrow \hat{P}_3 = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}}$$

~~Für $\hat{P}_1$ folgt mit 1~~

2 9)

Seien $|+\rangle := |\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\rangle$, $|-\rangle := |\frac{1}{2}\,-\frac{1}{2}\rangle$, dann gilt mit $\hat{J}_1 = \frac{1}{2}(\hat{J}_+ + \hat{J}_-)$, $\hat{J}_2 = \frac{1}{2i}(\hat{J}_+ - \hat{J}_-)$:

$$\hat{J}_3 = \frac{\hbar}{2}(|+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|) \longrightarrow \hat{J}_3 = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned}
\hat{J}_1 &= |+\rangle\langle+|\hat{J}_1|+\rangle\langle+| + |+\rangle\langle+|\hat{J}_1|-\rangle\langle-| + |-\rangle\langle-|\hat{J}_1|-\rangle\langle-| + |-\rangle\langle-|\hat{J}_1|+\rangle\langle+| \\
&= \frac{1}{2}\Big(|+\rangle\langle+|\hat{J}_+|+\rangle\langle+| + |+\rangle\langle+|\hat{J}_-|+\rangle\langle+| + |+\rangle\langle+|\hat{J}_+|-\rangle\langle-| + |+\rangle\langle+|\hat{J}_-|-\rangle\langle-| \\
&\quad + |-\rangle\langle-|\hat{J}_+|-\rangle\langle-| + |-\rangle\langle-|\hat{J}_-|-\rangle\langle-| + |-\rangle\langle-|\hat{J}_+|+\rangle\langle+| \\
&\quad + |-\rangle\langle-|\hat{J}_-|+\rangle\langle+|\Big) \\
&= \frac{1}{2}\Big(|+\rangle\langle+|\hat{J}_-|+\rangle\langle+| + |+\rangle\langle+|\hat{J}_+|-\rangle\langle-| + |-\rangle\langle-|\hat{J}_+|-\rangle\langle-| + |-\rangle\langle-|\hat{J}_-|+\rangle\langle+|\Big) \\
&= \frac{\hbar}{2}\Big(|+\rangle\underbrace{\langle+|-\rangle}_{=0}\langle+| + |+\rangle\underbrace{\langle+|+\rangle}_{=1}\langle-| + |-\rangle\underbrace{\langle-|+\rangle}_{=0}\langle-| + |-\rangle\underbrace{\langle-|-\rangle}_{=1}\langle+|\Big) \\
&= \frac{\hbar}{2}\big(|+\rangle\langle-| + |-\rangle\langle+|\big) \longrightarrow \hat{J}_1 = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}
\end{aligned}$$

Analog folgt $\hat{J}_2 = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$

$\square$

R

3 8)
$$(\vec{\hat{\sigma}}\cdot\vec{\hat{P}})^2 = \hat{\sigma}_1\hat{P}_1\hat{\sigma}_1\hat{P}_1 + \hat{\sigma}_1\hat{P}_1\hat{\sigma}_2\hat{P}_2 + \hat{\sigma}_1\hat{P}_1\hat{\sigma}_3\hat{P}_3 + \hat{\sigma}_2\hat{P}_2\hat{\sigma}_1\hat{P}_1 + \hat{\sigma}_2\hat{P}_2\hat{\sigma}_2\hat{P}_2 + \hat{\sigma}_2\hat{P}_2\hat{\sigma}_3\hat{P}_3 + \hat{\sigma}_3\hat{P}_3\hat{\sigma}_1\hat{P}_1 + \hat{\sigma}_3\hat{P}_3\hat{\sigma}_2\hat{P}_2 + \hat{\sigma}_3\hat{P}_3\hat{\sigma}_3\hat{P}_3$$
$$= \hat{\sigma}_1^2\hat{P}_1^2 + \hat{\sigma}_2^2\hat{P}_2^2 + \hat{\sigma}_3^2\hat{P}_3^2 + \hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2\hat{P}_1\hat{P}_2 + \hat{\sigma}_2\hat{\sigma}_1\hat{P}_1\hat{P}_2 + \hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_3\hat{P}_1\hat{P}_3 + \hat{\sigma}_3\hat{\sigma}_1\hat{P}_1\hat{P}_3 + \hat{\sigma}_2\hat{\sigma}_3\hat{P}_2\hat{P}_3 + \hat{\sigma}_3\hat{\sigma}_2\hat{P}_2\hat{P}_3$$
$$= \hat{P}_1^2 + \hat{P}_2^2 + \hat{P}_3^2 = \vec{\hat{P}}^2$$

□

3 9) Siehe Übung 9, Aufgabe 4.

4 4) $|\vec{s}| \leq 1$

Mit $\hat{\rho} = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \vec{s}\cdot\vec{\hat{\sigma}})$ gilt:

$$\hat{\rho}^2 = \frac{1}{4}(\mathbb{1} + \vec{s}^2 + \vec{s}\cdot\vec{\hat{\sigma}})$$

Es gilt $Tr(\vec{s}\cdot\vec{\hat{\sigma}}) = Tr(s_1\hat{\sigma}_1) + Tr(s_2\hat{\sigma}_2) + Tr(s_3\hat{\sigma}_3) = 0$:

$$Tr(s_1\hat{\sigma}_1) = \langle \tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}|\hat{\sigma}_1|\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\rangle + \langle \tfrac{1}{2}\,-\tfrac{1}{2}|\hat{\sigma}_1|\tfrac{1}{2}\,-\tfrac{1}{2}\rangle$$
$$= \left(\underbrace{\begin{bmatrix}1 & 0\end{bmatrix}\cdot\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}\cdot\begin{bmatrix}1\\ 0\end{bmatrix}}_{=0} + \underbrace{\begin{bmatrix}0 & 1\end{bmatrix}\cdot\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}\cdot\begin{bmatrix}0\\ 1\end{bmatrix}}_{=0}\right)\frac{\hbar}{2}$$
$$= 0$$

$$Tr(s_2\hat{\sigma}_2) = \langle \tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}|\hat{\sigma}_2|\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\rangle + \langle \tfrac{1}{2}\,-\tfrac{1}{2}|\hat{\sigma}_2|\tfrac{1}{2}\,-\tfrac{1}{2}\rangle$$
$$= \left(\underbrace{\begin{bmatrix}1 & 0\end{bmatrix}\cdot\begin{bmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{bmatrix}\cdot\begin{bmatrix}1\\ 0\end{bmatrix}}_{=0} + \underbrace{\begin{bmatrix}0 & 1\end{bmatrix}\cdot\begin{bmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{bmatrix}\cdot\begin{bmatrix}0\\ 1\end{bmatrix}}_{=0}\right)\frac{\hbar}{2}$$
$$= 0$$

$Tr(s_3\hat{\sigma}_3) = 0$ analog...

Daraus ergibt sich:

$$Tr(\hat{\rho}^2) = \frac{1}{4}Tr(\mathbb{1} + \vec{s}^2) + \underbrace{\frac{1}{4}Tr(\vec{s}\cdot\vec{\hat{\sigma}})}_{=0} \overset{(*)}{=} \frac{1}{2}(1 + \vec{s}^2) \leq Tr(\hat{\rho}) = 1$$

$$\Longrightarrow\ 1 + |\vec{s}|^2 \leq 2 \iff |\vec{s}| \leq 1$$

□

* Es wird $\frac{1}{4} \to \frac{1}{2}$, da über eine 2-D. Basis summiert wird.

Theo 2 09.02.21

4 a) $\hat{\rho}_1 \cdot \hat{\rho}_2 = 0 \iff \vec{s}_1 = \vec{s}_2$

$$\hat{\rho}_1 \cdot \hat{\rho}_2 = \frac{1}{4}(1 + \vec{s}_1 \cdot \vec{\hat{\sigma}})(1 + \vec{s}_2 \cdot \vec{\hat{\sigma}}) = \frac{1}{4}\Big(1 + (\vec{s}_1 + \vec{s}_2) \cdot \vec{\hat{\sigma}} + \underbrace{(\vec{s}_1 \cdot \vec{\hat{\sigma}})(\vec{s}_2 \cdot \vec{\hat{\sigma}})}\Big)$$

$$= i(\vec{s}_1)_k(\vec{s}_2)_l\, \hat{\sigma}_k \hat{\sigma}_l \cancel{+\delta_{kl}}$$
$$= i(\vec{s}_1)_k(\vec{s}_2)_l \epsilon_{klm}\hat{\sigma}_m + \delta_{kl}$$
$$= i\vec{\hat{\sigma}} \cdot (\vec{s}_1 \times \vec{s}_2) + \vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2$$

$$= \frac{1}{4}\left(1 + (\vec{s}_1 + \vec{s}_2) \cdot \vec{\hat{\sigma}} + i\,\vec{\hat{\sigma}} \cdot (\vec{s}_1 \times \vec{s}_2) + \vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2\right) \overset{!}{=} 0$$

$\iff \vec{s}_1 = -\vec{s}_2$

Da:
- $(\vec{s} - \vec{s}) \cdot \vec{\hat{\sigma}} = 0$
- $(\vec{s} \times \vec{s}) \cdot \vec{\hat{\sigma}}\, i = 0$
- $1 + \underbrace{\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2}_{=-1} = 0$

$\square$

4 b)

Mit $\vec{\omega} \equiv \omega \vec{e}_1$, $\vec{e}' = R(\vec{\omega})\vec{e}_3$ gilt

$$e'_k \equiv R_{kl}(\vec{\omega})(\vec{e}_3)_l \implies e'_k = R_{k3}(\vec{\omega}).$$

Aus der allgemeinen Transformationsrelation für Vektoroperatoren gilt für den Spinoperator $\vec{\hat{S}} = \hbar\vec{\hat{\sigma}}/2$:

$$e^{-i\vec{\omega}\cdot\vec{\hat{S}}/\hbar}\, \hat{S}_k\, e^{i\vec{\omega}\cdot\vec{\hat{S}}/\hbar} = R^{-1}_{kl}(\vec{\omega})\hat{S}_l$$

Daraus folgt für $\vec{e}' \cdot \vec{\hat{S}}$ mit der Spektraldarstellung

$$\hat{S}_3 = \frac{\hbar}{2}\left(|\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\rangle\langle\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}| - |\tfrac{1}{2}\,-\tfrac{1}{2}\rangle\langle\tfrac{1}{2}\,-\tfrac{1}{2}|\right)$$

von $\hat{S}_3$:

$$\vec{e}' \cdot \vec{\hat{S}} = e'_k \hat{S}_k = R_{k3}(\vec{\omega})\hat{S}_k = R^{-1}_{3k}(\vec{\omega})\hat{S}_k$$
$$= e^{-i\vec{\omega}\cdot\vec{\hat{S}}/\hbar}\, \hat{S}_3\, e^{i\vec{\omega}\cdot\vec{\hat{S}}/\hbar}$$
$$= \frac{\hbar}{2}\Big(e^{-i\vec{\omega}\cdot\vec{\hat{S}}/\hbar}|\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\rangle\langle\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}|\, e^{i\vec{\omega}\cdot\vec{\hat{S}}/\hbar}$$
$$+ e^{-i\vec{\omega}\cdot\vec{\hat{S}}/\hbar}|\tfrac{1}{2}\,-\tfrac{1}{2}\rangle\langle\tfrac{1}{2}\,-\tfrac{1}{2}|\, e^{i\vec{\omega}\cdot\vec{\hat{S}}/\hbar}\Big)$$

$\square$

4 c)

Mit (5.41) gilt für $|\varphi_\pm\rangle$:

$$|\varphi_\pm\rangle = e^{-i\vec{\omega}\cdot\vec{\hat{S}}/\hbar}|\tfrac{1}{2}\,\pm\tfrac{1}{2}\rangle\langle\tfrac{1}{2}\,\pm\tfrac{1}{2}|$$
$$= \cos\frac{|\vec{\omega}|}{2}|\tfrac{1}{2}\,\pm\tfrac{1}{2}\rangle\cancel{\langle\tfrac{1}{2}\,\pm\tfrac{1}{2}|} - i\frac{\vec{\omega}}{|\vec{\omega}|}\cdot\vec{\hat{\sigma}}\,\sin\frac{|\vec{\omega}|}{2}|\tfrac{1}{2}\,\pm\tfrac{1}{2}\rangle\cancel{\langle\tfrac{1}{2}\,\pm\tfrac{1}{2}|}$$

$\square$

T

4 8)

~~Sein~~ Sei $\omega_i := \vec{\omega} \cdot \vec{e}_i$, $i \in \{1, 2, 3\}$. Dann gilt:

$$\langle \tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2} | (\vec{\omega} \cdot \vec{\sigma}) | \tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2} \rangle = \langle \tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2} | (\omega_1 \vec{\sigma}_1 + \omega_1 \vec{\sigma}_2 + \omega_3 \vec{\sigma}_3) | \tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2} \rangle$$

$$= \omega_1 \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}}_{=0} + \omega_2 \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}}_{=0} + \omega_3 \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}}_{=1}$$

$$\cancel{= \omega_3} = \omega_3$$

$$\Rightarrow |\langle \varphi_+ | \tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2} \rangle|^2 = \left| \left(\cos \tfrac{|\vec{\omega}|}{2} \langle \tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2} | + \tfrac{i1}{|\vec{\omega}|} \sin \tfrac{|\vec{\omega}|}{2} \langle \tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2} | (\vec{\omega} \cdot \vec{\sigma}) \right) | \tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2} \rangle \right|^2$$

$$= \left| \cos \tfrac{|\vec{\omega}|}{2} + i \tfrac{1}{|\vec{\omega}|} \sin \tfrac{|\vec{\omega}|}{2} (\vec{\omega} \cdot \vec{e}_3) \right|^2$$

$$= \cos^2 \tfrac{|\vec{\omega}|}{2} + \tfrac{1}{|\vec{\omega}|^2} \sin^2 \tfrac{|\vec{\omega}|}{2} (\vec{\omega} \cdot \vec{e}_3)^2 \qquad \square$$

4 9)

Analog zu (5.48) gilt $\langle \tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2} | (\vec{\omega} \cdot \vec{\sigma}) | \tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2} \rangle = \omega_1 + i\omega_2$

$$|\langle \varphi_- | \tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2} \rangle|^2 = \left| \left(\cos \tfrac{|\vec{\omega}|}{2} \langle \tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2} | + i \tfrac{1}{|\vec{\omega}|} \sin \tfrac{|\vec{\omega}|}{2} \langle \tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2} | (\vec{\omega} \cdot \vec{\sigma}) \right) | \tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2} \rangle \right|^2$$

$$= i \tfrac{1}{|\vec{\omega}|} \sin \tfrac{|\vec{\omega}|}{2} \cancel{(\omega_1 + i} ((\vec{\omega} \cdot \vec{e}_1) + (\vec{\omega} \cdot \vec{e}_2) i)$$

$$= \tfrac{1}{|\vec{\omega}|^2} \sin^2 \tfrac{|\vec{\omega}|}{2} \left((\vec{\omega} \cdot \vec{e}_1)^2 + (\vec{\omega} \cdot \vec{e}_2)^2 \right) \qquad \square$$

5 1)

$$w_+ = \langle \tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2} | \rho_1 | \tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2} \rangle \equiv \langle \tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2} | (w_+ | \varphi_+ \rangle\langle \varphi_+ | + w_- | \varphi_- \rangle\langle \varphi_- |) | \tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2} \rangle$$

$$= w_+ \langle \tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2} | \varphi_+ \rangle\langle \varphi_+ | \tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2} \rangle + w_- \langle \cancel{\varphi_+}\ \tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2} | \varphi_- \rangle\langle \varphi_- | \tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2} \rangle$$

$$= w_+ \underbrace{|\langle \varphi_+ | \tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2} \rangle|^2}_{=w_+} + w_- \underbrace{|\langle \varphi_- | \tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2} \rangle|^2}_{=w_-} = w_+^2 + w_-^2 \qquad \square$$

5 2)

$$w_- = \langle \tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2} | \rho_1 | \tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2} \rangle \equiv \langle \tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2} | (w_+ | \varphi_+ \rangle\langle \varphi_+ | + w_- | \varphi_- \rangle\langle \varphi_- |) | \tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2} \rangle$$

$$\cancel{= w_+ \langle \tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2} \rangle} = w_+ \langle \tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2} | \varphi_+ \rangle \underbrace{\langle \varphi_+ | \tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2} \rangle}_{= \langle \varphi_- | \frac{1}{2}\ \frac{1}{2} \rangle = w_-} + w_- \langle \tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2} | \varphi_- \rangle \underbrace{\langle \varphi_- | \tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2} \rangle}_{= \langle \varphi_+ | \frac{1}{2}\ \frac{1}{2} \rangle = w_+}$$

$$= w_+ w_- + w_- w_+ = 2\, w_+ w_- \qquad \square$$

Theo 2 10.02.21

56) $j \in \cancel{\mathbb{N}_0}\ \mathbb{Z}$, $m = -j, -j+1, \dots, j-1, j$

Es wird die 3-Komponente von $\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{X}} \times \hat{\vec{P}}$, $\hat{L}_3 = \cancel{\hat{X}_1 \hat{P}_2 - \hat{P}_2 \hat{X}_1} = \hat{X}_1\hat{P}_2 - \hat{X}_2\hat{P}_1$ zusammen mit den kanonischen Kommutatorrelationen

$$[\hat{X}_\alpha, \hat{P}_\beta] = i\hbar\,\delta_{\alpha\beta}$$

betrachtet. Sei nun $L \in \mathbb{R}$, $[L] = m$ und seien

$$\hat{q}_1 := \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{1}{L}\hat{X}_1 + \frac{L}{\hbar}\hat{P}_2\right) \qquad \hat{q}_2 := \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{1}{L}\hat{X}_1 - \frac{L}{\hbar}\hat{P}_2\right)$$

$$\hat{p}_1 := \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{L}{\hbar}\hat{P}_1 - \frac{1}{L}\hat{X}_2\right) \qquad \hat{p}_2 := \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{L}{\hbar}\hat{P}_1 + \frac{1}{L}\hat{X}_2\right)$$

neue effektive und dimensionslose Orts- und Impulsoperatoren. Umgekehrt gilt:

$$\hat{X}_1 = \frac{L}{\sqrt{2}}(\hat{q}_1 + \hat{q}_2) \qquad \hat{X}_2 = \frac{L}{\sqrt{2}}(\hat{p}_2 - \hat{p}_1)$$

$$\hat{P}_1 = \frac{\hbar}{\sqrt{2}L}(\hat{p}_1 + \hat{p}_2) \qquad \hat{P}_2 = \frac{\hbar}{\sqrt{2}L}(\hat{q}_1 - \hat{q}_2)$$

Für diese Operatoren gilt wiederum die Heisenberg-Algebra (mit $\hbar \to 1$), d.h. es gilt

$$[\hat{q}_\alpha, \hat{p}_\beta] = i\,\delta_{\alpha\beta} \qquad [\hat{q}_\alpha, \hat{q}_\beta] = [p_\alpha, p_\beta] = 0.$$

Daraus folgt:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\hbar}\hat{L}_3 &= \hat{X}_1\hat{P}_2 - \hat{X}_2\hat{P}_1 \\
&= \frac{1}{2}\left[(\hat{q}_1+\hat{q}_2)(\hat{q}_1-\hat{q}_2) - (\hat{p}_2-\hat{p}_1)(\hat{p}_1+\hat{p}_2)\right] \\
&\cancel{= \frac{1}{2}\hat{q}_1^2 \quad \hat{q}_1\hat{q}_2} \\
&= \frac{1}{2}\left(\hat{q}_1^2 - \hat{q}_2^2 - \hat{p}_2^2 + \hat{p}_1^2\right) \\
&\cancel{= \frac{1}{2}\hat{q}_1^2} \quad = \frac{1}{2}\left(\hat{p}_1^2 + \hat{q}_1^2\right) - \frac{1}{2}\left(\hat{p}_2^2 + \hat{q}_2^2\right)
\end{aligned}$$

Dies entspricht der ~~Su~~ (normierten) Summe von zwei Hamilton-Operatoren von je einem harmonischen Oszillator mit $\hbar = M = \omega = 1$. Da die Eigenwerte eines harmonischen Oszillators gegeben sind durch $\hbar\omega(n+\frac{1}{2})$, $n \in \mathbb{N}_0$, folgt sofort

$$\cancel{Sp\left(\frac{1}{\hbar}\hat{L}_3\right) = (n_1 + \tfrac{1}{2}) - (n_2 + \tfrac{1}{2}) = n_1 + n_2}$$

$$Sp\left(\frac{1}{\hbar}\hat{L}_3\right) = \{n_1 - n_2 \mid n_1, n_2 \in \mathbb{N}_0\},$$

da $(n_1 + \frac{1}{2}) - (n_2 + \frac{1}{2}) = n_1 - n_2$. $\square$

V

Theo 2

#) $[\vec{\hat{L}}, \vec{\hat{X}}^2] = 0$

$[\vec{\hat{L}}, \vec{\hat{X}}^2] = [\vec{\hat{L}}, \hat{X}_1^2] + [\vec{\hat{L}}, \hat{X}_2^2] + [\vec{\hat{L}}, \hat{X}_3^2]$

$\Rightarrow [\hat{L}_\alpha, \hat{X}_\beta \hat{X}_\beta] = \epsilon_{\alpha\gamma\delta} \underbrace{[\hat{X}_\gamma \hat{P}_\delta, \hat{X}_\beta \hat{X}_\beta]} = 2i\hbar\,\epsilon_{\alpha\gamma\beta} \hat{X}_\gamma \hat{X}_\beta = 0$

$\cancel{= \hat{X}_\gamma [\hat{P}_\delta, \hat{X}_\beta \hat{X}_\beta] + [\hat{P}_\delta, \hat{X}_\beta \hat{X}_\beta] \hat{X}_\gamma}$

$= \hat{X}_\gamma [\hat{P}_\delta, \hat{X}_\beta \hat{X}_\beta] + \underbrace{[\hat{X}_\gamma, \hat{X}_\beta \hat{X}_\beta]}_{=0} \hat{P}_\delta$

$= 2i\hbar\,\delta_{\beta\delta} \hat{X}_\gamma \hat{X}_\beta$

$\square$

6 5)

$$\vec{\nabla} = \begin{bmatrix} \sin\theta\cos\varphi \frac{\partial}{\partial r} + \cos\theta\cos\varphi \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} - \sin\varphi \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} \\ \sin\theta\sin\varphi \frac{\partial}{\partial r} + \cos\theta\sin\varphi \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \cos\varphi \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} \\ \cos\theta \frac{\partial}{\partial r} - \sin\theta \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} \end{bmatrix}$$

$\cancel{\hat{L}_3 = (\vec{\hat{X}} \times \vec{\hat{P}})_3 = -i\hbar(\vec{\hat{X}} \times \vec{\hat{P}})_3 = -i\hbar(\hat{X}_1 \hat{P}_2 - \hat{X}_2 \hat{P}_1)}$

$\cancel{\hat{L}_3 = -i\hbar \hat{X}_1}$

$\hat{L}_3 = (\vec{\hat{X}} \times \vec{\hat{P}})_3 \longrightarrow -i\hbar(\vec{x} \times \vec{\nabla})_3 = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$

$= -i\hbar\Big(r\sin\theta\cos\varphi\big(\sin\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \cos\theta\sin\varphi\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \cos\varphi\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\big)$

$- r\sin\theta\sin\varphi\big(\sin\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \cos\theta\cos\varphi\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} - \sin\varphi\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\big)\Big)$

$\cancel{= -i\hbar(r\sin^2\theta\cos\varphi\sin\varphi}$

$= -i\hbar\Big[(r\sin^2\theta\cos\varphi\sin\varphi - r\sin^2\theta\cos\varphi\sin\varphi)\frac{\partial}{\partial r}$

$+ (\cos\theta\sin\theta\cos\varphi\sin\varphi - \cos\theta\sin\theta\cos\varphi\sin\varphi)\frac{\partial}{\partial\theta}$

$+ (\cos^2\varphi + \sin^2\varphi)\frac{\partial}{\partial\varphi}\Big] = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$

$\square$

9 4)

Sei $\vec{e}$ die Quantisierungsachse der Zustände $|j\,\tilde{m}\rangle$, dann gilt für jeden Zustand $|jm\rangle$:

$\hat{R}(2\pi\vec{e})|j\ m\rangle = e^{-i2\pi\vec{e}\cdot\vec{\hat{J}}/\hbar}|j\ m\rangle = e^{-i2\pi\vec{e}\cdot\vec{\hat{J}}/\hbar} \sum_{\tilde{m}} \alpha_{\tilde{m}} |j\,\tilde{m}\rangle$

$= \sum_{\tilde{m}} \alpha_{\tilde{m}} e^{-i2\pi\vec{e}\cdot\vec{\hat{J}}/\hbar}|j\ \tilde{m}\rangle = \sum_{\tilde{m}} \alpha_{\tilde{m}} e^{-i2\pi\tilde{m}}|j\,\tilde{m}\rangle$

$= e^{-2\pi j i}|j\ m\rangle = [\cos(-2\pi j) + i\underbrace{\sin(-2\pi j)}_{=0}]|j\,m\rangle$

$= \cos(2\pi j)|j\ m\rangle$

$= (-1)^{2j}|j\,m\rangle$

$\square$

W

Theo 2 110.02.21

9 8)

Seien $|+\rangle$, $|-\rangle$ Zustände mit ganz-, bzw. ~~hal~~ halbzahligem, Drehimpuls und sei $\hat{A}$ eine physikalische Variable, für die

$$[\hat{R}(2\pi\vec{e}),\ \hat{A}] = 0$$

für eine beliebige Drehachse $\vec{e}$ gilt. Dann gilt wegen

$$\cancel{\hat{R}(2\pi\vec{e})} \qquad \hat{R}(2\pi\vec{e})|+\rangle = (-1)^{2j_+}|+\rangle = |+\rangle \quad (j_+ \text{ ganzzahlig})$$

auch

$$\langle -|\hat{A}|+\rangle = \langle -|\hat{A}\left(\hat{R}(2\pi\vec{e})|+\rangle\right) = \langle -|\hat{A}\,\hat{R}(2\pi\vec{e})|+\rangle = \langle -|\hat{R}(2\pi\vec{e})\,\hat{A}|+\rangle.$$

Daraus folgt schließlich die Superauswahlregel:

$$\cancel{\langle -|\hat{A}\,\hat{R}|+\rangle = \langle -|\hat{A}\,\hat{R}|+\rangle}$$

$$\cancel{\Leftrightarrow \langle -|\hat{A}(\hat{R}|+\rangle) =}$$

$$\vdash$$

$$\langle -|\hat{A}\,\hat{R}|+\rangle = \langle -|\hat{R}\,\hat{A}|+\rangle \quad \Leftrightarrow \quad \langle -|\hat{A}(\hat{R}|+\rangle) = (\langle -|\hat{R})\hat{A}|+\rangle$$

$$\Leftrightarrow \langle -|\hat{A}|+\rangle = \underbrace{(-1)^{2j_-}}_{=-1}\langle -|\hat{A}|+\rangle = -\langle -|\hat{A}|+\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle -|\hat{A}|+\rangle = 0$$

$\square$

~~#) Konsequenz der Superauswahlregel~~

~~Seien $\hat{P}_+$, $\hat{P}_-$ die Projektionsoperatoren auf die Räume mit ganz-, bzw. halbzahligem, Drehimpuls. Dann Für diese gilt~~

$$\cancel{\hat{P}_+ + \hat{P}_- = \mathbb{1} \quad \text{und} \quad \hat{P}_+\hat{P}_- = \hat{P}_-\hat{P}_+ = 0.}$$

~~Dann gilt für einen Zustand $\hat{\rho}$:~~

$$\cancel{\hat{\rho} = \hat{P}_+\hat{\rho}\hat{P}_+ + \hat{P}_-\hat{\rho}\hat{P}_- + \hat{P}_+\hat{\rho}\hat{P}_- + \hat{P}_-\hat{\rho}\hat{P}_+}$$

X

Theo 2 11.02.21

#) Konsequenz der Superauswahlregel

Seien $\hat{P}_+, \hat{P}_-$ die Projektionsoperatoren auf die Räume mit ganz-, bzw. halbzahligem, ~~Spin~~ Drehimpuls. Dann gilt für einen Zustand:

$$\hat{\rho} = \hat{P}_+ \hat{\rho} \hat{P}_+ + \hat{P}_- \hat{\rho} \hat{P}_- + \hat{P}_+ \hat{\rho} \hat{P}_- + \hat{P}_- \hat{\rho} \hat{P}_+$$

Durch die Superauswahlregel gilt jedoch für jede physikalische Variable ~~A~~ $\hat{A}$

$$\hat{A} = \hat{P}_+ \hat{A} \hat{P}_+ + \hat{P}_- \hat{A} \hat{P}_-,$$

d.h. die Superpositionsterme mit ~~mi~~ Mischung von ganz- und halbzahligem Drehimpuls verschwinden. Für den Erwartungswert von $\hat{A}$ gilt durch zyklische Vertauschung in der Spur:

$$\begin{aligned}
\langle \hat{A} \rangle &= \mathrm{Tr}(\hat{\rho} \hat{A}) = \mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}\left(\hat{P}_+ \hat{A} \hat{P}_+ + \hat{P}_- \hat{A} \hat{P}_-\right)\right) \\
&= \mathrm{Tr}\left(\hat{\rho} \hat{P}_+ \hat{A} \hat{P}_+ + \hat{\rho} \hat{P}_- \hat{A} \hat{P}_-\right) = \mathrm{Tr}\left(\hat{P}_+ \hat{\rho} \hat{P}_+ \hat{A} + \hat{P}_- \hat{\rho} \hat{P}_- \hat{A}\right) \\
&= \mathrm{Tr}\left(\underbrace{\left(\hat{P}_+ \hat{\rho} \hat{P}_+ + \hat{P}_- \hat{\rho} \hat{P}_-\right)}_{\hat{\rho}' :=} \hat{A}\right)
\end{aligned}$$

Die Zustände $\hat{\rho}$ und $\hat{\rho}' = \hat{P}_+ \hat{\rho}_+' \hat{P}_+ + \hat{P}_- \hat{\rho}_-' \hat{P}_-$ sind somit physikalisch nicht unterscheidbar.

Daher sind Superpositionen zwischen Zuständen mit ganz- und halbzahligem Drehimpuls unphysikalisch. $\square$

Y