

Theoretische Physik II - Quantentheorie I

SoSe 2005

Prof. Dr. Olaf Lechtenfeld

Inhaltsverzeichnis

I Photonen	1
a) klassisches Licht: Polfilter	1
b) Photonen-Zustand: Bra-Ket-Notation	2
c) Drehimpuls und Helizität	4
d) Operatoren, Eigenwerte, Erwartungswerte, Projektoren	5
e) Amplituden – Mechanik	7
f) Gemische	8
g) Doppelbrechung: Ortsentwicklung	9
h) K-Mesonen: Zeitentwicklung	12
II Elemente der linearen Algebra	15
a) Vektoren = Kets	15
b) Dualvektoren = Bras	15
c) Skalarprodukt	15
d) äußeres Produkt	16
e) lineare Operatoren	16
f) adjungierte Operatoren	16
g) Eigenkets, Eigenwerte	17
h) Unitäre Operatoren	17
i) hermitesche Operatoren $H^\dagger = H$	18
j) Diagonalisierung hermitescher Operatoren	18
III Bewegung von Teilchen	18
a) unendlich viele Freiheitsgrade, Hilbertraum	18
b) Operatoren im Hilbertraum \mathcal{V}	21
c) Das freie Teilchen	24
d) Summe über Pfade	27
IV Hamilton-Formalismus	29
a) Postulate	29
b) Bilder der Zeitentwicklung	33
c) Klassischer Grenzwert	33
d) Wahrscheinlichkeitsstrom	34
e) Lösen der Schrödinger-Gleichung	35
V Einfache Systeme (1D)	36
a) Potentialstufe	36
b) Potentialtopf	39
c) Periodisches Potenzial	43
d) Allgemeine Resultate	46
e) Der harmonische Oszillator	47
VI Drehimpuls	50
a) Symmetrien in der Quantentheorie	50
b) Drehimpulsalgebra und ihre Darstellungen	53
c) Addition von Drehgruppen	57
d) Der Spin	60
VII Zentralpotential	61
a) Separation der Schrödinger-Gleichung	61
b) allgemeine Resultate	63
c) freies Teilchen	63

I Photonen

a) klassisches Licht: Polfilter

Eine Lichtwelle propagiert in z-Richtung. Dann gilt:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) \doteq \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ 0 \end{pmatrix} e^{ikz - i\omega t} \text{ mit } k^2 = \omega^2 \text{ und } E_x, E_y \in \mathbb{C}$$

\doteq bedeutet „dargestellt in geeigneter Basis“.

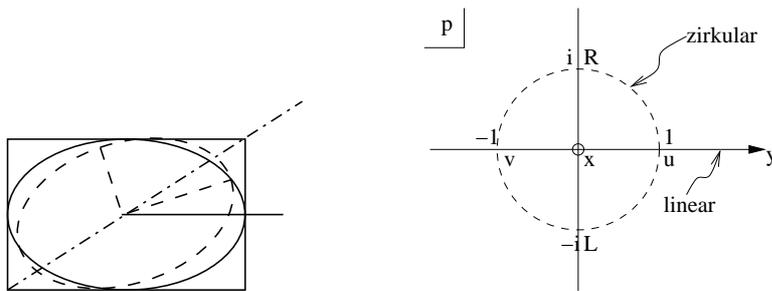
$\vec{B}(\vec{r}, t) = \vec{e}_z \times \vec{E}(\vec{r}, t)$ in Heaviside Einheiten: $\mu_0 = \epsilon_0 = 1$

„Polarisationsvektor“ $\begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix}$ z.B. verantwortlich für z.B. zirkular polarisiertes Licht. (Phasendifferenz = $\frac{\pi}{2}$)

charakterisiert durch $p = \frac{E_y}{E_x} = e^{\epsilon + i\alpha} \in \mathbb{C}$

Spezialfälle: $p =$	0	∞	1	-1	i	$-i$
	"x"	"y"	"u"	"v"	"R"	"L"
	\leftrightarrow	\updownarrow	$\swarrow \searrow$	$\nearrow \nwarrow$	\circ	\circ

linear polarisiert liegt
auf der reellen Achse



für $|p|$ fest

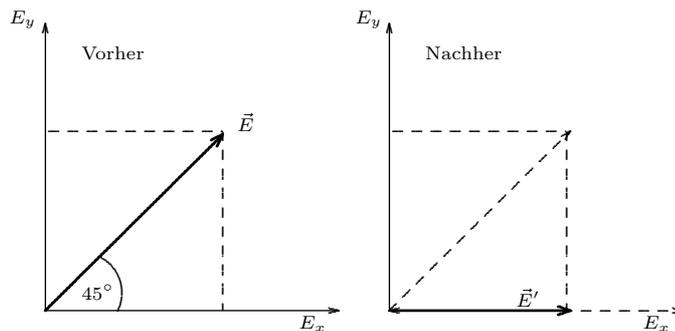
Energiedichte:

$$\begin{aligned} W(\vec{r}, t) &= \frac{1}{2} (|\operatorname{Re} \vec{E}(\vec{r}, t)|^2 + |\operatorname{Re} \vec{B}(\vec{r}, t)|^2) = |\operatorname{Re} \vec{E}(\vec{r}, t)|^2 \\ &= |E_x|^2 \cos^2(kz - \omega t + \alpha_x) + |E_y|^2 \cos^2(kz - \omega t + \alpha_y) \quad \alpha = \alpha_y - \alpha_x \end{aligned}$$

Gesamtenergie im Volumen V:

$$\varepsilon(t) = \int_V d^3r w(\vec{r}, t) = \frac{1}{2} V (|E_x|^2 + |E_y|^2) = \frac{1}{2} V |\vec{E}|^2 \quad \text{mit } \vec{E} = \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} \quad (1.1)$$

Nun soll ein Polarisationsfilter eingesetzt werden. Betrachte eine u-Welle ($p = 1$) und lasse sie durch einen x-Filter ($p = 0$) treten.



$$\varepsilon_{\text{vor}} = \frac{1}{2}V \cdot 2|E_x|^2 \Rightarrow \varepsilon_{\text{nach}} = \frac{1}{2}V|E_x|^2$$

Die Energie hat sich halbiert.

b) Photonen-Zustand: Bra-Ket-Notation

Quanten-Input

Lichtwelle besteht aus einer großen Anzahl N *identischer* Photonen mit Energie $\hbar\omega$.

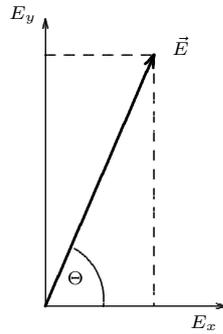
demnach: $\varepsilon = N\hbar\omega \xrightarrow{\text{Filter}} \frac{N}{2}\hbar\omega$, d.h. 50% der Photonen passieren

Interpretation: jedes Photon hat 50% Passierwahrscheinlichkeit.

Korrespondenzprinzip

klassischer Grenzfall für $N \rightarrow \infty$ mit $\frac{\Delta N}{N} \sim \frac{1}{\sqrt{N}} \rightarrow 0$

bisher: Passierwahrscheinlichkeit eines x-Filters für linear polarisierte Photonen \vec{E} ($p \in \mathbb{R}$)



$$W_x(\vec{E}) = \frac{|E_x|^2}{|\vec{E}|^2} = \frac{|E_x|^2}{|E_x|^2 + |E_y|^2} = \cos^2 \Theta \quad \text{für } p = \tan \Theta$$

analog für zirkulare Polfilter, z.B. ein R-Filter (rechtszirkular):

alte Basis: (\vec{e}_x, \vec{e}_y)

neue Basis: (\vec{e}_R, \vec{e}_L) mit $\vec{e}_R = \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{e}_x + i\vec{e}_y)$ und $\vec{e}_L = \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{e}_x - i\vec{e}_y)$

neue Komponenten E_R, E_L erhält man über

$$\vec{E} = E_x\vec{e}_x + E_y\vec{e}_y = E_R\vec{e}_R + E_L\vec{e}_L \Rightarrow E_R = \frac{1}{\sqrt{2}}(E_x - iE_y), E_L = \frac{1}{\sqrt{2}}(E_x + iE_y)$$

Passierwahrscheinlichkeit eines R-Filters bei linear polarisierten Photonen \vec{E}

$$W_R(\vec{E}) = \frac{|E_R|^2}{|\vec{E}|^2} = \frac{|\frac{1}{\sqrt{2}}(E_x - iE_y)|^2}{|\vec{E}|^2} = \frac{||\vec{E}| \cos \Theta - i|\vec{E}| \sin \Theta|^2}{2|\vec{E}|^2} = \frac{1}{2}|\cos \Theta - i \sin \Theta|^2 = \frac{1}{2}|e^{-i\Theta}|^2 = \frac{1}{2}$$

für linear polarisiertes Licht kommt 50% durch den R-Filter

Beschreibung des Zustands einzelner Photonen

$$\text{Energie} \quad \varepsilon = N\hbar\omega = \frac{1}{2}V|\vec{E}|^2 \xrightarrow{N=1} \varepsilon = \hbar\omega = \frac{1}{2}V|\vec{E}|^2$$

Definiere den **Zustandsvektor** der Photonenpolarisation

$$|\psi\rangle \doteq \begin{pmatrix} \psi_x \\ \psi_y \end{pmatrix} := \sqrt{\frac{V}{2\hbar\omega}} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^2 \quad \text{so dass } |\psi_x|^2 + |\psi_y|^2 = 1 \quad (1.2)$$

$|\cdot\rangle$ heißt „Ket“ (neue Notation für Vektoren) $|\psi\rangle \in S^3$ (Einheitsvektor in $\mathbb{C}^2 \simeq \mathbb{R}^4$)

Bemerkung 1:

vorher $p \in \mathbb{C}$ jetzt $|\psi\rangle \in S^3$.

Die Redundanz in $|\psi\rangle$ ist die Phase: $|\psi\rangle \sim e^{i\varphi} |\psi\rangle$

Bemerkung 2:

Die Normierung $|\psi_x|^2 + |\psi_y|^2 = 1$ ist unverträglich mit dem Superpositions-Prinzip. Man muß beim Addieren noch mehr Redundanz zulassen:

$$|\psi\rangle \sim \lambda |\psi\rangle \quad \text{mit } \lambda \in \mathbb{C} \qquad |\psi\rangle \text{ modulo } \lambda\text{-Multiplikation ist ein „Strahl“}.$$

Beispiele:

$$\begin{aligned} |x\rangle &\doteq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, & |y\rangle &\doteq \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ |u\rangle &\doteq \sqrt{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, & |v\rangle &\doteq \sqrt{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ |R\rangle &\doteq \sqrt{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, & |L\rangle &\doteq \sqrt{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Definition: adjungierten Vektor

$$|\psi\rangle := (\psi_x^*, \psi_y^*) \quad \text{„Bra“} \tag{1.3}$$

Definition: Skalarprodukt: aus „Ket“ $|\psi\rangle$ und $|\phi\rangle$ bilde $|\psi\rangle, \langle\phi|$

$$\langle\phi|\psi\rangle := (\phi_x^*, \phi_y^*) \begin{pmatrix} \psi_x \\ \psi_y \end{pmatrix} = \phi_x^* \psi_x + \phi_y^* \psi_y = \langle\psi|\phi\rangle^* \tag{1.4}$$

Dies definiert \mathbb{C}^2 als unitären Vektorraum.

Normierung von $|\phi\rangle$: $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle\phi|\phi\rangle}} |\phi\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle\psi|\psi\rangle = 1$

Zerlegung eines Zustands in einer Basis:

$$|\psi\rangle = |x\rangle\psi_x + |y\rangle\psi_y \stackrel{\text{oder}}{=} |R\rangle\psi_R + |L\rangle\psi_L$$

Man findet die Koeffizienten durch Projektion:

$$\langle x|\psi\rangle = \underbrace{\langle x|x\rangle}_{1} \psi_x + \underbrace{\langle x|y\rangle}_{0} \psi_y \stackrel{\text{oder}}{=} \langle x|R\rangle\psi_R + \langle x|L\rangle\psi_L$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{\psi_x}$

Damit lässt sich $|\psi\rangle$ wie folgt darstellen:

$$|\psi\rangle = |x\rangle\langle x|\psi\rangle + |y\rangle\langle y|\psi\rangle \quad \text{analog:} \quad |\psi\rangle = |R\rangle\langle R|\psi\rangle + |L\rangle\langle L|\psi\rangle$$

Allgemein:

$$|x\rangle\langle x| + |y\rangle\langle y| = 1 \quad \text{„Zerlegung der Eins“}$$

\Rightarrow Polarisationsfilter wirken wie Projektoren

$$|\psi\rangle = |x\rangle\langle x|\psi\rangle + |y\rangle\langle y|\psi\rangle \xrightarrow{\text{x-Filter}} |\psi'\rangle = |x\rangle\langle x|\psi\rangle \xrightarrow{\text{Normierung}} |\psi'\rangle = |x\rangle$$

Passierwahrscheinlichkeit: $W_x(|\psi\rangle) = \frac{|\psi_x|^2}{|\psi_x|^2 + |\psi_y|^2} = |\psi_x|^2 = |\langle x|\psi\rangle|^2$, da die Zustände normiert sind. Die Summe aller möglichen Wahrscheinlichkeiten ist 1: $|\psi_x|^2 + |\psi_y|^2 = 1$.

$\langle x|\psi\rangle \dots$ Amplitude \Rightarrow Wahrscheinlichkeit = | Amplitude |²
 Vergleiche dazu klassische Wellenoptik: Intensität = | Amplitude |²

analog für $|R\rangle$ -Filter: $W_R = |\langle R|\psi\rangle|^2$ bei Photonenzustand $|\psi\rangle$

Allgemein: Photonen $|\psi\rangle$ passieren ϕ -Filter mit Wahrscheinlichkeit $W_\phi(|\psi\rangle) = |\langle\phi|\psi\rangle|^2$ (1.5)
 (Zwei Zustände: Photonenzustand $|\psi\rangle$ und „Filter-Zustand“ $|\phi\rangle$)

c) Drehimpuls und Helizität

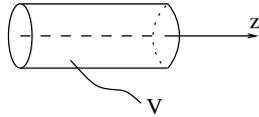
Quanten-Input

Drehimpuls einer Lichtwelle = \sum_{Photonen} Drehimpuls eines Photons

Im Experiment beobachtet man: Helizität = Drehimpuls parallel zur Bewegungsrichtung $\sim \vec{L} \cdot \vec{p} = \pm \hbar$
 Eine klassische EM-Welle in \hat{z} -Richtung hat den Drehimpuls

$$\vec{L} = \frac{1}{c} \int d^3r \vec{r} \times (\vec{E} \times \vec{B}); \quad \infty\text{-ausgedehnt: } \vec{E} \times \vec{B} \sim \hat{e}_z \Rightarrow \text{Helizität} = 0$$

Betrachtet man aber eine räumlich begrenzte Welle



so verschwindet die Helizität nicht unbedingt: $\vec{E} \times \vec{B}|_{\partial V} \approx \hat{e}_z$.

Rechnung: $\nabla \cdot \vec{E} = 0$, $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$, $\vec{E} = -\frac{1}{c} \partial_t \vec{A}$ mit Eichung $\phi = 0$

$$\begin{aligned} \vec{L} &= \frac{1}{c} \int_{\mathbb{R}^3} d^3r \vec{r} \times (\vec{E} \times (\nabla \times \vec{A})) = \frac{1}{c} \int_{\mathbb{R}^3} d^3r \vec{r} \times (E_m \nabla A_m - E_m \partial_m \vec{A}) \\ &= \frac{1}{c} \int_{\mathbb{R}^3} d^3r [E_m (\vec{r} \times \nabla) A_m - \underbrace{\partial_m (E_m \vec{r} \times \vec{A})}_0 + \underbrace{(\partial_m E_m) \vec{r} \times \vec{A}}_0 + E_m \underbrace{\partial_m \vec{r} \times \vec{A}}_{\vec{e}_m}] \\ &= \frac{1}{c} \int_{\mathbb{R}^3} d^3r [\underbrace{\vec{E} \times \vec{A}}_{\text{Spin} \sim V} + \underbrace{E_m (\vec{r} \times \nabla) A_m}_{\text{Orbital} \sim \partial V}] \end{aligned}$$

z-Komponente: $(\vec{r} \times \nabla)_z = x \partial_y - y \partial_x = \partial_\varphi$ gibt Null auf e^{ikz} , nur Beiträge vom Rand ∂V

$$L_z \stackrel{V \text{ groß}}{\approx} \frac{1}{c} \int d^3r (\vec{E} \times \vec{A})_z \quad \text{Helizität} \quad (1.6)$$

Welle(npaket) in \hat{z} -Richtung: $\vec{E}(\vec{r}, t) = \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} \cdot e^{i(kz - \omega t)}$

E_x, E_y Polarisationsrichtungen

$$\Rightarrow \vec{A}(\vec{r}, t) = \frac{c}{i\omega} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} \cdot e^{i(kz - \omega t)}$$

Im Folgenden ist $\begin{pmatrix} a_x \\ a_y \end{pmatrix} = \frac{c}{i\omega} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix}$ und $e^{i(kz - \omega t)} = e^{i\alpha}$.

$$\begin{aligned} L_z &= \frac{1}{c} \int d^3r [\text{Re}(E_x) \text{Re}(A_y) - \text{Re}(E_y) \text{Re}(A_x)] \\ &= \frac{1}{4c} \int d^3r [(E_x e^{i\alpha} + E_x^* e^{-i\alpha})(a_y e^{i\alpha} + a_y^* e^{-i\alpha}) - (E_y e^{i\alpha} + E_y^* e^{-i\alpha})(a_x e^{i\alpha} + a_x^* e^{-i\alpha})] \\ &= \frac{V}{4c} (E_x A_y^* + E_x^* A_y - E_y A_x^* - E_y^* A_x) \\ &= \frac{V}{2i\omega} (E_x^* E_y - E_x E_y^*) \end{aligned}$$

unter Verwendung des Integrals

$$\int_V d^3r e^{in\alpha} = e^{-in\omega t} \pi R^2 \int_{-L/2}^{L/2} dz e^{inkz} \quad \text{für } \underline{\underline{kL}} \gg 1 \quad V \delta_{n,0}$$

im letzten Schritt. Mit $E_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(E_R + E_L)$ und $E_y = \frac{i}{\sqrt{2}}(E_R - E_L)$ folgt

$$L_z = \frac{V}{2\omega} (|E_R|^2 - |E_L|^2) \quad .$$

Für den Zustandsvektor (vgl. (1.2)) $|\psi\rangle$ folgt $E_{L,R} = \sqrt{\frac{2\hbar\omega}{V}}\psi_{L,R}$ für ein Photon.

$$L_z = \hbar (|\psi_R|^2 - |\psi_L|^2) = \hbar (|\langle R|\psi\rangle|^2 - |\langle L|\psi\rangle|^2) \quad (1.7)$$

Aus dem Experiment erhält man aber Helizität $= \pm\hbar$. Den Ausweg bietet die

Quanteninterpretation

(1.7) ist ein quantenmechanischer Mittelwert (Erwartungswert) für viele identische Messungen.

Erinnerung: Sei A eine Messgröße. \Rightarrow Mittelwert von $A = \sum_i a_i W(a_i) =: \langle A \rangle$

mit $a_i =$ „mögliche Messwerte“ und $W(a_i) =$ „Wahrscheinlichkeit, dass a_i gemessen wird“

hier: $\langle L_z \rangle = +\hbar W(+\hbar) + (-\hbar) W(-\hbar)$,

wobei $W(+\hbar) = W_R(|\psi\rangle) = |\langle R|\psi\rangle|^2$ und $W(-\hbar) = W_L(|\psi\rangle) = |\langle L|\psi\rangle|^2$ ist.

Normierung: $W(+\hbar) + W(-\hbar) = |\langle R|\psi\rangle|^2 + |\langle L|\psi\rangle|^2 = \langle \psi|R\rangle\langle R|\psi\rangle + \langle \psi|L\rangle\langle L|\psi\rangle = \langle \psi|\psi\rangle = 1$
Der Erwartungswert $\langle L_z \rangle$ hängt vom Polarisationszustand $|\psi\rangle$ ab \Rightarrow schreibe $\langle L_z \rangle_\psi$

$$W(+\hbar) + W(-\hbar) = \langle \psi|\psi\rangle = 1$$

Wir erhalten also

$$\langle L_z \rangle_\psi = \hbar |\langle R|\psi\rangle|^2 - \hbar |\langle L|\psi\rangle|^2$$

und $|\psi\rangle = |R\rangle \Rightarrow \langle L_z \rangle_\psi = +\hbar$, $|\psi\rangle = |L\rangle \Rightarrow \langle L_z \rangle_\psi = -\hbar$

d) Operatoren, Eigenwerte, Erwartungswerte, Projektoren

Was zeichnet $|R\rangle$, $|L\rangle$ bezüglich L_z aus?

Eigenzustände eines Operators $S : \mathbb{C}^2 \rightarrow \mathbb{C}^2$ (lineare Abbildung)

$$\left. \begin{array}{l} S|R\rangle = +1|R\rangle \\ S|L\rangle = -1|L\rangle \end{array} \right\} \text{Matrixdarstellung von } S \doteq \begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix} \text{ in } |R\rangle, |L\rangle\text{-Basis} \quad (1.8)$$

In einer $|x\rangle, |y\rangle$ -Basis ist $S \doteq \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$, $|R\rangle \doteq \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$, $|L\rangle \doteq \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$.

S erzeugt Rotationen um die z -Achse:

$$e^{i\theta S} \underset{S^2=\mathbf{1}}{=} \mathbf{1} + i\theta S + \frac{(i\theta)^2}{2!} \mathbf{1} + \frac{(i\theta)^3}{3!} S + \dots = \mathbf{1} \cos \theta + iS \sin \theta =: \mathcal{R}(\theta) \quad \text{Drehoperator}$$

$$\Rightarrow \mathcal{R}(\theta)|R\rangle = e^{i\theta}|R\rangle, \quad \mathcal{R}(\theta)|L\rangle = e^{-i\theta}|L\rangle \quad (1.9)$$

$\Rightarrow |R\rangle$ und $|L\rangle$ sind Eigenkets zum Drehoperator um die \hat{z} -Achse.

Spin- oder Helizitätsoperator

$$\begin{aligned} \langle L_z \rangle_\psi &= \hbar |\langle R|\psi\rangle|^2 - \hbar |\langle L|\psi\rangle|^2 \\ &= \hbar \langle \psi|R\rangle\langle R|\psi\rangle - \hbar \langle \psi|L\rangle\langle L|\psi\rangle \\ &\stackrel{(1.8)}{=} \langle \psi|\hbar S|R\rangle\langle R|\psi\rangle + \langle \psi|\hbar S|L\rangle\langle L|\psi\rangle \\ &\stackrel{\text{Zerleg. d. 1}}{=} \langle \psi|\hbar S|\psi\rangle \end{aligned} \quad (1.10)$$

Erwartungswert der Helizität = Matrixelement des Spin-Operators

Zusammenfassung: Der Zustand eines Systems wird beschrieben durch einen Ket $|\psi\rangle \in \mathbb{C}^2$.

makroskopische Interpretation

Quanteninterpretation

physikalische Größe z.B. Photon-Drehimpuls L_z	\longleftrightarrow	Operator im Zustandsraum \mathbb{C}^2 z.B. $\hbar S$ „Observable“
mögliche Messwerte ($L_z = \pm \hbar$)	\longleftrightarrow	Eigenwerte ($\pm \hbar \dots$ EW von $\hbar S$)
Zustand mit scharfem Messwert λ ($L_z = +\hbar$)	\longleftrightarrow	$ \psi\rangle =$ Eigenvektor $ \lambda\rangle$ ($ \psi\rangle = R\rangle$)
Wahrscheinlichkeit, scharfen Messwert λ zu beobachten ($W(+\hbar)$)	\longleftrightarrow	$W_\lambda(\psi\rangle) = \langle \lambda \psi \rangle ^2$ ($W_{+\hbar}(\psi\rangle) = \langle R \psi \rangle ^2$)
Mittelwert einer physikal. Größe ($\langle L_z \rangle$)	\longleftrightarrow	Erwartungswert eines Operators ($\langle L_z \rangle_\psi = \langle \psi \hbar S \psi \rangle$)

Wiederholung

Operatoren im Zustandsraum, z. B. $\hbar S$,

Eigenwerte λ , Eigenzustände $|\lambda\rangle$, Zustände $|\psi\rangle$ (normiert $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ und $\langle \lambda | \lambda \rangle = 1$),

$W_\lambda(|\psi\rangle) = |\langle \lambda | \psi \rangle|^2$, Mittelwert $\langle \mathcal{O} \rangle_\psi = \langle \psi | \mathcal{O} | \psi \rangle$,

spezieller Fall für $\mathcal{O} = |\lambda\rangle\langle \lambda| = P_\lambda \Rightarrow \langle \psi | \mathcal{O} | \psi \rangle = \langle \psi | \lambda \rangle \langle \lambda | \psi \rangle = |\langle \lambda | \psi \rangle|^2$, weil $\langle \psi | \lambda \rangle = \langle \lambda | \psi \rangle^*$,

d.h. $\langle P_\lambda \rangle_\psi = W_\lambda(|\psi\rangle)$.

Etwas Lineare Algebra

Äußeres Produkt (dyadisches Produkt) von 2 Vektoren

$$|\psi\rangle\langle \phi| \doteq \begin{pmatrix} \psi_x \\ \psi_y \end{pmatrix} (\phi_x^*, \phi_y^*) = \begin{pmatrix} \psi_x \phi_x^* & \psi_x \phi_y^* \\ \psi_y \phi_x^* & \psi_y \phi_y^* \end{pmatrix} \tag{1.11}$$

$$\text{Bsp.: } |x\rangle\langle x| \doteq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (1, 0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$|x\rangle\langle y| \doteq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (0, 1) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$|x\rangle\langle R| \doteq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} (1, -i) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Zerlegung nach Basismatrizen:

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = a|x\rangle\langle x| + b|x\rangle\langle y| + c|y\rangle\langle x| + d|y\rangle\langle y|$$

„Assoziativität“

$$\left(|\psi\rangle\langle \phi|\right) |\theta\rangle = |\psi\rangle \left(\langle \phi | \theta \rangle\right) \Rightarrow \text{Klammern überflüssig! (bitte prüfen!)}$$

Folgerungen:

(1) $|\phi\rangle\langle\phi| = P_\phi$ ist ein Projektionsoperator (falls $\langle\phi|\phi\rangle = 1$)

$$\begin{aligned} \Rightarrow P_\phi |\psi\rangle &= |\phi\rangle\langle\phi|\psi\rangle \sim |\phi\rangle \\ \Rightarrow P_\phi P_\phi &= |\phi\rangle \underbrace{\langle\phi|\phi\rangle}_{=1} \langle\phi| = |\phi\rangle\langle\phi| = P_\phi \end{aligned} \quad (1.12)$$

(2) Summe von Basisprojektoren = Identität

$$\text{Bsp.: } |x\rangle\langle x| + |y\rangle\langle y| = \mathbb{1} \quad (1.13)$$

(3) Zerlegung eines Vektors:

$$\text{z. B. } |\psi\rangle = \mathbb{1} |\psi\rangle = (|x\rangle\langle x| + |y\rangle\langle y|) |\psi\rangle = |x\rangle\langle x|\psi\rangle + |y\rangle\langle y|\psi\rangle = \psi_x |x\rangle + \psi_y |y\rangle$$

(4) Zerlegung eines Operators (in Eigenbasis):

$$\begin{aligned} \text{z. B. } S &= S \cdot \mathbb{1} = S \cdot (|R\rangle\langle R| + |L\rangle\langle L|) = (+1)|R\rangle\langle R| + (-1)|L\rangle\langle L| = |R\rangle\langle R| - |L\rangle\langle L| \\ &\doteq \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

e) Amplituden – Mechanik

$|\langle R|\psi\rangle|^2$ ist die Wahrscheinlichkeit, dass sich ein Photon im Zustand $|\psi\rangle$ im Hinblick auf einen R-Filter so verhält, als wäre es im Zustand $|R\rangle$.

$$\Rightarrow W_\phi(|\psi\rangle) = |\langle\phi|\psi\rangle|^2 \quad \text{Wahrscheinlichkeit(1.5)}$$

$\langle\phi|\psi\rangle$ heißt (Wahrscheinlichkeits-)Amplitude (für $|\psi\rangle$ in $|\phi\rangle$)

totale Wahrscheinlichkeit $W_y(|x\rangle)$ eines x -Photons, einen y -Filter zu passieren: mit Umweg über Zerlegung in zirkuläre Basis ($|R\rangle, |L\rangle$): Amplitude = $\langle y|x\rangle = \langle y|(|R\rangle\langle R| + |L\rangle\langle L|)|x\rangle = \langle y|R\rangle\langle R|x\rangle + \langle y>L\rangle\langle L|x\rangle$

$$\begin{aligned} W_y(|x\rangle) &= |\langle y|x\rangle|^2 = |\langle y|R\rangle\langle R|x\rangle + \langle y>L\rangle\langle L|x\rangle|^2 \\ &= |\langle y|R\rangle|^2 \cdot |\langle R|x\rangle|^2 + |\langle y>L\rangle|^2 \cdot |\langle L|x\rangle|^2 + \underbrace{\left(\langle y|R\rangle\langle R|x\rangle\langle y>L\rangle^* \langle L|x\rangle^* + \text{h. c.} \right)}_{\text{Interferenz-Terme}} \\ &= \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} + \underbrace{\frac{i}{2} \cdot \frac{i}{2} + \frac{i}{2} \cdot \frac{i}{2}}_{\text{hermitesch konjugiert}} = 0 \end{aligned}$$

Klassische Rechnung: Addition der Wahrscheinlichkeit der beiden Alternativen:

$$|x\rangle \xrightarrow[W=\frac{1}{2}]{R} |R\rangle \xrightarrow[W=\frac{1}{2}]{y} |y\rangle \quad \text{und} \quad |x\rangle \xrightarrow[W=\frac{1}{2}]{L} |R\rangle \xrightarrow[W=\frac{1}{2}]{y} |y\rangle \quad \text{addieren sich zu } \frac{1}{4} + \frac{1}{4} = \frac{1}{2}, \quad \text{aber wir wissen } W_y(|x\rangle) = 0.$$

$|x\rangle = |L\rangle\langle L|x\rangle + |R\rangle\langle R|x\rangle$ ist Superposition von $|L\rangle$ und $|R\rangle$

Messungen projizieren und verändern dadurch Zustände: $|\psi\rangle \xrightarrow{x} |x\rangle\langle x|\psi\rangle$

hierbei ist $|x\rangle$ der Endzustand und $\langle x|\psi\rangle$ die Amplitude.

Unterschied zur klassischen Wahrscheinlichkeitsaddition: quantenmechanisch sind die **Amplituden** von nicht unterscheidbaren Alternativen zu **addieren**, erst dann zur Wahrscheinlichkeit zu quadrieren.

f) Gemische

kombiniere einen monochromatischen Strahl aus zwei Quellen:

Quelle 1 emittiert nur Photonen in $|\psi_1\rangle$ mit Intensität L_1 und $W = p_1 = \frac{L_1}{L_1+L_2}$

Quelle 2 emittiert nur Photonen in $|\psi_2\rangle$ mit Intensität L_2 und $W = p_2 = \frac{L_2}{L_1+L_2}$

Was ist der Erwartungswert einer physikalischen Größe für solche Lichtstrahlen?

Antwort am Bsp. L_z :

$$\begin{aligned}
 \langle L_z \rangle &= (+\hbar)W(+\hbar) + (-\hbar)W(-\hbar) \\
 &= (+\hbar)[p_1W_R(|\psi_1\rangle) + p_2W_R(|\psi_2\rangle)] + (-\hbar)[p_1W_L(|\psi_1\rangle) + p_2W_L(|\psi_2\rangle)] \\
 &= \hbar \left(p_1|\langle R|\psi_1\rangle|^2 + p_2|\langle R|\psi_2\rangle|^2 - p_1|\langle L|\psi_1\rangle|^2 - p_2|\langle L|\psi_2\rangle|^2 \right) \\
 &= p_1 \left(\hbar|\langle R|\psi_1\rangle|^2 - \hbar|\langle L|\psi_1\rangle|^2 \right) + p_2 \left(\hbar|\langle R|\psi_2\rangle|^2 - \hbar|\langle L|\psi_2\rangle|^2 \right) \\
 &\stackrel{(1.10)}{=} p_1\langle\psi_1|\hbar S|\psi_1\rangle + p_2\langle\psi_2|\hbar S|\psi_2\rangle \\
 &=: p_1\langle L_z \rangle_1 + p_2\langle L_z \rangle_2
 \end{aligned} \tag{1.14}$$

klassische Wahrscheinlichkeits-Addition der quantenmechanischen Wahrscheinlichkeit der Teilstrahlen

- **allgemeiner Fall**

Quantensystem ist mit Wahrscheinlichkeit $p_i (i = 1, \dots, n)$ in *einem* von mehreren Zuständen $|\psi_i\rangle$; heißt „gemischter Zustand“, besser „Zustandsgemisch“

- **Spezialfall**

alle p_i außer einem sind Null \Rightarrow Quantensystem befindet sich in einem „reinen Zustand“ $|\psi\rangle$

- **Dekohärenz:** reiner Zustand \rightarrow Gemisch

Superposition $\alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle = |\psi\rangle$ mit $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0$, $\langle\psi|\psi\rangle = 1$, d. h. $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$

Zerstören der Phasenkorrelation führt zu einem Gemisch $\left\{ |\psi_1\rangle, p_1 = |\alpha|^2 \right\} \cup \left\{ |\psi_2\rangle, p_2 = |\beta|^2 \right\}$

$$\begin{aligned}
 \text{Bsp.: } \langle L_z \rangle_\psi &= (\alpha^*\langle\psi_1| + \beta^*\langle\psi_2|) \hbar S (\alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle) \\
 &= |\alpha|^2\langle\psi_1|\hbar S|\psi_1\rangle + |\beta|^2\langle\psi_2|\hbar S|\psi_2\rangle + \alpha^*\beta\langle\psi_1|\hbar S|\psi_2\rangle + \alpha\beta^*\langle\psi_2|\hbar S|\psi_1\rangle
 \end{aligned}$$

Mittelung über relative Phase φ von $\alpha^*\beta = |\alpha\beta|e^{i\varphi}$ liefert

$$\overline{\langle L_z \rangle_\psi} = |\alpha|^2\langle\psi_1|\hbar S|\psi_1\rangle + |\beta|^2\langle\psi_2|\hbar S|\psi_2\rangle = |\alpha|^2\langle L_z \rangle_1 + |\beta|^2\langle L_z \rangle_2$$

Dieser Prozess heißt „Dekohärenz“

- **Extremfall** ist unpolarisiertes Licht

mit gleicher Wahrscheinlichkeit in *jedem* Polarisationszustand $|\phi\rangle (\langle\phi|\phi\rangle = 1)$

ist äquivalent zu einer einfacheren Beschreibung:

mit jeweils $W = \frac{1}{2}$ in einem von *zwei* orthogonalen Polarisationszuständen $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$

Demonstration am Bsp. $\langle L_z \rangle$:

jedes $|\phi\rangle = \alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle, |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$

$$\begin{aligned}
 \langle L_z \rangle_{\text{unpol.}} &= \text{Mittelung von } \langle\phi|\hbar S|\phi\rangle \text{ über alle } |\phi\rangle \\
 &= \text{Mittelung von } \langle L_z \rangle_{\alpha,\beta} \text{ über alle } \alpha, \beta \\
 &= \text{Mittelung von } \langle L_z \rangle_{\alpha,\beta} \text{ über Phase } \varphi, \text{ dann über } |\alpha|, |\beta| \\
 &= \text{Mittelung von } \overline{\langle L_z \rangle_{\alpha,\beta}} \text{ über } |\alpha|, |\beta| \\
 &= \frac{1}{2}\langle L_z \rangle_1 + \frac{1}{2}\langle L_z \rangle_2
 \end{aligned}$$

z. B. $|\psi_1\rangle = |R\rangle, |\psi_2\rangle = |L\rangle \Rightarrow \langle L_z \rangle_{\text{unpol.}} = \frac{1}{2}(+\hbar) + \frac{1}{2}(-\hbar) = 0$

Dichtematrix (Dichteoperator)

Zur Berechnung der Spur am Beispiel einer 2x2 Matrix:

$$\text{tr}[M|\psi\rangle\langle\phi|] = \langle\phi|M|\psi\rangle \quad (1.15)$$

Beweis:

$$\begin{aligned} \text{tr}[M|\psi\rangle\langle\phi|] & \stackrel{\text{Basis } |x\rangle|y\rangle}{=} \langle x|M|\psi\rangle\langle\phi|x\rangle + \langle y|M|\psi\rangle\langle\phi|y\rangle \\ & = \langle\phi|x\rangle\langle x|M|\psi\rangle + \langle\phi|y\rangle\langle y|M|\psi\rangle \\ & = \langle\phi|(|x\rangle\langle x| + |y\rangle\langle y|)M|\psi\rangle \\ & = \langle\phi|M|\psi\rangle \end{aligned}$$

Spezialfall:

$$\begin{aligned} \text{tr}[M] & = \text{tr}[M\mathbb{1}] = \text{tr}[M(|x\rangle\langle x| + |y\rangle\langle y|)] \\ & = \text{tr}[M|x\rangle\langle x|] + \text{tr}[M|y\rangle\langle y|] \\ & = \langle x|M|x\rangle + \langle y|M|y\rangle \end{aligned}$$

Beachte Photonenstrahl gemischt aus $\left\{ \begin{array}{l} |\psi_1\rangle \text{ mit W.} = p_1 \\ |\psi_2\rangle \text{ mit W.} = p_2 \end{array} \right\}$,
wobei $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0$, $p_1 + p_2 = 1$, $\langle\psi_1|\psi_1\rangle = \langle\psi_2|\psi_2\rangle = 1$.

$$\begin{aligned} \langle L_z \rangle & = p_1 \langle\psi_1|\hbar S|\psi_1\rangle + p_2 \langle\psi_2|\hbar S|\psi_2\rangle \\ & = p_1 \text{tr}[\hbar S|\psi_1\rangle\langle\psi_1|] + p_2 \text{tr}[\hbar S|\psi_2\rangle\langle\psi_2|] \\ & = \text{tr}[\hbar S(p_1|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + p_2|\psi_2\rangle\langle\psi_2|)] \\ & = \text{tr}[\hbar S\rho] \end{aligned}$$

$$\text{mit } \rho = p_1|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + p_2|\psi_2\rangle\langle\psi_2| =: \text{Dichtematrix} \quad (1.16)$$

$$\text{allgemein: } \langle O \rangle = \text{tr}[O\rho] \quad (1.17)$$

Eigenschaften der Dichtematrix:

$$(1) \quad \text{tr}\rho = p_1 + p_2, \quad \text{tr}[\rho^2] = p_1^2 + p_2^2 \leq 1$$

$$(2) \quad p_1 = 1, \text{ andere} = 0 \quad \left\{ \begin{array}{l} \Rightarrow \rho = |\psi_1\rangle\langle\psi_1| = P_1 \\ \Rightarrow \rho^2 = \rho \end{array} \right\} \text{Reinzustand} \Leftrightarrow \text{Rang } \rho = 1 \quad (1.18)$$

$$(3) \quad \rho^2 = \rho \Rightarrow \exists |\psi\rangle \text{ so, dass } \rho = |\psi\rangle\langle\psi| = P_\psi$$

$$(4) \quad \rho^\dagger = \rho \quad \text{hermitesch}$$

$$(5) \quad \rho_{\text{unpol.}} = \frac{1}{2}\mathbb{1}$$

Achtung: im Allgemeinen ist ρ nicht diagonal.

$$\text{Bsp.: in } |x\rangle|y\rangle\text{-Basis: } \rho \doteq \begin{pmatrix} p_1 & 0 \\ 0 & p_2 \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{in } |R\rangle, |L\rangle\text{-Basis}} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} p_1 + p_2 & p_1 - p_2 \\ p_1 - p_2 & p_1 + p_2 \end{pmatrix}$$

g) Doppelbrechung: Ortsentwicklung

Betrachte einen Calcit-Kristall, der Photonenstrahl selektiv aufspaltet:

Brechungsindex n_o für Photonenpolarisation senkrecht zur optischen Achse: $\perp \vec{n}$ (ordinary)

Brechungsindex n_e für Photonenpolarisation parallel zur optischen Achse: $\parallel \vec{n}$ (extraordinary) ($n_e < n_o$)

Wahl: Strahl in z-Richtung, \vec{n} in x-y-Ebene, Polarisationsbasis: $|o\rangle|e\rangle$ (wie $|x\rangle|y\rangle$), Grenzflächen \perp Strahl

Die Phase von $\vec{E} \sim e^{ikz - i\omega t}$, ω fest, $k = \frac{\omega}{c}n \Rightarrow k_e < k_o$

Länge des Kristalls: $L \Rightarrow$ Laufzeit im Vakuum $T = \frac{L}{c}$

Zerlegung: $|\psi_{in}\rangle = |e\rangle\langle e|\psi_{in}\rangle + |o\rangle\langle o|\psi_{in}\rangle$

Effekt des Calcit-Kristalls: Multiplikation der Anteile $\sim |e\rangle$ und $\sim |o\rangle$ mit unterschiedlichen Phasen:

$$|\psi_{out}\rangle = e^{ik_e L - i\omega T} |e\rangle\langle e|\psi_{in}\rangle + e^{ik_o L - i\omega T} |o\rangle\langle o|\psi_{in}\rangle =: e^{-i\omega T} U_L |\psi_{in}\rangle \quad (1.19)$$

$$\text{mit } U_z = e^{ik_e z} |e\rangle\langle e| + e^{ik_o z} |o\rangle\langle o| \quad (z.B. z = L) \quad (1.20)$$

Definition: Übergangsamplitude von $|\psi_{in}\rangle$ nach $|\phi\rangle$

= Amplitude für $|\phi\rangle$ in $|\psi_{out}\rangle$

= $\langle\phi|\psi_{out}\rangle$

= $\langle\phi|U_L|\psi_{in}\rangle$

dann: Übergangswahrscheinlichkeit von $|\psi_{in}\rangle$ nach $|\phi\rangle = |\langle\phi|U_L|\psi_{in}\rangle|^2$

$$\begin{aligned} \text{Phasenänderung im Kristall: } \quad |\psi_z\rangle &= U_z |\psi_{in}\rangle, \quad 0 \leq z \leq L \\ |\psi_{z=0}\rangle &= |\psi_{in}\rangle, \quad |\psi_{z=L}\rangle = |\psi_{out}\rangle \end{aligned} \quad (1.21)$$

3 wichtige Eigenschaften von U_z :

(1) Multiplikativität

$$U_z \text{ ist multiplikativ, d.h. } U_{z+a} |\psi_{in}\rangle = |\psi_{z+a}\rangle = U_a U_z |\psi_{in}\rangle \quad (1.22)$$

Beweis:

$$\begin{aligned} U_a U_z &= (e^{ik_e a} |e\rangle\langle e| + e^{ik_o a} |o\rangle\langle o|)(e^{ik_e z} |e\rangle\langle e| + e^{ik_o z} |o\rangle\langle o|) \\ &= e^{ik_e(z+a)} |e\rangle\langle e| + e^{ik_o(z+a)} |o\rangle\langle o| \\ &= U_{z+a} \end{aligned} \quad (1.23)$$

falls $k_e a \ll 1, k_o a \ll 1$ gilt: $U_a \approx \mathbb{1} + iaK$

$$\text{mit } K = k_e |e\rangle\langle e| + k_o |o\rangle\langle o| \text{ Wellenzahloperator} \quad (\text{in } |e\rangle |o\rangle - \text{Basis} : K = \begin{pmatrix} k_e & 0 \\ 0 & k_o \end{pmatrix}) \quad (1.24)$$

Beweis:

$$\begin{aligned} U_a &\approx (1 + ik_e a) |e\rangle\langle e| + (1 + ik_o a) |o\rangle\langle o| \\ &= |e\rangle\langle e| + |o\rangle\langle o| + ia(k_e |e\rangle\langle e| + k_o |o\rangle\langle o|) \\ &= \mathbb{1} + iaK \end{aligned}$$

Bemerkung: Ein allgemeiner Zustand $|\psi\rangle = |e\rangle\psi_e + |o\rangle\psi_o$ hat keine definierte Wellenzahl (außer $|\psi\rangle = |e\rangle$ oder $|\psi\rangle = |o\rangle$).

(2) Differentialgleichung für $|\psi_z\rangle$ (und U_z)

Sei ka infinitesimal:

$$\begin{aligned} \Rightarrow |\psi_{z+a}\rangle &\approx (\mathbb{1} + iaK) |\psi_z\rangle \\ \Rightarrow |\psi_{z+a}\rangle - |\psi_z\rangle &\approx iaK |\psi_z\rangle \\ \Rightarrow \lim_{a \rightarrow 0} (|\psi_{z+a}\rangle - |\psi_z\rangle) &= iK |\psi_z\rangle \\ \Rightarrow \frac{d}{dz} |\psi_z\rangle &= iK |\psi_z\rangle \Leftrightarrow \frac{d}{dz} U_z = iK U_z \end{aligned} \quad (1.25)$$

explizit in $|x\rangle|y\rangle$ -Basis:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dz}\langle x|\psi_z\rangle &= i\langle x|K|\psi_z\rangle = i\langle x|K|x\rangle\langle x|\psi_z\rangle + i\langle x|K|y\rangle\langle y|\psi_z\rangle \\ \frac{d}{dz}\langle y|\psi_z\rangle &= i\langle y|K|\psi_z\rangle = i\langle y|K|x\rangle\langle x|\psi_z\rangle + i\langle y|K|y\rangle\langle y|\psi_z\rangle \\ \frac{d}{dz}\begin{pmatrix}\psi_x \\ \psi_y\end{pmatrix}(z) &= i\begin{pmatrix}K_{xx} & K_{xy} \\ K_{yx} & K_{yy}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_x \\ \psi_y\end{pmatrix}(z) \quad \text{Notation: } \begin{cases} \psi_x(z) = \langle x|\psi_z\rangle \text{ etc.} \\ K_{xx} = \langle x|K|x\rangle \end{cases}\end{aligned}$$

Lösung der Dgl. mit Anfangswert $|\psi_{z=0}\rangle = |\psi_{in}\rangle$ bzw. $U_{z=0} = \mathbb{1}$:

$$|\psi_z\rangle = e^{izK}|\psi_{in}\rangle \quad \Leftrightarrow \quad U_z = e^{izK} \quad (1.26)$$

check:

$$K = k_e|e\rangle\langle e| + k_o|o\rangle\langle o| \Rightarrow e^{izK} = e^{izk_e}|e\rangle\langle e| + e^{izk_o}|o\rangle\langle o| = U_z$$

(3) U_a ändert nicht die Norm von $|\psi_z\rangle$, d.h. $\langle\psi_{z+a}|\psi_{z+a}\rangle = \langle\psi_z|\psi_z\rangle$.

Beweis:

$$\begin{aligned}\langle\psi_{z+a}|\psi_{z+a}\rangle &= \langle\psi_z|U_a^\dagger U_a|\psi_z\rangle \\ &= \langle\psi_z|\psi_z\rangle, \text{ da } U_z^\dagger = e^{-izK^\dagger} \stackrel{K=K^\dagger}{=} U_{-z}\end{aligned}$$

$$K = K^\dagger \quad (K \text{ ist hermitesch}), \quad U_a^\dagger U_a = \mathbb{1} \quad (U_a \text{ ist unitär}) \quad (1.27)$$

Es gilt sogar:

$$U_z^\dagger U_z = \mathbb{1} \text{ (unitär)} \Leftrightarrow K^\dagger = K \text{ (hermitesch)}$$

da man auch die andere Richtung zeigen kann:

Beweis:

$$\begin{aligned}0 &= \frac{d}{dz}\mathbb{1} = \frac{d}{dz}(U_z^\dagger U_z) = \left(\frac{d}{dz}U_z^\dagger\right)U_z + U_z^\dagger\left(\frac{d}{dz}U_z\right) \\ &= \left(\frac{d}{dz}U_z\right)^\dagger U_z + U_z^\dagger\left(\frac{d}{dz}U_z\right) \stackrel{\text{Dgl.}}{=} (iKU_z)^\dagger U_z + U_z^\dagger(iKU_z) \\ &= -iU_z^\dagger K^\dagger U_z + iU_z^\dagger K U_z = iU_z^\dagger(K - K^\dagger)U_z \\ &\Rightarrow K = K^\dagger\end{aligned}$$

Es gilt allgemein:

$$\det e^{tM} = e^{t \operatorname{tr} M}$$

Einfach zu zeigen für beliebige diagonalisierbare Matrix $M = SDS^{-1}$ mit $D = \operatorname{diag}(\lambda_i)$:

$$\begin{aligned}\det e^{tM} &= \det e^{tSDS^{-1}} = \det S e^{tD} S^{-1} = \det S \cdot \det e^{tD} \cdot \det S^{-1} \\ &= \det S \left(\prod_i e^{t\lambda_i}\right) \cdot (\det S)^{-1} \\ &= e^{t \sum_i \lambda_i} = e^{t \operatorname{tr} D} = e^{t \operatorname{tr}(SDS^{-1})} = e^{t \operatorname{tr} M}\end{aligned}$$

Mit dieser Identität kann man nun folgendes feststellen:

$$\begin{array}{llll} K = K^\dagger & \Rightarrow \operatorname{tr} K \text{ reell} & \Rightarrow \det U_z = \det e^{izK} = e^{iz \operatorname{tr} K} = e^{i\varphi} \quad \text{mit } \varphi \in \mathbb{R} \\ \Downarrow & & & \Uparrow \\ U_z U_z^\dagger = \mathbb{1} & \Rightarrow \det(U_z^\dagger U_z) = 1 & \Rightarrow (\det U_z)^* \det U_z = 1 \end{array}$$

Also ist $\det U_z = e^{i\varphi}$ eine Phase.

h) K-Mesonen: Zeitentwicklung

bisher: ebene Welle $\sim e^{ikz-i\omega t-\lambda t}$ wobei $-\lambda t$ durch die Absorption zustande kommt, monochromatisch: ω fest, k variabel (mit dem Medium)

Erinnerung an 2 Fakten:

1. Relativistik:

$$p^\mu = \begin{pmatrix} p^0 \\ \vec{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{E}{c} \\ \vec{p} \end{pmatrix} \quad \text{mit } p^2 = p_\mu p^\mu = \left(\frac{E}{c}\right)^2 - \vec{p}^2 \stackrel{!}{=} m^2 c^2 \quad \text{wobei } m \text{ die invariante Masse ist}$$

2. Planck – de Broglie:

$$\begin{pmatrix} \frac{E}{c} \\ \vec{p} \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} \frac{\omega}{c} \\ \vec{k} \end{pmatrix} \quad \text{mit } \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 - \vec{k}^2 = \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \quad \left| \begin{array}{l} m = 0 : \text{ Licht} \\ m > 0 : \text{ Materie} \end{array} \right.$$

Welle $\sim e^{\frac{i}{\hbar}(pz-Et)-\lambda t}$

Aufgrund der Absorption ($-\lambda t$) hat diese nur eine endliche Lebensdauer:

$$\tau = \frac{1}{2\lambda} \tag{1.30}$$

jetzt: fester p , variables $E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$ durch Benutzen verschiedener Massen
überlagere 2 Materiestrahlen unterschiedlicher Masse $m = m_L$ und $m = m_S$
erlaube auch verschiedene Lebensdauern $\lambda = \lambda_L$ und $\lambda = \lambda_S$ (L= „long“, S=„short“)

Paradebeispiel: neutrale K-Mesonen (hier vereinfacht: ohne CP-Verletzung) kommen als Zustände scharfer Masse und Lebensdauer in 2 Varianten vor:

- K_L hat $m_L \approx 500 \text{ MeV}$, $\tau_L \approx 500 \cdot 10^{-10} \text{ s} \Leftrightarrow \lambda_L = 10^7 \text{ s}^{-1}$
- K_S hat $m_S \approx 500 \text{ MeV}$, $\tau_S \approx 10^{-10} \text{ s} \Leftrightarrow \lambda_S = 500 \cdot 10^7 \text{ s}^{-1}$

$$\text{aber } \Delta m = m_L - m_S \approx 3,5 \cdot 10^{-6} \text{ eV} \approx 500 \cdot 10^7 \frac{\hbar}{c^2} \text{ s}^{-1} \approx \frac{\hbar}{c^2} \lambda_S \quad \curvearrowright \quad \frac{\Delta m}{m} \approx 10^{-14}$$

Zerfälle:	$K_S \longrightarrow$	$\pi^+ \pi^-$	(70%)	$K_L \longrightarrow$	$\pi^\pm e^\mp \nu_e$	(39%)
		$\pi^0 \pi^0$	(30%)		$\pi^\pm \mu^\mp \nu_\mu$	(27%)
					$\pi^0 \pi^0 \pi^0$	(21%)
					$\pi^+ \pi^- \pi^0$	(13%)

Als Zustände scharfer Masse und Lebensdauer sind $|K_L\rangle$ und $|K_S\rangle$ Eigenzustände der Zeitentwicklung. $|K_L\rangle$ und $|K_S\rangle$ sind auch Eigenzustände eines Operators CP:

$$CP|K_S\rangle = +|K_S\rangle \quad CP|K_L\rangle = -|K_L\rangle \quad \text{ON-Basis: } |K_L\rangle, |K_S\rangle$$

aber: Erzeugung und Vernichtung von K-Mesonen werden als Eigenzustände von „Strangeness“ S beschrieben:

$$S|K^0\rangle = +|K^0\rangle \quad S|\bar{K}^0\rangle = -|\bar{K}^0\rangle \quad \text{ONBasis: } |K^0\rangle, |\bar{K}^0\rangle$$

Zusammenhang:

$$\begin{aligned} |K^0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|K_S\rangle + |K_L\rangle) & \stackrel{(1.31)}{\iff} & |K_S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|K^0\rangle + |\bar{K}^0\rangle) \\ |\bar{K}^0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|K_S\rangle - |K_L\rangle) & & |K_L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|K^0\rangle - |\bar{K}^0\rangle) \end{aligned}$$

$$|K^0\rangle \xrightarrow{\underline{CP}} |\bar{K}^0\rangle \qquad |K_L\rangle \xrightarrow{\underline{S}} |\bar{K}_S\rangle$$

Zeitentwicklung eines Eigenzustandes $\sim e^{-\frac{i}{\hbar}Et-\lambda t} \sim e^{-i\omega t-\lambda t}$ mit $E = E_S$ oder E_L , $\lambda = \lambda_S$ oder λ_L , lasse gemeinsame Phase $e^{\frac{i}{\hbar}pz}$ weg.

- i) sei $|\psi(t=0)\rangle = |K_S\rangle$
dann $|\psi(t > 0)\rangle = e^{-i\omega_S t - \lambda_S t} |K_S\rangle$ mit $\omega_S = \frac{1}{\hbar} \sqrt{p^2 c^2 + m_S^2 c^4}$

Wahrscheinlichkeit, das Teilchen zu einem späteren Zeitpunkt als K_S zu detektieren:

$$|\langle K_S | \psi(t) \rangle|^2 \stackrel{\text{ONB}}{=} |e^{-i\omega_S t - \lambda_S t}|^2 = e^{-2\lambda_S t} = e^{-\frac{t}{\tau_S}}$$

Achtung: $\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle$ nimmt ab $\sim e^{-2\lambda_S t}$ (Zerfall)

- ii) sei $|\psi(t=0)\rangle = |K^0\rangle$ z.B. erzeugt durch starke Wechselwirkung ($p\pi \rightarrow \Lambda K$)
zerlege in CP-Eigenbasis $|K_L\rangle, |K_S\rangle$:

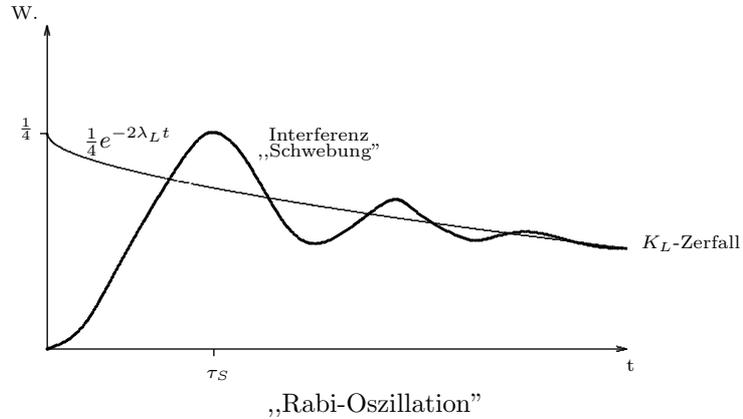
$$|\psi(t=0)\rangle = |K^0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|K_S\rangle + |K_L\rangle)$$

$$|\psi(t > 0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{-i\omega_S t - \lambda_S t} |K_S\rangle + e^{-i\omega_L t - \lambda_L t} |K_L\rangle)$$

Wahrscheinlichkeit, später ein \bar{K}^0 zu finden:

$$\begin{aligned} |\langle \bar{K}^0 | \psi(t > 0) \rangle|^2 &= \frac{1}{2} |e^{-i\omega_S t - \lambda_S t} \langle \bar{K}^0 | K_S \rangle + e^{-i\omega_L t - \lambda_L t} \langle \bar{K}^0 | K_L \rangle|^2 \\ &\vdots \\ &= \frac{1}{4} (e^{-2\lambda_S t} + e^{-2\lambda_L t} - e^{-(\lambda_S + \lambda_L)t} \cos(\omega_L - \omega_S)t) \\ \text{nicht relativistisch} &\approx \frac{1}{4} e^{-2\lambda_S t} + \frac{1}{4} e^{-2\lambda_L t} - \frac{1}{2} e^{-\lambda t} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \Delta m c^2 t\right) \end{aligned} \quad (1.32)$$

(langsam) $p^2 \ll m^2 c^2$



\Rightarrow Aus der Länge der Schwebung erhält man Δm

Zeitentwicklung für beliebigen Eigenzustand:

Notation: $\omega_L - i\lambda_L =: \alpha_L, \omega_S - i\lambda_S =: \alpha_S$

$$\begin{aligned} |\psi(0)\rangle &= |K_S\rangle \langle K_S | \psi(0) \rangle + |K_L\rangle \langle K_L | \psi(0) \rangle \\ |\psi(t)\rangle &= e^{-i\alpha_S t} |K_S\rangle \langle K_S | \psi(0) \rangle + e^{-i\alpha_L t} |K_L\rangle \langle K_L | \psi(0) \rangle \\ &= \left(e^{-i\alpha_S t} |K_S\rangle \langle K_S | + e^{-i\alpha_L t} |K_L\rangle \langle K_L | \right) |\psi(0)\rangle \\ &=: U_t |\psi(0)\rangle \end{aligned} \quad (1.33)$$

$$\text{mit } U_t = e^{-i\alpha_S t} |K_S\rangle \langle K_S | + e^{-i\alpha_L t} |K_L\rangle \langle K_L | \quad \begin{array}{l} \text{Zeitentwicklungsoperator} \\ \text{„Propagator“} \end{array} \quad (1.34)$$

Differentialgleichung:

$$\begin{aligned} i \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle &= \left(\alpha_S e^{-\alpha_S t} |K_S\rangle\langle K_S| + \alpha_L e^{-\alpha_L t} |K_L\rangle\langle K_L| \right) |\psi(0)\rangle \\ &= \left(\alpha_S |K_S\rangle\langle K_S| + \alpha_L |K_L\rangle\langle K_L| \right) \cdot \underbrace{\left(e^{-i\alpha_S t} |K_S\rangle\langle K_S| + e^{-i\alpha_L t} |K_L\rangle\langle K_L| \right)}_{=|\psi(t)\rangle} |\psi_0\rangle \end{aligned} \quad (1.35)$$

$$\Rightarrow i \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle =: \frac{1}{\hbar} H |\psi(t)\rangle \quad \text{Schrödinger-Gleichung} \quad (1.36)$$

$$\text{mit } H = \hbar \left(\alpha_S |K_S\rangle\langle K_S| + \alpha_L |K_L\rangle\langle K_L| \right) \quad \text{Hamiltonoperator} \quad (1.37)$$

in $|K_L\rangle, |K_S\rangle$ -Basis:

$$\begin{aligned} H &\doteq \hbar \begin{pmatrix} \alpha_L & 0 \\ 0 & \alpha_S \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_S - i\hbar\lambda_S & 0 \\ 0 & E_L - i\hbar\lambda_L \end{pmatrix} \\ U_t &\doteq \begin{pmatrix} e^{-i\alpha_L t} & 0 \\ 0 & e^{-i\alpha_S t} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

wenn $\lambda_S = \lambda_L = 0 \Rightarrow H^\dagger = H$ und $U_t^\dagger U_t = \mathbb{1}$

Zusammenhang zwischen H und U_t :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} U_t &= H U_t \quad \text{mit } U_0 = \mathbb{1} \\ \text{Lösung: } U_t &= e^{-\frac{i}{\hbar} t H} \Leftrightarrow H = U_t^{-1} \left(i \frac{d}{dt} U_t \right) \end{aligned} \quad (1.38)$$

Versuchen Sie H und U_t in $|K^0\rangle, |\bar{K}^0\rangle$ -Basis aufzuschreiben!

Zusammenfassung / Wiederholung

$$|\psi(t)\rangle = U_t |\psi(0)\rangle \quad \text{Schrödingergleichung: } i \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \frac{1}{\hbar} H |\psi(t)\rangle$$

falls H zeitunabhängig: $U_t = e^{-\frac{i}{\hbar} t H}$

unser Beispiel: $H = \hbar\alpha_S |K_S\rangle\langle K_S| + \hbar\alpha_L |K_L\rangle\langle K_L|$

in Eigenbasis $|K_L\rangle, |K_S\rangle$:

$$H \doteq \hbar \begin{pmatrix} \alpha_S & \\ & \alpha_L \end{pmatrix} \longrightarrow U_t = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha_S t} & \\ & e^{-i\alpha_L t} \end{pmatrix}$$

in $|K^0\rangle, |\bar{K}^0\rangle$ -Basis:

$$\begin{aligned} H &\doteq \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \alpha_S + \alpha_L & \alpha_S - \alpha_L \\ \alpha_S - \alpha_L & \alpha_S + \alpha_L \end{pmatrix} \longrightarrow U_t = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{-i\alpha_S t} + e^{-i\alpha_L t} & e^{-i\alpha_S t} - e^{-i\alpha_L t} \\ e^{-i\alpha_S t} - e^{-i\alpha_L t} & e^{-i\alpha_S t} + e^{-i\alpha_L t} \end{pmatrix} \\ H &= \frac{\hbar}{2} (\alpha_S + \alpha_L) \mathbb{1} + \frac{\hbar}{2} (\alpha_S - \alpha_L) \sigma_1 \longrightarrow U_t = e^{-i\frac{t}{2}(\alpha_S + \alpha_L)} \begin{pmatrix} \cos(\alpha_S - \alpha_L)\frac{t}{2} & -i \sin(\alpha_S - \alpha_L)\frac{t}{2} \\ -i \sin(\alpha_S - \alpha_L)\frac{t}{2} & \cos(\alpha_S - \alpha_L)\frac{t}{2} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Bemerkung: Wir hatten die Dichtematrix eines Gemisches definiert als

$$\rho = p_1 |\psi_1\rangle\langle\psi_1| + p_2 |\psi_2\rangle\langle\psi_2|, \quad |\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \text{ ist ONBasis.}$$

Setzt sich der Strahl aus mehr Anteilen zusammen, gilt analog

$$\rho = \sum_i^n p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \quad \text{mit } \langle\psi_i|\psi_i\rangle = 1, \text{ aber nicht orthogonal, trotzdem } 2 \times 2 \text{ Matrix bei Photonenpolarisation.}$$

Nur die Zerlegung von ρ in **zwei orthogonale** Projektoren ist eindeutig.

II Elemente der linearen Algebra

a) Vektoren = Kets

lineare Vektorräume V über \mathbb{C} mit Elementen $a, b, c \in V, \lambda, \mu, \dots \in \mathbb{C}$

$$|\lambda a + \mu b\rangle = \lambda |a\rangle + \mu |b\rangle \quad \text{Basis } \{|i\rangle, i = 1, \dots, d\} = \{|1\rangle, |2\rangle, \dots, |d\rangle\}; \quad d = \dim V, \text{ Dimension}$$

Zerlegung $|a\rangle = \sum_i |i\rangle a_i$ eindeutig, $a_i \in \mathbb{C}$

b) Dualvektoren = Bras

Linearformen in V bilden den dualen Vektorraum $V^*, \tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c} \in V^*$.

Dualer Vektorraum:

$$V^* \ni \text{Bra: } V \longrightarrow \mathbb{C}$$

$$\langle \tilde{a} | : |b\rangle \longmapsto \text{Zahl } \langle \tilde{a} | (|b\rangle) \in \mathbb{C}$$

$$\text{antilinear: } \langle \lambda \tilde{a} + \mu \tilde{b} | = \lambda^* \langle \tilde{a} | + \mu^* \langle \tilde{b} |$$

$$\text{Basis } \{ \langle \tilde{i} |, i = 1, \dots, d \} \quad \text{Zerlegung } \langle \tilde{a} | = \sum_i \tilde{a}_i \langle \tilde{i} |$$

Bei unendlich dimensionalen Vektorräumen kann es durchaus vorkommen, dass $d \neq \tilde{d}$.

c) Skalarprodukt

$$V \times V \longmapsto \mathbb{C}$$

$$(|a\rangle, |b\rangle) \longmapsto \langle a|b\rangle = -\langle b|a\rangle^* \text{ sesquilinear}$$

- wenn auf allen Vektoren erklärt, dann ist V **unitär**, z.B. $V = \mathbb{C}^d$

- definiert eine Konjugation $V \xrightarrow{\dagger} V, |a\rangle \longmapsto |a\rangle^\dagger = \langle \tilde{a} |$ vermöge $\langle \tilde{a} | (|b\rangle) = \langle a|b\rangle$

- sesquilinear: $\langle a|\lambda b + \mu c\rangle = \lambda \langle a|b\rangle + \mu \langle a|c\rangle$
 $\langle \lambda b + \mu c|a\rangle = \lambda^* \langle b|a\rangle + \mu^* \langle c|a\rangle$

- definiert eine Norm: $\text{Norm}^2(|a\rangle) = ||a\rangle|^2 = |a|^2 := \langle a|a\rangle \in \mathbb{R}_{\geq 0}$
 $|\langle a|b\rangle| \leq |a| \cdot |b|, |a + b| \leq |a| + |b|$

- ONBasis: $\{|i\rangle\} : \langle i|j\rangle = \delta_{ij}$
 $|a\rangle = \sum_i |i\rangle a_i = \sum_i |i\rangle \langle i|a\rangle$
 $\langle a|b\rangle = \sum_i \langle a|i\rangle \langle i|b\rangle = \sum_i a_i^* b_i, \langle a|a\rangle = \sum_i |a_i|^2 \geq 0$

- wir können identifizieren: $V^* \cong V$, $\langle \tilde{a} | = |a\rangle^\dagger =: \langle a |$

d) äußeres Produkt

Das äußere Produkt ist eine lineare Abbildung von V nach V .
 $V \times V^* \longrightarrow \text{Lin}(V \rightarrow V)$

$$(|a\rangle, \langle \tilde{b}|) \longmapsto |a\rangle \langle \tilde{b}| : V \longrightarrow V$$

mit $|v\rangle \longmapsto |a\rangle \underbrace{\langle \tilde{b}|(|v\rangle)}_{\text{Zahl}} \stackrel{V \text{ unitär}}{=} |a\rangle \langle b|v\rangle$

V sei unitär $\Rightarrow (|a\rangle \langle b|)^\dagger = |b\rangle \langle a|$

speziell: $\frac{|a\rangle \langle a|}{\langle a|a\rangle} = P_a$ Projektor, hermitesch, $\text{rg } P_a = 1$

Zerlegung der Eins: $\mathbb{1} = \sum_i |i\rangle \langle i| = \sum_i P_i$ mit $P_i P_j = \delta_{ij} P_i$ (keine Summe über i)

e) lineare Operatoren

$$\begin{aligned} \Omega : V &\longrightarrow V \\ |a\rangle &\longmapsto |a'\rangle = \Omega |a\rangle =: |\Omega a\rangle \\ \left. \begin{aligned} \Omega |\lambda a + \mu b\rangle &= \lambda \Omega |a\rangle + \mu \Omega |b\rangle \\ (\Lambda \Omega) |a\rangle &= \Lambda (\Omega |a\rangle) = \Lambda |\Omega a\rangle = |\Lambda \Omega a\rangle \end{aligned} \right\} \text{linear} \end{aligned}$$

Kommutator: $[\Omega, \Lambda] := \Omega \Lambda - \Lambda \Omega = -[\Lambda, \Omega]$

Es gilt: $[\Omega, \Lambda \Theta] = \Lambda [\Omega, \Theta] + [\Omega, \Lambda] \Theta$ vgl. Produktregel beim Differenzieren
 $[[\Lambda, \Omega], \Theta] + [[\Theta, \Lambda], \Omega] + [[\Omega, \Theta], \Lambda] = 0$ Jacobi-Identität

In ONBasis:

$$\begin{aligned} \langle i|\Omega|j\rangle = \Omega_{ij} &\leftrightarrow \Omega = \sum_{ij} \Omega_{ij} |i\rangle \langle j| = \sum_{ij} |i\rangle \Omega_{ij} \langle j| = \sum_{ij} |i\rangle \langle i|\Omega|j\rangle \langle j| \\ (\Omega \Lambda)_{ij} = \langle i|\Omega \Lambda|j\rangle &= \sum_k \langle i|\Omega|k\rangle \underbrace{\langle k|\Lambda|j\rangle}_{\mathbb{1}} = \sum_k \Omega_{ik} \Lambda_{kj} \end{aligned}$$

f) adjungierte Operatoren

Zu Ω adjungierter Operator: $\Omega^\dagger : V^* \longrightarrow V^*$

$$\langle \tilde{a} | \longmapsto \langle \tilde{a}' | = \langle \tilde{a} | \Omega^\dagger = \langle \widetilde{\Omega a} | := |\Omega a\rangle^\dagger = (\Omega |a\rangle)^\dagger$$

$$\begin{array}{ccc} |a\rangle & \xrightarrow{\Omega} & |\Omega a\rangle \\ \downarrow \dagger & & \downarrow \dagger \\ \langle \tilde{a} | & \xrightarrow{\Omega} & \langle \widetilde{\Omega a} | \end{array}$$

Es gilt: $(\Omega\Lambda)^\dagger = \Lambda^\dagger\Omega^\dagger$ (analog: $(\Omega\Lambda)^{-1} = \Lambda^{-1}\Omega^{-1}$)

Beweis: $\langle \tilde{a} | (\Omega\Lambda)^\dagger = \langle \tilde{a} | \widetilde{(\Omega\Lambda)a} = \langle \widetilde{\Omega(\Lambda a)} = \langle \widetilde{\Lambda a} | \Omega^\dagger = \langle \tilde{a} | \Lambda^\dagger \Omega^\dagger$
 Ferner ist $(\Omega^\dagger)^\dagger = \Omega$.

$$\begin{array}{ccccc} \langle a | \Omega | b \rangle^* & = & \langle a | \Omega b \rangle^* & = & \langle \Omega b | a \rangle \\ \parallel & \longleftarrow & V \text{ unitär} & \longrightarrow & \parallel \\ \langle \Omega^\dagger a | b \rangle^* & = & \langle b | \Omega^\dagger a \rangle & = & \langle b | \Omega^\dagger | a \rangle \end{array}$$

g) Eigenkets, Eigenwerte

Definition: $\Omega |\omega\rangle = \omega |\omega\rangle$

Dabei ist $|\omega\rangle$ Eigenket zum Eigenwert ω . Im Falle von Entartung (mehrere Eigenkets zu einem (mehrfachen) Eigenwert), schreibe $|\omega, \alpha\rangle$, $\alpha = 1, \dots, g$. Dabei ist g der Grad der Entartung = Dimension des Eigenraums.

$P_a |a\rangle = \frac{|a\rangle\langle a|}{\langle a|a\rangle} = 1 \cdot |a\rangle$, $P_a |a^\perp\rangle = 0$ mit $|a^\perp\rangle$ senkrecht zu $|a\rangle$.

Es sind auch $\sum_\alpha \lambda_\alpha |\omega, \alpha\rangle$ Eigenkets zum Eigenwert ω .

Falls es eine vollständige ONBasis $\{|\omega_i\rangle\}$ von Ω -Eigenkets gibt, gilt:

$$\langle \omega_i | \Omega | \omega_j \rangle = \delta_{ij} \omega_i \text{ (keine Summe)} \quad (\Omega_{ij}) \doteq \begin{pmatrix} \omega_1 & & \\ & \omega_2 & \\ & & \ddots \end{pmatrix}, \quad \Omega |\omega_i\rangle = \omega_i |\omega_i\rangle, \quad \langle \omega_i | \omega_j \rangle = \delta_{ij}$$

Spektralzerlegung:

$$\Omega = \sum_i \omega_i |\omega_i\rangle\langle \omega_i| = \sum_i \omega_i P_i \doteq \text{diag}(\omega_i)$$

$\{\omega_i\}$ heißt **Spektrum** des Operators Ω .

$$\text{tr } \Omega = \sum_i \omega_i, \quad \det \Omega = \prod_i \omega_i, \quad \text{rg } \Omega = \#(\omega_i \neq 0)$$

↙ Anzahl

h) Unitäre Operatoren

U unitär $\Leftrightarrow U^\dagger U = \mathbb{1} = U U^\dagger$

Das Skalarprodukt ist invariant unter Transformationen U , d.h. U erhält das Skalarprodukt:

$\langle Ua | Ub \rangle = (\langle a | U^\dagger)(U | b \rangle) = \langle a | \underbrace{U^\dagger U}_\mathbb{1} | b \rangle = \langle a | b \rangle$. Es gilt sogar

$$\langle Ua | Ub \rangle = \langle a | b \rangle \quad \forall |a\rangle, |b\rangle \quad \Leftrightarrow \quad U U^\dagger = \mathbb{1} \quad \Leftrightarrow \quad U \text{ unitär.}$$

Ferner ergibt sich folgende Ähnlichkeitstransformation von Ω :

$$\langle Ua | \Omega | Ub \rangle = \langle a | U^\dagger \Omega U | b \rangle; \quad \text{vergleiche mit } \langle a | \Omega | b \rangle$$

Es sind **äquivalent**

(1) Transformation der Zustände $|a\rangle \longrightarrow |a'\rangle = |Ua\rangle$, $\Omega \longrightarrow \Omega$

(2) Transformation der Operatoren $|a\rangle \longrightarrow |a\rangle$, $\Omega \longrightarrow \Omega' = U^\dagger \Omega U$

$$\det(U^\dagger \Omega U) = \det \Omega, \quad \text{tr}(U^\dagger \Omega U) = \text{tr} \Omega$$

Eigenwerte und Eigenkets von U :

Betrachte zwei Eigenkets: $U|u_i\rangle = u_i|u_i\rangle, U|u_j\rangle = u_j|u_j\rangle \rightsquigarrow \langle u_j|U^\dagger = u_j^*\langle u_j|$
 $\rightsquigarrow \langle u_j|u_i\rangle = \langle u_j|U^\dagger U|u_i\rangle = u_j^* u_i \langle u_j|u_i\rangle$

2 Fälle:

$i = j$: $\langle u_i|u_i\rangle \neq 0 \rightsquigarrow u_i^* u_i = 1 \rightsquigarrow u_i = e^{i\phi}$ Phase.

$i \neq j$: entweder $u_i \neq u_j$ (nicht entartet) $\rightsquigarrow u_j^* u_i \neq 1 \rightsquigarrow \langle u_j|u_i\rangle = 0$.
 oder $u_i = u_j$ (entartet) $\rightsquigarrow u_j^* u_i = 1 \rightsquigarrow \langle u_j|u_i\rangle$ unbestimmt.

Fazit: \exists vollständige ONBasis aus Eigenkets, falls U, U^\dagger auf ganz V definiert sind.

i) hermitesche Operatoren $H^\dagger = H$

$[\det(H - \lambda \mathbb{1})]^* = \det(H - \lambda \mathbb{1})^\dagger = \det(H - \lambda^* \mathbb{1}) \Rightarrow$ Nullstellen λ_i sind reell \Rightarrow Eigenwerte reell, Eigenkets?
 betrachte 2 Eigenkets: $H|h_i\rangle = h_i|h_i\rangle, H|h_j\rangle = h_j|h_j\rangle \rightarrow h_i \langle h_j|h_i\rangle = \langle h_j|H|h_i\rangle = \langle h_j|H^\dagger|h_i\rangle = h_j^* \langle h_j|h_i\rangle$

- $i = j$: $\langle h_i|h_i\rangle \neq 0 \rightsquigarrow h_i = h_i^*$ (Eigenwerte reell)
- $i \neq j$: entweder $h_i \neq h_j \rightsquigarrow h_i \neq h_j^* \rightsquigarrow \langle h_j|h_i\rangle = 0$
 oder $h_i = h_j$ (Entartung) $\rightsquigarrow h_i = h_j^* \rightsquigarrow \langle h_j|h_i\rangle$ unbestimmt \rightsquigarrow
 kann in $\{\lambda|h_i\rangle + \mu|h_j\rangle\}$ orthogonalisieren

Fazit: \exists ONB aus Eigenkets, vollständig falls H, H^\dagger auf ganz V definiert

j) Diagonalisierung hermitescher Operatoren

- gegeben H in einer ONB $\{|i\rangle\}$, gesucht: „Rotation“ U in eine Eigenbasis $\{|h_i\rangle\}$, dann $\exists U$ unitär, so dass $U^\dagger H U = H' = \text{diag}(h_i)$
- gegeben zwei hermitesche Operatoren H, G , die kommutieren: $[H, G] = 0$, dann gibt es eine *gemeinsame* Eigenbasis $\{|h_i, g_i\rangle\}$, d.h. $H|h_i, g_i\rangle = h_i|h_i, g_i\rangle$ und $G|h_i, g_i\rangle = g_i|h_i, g_i\rangle \quad \forall i$

Beweis: nehme an, dass G oder H nicht entartet ist (z.B. H), H -Eigenkets $H|h_i\rangle = h_i|h_i\rangle$
 $H|Gh_i\rangle = H \cdot G|h_i\rangle = G \cdot H|h_i\rangle = G \cdot h_i|h_i\rangle = h_i \cdot G|h_i\rangle = h_i|Gh_i\rangle$
 $\Rightarrow |Gh_i\rangle$ ist wie $|h_i\rangle$ ein H -Eigenket zum Eigenwert h_i
 H nicht entartet $\rightsquigarrow |Gh_i\rangle \propto |h_i\rangle \rightsquigarrow G|h_i\rangle = g_i|h_i\rangle$, schreibe fortan $|h_i\rangle := |h_i, g_i\rangle$

- ein Satz kommutierender hermitescher Operatoren kann simultan (mit *einem* U) diagonalisiert werden, d.h. die Eigenkets geben simultan Eigenwerte *aller* Operatoren

III Bewegung von Teilchen

a) unendlich viele Freiheitsgrade, Hilbertraum

bisher 2 Freiheitsgrade \rightarrow Zustandsraum \mathbb{C}^2 , können mehr haben $\rightarrow \{|i\rangle\}$ Basis $i = 1, \dots, d$
neu: d kann ∞ werden \rightarrow abzählbar: Basis $\{|i\rangle, i \in \mathbb{N}\}$
 \rightarrow überabzählbar: Basis $\{|x\rangle, x \in \mathbb{R}\}$

Beispiel: Orts- und Impulsmessung eines Teilchens in einer Dimension

etwa Ortsmessung: Wahrscheinlichkeit, das Teilchen im Intervall $[x, x + dx]$ zu finden

für $dx \rightarrow 0$ ist diese Wahrscheinlichkeit $\propto dx$ und demnach:

$$W_{[x, x+dx]}(|\psi\rangle) = w_x(|\psi\rangle)dx, \quad w_x \text{ ist die Wahrscheinlichkeitsdichte am Ort } x \quad (3.1)$$

nach bisherigen Regeln

$$w_x(|\psi\rangle) = |\langle x|\psi\rangle|^2, \quad \text{mit „Filterzustand“ } |x\rangle \text{ (keine Polarisation!)} \quad (3.2)$$

ist das Absolutquadrat einer (Wahrscheinlichkeitsdichten-) Amplitude

$$\psi(x) := \langle x|\psi\rangle \in \mathbb{C} \quad \text{„Wellenfunktion“} \quad (3.3)$$

Schreibweise $\langle x|\psi\rangle$ suggeriert Existenz eines Skalarprodukts

$$|\phi\rangle, |\psi\rangle \mapsto \langle\phi|\psi\rangle \in \mathbb{C}$$

auch im ∞ -dimensionalen Zustandsraum V , d.h. auch eine Bijektion $V \leftrightarrow V^*$ über die Konjugation

$$|\phi\rangle \xrightarrow{\dagger} |\phi\rangle^\dagger = \langle\phi|, \quad \langle\phi| \xrightarrow{\dagger} \langle\phi|^\dagger = |\phi\rangle$$

Basis-Darstellung:

endlich abzählbar überabzählbar

$$\langle\phi|\psi\rangle = \underbrace{\sum_{i=1}^d \langle\phi|i\rangle\langle i|\psi\rangle}_{=\sum_{i=1}^d \phi_i^* \psi_i} \longrightarrow \underbrace{\sum_{i=1}^{\infty} \langle\phi|i\rangle\langle i|\psi\rangle}_{=\sum_{i=1}^{\infty} \phi_i^* \psi_i} \longrightarrow \underbrace{\int_{\mathbb{R}} \langle\phi|x\rangle\langle x|\psi\rangle dx}_{=\int_{\mathbb{R}} \phi_i^*(x) \psi_i(x) dx} \quad (3.4)$$

neu bei $d = \infty$: \sum_i bzw. $\int dx$ muss konvergieren \rightarrow Einschränkungen an Zustände, somit V

Definition: ein Hilbertraum \mathcal{H} ist

- (i) ein Vektorraum über \mathbb{C} [linear]
- (ii) mit einem sesquilinearen Skalarprodukt [unitär]
- (iii) in dessen Norm jede Cauchy-Folge konvergiert [Vollständigkeit]
- (iv) und mit einer abzählbaren Basis [separabel]

Anmerkungen:

zu (iii): *Cauchy-Folge* $\{|\psi_n\rangle, n \in \mathbb{N}\}$ derart, dass $\forall \varepsilon > 0 \exists N \in \mathbb{N}$, so dass $|\langle\psi_l|\psi_m\rangle| < \varepsilon \quad \forall l, m \geq N$
Konvergenz heißt, dass Grenz-Ket $|\psi_\infty\rangle$ in \mathcal{H} liegt

zu (iv): \exists ONB $\{|i\rangle\}$, so dass \exists eindeutige Zerlegung $|\psi\rangle = \sum_i |i\rangle\langle i|\psi\rangle \quad \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}$
 (Mathematiker lassen auch überabzählbare Basen zu!)

Vorteil von \mathcal{H} : $V^* \simeq V$

Zentraler Satz (Spektraldarstellung)

Zu jedem selbstadjungierten (\rightarrow hermitesch, $\mathbb{D}(A) = \mathbb{D}(A^\dagger)$)¹ Operator A in \mathcal{H} gibt es eine Zerlegung

$$A = \sum_i |a_i\rangle a_i \langle a_i| + \int_{S_{\text{kont}}} |\alpha\rangle \alpha \langle\alpha| d\alpha \quad (S_{\text{kont}} = \text{„kontinuierliches Spektrum“}) \quad (3.5)$$

mit $A|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle, a_i \in S_{\text{diskret}}$ bzw. $A|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle, \alpha \in S_{\text{kont}}$, wobei das Spektrum $S_{\text{diskret}} \cup S_{\text{kont}} \subseteq \mathbb{R}$

Mathematik: $\alpha, |\alpha\rangle$ sind keine Eigenwerte bzw. Eigenkets, es existiert nur $|\alpha\rangle\langle\alpha| d\alpha$

¹ \mathbb{D} : Definitionsbereich

$$R(A) = (z\mathbf{1} - A)^{-1} \rightarrow \text{Spektrum} = \{ \text{Singularitäten von } R \}$$

Jedes solche A ist selbstadjungiert. Eigenkets von A taugen nur als vollständiges Orthonormalsystem (VONS) von \mathcal{H} , falls $S_{\text{kont}} = \emptyset$. **Vorsicht:** $|\alpha\rangle \notin \mathcal{H}$!

Beispiel: $L_2^{\text{per}}([0, 1]) = \{ \text{quadratintegrale periodische komplexe Funktionen auf } [0, 1] \}$

$$\text{Skalarprodukt: } (f, g) \mapsto \int_0^1 f^*(y)g(y) dy =: \langle f|g \rangle$$

$$\text{Norm: } |f|^2 = \int_0^1 |f(y)|^2 dy < \infty \quad \forall f$$

$$\text{Basis: } \{e_n, n = 0, 1, 2, \dots\} \text{ mit } e_0(y) = 1 \text{ bzw. } e_{n>0}(y) = \sqrt{2} \cdot \sin n\pi y \rightarrow \int_0^1 e_m^* e_n dy = \delta_{mn}$$

$$\text{Vollständigkeit: } \sum_{n=0}^{\infty} e_n(x)e_n^*(y) = \delta(x-y) \quad \text{„Zerlegung der Eins“}$$

$$\text{Entwicklung: } f(y) = \sum_n e_n(y)f_n \text{ mit } f_n = \int_0^1 e_n^*(y)f(y) dy$$

Nachteil des Hilbertraums als Zustandsraum: „Eigenvektoren“ zum kontinuierlichen Teil des Spektrums eines selbstadjungierten Operators sind nicht normierbar: $\langle \alpha|\alpha\rangle = \infty$, d.h. $|\alpha\rangle \notin \mathcal{H}$. Bezeichnung: „uneigentliche Kets“.

Beispiel: Orts-„Eigenbasis“ auf \mathbb{R} : Ortsmessung \leftrightarrow selbstadjungierter Operator X mit „Eigenkets“ $|x\rangle$ zu jedem reellen Messwert x :

$$X|x\rangle = x|x\rangle \quad x \in \mathbb{R} \quad (3.6)$$

Betrachte $\mathcal{H} = L_2(\mathbb{R})$, d.h. $|\psi\rangle$ ist quadratintegrale Funktion, $\langle \psi|$ die komplex-konjugierte Funktion. Nehme $|x\rangle \notin L_2(\mathbb{R})$ hinzu, dann korrespondiert über das Skalarprodukt dazu auch ein $\langle x|$:

$$\begin{aligned} \psi^*(x) = \langle x|\psi\rangle^* &= \langle \psi|x\rangle = \int dy \psi^*(y)f_x(y) & f_x = \text{Fkt., die zu } |x\rangle \text{ gehört} \\ \curvearrowright f_x(y) = \delta(y-x) &\curvearrowright f_x = \delta(\cdot - x) \end{aligned}$$

Norm:

$$\langle x|x\rangle = |f_x|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dy |f_x(y)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dy [\delta(y-x)]^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dy \delta(y-x)\delta(0) = \delta(0) = \infty$$

außerdem enthält \mathcal{H} auch unstetige und singular quadratintegrale Funktionen ψ , d.h. $\langle x|\psi\rangle$ ist nicht überall eindeutig oder endlich.

Fazit: weder $|x\rangle$ noch $\langle x|$ sind in \mathcal{H} . Auswege:

(a) Verkleinere auf $\mathcal{V} \subset \mathcal{H}$, z.B. fordere dass ψ stetig, diffbar., etc. $\curvearrowright \mathcal{V}^* \supset \mathcal{H}$, enthält $|x\rangle$, weil dann $\langle x|\psi\rangle = \int dy \delta(y-x)\psi(y) = \psi(x)$ eindeutig und endlich. \odot

Aber: $\langle x| \notin \mathcal{V} \rightsquigarrow \odot$

(b) Vergrößere auf $\mathcal{V} \supset \mathcal{H}$, z.B. lasse Distributionen zu. $\curvearrowright \mathcal{V}^* \subset \mathcal{H}$, enthält kein $\langle x|$. \odot

Dafür haben wir $|x\rangle \in \mathcal{V} \rightsquigarrow \odot$.

mathematisch sauber: entweder $\mathcal{V}^* \supset \mathcal{H} \supset \mathcal{V}$, oder $\mathcal{W}^* \subset \mathcal{H} \subset \mathcal{W}$ (Stichwort: „Gelfandsche Raumtripel“)

Wie gehen wir mit diesem Problem um?

Benutze $|x\rangle, \langle x|$ als praktisches formales Konzept. Im Notfall können wir immer mit „Wellenpaketen“ regularisieren:

$$\begin{aligned} |x, \varepsilon\rangle : \quad \langle y|y, \varepsilon\rangle &= f_{x, \varepsilon}(y) = \frac{1}{\varepsilon\sqrt{\pi}} e^{-\frac{(y-x)^2}{\varepsilon^2}} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \delta(y-x) \\ \langle x, \varepsilon| : \quad f \mapsto \langle x, \varepsilon|f\rangle &= \frac{1}{\varepsilon\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-\frac{(y-x)^2}{\varepsilon^2}} f(y) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} f(x) \\ \langle x_1, \varepsilon|x_2, \varepsilon\rangle &= \frac{1}{\varepsilon^2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-\frac{(y-x_1)^2}{\varepsilon^2}} e^{-\frac{(y-x_2)^2}{\varepsilon^2}} = \frac{1}{\varepsilon\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x_1-x_2)^2}{2\varepsilon^2}} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \delta(x_1-x_2) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \langle x, \varepsilon | x, \varepsilon \rangle = ||x, \varepsilon\rangle|^2 = \frac{1}{\varepsilon \sqrt{2\pi}} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \infty$$

Wir rechnen mit kontinuierlicher „Basis“ $\{|x\rangle, x \in \mathbb{R}\}$.

$$\text{Orthonormiertheit : } \quad \langle x_1 | x_2 \rangle = \delta(x_1 - x_2) \quad \text{„delta-normiert“} \quad (3.7)$$

$$\text{Vollständigkeit : } \quad \int dx |x\rangle \langle x| = \mathbb{1} \quad \text{Zerlegung der Eins} \quad (3.8)$$

$$\Rightarrow |\psi\rangle = \int dx |x\rangle \langle x|\psi\rangle = \int dx |x\rangle \psi(x) \quad \text{Test : } \langle y|\psi\rangle = \int dx \langle y|x\rangle \psi(x) = \int dx \delta(y-x) \psi(x) = \psi(y) \quad \checkmark$$

$$\langle \phi|\psi\rangle = \int dx \langle \phi|x\rangle \langle x|\psi\rangle = \int dx \phi^*(x) \psi(x) \quad \checkmark \quad (L_2 - \text{SKP})$$

$$|\psi\rangle = \sum_i |i\rangle \langle i|\psi\rangle = \int dx |x\rangle \langle x|\psi\rangle = \int dx |x\rangle \psi(x)$$

Basiswechsel: von $\{|x\rangle\}$ zu $\{|i\rangle\}$ mit $\langle x|i\rangle =: f_i(x)$:

$$\psi_i = \langle i|\psi\rangle \stackrel{(3.8)}{=} \int dx \langle i|x\rangle \langle x|\psi\rangle = \int dx f_i^*(x) \psi(x) \quad (3.9)$$

von $\{|i\rangle\}$ zu $\{|x\rangle\}$:

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle = \sum_i \langle x|i\rangle \langle i|\psi\rangle = \sum_i f_i(x) \psi_i \quad (3.10)$$

(3.9) und (3.10): Entwicklung von $\psi(x)$ nach ONB $\{f_i(x)\}$.

Basiswechsel von $\{|x\rangle\}$ zu $\{|k\rangle\}$ mit $\langle x|k\rangle =: f_k(x)$:

$$\tilde{\psi}(k) = \langle k|\psi\rangle = \int dx \langle k|x\rangle \langle x|\psi\rangle = \int dx f_k^*(x) \psi(x) \quad (3.11)$$

und zurück:

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle = \int dk \langle x|k\rangle \langle k|\psi\rangle = \int dk f_k(x) \tilde{\psi}(k) \quad (3.12)$$

wichtig: Zustand $|\psi\rangle$ ist immer der gleiche Vektor im \mathcal{H} , nur dargestellt durch Wellenfkt. $\psi(x)$ in einer, oder $\tilde{\psi}(k)$ in einer anderen Basis.

b) Operatoren im Hilbertraum \mathcal{V}

linearer Operator $\Omega : \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{V}$ mit $|\psi\rangle \mapsto \Omega|\psi\rangle$.

in Ortseigenbasis $\{|x\rangle\}$:

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle \xrightarrow{\Omega} \langle x|\Omega|\psi\rangle = \int dy \langle x|\Omega|y\rangle \langle y|\psi\rangle =: \int dy \Omega(x, y) \psi(y) \quad (3.13)$$

\leadsto allg. homogene lineare Transformation von $\psi(x)$ $\langle x|\Omega|y\rangle =: \Omega(x, y)$ Integralkern

Eigenwertproblem: $\Omega|\omega\rangle = \omega|\omega\rangle$ in Ortseigenbasis:

$$\int dy \langle x|\Omega|y\rangle \langle y|\omega\rangle = \omega \langle x|\omega\rangle \quad \leftrightarrow \quad \int dy \Omega(x, y) f_\omega(y) = \omega f_\omega(x)$$

Achtung: Definitionsbereich von Ω beeinflusst das Spektrum $\{\omega\}$,

z.B.: $L_2(\mathbb{R}) \neq L_2^{\text{period.}}([0, 1]) \neq L_2^{\text{Dirichlet}}([0, 1])$.

in diskreter Basis $\{|i\rangle\}$:

$$\psi_i = \langle i|\psi\rangle \xrightarrow{\Omega} \langle i|\Omega|\psi\rangle = \sum_j \langle i|\Omega|j\rangle \langle j|\psi\rangle =: \sum_j \Omega_{ij} \psi_j \quad (3.14)$$

Zusammenhang per Basiswechsel:

$$\left. \begin{aligned} \Omega_{ij} &= \langle i|\Omega|j\rangle = \int dx \int dy \langle i|x\rangle \langle x|\Omega|y\rangle \langle y|j\rangle = \int dx \int dy f_i^*(x) \Omega(x,y) f_j(x) \\ \Omega(x,y) &= \langle x|\Omega|y\rangle = \sum_i \sum_j \langle x|i\rangle \langle i|\Omega|j\rangle \langle j|y\rangle = \sum_i \sum_j f_i(x) \Omega_{ij} f_j^*(y) \end{aligned} \right\} \quad (3.15)$$

Wichtige Operatoren auf $L_2(\mathbb{R})$:

- Identität: $\mathbb{1} = Id : \mathbb{1}|\psi\rangle = |\psi\rangle$

$$\mathbb{1}_{ij} = \langle i|\mathbb{1}|j\rangle = \delta_{ij}; \quad \mathbb{1}(x,y) = \langle x|\mathbb{1}|y\rangle = \delta(x-y) \quad (3.16)$$

- Multiplikationsoperator = Ortsoperator X : $X|x\rangle = x|x\rangle$ auf Ortseigenzustände

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle \xrightarrow{X} \langle x|X|\psi\rangle = \langle x|X^\dagger|\psi\rangle = x\langle x|\psi\rangle = x \cdot \psi(x) = \check{\psi}(x) \quad \text{mit } \check{\psi} = x \cdot \psi$$

$$\langle x|X|y\rangle = \langle x|y\rangle y = \delta(x-y) \cdot y = x \cdot \delta(x-y) \quad (3.17)$$

$$\langle \phi|X|\psi\rangle = \int dx \int dy \langle \phi|x\rangle \langle x|X|y\rangle \langle y|\psi\rangle = \int dx \phi^*(x) x \psi(x) \quad (3.18)$$

- Ableitungsoperator D , $K := -iD$ $D : |\psi\rangle \mapsto |\psi'\rangle$

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle \xrightarrow{D} \langle x|D|\psi\rangle = \langle x|\psi'\rangle = \left(\frac{d}{dx}\psi\right)(x) \quad (3.19)$$

$$\begin{aligned} &\sim \int dy \langle x|D|y\rangle \langle y|\psi\rangle = \int dy \delta(x-y) \frac{d}{dy} \langle y|\psi\rangle \\ &\quad \sim \langle x|D|y\rangle = \delta(x-y) \frac{d}{dy} \end{aligned} \quad (3.20)$$

$$\langle \phi|D|\psi\rangle = \int dx \phi^*(x) \frac{d}{dx} \psi(x) \quad (3.21)$$

X existiert nicht immer, z.B. nicht auf $L_2^{\text{periodisch}}([0,1])$

D existiert nicht immer, z.B. nicht auf $C^0([0,1])$

D ist nicht hermitesch:

$$\begin{aligned} \langle \psi|D^\dagger|\phi\rangle &= \langle \phi|D|\psi\rangle^* = \left(\int dx \phi^*(x) \psi'(x)\right)^* \\ &= \int dx \psi'^*(x) \phi(x) \stackrel{\text{P.I.}}{=} \psi^* \phi \Big|_{\text{Rand}} - \int dx \psi^* \phi'(x) \\ &= \psi^* \phi \Big|_{\text{Rand}} - \langle \psi|D|\phi\rangle \end{aligned}$$

falls V so gewählt ist, dass die Randterme Null sind, ist D antihermitesch

\leadsto definiere $K := -iD$ ist hermitesch auf $L_2^{\text{periodisch}}$ oder $L_2^{\text{Dirichlet}}$ oder $L_2(\mathbb{R})$

Spektrum von X ist bekannt, nämlich \mathbb{R}

Spektrum von K ?

Eigenwertproblem von K auf $L_2^{\text{periodisch}}([0,1])$: $-i \frac{d}{dx} f_k(x) = k f_k(x)$ mit $f_k(x+L) = f_k(x)$

Lösung:

$$S(K) = \{k_n = \frac{2\pi n}{L}, n \in \mathbb{Z}\}, \quad f_n(x) \equiv f_{k_n}(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{\frac{2\pi i n x}{L}} = \langle x|n\rangle \quad (3.22)$$

Eigenwertproblem von K auf $L_2(\mathbb{R})$: wie oben, mit $L \rightarrow \infty$

Lösung:

$$S(K) = \{k \in \mathbb{R}\}, f_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} = \langle x|k \rangle \quad (3.23)$$

Die k -Eigenkets $|k\rangle$ sind nicht normierbar:

$$\langle k_1|k_2 \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ik_1x} e^{ik_2x} = \delta(k_1 - k_2) \quad (3.24)$$

Übergang $\{|x\rangle$ -Basis zur $\{|k\rangle$ -Basis auf \mathbb{R} :

$$\begin{aligned} \langle x|\psi \rangle &= \psi(x) \\ \langle k|\psi \rangle &= \int dx \langle k|x \rangle \langle x|\psi \rangle = \int dx f_k^*(x) \psi(x) = \int \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx} \psi(x) =: \tilde{\psi}(k) \end{aligned} \quad (3.25)$$

Fourier-Transformation verbindet X -Eigenbasis mit K -Eigenbasis:

$$\begin{aligned} \langle x|X|\psi \rangle &= x \langle x|\psi \rangle & \langle x|K|\psi \rangle &= -i \frac{d}{dx} \langle x|\psi \rangle \\ \langle k|X|\psi \rangle &= i \frac{d}{dk} \langle k|\psi \rangle & \langle k|K|\psi \rangle &= k \langle k|\psi \rangle \\ X &= \int_{\mathbb{R}} dx |x\rangle x \langle x| & K &= \int_{\mathbb{R}} dk |k\rangle k \langle k| \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle \phi|X|\psi \rangle &= \int dx \phi^*(x) x \psi(x) = \int dk \tilde{\phi}^*(k) i \frac{d}{dk} \tilde{\psi}(k) \\ \langle \phi|K|\psi \rangle &= - \int dx \phi^*(x) i \frac{d}{dx} \psi(x) = \int dk \tilde{\phi}^*(k) k \tilde{\psi}(k) \end{aligned} \quad (3.26)$$

Kommutator: $[X, K]$:

$$\begin{aligned} ([X, K]\psi)(x) &= (XK\psi)(x) - (KX\psi)(x) = x \left(-i \frac{d}{dx} \psi \right)(x) - \left(-i \frac{d}{dx} \right) (x\psi(x)) \\ &= -ix\psi'(x) + ix\psi'(x) + i\psi(x) = i\psi(x) \\ &\Rightarrow [X, K] = i\mathbb{1} \end{aligned} \quad (3.27)$$

Interpretation:

ebene Welle mit Wellenzahl \hat{k} fest, $p = \hbar\hat{k}$

$$\begin{aligned} \langle x|\psi(t=0) \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\hat{k}x} = \psi(x, t=0) = \langle x|\hat{k} \rangle \\ \Rightarrow \langle x|\psi(t) \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\hat{k}x - i\omega t} = \langle x|\hat{k} \rangle e^{-i\omega t} \quad \text{in } x\text{-Basis} \\ \langle k|\psi(t) \rangle &= \delta(k - \hat{k}) e^{-i\omega t} = \tilde{\psi}(k, t) = \langle k|\hat{k} \rangle e^{-i\omega t} \quad \text{in } k\text{-Basis} \\ P &:= \hbar K = -i\hbar D \end{aligned} \quad (3.28)$$

heißt Impulsoperator, weil für ebene Welle

$$\begin{aligned} \langle x|P|\psi(t) \rangle &= \frac{\hbar}{i} \langle x|D|\psi(t) \rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \langle x|\psi(t) \rangle = \hbar k \langle x|\psi(t) \rangle = p \langle x|\psi(t) \rangle \\ &\leadsto [X, P] = i\hbar\mathbb{1} \quad \text{kanonische Vertauschungsrelation} \end{aligned} \quad (3.29)$$

c) Das freie Teilchen

klassisch:

$$\text{Energie-Impuls-Beziehung} \begin{cases} \text{Licht} & E(\vec{p}) = c|\vec{p}| \\ \text{Materie} & E(\vec{p}) = \sqrt{mc^2 + \vec{p}^2 c^2} \quad \text{relativistisch} \\ & E(\vec{p}) = \cancel{mc^2} + \frac{\vec{p}^2}{2m} + \mathcal{O}(c^{-2}) \quad \text{nichtrelativistisch} \end{cases}$$

in einer Dimension $\vec{p} \rightarrow p$

Eigenzustand $|k\rangle$ zu k ist Materiewelle mit $p = \hbar k$ und $E(p) = \frac{p^2}{2m}$

Zeitabhängigkeit: $e^{i\omega t} = e^{-\frac{i}{\hbar} E(p)t}$

Allgemeiner Zustand $|\psi\rangle$ ist Superposition von $|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{\hbar}} |k\rangle$, zu allen Zeiten:

$$|\psi(t)\rangle = \int dp |p\rangle \langle p|\psi(t)\rangle = \underbrace{\int dp |p\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E(p)t} \langle p|\psi(0)\rangle}_{U(t)} =: U(t) |\psi(0)\rangle \quad (3.30)$$

Normierung:

$$\begin{aligned} \langle p|p'\rangle &\stackrel{!}{=} \delta(p-p') \stackrel{p=\hbar k}{=} \frac{1}{\hbar} \delta(k-k') = \frac{1}{\hbar} \langle k|k'\rangle \leadsto |p\rangle = \frac{1}{\sqrt{\hbar}} |k\rangle \\ P|p\rangle &= p|p\rangle, \langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} px} \end{aligned} \quad (3.31)$$

Damit ist die Wellenfunktion:

$$\psi(x,t) = \langle x|\psi(t)\rangle = \int dp \langle x|p\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E(p)t} \langle p|\psi(0)\rangle = \int \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} (px - E(p)t)} \tilde{\psi}(p,0) \quad (3.32)$$

Differentialgleichung für $|\psi(t)\rangle$ ist die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung:

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t |\psi(t)\rangle &\stackrel{(3.30)}{=} \int dp |p\rangle E(p) e^{-\frac{i}{\hbar} E(p)t} \langle p|\psi(0)\rangle = \int dp E(p) |p\rangle \langle p|\psi(t)\rangle \\ &= E(P) |\psi(t)\rangle := H |\psi(t)\rangle \end{aligned} \quad (3.33)$$

mit dem Hamilton-Operator H aus der Hamilton-Funktion $h(x,p)$:

$$H = h(X, P) = \frac{P^2}{2m} + V(X) \quad (3.34)$$

Hier für $V = 0$: $H = \frac{P^2}{2m} = E(P)$

$$\begin{aligned} \leadsto i\hbar \partial_t \psi(x,t) &= i\hbar \partial_t \langle x|\psi(t)\rangle \stackrel{(3.33)}{=} \langle x|H|\psi(t)\rangle \\ &= \frac{1}{2m} \langle x|P^2|\psi(t)\rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \langle x|K^2|\psi(t)\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \langle x|\psi(t)\rangle \\ \text{d.h.} \quad i\hbar \partial_t \psi(x,t) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \psi(x,t) \end{aligned} \quad (3.35)$$

Schrödinger-Gleichung = Diffusionsgleichung in imaginärer Zeit.

Eigenschaften:

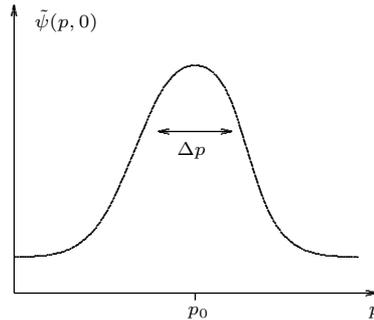
1. linear in $\psi \leftrightarrow$ Superpositionsprinzip
2. homogen $\leftrightarrow \psi$ -Normierung ist frei
3. 1. Ordnung in $t \rightarrow \psi(x,t)$ determiniert aus Anfangswert $\psi(x,0)$

4. ebene Wellen sind Lösungen bei $V \equiv 0$

$V \equiv 0$: Lösung ist wegen $E(p) = \frac{p^2}{2m}$

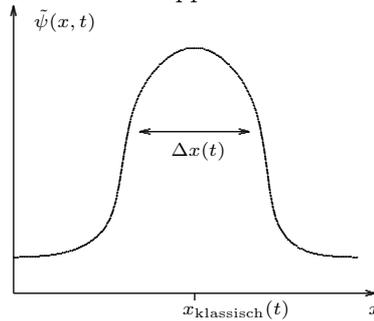
$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} \left(px - \frac{p^2}{2m} t \right)} \tilde{\psi}(p, 0)$$

für ein Anfangsprofil $\tilde{\psi}(p, 0)$ in den Impulsen. Diese Lösung nennt man *Wellenpaket*.
einfachste Situation: Anfangsprofil im Impulsraum $\tilde{\psi}(p, 0) = |\tilde{\psi}(p, 0)| e^{i\alpha(p)}$:



Analyse des p -Integrals $\leadsto \psi(x, t)$ ist konzentriert um $x_{\text{klassisch}}(t) = \frac{p_0}{m} t - \hbar \alpha'(p_0) =: vt + x_0$

Schnappschuss:



mit $|\Delta x \cdot \Delta p| \gtrsim \pi \hbar$ Unschärfe.

Schrödingergleichung:

$$i\hbar \partial_t |\psi\rangle = H |\psi\rangle \quad \leadsto \quad \text{Lösung: } |\psi(t)\rangle = U(t) |\psi(0)\rangle$$

falls H zeitunabhängig: $U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} t H}$

freies Teilchen: $H = \frac{p^2}{2m}$

in der Ortsbasis $\{|x\rangle\}$: $\langle x|\psi(t)\rangle \equiv \psi(x, t)$

$$i\hbar \partial_t \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \psi(x, t)$$

Berechnungsarten:

- $\psi(x, t) = \int \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} \left(px - \frac{p^2}{2m} t \right)} \tilde{\psi}(p, 0)$

- $\psi(x, t) = \int dy \underbrace{\langle x|U(t)|y\rangle}_{U(t;x,y)} \psi(y, 0)$

mit $U(t; x, y) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} e^{\frac{im(x-y)^2}{2\hbar t}}$

- $\psi(x, t) = e^{-\frac{i\hbar t}{2m}\partial_x^2}\psi(x, 0)$

Welches Wellenpaket $\psi(x)$ minimiert die Unschärfe $\Delta X \Delta P$? Zeitentwicklung?
Unschärfe folgt aus einer Vertauschungsrelation!

Beweis: (allgemein für zwei hermitesche Operatoren A, B)

definiere $\hat{A} := A - \langle A \rangle \mathbb{1}$ und $\hat{B} := B - \langle B \rangle \mathbb{1}$, so dass $\langle \hat{A} \rangle = \langle \hat{B} \rangle = 0$, $\langle \hat{A}^2 \rangle = (\Delta A)^2$, $\langle \hat{B}^2 \rangle = (\Delta B)^2$.

Achtung: Dies hängt vom Zustand $|\psi\rangle$ ab, da $\langle A \rangle \equiv \langle \psi | A | \psi \rangle$ ist.

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

Trick: betrachte Schar von Kets $|\Phi(\lambda)\rangle := (\hat{A} + i\lambda\hat{B})|\psi\rangle$ für $|\psi\rangle$ fest und $\lambda \in \mathbb{R}$.

$$\begin{aligned} \text{Es gilt: } 0 \leq \langle \Phi(\lambda) | \Phi(\lambda) \rangle &= \langle \psi | (\hat{A} - i\lambda\hat{B})(\hat{A} + i\lambda\hat{B}) | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | \hat{A}^2 + i\lambda\hat{A}\hat{B} - i\lambda\hat{B}\hat{A} + \lambda^2\hat{B}^2 | \psi \rangle \\ &= (\Delta A)^2 + \lambda^2(\Delta B)^2 + i\lambda\langle [A, B] \rangle \\ &\quad \text{reelles quadratisches Polynom in } \lambda \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \curvearrowright \text{ Diskriminante ist } \leq 0 &\quad \curvearrowright \quad (i\langle [A, B] \rangle)^2 - 4(\Delta A)^2(\Delta B)^2 \leq 0 \\ &\quad \curvearrowright \quad (\Delta A)(\Delta B) \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle| \quad \forall |\psi\rangle \end{aligned} \quad (3.36)$$

allgemeine Unschärferelation

minimale Unschärfe bei Sättigung der Ungleichung, d.h. für einen Zustand $|\psi\rangle$ mit der Bedingung

$$\begin{aligned} 0 &= \langle \Phi(\lambda) | \Phi(\lambda) \rangle \Leftrightarrow |\Phi(\lambda)\rangle = 0 \Leftrightarrow (\hat{A} + i\lambda\hat{B})|\psi\rangle = 0 \\ \curvearrowright \quad |\hat{A}|\psi\rangle &= \lambda|\hat{B}|\psi\rangle \quad \curvearrowright \quad \langle \psi | \underbrace{\hat{A}^2}_{=(\Delta A)^2} | \psi \rangle = \lambda^2 \langle \psi | \underbrace{\hat{B}^2}_{=(\Delta B)^2} | \psi \rangle \quad \curvearrowright \quad \lambda = \frac{\Delta A}{\Delta B} \\ \curvearrowright \quad \frac{\hat{A}}{\Delta A} |\psi\rangle &+ i \frac{\hat{B}}{\Delta B} |\psi\rangle = 0 \end{aligned} \quad (3.37)$$

bestimmt „minimales Wellenpaket“ $|\psi\rangle$ für gegebene Operatoren A, B

Achtung: $\Delta A, \Delta B$ hängen auch von $|\psi\rangle$ ab.

Für diese $|\psi\rangle$ gilt $\Delta A \cdot \Delta B = \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle|$

Zurück zu $A = X, B = P, [A, B] = i\hbar\mathbb{1}$

$$\text{Unschärfe (3.36)} \Rightarrow \Delta X \cdot \Delta P \geq \frac{\hbar}{2} \quad (3.38)$$

$$\text{minimales Paket (3.37)} \Rightarrow \frac{\hat{X}}{\Delta X} |\psi\rangle + i \frac{\hat{P}}{\Delta P} |\psi\rangle = 0$$

Projektion in den Ortsraum

$$\text{Ortseigenbasis: } \curvearrowright \quad \langle x | \frac{X - \langle X \rangle}{\Delta X} | \psi \rangle + i \langle x | \frac{P - \langle P \rangle}{\Delta P} | \psi \rangle$$

Verwende $x_0 := \langle X \rangle, p_0 := \langle P \rangle$.

$$\curvearrowright \quad \frac{x - x_0}{\Delta X} \psi(x) + i \frac{\hbar/i \partial_x - p_0}{\Delta P} \psi(x) = 0$$

minimales Wellenpaket: $\Delta X \cdot \Delta P = \frac{\hbar}{2}$

$$\curvearrowright \quad \hbar \partial_x \psi(x) = i p_0 \psi(x) - \frac{\Delta P}{\Delta X} (x - x_0) \psi(x) = \left(i p_0 - \frac{\hbar(x - x_0)}{2(\Delta X)^2} \right) \psi(x)$$

Lösung der Differentialgleichung:

$$\psi(x) = N \cdot e^{\frac{i}{\hbar} p_0 x - \frac{(x-x_0)^2}{4(\Delta X)^2}} \quad \text{„minimales Gauß-Paket“} \quad (3.39)$$

Normierung: $1 = \int dx |\psi|^2 \leadsto N = [2\pi(\Delta X)^2]^{-\frac{1}{4}}$

Phase frei: man kann $p_0 x \rightarrow p_0(x - x_0)$ durch Phase $e^{-\frac{i}{\hbar} p_0 x_0}$ verschieben.

Eigenschaften dieses minimalen Paketes:

(i) $\langle \psi | X | \psi \rangle = x_0$; $\langle \psi | P | \psi \rangle = p_0$; $\langle \psi | (x - x_0)^2 | \psi \rangle = (\Delta X)^2$

(ii) $\langle p | \psi \rangle \equiv \tilde{\psi}(p) = N' \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} x_0 p - \frac{(\Delta X)^2}{\hbar^2} (p - p_0)^2}$
wieder Gauß-Paket mit $\Delta P = \frac{\hbar}{2\Delta X}$

(iii) $w(x) = |\psi(x)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta X} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2(\Delta X)^2}}$

(iv) Zeitliche Entwicklung?

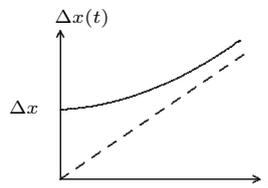
$|\psi(0)\rangle =$ Gaußsches Minimal-Paket $(x_0, p_0, \Delta X)$

$$\psi(x, t) = [2\pi(\Delta X)^2(t)]^{-\frac{1}{4}} e^{\frac{i}{\hbar} p_0 x - \frac{(x-x_0(t))^2}{4(\Delta X)^2(t)}} \quad (3.40)$$

mit $\langle P \rangle(t) = p_0$, $\Delta P(t) = \frac{\hbar}{2\Delta X} = const$, $\langle X \rangle(t) = x_0(t) = x_0 + \frac{p_0}{m} t$

$$(\Delta X)^2(t) = (\Delta X)^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2(\Delta X)^2} \quad (3.41)$$

\Rightarrow nicht-minimales Paket für $t > 0$ „Zerfließen des Wellenpaketes“



Zwei Zahlenbeispiele

betrachte Objekt mit Masse m , lokalisiere es im Ort auf $\Delta x \approx d$ („Größe“)

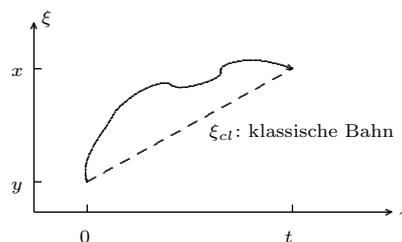
Abschätzung: $\Delta p \sim \frac{\hbar}{2\Delta x}$; $\Delta V \sim \frac{\Delta P}{m} \leadsto \Delta x(t) \stackrel{t \text{ groß}}{\sim} t \cdot \Delta V \sim \frac{\hbar t}{2m\Delta x}$

(a) Staubkorn: $m = 10^{-15} \text{ kg}$ $d \approx 1 \mu\text{m}$ $\leadsto \Delta x(650\text{a}) \approx 1 \text{ mm}$

(b) Elektron: $m = 10^{-30} \text{ kg}$ $d \approx 10^{-5} \text{ cm}$ $\leadsto \Delta x(1\text{s}) \approx 1 \text{ km}$

d) Summe über Pfade

Der Propagator $U(t)$ kann ausgedrückt werden durch die Wirkung S der klassischen Teilchenbahn. Betrachte freies klassisches Teilchen, dass sich von $(y, 0)$ nach (x, t) entlang einer Bahn $\xi(\tau)$ bewege.



berechne Wirkung

$$S[\xi|y, 0; x, t] = \int_0^t d\tau L(\xi, \dot{\xi}) = \int_0^t d\tau \frac{m}{2} \dot{\xi}^2$$

klassische Bahn

$$\ddot{\xi}_{cl} = 0 \quad \leadsto \quad \dot{\xi}_{cl} = v = \frac{x-y}{t} \quad \leadsto \quad \xi_{cl}(\tau) = y + \frac{x-y}{t} \cdot \tau$$

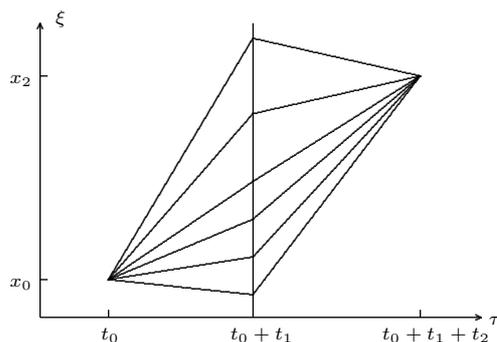
$$\text{Wert von } S_{cl}(y, 0; x, t) := S[\xi_{cl}|y, 0; x, t] = \frac{m}{2} \int_0^t d\tau \left(\frac{x-y}{t} \right)^2 = \frac{m(x-y)^2}{2t}$$

Wir hatten gefunden

$$\langle x|U(t)|y \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} e^{\frac{i m (x-y)^2}{2 \hbar t}} = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} e^{\frac{i}{\hbar} S_{cl}(y, 0; x, t)} \quad (3.42)$$

\leadsto Ortsabhängigkeit gegeben durch Phasenfaktor mit Phase = $\frac{i}{\hbar}$ (Wirkung der klassischen Teilchenbahn).
Zerlegung des Propagators über seine Kompositionseigenschaft $U(t_2) \cdot U(t_1) = U(t_1 + t_2)$

$$\leadsto \langle x_2|U(t_1 + t_2)|x_0 \rangle = \langle x_2|U(t_2) \cdot U(t_1)|x_0 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \langle x_2|U(t_2)|x_1 \rangle \langle x_1|U(t_1)|x_0 \rangle$$



\leadsto Wahrscheinlichkeitsamplitude von (x_0, t_0) nach $(x, t) = (x_2, t_0 + t_1 + t_2)$ ist die „Summe“ ($\int dx$) aller Amplituden

$$(x_0, t_0) \longrightarrow (x_1, t_0 + t_1) \longrightarrow (x, t)$$

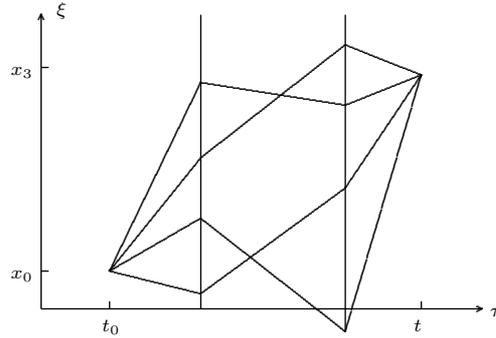
über beliebige Zwischenstopps x bei $\tau = t_0 + t_1$

\leadsto Amplitude mit Zwischenstopps = Produkt der „Stück-Amplituden“

$$\begin{aligned} \leadsto \text{Phase} &= \frac{1}{\hbar} (S_{cl}(x_0, t_0; x_1, t_0 + t_1) + S_{cl}(x_1, t_0 + t_1; x_2, t_0 + t_1 + t_2)) \\ &= \frac{1}{\hbar} S_2(x_0, t_0; x_2, t_0 + t_1 + t_2) \text{ für speziellen 2-stückigen Weg über } (x, t_0 + t_1) \end{aligned}$$

Diese Wegaufspaltung lässt sich nun beliebig iterieren

$$\langle x_3|U(t_1 + t_2 + t_3)|x_0 \rangle = \int dx_1 \int dx_2 \underbrace{\langle x_3|U(t_3)|x_2 \rangle \langle x_2|U(t_2)|x_1 \rangle \langle x_1|U(t_1)|x_0 \rangle}_{\text{Wirkung von Dreistückigem Weg } \sim e^{i/\hbar \cdot S_3(x_0, t_0; x, t)}}$$



$$\langle x|U(t)|y\rangle \propto \sum_{\text{Pfade } \xi} e^{\frac{i}{\hbar}S[\xi|y,0;x,t]} = \langle x|e^{\frac{i}{\hbar}tH}|y\rangle \quad (3.43)$$

Pfadintegraldarstellung des Propagators

Feynman-Integral

$$\text{Notation: } \sum_{\text{Pfade } \xi} \longrightarrow \int_y^x \mathcal{D}\xi(t)$$

IV Hamilton-Formalismus

a) Postulate

- P I. Den Observablen eines physikalischen Systems entsprechen die selbstadjungierten Operatoren Ω in einem Hilbertraum. Die möglichen Messwerte bei Einzelmessung an einem physikalischen System sind bestimmt durch das Spektrum Ω .
- P II. Die Operatoren, die den kartesischen Orts- und Impulskordinaten eines Teilchens zugeordnet sind, genügen der heisenbergschen Vertauschungsrelation:

$$[Q_j, Q_k] = 0 = [P_j, P_k], \quad [Q_j, P_k] = i\hbar\delta_{jk}\mathbf{1} \quad (4.1)$$

Kommentare:

- klassisch $\omega(q, p) \longleftrightarrow$ Quantentheorie $\Omega = \omega(q \rightarrow Q, p \rightarrow P)$,
i. A. nicht eindeutig, z. B. $\omega = qp^2 \longrightarrow Q_1 = \frac{1}{2}(QP^2 + P^2Q)$ oder $Q_2 = PQP$

- P III. Die Quantentheorie gibt quantitative Vorhersagen über das Verhalten von Gesamtheiten von physikalischen Systemen. Über das Ergebnis einer Messung an den Systemen der Gesamtheit sind (i. A.) nur Wahrscheinlichkeitsvorhersagen möglich. Der Zustand einer quantenmechanischen Gesamtheit zu einer festen Zeit ist zu beschreiben durch einen Dichteoperator

$$\rho = \sum_i p_i |i\rangle\langle i|, \quad (4.2)$$

wobei die $|i\rangle\langle i|$ Orthogonalprojektoren in \mathcal{H} sind und $p_i \in \mathbb{R}$ mit $0 \leq p_i \leq 1, \sum_i p_i = 1$. Der Erwartungswert $\langle \Omega \rangle$ für die Messung der Observablen Ω in dem so charakterisierten Zustand p ist

$$\langle \omega \rangle = \text{tr}(\rho\Omega) = \sum_i p_i \langle i|\Omega|i\rangle \quad (4.3)$$

Kommentare:

- Ausnahme (sicheres Messergebnis):
 Ω ist entartet im Zustand ρ , dann ist das Messergebnis sicher.

Beispiel: $\mathcal{H} = \mathbb{C}^3$, $\rho = p_1|1\rangle\langle 1| + p_2|2\rangle\langle 2|$ ($p_3 = 0$)
 $\Omega = \alpha|1\rangle\langle 1| + \alpha|2\rangle\langle 2| + \beta|3\rangle\langle 3|$
 $\Rightarrow \langle \Omega \rangle = \text{tr}(\rho\Omega) = \alpha p_1 + \alpha p_2 + \beta \cdot 0 = \alpha$ (Eigenwert)

- Ja/Nein-Observablen:

$$W_{\omega_0}(\rho) = \text{Wahrscheinlichkeit des Auftretens eines bestimmten Messwertes } \omega_0 \\ \text{für die Zerlegung } \Omega = \sum_k \omega_k |k\rangle\langle k| \text{ (bzw. } \Omega = \int \omega_k |k\rangle\langle k| dk)$$

Die dazu gehörige Observable ist $P_0 = |\omega_0\rangle\langle \omega_0|$ (falls ω_0 nicht entartet), denn entweder EW = 1 \longleftrightarrow ω_0 gemessen („ja“) oder EW = 0 \longleftrightarrow nicht ω_0 gemessen („nein“). Der Erwartungswert von P_0 ist die relative Häufigkeit des ω_0 -Messwerts im Zustand ρ :

$$W_{\omega_0}(\rho) = \langle P_0 \rangle = \text{tr}(\rho P_0) = \text{tr}(\sum_i p_i |i\rangle\langle i| |\omega_0\rangle\langle \omega_0|) = \text{tr}(\sum_i p_i \langle \omega_0 | i \rangle \langle i | \omega_0 \rangle) = \sum_i p_i |\langle \omega_0 | i \rangle|^2 \quad (4.4)$$

- Spezialfall reiner Zustand:

$$p_i = \delta_{i0} \rightsquigarrow \rho = |0\rangle\langle 0| =: |\psi\rangle\langle \psi| \rightsquigarrow \langle \Omega \rangle = \text{tr}(|\psi\rangle\langle \psi| \Omega) = \langle \psi | \Omega | \psi \rangle \quad (4.5)$$

Für Ja/Nein-Observable P_0 :

$$W_{\omega_0}(|\psi\rangle) = \langle \psi | P_0 | \psi \rangle = |\langle \omega_0 | \psi \rangle|^2 = |P_0 |\psi\rangle|^2 \quad (4.6)$$

Wann sicher? Wenn $|\psi\rangle = |\omega_0\rangle \rightsquigarrow \langle \Omega \rangle = \omega_0$, $W_{\omega_0}(|\omega_0\rangle) = 1$

P IV. Wenn eine Gesamtheit durch den Dichteoperator ρ beschrieben wird, so verändert eine **ideale Messung** von Ω mit Ergebnis ω die Beschreibung zu

$$\rho' = \frac{P_\omega \rho P_\omega}{\text{tr}(P_\omega \rho P_\omega)} =: \rho_\omega, \quad \begin{array}{l} \text{„Zustandsreduktion“} \\ \text{„Kollaps der Wellenfunktion“} \end{array} \quad (4.7)$$

wobei P_ω auf den Ω -Eigenraum zu ω projiziert.

Kommentare:

- i. A. ist $P_\Omega = \sum_{s=1}^{r_\omega} |\omega, s\rangle\langle s, \omega|$, r_ω : Entartungsgrad ($r_\omega = \text{Rang von } P_\omega$)
wobei $\{|\omega, s\rangle, s = 1, \dots, r_\omega\}$ den Eigenraum als Orthonormalbasis aufspannen.
- Spezialfall Nichtentartung: $r_\omega = 1$, d. h. $P_\omega = |\omega\rangle\langle \omega|$

$$\rightsquigarrow \rho' = \frac{|\omega\rangle\langle \omega| \rho |\omega\rangle\langle \omega|}{\langle \omega | \rho | \omega \rangle} = |\omega\rangle\langle \omega| = P_\omega \text{ rein!} \quad \Leftrightarrow \quad |\psi'\rangle = |\omega\rangle \quad (4.8)$$

- Spezialfall reiner Ausgangszustand:
 $\rho = |\psi\rangle\langle \psi|$, dann folgt nach Messung von Ω : ω (lies: „mit Ergebnis ω “)

$$\rightsquigarrow \rho' = \frac{P_\omega |\psi\rangle\langle \psi| P_\omega}{\langle \psi | P_\omega | \psi \rangle} = \frac{|\psi'\rangle\langle \psi'|}{\langle \psi' | \psi' \rangle} = P_{|\psi'\rangle} \text{ rein!} \quad \Leftrightarrow \quad |\psi'\rangle = P_\omega |\psi\rangle \quad (4.9)$$

Anwendung: aufeinander folgende Messungen

- Messe erst Ω , dann Λ an einem System ρ , wobei $\omega = \text{Eigenwert von } \Omega$, $\lambda = \text{Eigenwert von } \Lambda$.

- Wie groß ist $W_{\omega,\lambda}(\rho)$ nacheinander erst ω , dann λ zu messen?

$$W_{\omega}(\rho) = \text{tr}(\rho\Omega) \quad \text{und} \quad \rho \mapsto \rho_{\omega} = \frac{P_{\omega}\rho P_{\omega}}{\text{tr}(P_{\omega}\rho P_{\omega})}$$

$$W_{\lambda}(\rho_{\omega}) = \text{tr}(\rho_{\omega}P_{\lambda}) = \frac{\text{tr}(P_{\lambda}P_{\omega}\rho P_{\omega}P_{\lambda})}{\text{tr}(P_{\omega}\rho P_{\omega})} = \frac{\text{tr}(P_{\omega}P_{\lambda}P_{\omega}\rho)}{\text{tr}(P_{\omega}\rho)}$$

$$\Rightarrow W_{\omega,\lambda}(\rho) = W_{\lambda}(\rho_{\omega}) \cdot W_{\omega}(\rho) = \text{tr}(P_{\omega}P_{\lambda}P_{\omega}\rho)$$

- Wie groß ist $W_{\lambda,\omega}(\rho)$ für die umgekehrte Reihenfolge?

$$\Rightarrow W_{\lambda,\omega}(\rho) = \text{tr}(P_{\lambda}P_{\omega}\rho)$$

- Was vereinfacht sich bei einem reinem Zustand $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$?

$$W_{\omega}(|\psi\rangle) = \langle\psi|P_{\omega}|\psi\rangle \quad \text{und} \quad |\psi\rangle \mapsto |\psi_{\omega}\rangle = \frac{P_{\omega}|\psi\rangle}{|P_{\omega}|\psi\rangle|}$$

$$W_{\lambda}(|\psi_{\omega}\rangle) = \langle\psi_{\omega}|P_{\lambda}|\psi_{\omega}\rangle = \frac{\langle\psi|P_{\omega}P_{\lambda}P_{\omega}|\psi\rangle}{\langle\psi|P_{\omega}|\psi\rangle}$$

$$\Rightarrow W_{\omega,\lambda}(|\psi\rangle) = \langle\psi|P_{\omega}P_{\lambda}P_{\omega}|\psi\rangle \quad \text{war klar!}$$

- Wann hängt die Wahrscheinlichkeit in *keinem* Zustand $|\psi\rangle$ von der Messreihenfolge ab?

$$\Rightarrow P_{\omega}P_{\lambda}P_{\omega} \stackrel{!}{=} P_{\lambda}P_{\omega}P_{\lambda} \Leftrightarrow [P_{\omega}, P_{\lambda}] \stackrel{!}{=} 0 \Leftrightarrow P_{\omega}P_{\lambda} = P_{\omega \cap \lambda} \quad \leftarrow \text{gemeinsamer Eigenraum} \quad (4.10)$$

falls dies auch noch für alle möglichen Messwerte (ω, λ) gelten soll, dann folgt aus der Spektralzerlegung:

$$[\Omega, \Lambda] = 0 \quad (4.11)$$

- Paar von selbstadjungierten Operatoren (Ω, Λ) fallen in 3 Klassen:

a) *kompatibel*:

$[\Omega, \Lambda] = 0 \rightsquigarrow$ „gleichzeitig messbar“, gemeinsame Eigenkets

b) *inkompatibel*:

$[\Omega, \Lambda] = \Gamma$ und $0 \notin \text{Spektrum}(\Gamma) \rightsquigarrow$ es gibt keine gemeinsamen Eigenkets

c) *andere*:

sind a) oder b) auf Unterräumen, je nach Eigenwerten

Zusammengefasst:

Bei vielen Messungen: $\Omega_1, \Omega_2, \Omega_3, \dots$

$$\rho \rightarrow \frac{\dots P_2 P_1 \rho P_1 P_2 \dots}{\text{tr}(\dots P_2 P_1 \rho P_1 P_2 \dots)} \quad \text{bzw.} \quad |\psi\rangle \rightarrow \frac{\dots P_2 P_1 |\psi\rangle}{|\dots P_2 P_1 |\psi\rangle|}$$

mit Ergebnissen: $\omega_1, \omega_2, \omega_3, \dots$

$$\begin{array}{cccc} \downarrow & \downarrow & \downarrow & \dots \\ P_1 & P_2 & P_3 & \dots \end{array}$$

$$W_{1,2,3,\dots,N}(\rho) = \text{tr}(P_1 \dots P_N \dots P_1 \rho)$$

$$\begin{aligned} \text{bzw. } W_{1,2,3,\dots,N}(|\psi\rangle) &= \text{tr}(|\psi_1\rangle\langle\psi_1|\psi_2\rangle\langle\psi_2|\dots|\psi_N\rangle\langle\psi_N|\dots|\psi_1\rangle\langle\psi_1|\psi\rangle\langle\psi|) \\ &= |\langle\psi|\psi_1\rangle\langle\psi_1|\psi_2\rangle\dots\langle\psi_{N-1}|\psi_N\rangle|^2 \end{aligned}$$

falls nicht entartet!

vollständiger Satz von kommutierenden Operatoren führt zu simultanen Eigenzuständen:

$$|\omega, \lambda, \gamma, \dots\rangle$$

$\uparrow \quad \uparrow \quad \uparrow$
 Eigenwerte heißen
 „Quantenzahlen“

P V. Die zeitliche Entwicklung einer Gesamtheit wird durch einen unitären Operator $U(t)$ beschrieben, der der Differenzialgleichung

$$i\hbar\dot{U}(t) = HU(t) \quad (4.12)$$

genügt. dabei ist H der *Hamilton-Operator* des Systems. Die Zeitabhängigkeit der Erwartungswerte folgt aus

$$\langle \Omega \rangle = \text{tr}(U(t)\rho U^\dagger(t)\Omega) \quad (4.13)$$

Kommentare:

- reine Zustände \rightarrow Schrödinger-Gleichung

sei $\rho = |\psi\rangle\langle\psi| := \langle \Omega \rangle (t) \stackrel{(4.13)}{=} \text{tr}(|\psi\rangle\langle\psi|U^\dagger(t)\Omega U(t)) = \langle\psi|U^\dagger(t)\Omega U(t)|\psi\rangle$ für jedes Ω

$$\curvearrowright |\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(t=0)\rangle \quad \curvearrowright i\hbar\partial_t|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle \quad (4.14)$$

- Gemisch \rightarrow Zeitentwicklung des Dichteoperators

Schreibe (4.13) als

$$\langle \Omega \rangle (t) =: \text{tr}(\rho(t)\Omega) \quad \curvearrowright \quad \rho(t) = U(t)\rho U^\dagger(t) \quad (4.15)$$

Differentialgleichung für $\rho(t)$ lautet

$$i\hbar\frac{d}{dt}\rho(t) = [H, \rho(t)] \quad \text{„Liouville-Gleichung“} \quad (4.16)$$

Beweis:

$$\begin{aligned}
 i\hbar\frac{d}{dt}\rho(t) &\stackrel{(4.15)}{=} i\hbar\frac{d}{dt}\left(U(t)\rho(0)U^\dagger(t)\right) \\
 &= i\hbar\left(\dot{U}(t)\rho(0)U^\dagger(t) + U(t)\rho(0)\dot{U}^\dagger(t)\right) \\
 &= HU(t)\rho(0)U^\dagger(t) - U(t)\rho(0)U^\dagger(t)H \\
 &= H\rho(t) - \rho(t)H \quad \text{q.e.d.}
 \end{aligned}$$

- Dgl. für $\langle \Omega \rangle (t)$:

$$\begin{aligned}
 i\hbar\frac{d}{dt}\langle \Omega \rangle (t) &\stackrel{(4.13)}{=} i\hbar\frac{d}{dt}\text{tr}(U\rho U^\dagger\Omega) \\
 &= i\hbar\text{tr}(\dot{U}\rho U^\dagger\Omega + U\rho\dot{U}^\dagger\Omega + U\rho U^\dagger\dot{\Omega}) \\
 &= \text{tr}([H, \rho(t)]\Omega) + i\hbar\langle \dot{\Omega} \rangle \\
 &= {}^2 \text{tr}(\rho(t)[\Omega, H]) + i\hbar\langle \dot{\Omega} \rangle
 \end{aligned}$$

$$\curvearrowright i\hbar\frac{d}{dt}\langle \Omega \rangle (t) = \langle [\Omega, H] \rangle (t) + i\hbar\langle \dot{\Omega} \rangle (t) \quad (4.17)$$

²Nebenrechnung: $\text{tr}[A, B]C = -\text{tr} B[A, C]$ wegen $[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$

b) Bilder der Zeitentwicklung

Bei Messungen treten immer nur *Kombinationen* von Operatoren und Zuständen auf. Zeitentwicklung interpretiert als Evolution von ρ oder $|\psi\rangle$, kann aber auch als Evolution der Observablen gelesen werden.

$$\langle \Omega \rangle (t) = \text{tr} (U(t)\rho U^\dagger(t)\Omega) \quad \text{bzw.} \quad = \langle \psi | U^\dagger(t)\Omega U(t) | \psi \rangle$$

bisher interpretiert als:

$$\left. \begin{array}{l} \Omega \text{ zeitunabhängig} \\ (4.15) \quad \rho(t) = U(t)\rho U^\dagger(t) \\ (4.14) \quad |\psi(t)\rangle = U(t) |\psi\rangle \end{array} \right\} \text{„Schrödinger-Bild“}$$

alternative Leseart:

$$(4.18) \quad \left. \begin{array}{l} \rho, |\psi\rangle \text{ zeitunabhängig} \\ \Omega(t) = U^\dagger(t)\Omega U(t) \end{array} \right\} \text{„Heisenberg-Bild“}$$

zugehörige Differentialgleichungen (mit unterdrückten Zeitargumenten):

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho = [H, \rho] \quad (4.16)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = H |\psi\rangle \quad (4.14) \quad \text{Schrödinger-Gleichung}$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \Omega = [\Omega, H] \quad (4.19) \quad \text{„Heisenberg-Gleichung“}$$

dritte Möglichkeit bei Aufspaltung $H = H_o + H_{I \searrow \text{interaction}}$

$$\langle \Omega \rangle (t) = \text{tr} (U_0^\dagger U \rho U^\dagger U_0 U_0^\dagger \Omega U_0) =: \text{tr} (\rho_I(t) \Omega_I(t)) \quad (4.20)$$

$$\begin{aligned} \text{bzw.} \quad &= \underbrace{\langle \psi | U^\dagger U_0}_{\langle \psi_I(t) |} \underbrace{U_0^\dagger \Omega U_0}_{\Omega_I(t)} \underbrace{U_0^\dagger U}_{| \psi_I(t) \rangle} \\ &=: \langle \psi_I(t) | \Omega_I(t) | \psi_I(t) \rangle \end{aligned} \quad (4.21)$$

$$\text{also:} \quad \Omega_I(t) = U_0^\dagger \Omega U_0(t) \quad (4.22)$$

$$\begin{aligned} \rho_I(t) &= W(t)\rho W^\dagger(t) \\ |\psi_I(t)\rangle &= W(t) |\psi\rangle \end{aligned} \quad \text{mit } W(t) = U_0^\dagger(t)U(t) \quad (4.23)$$

heißt *Wechselwirkungs-Bild* (oder „Dirac-Bild“)

c) Klassischer Grenzwert

Heisenberg-Gleichung (mit $\dot{F} = 0$): $i\hbar \frac{d}{dt} F = [F, H]$

erinnert an $\frac{d}{dt} f = \{f, H\}$ ³ für $f(q, p)$ mit Poisson-Klammer $\{\cdot, \cdot\}$

- für Erwartungswerte: $\frac{d}{dt} \langle F \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle [F, H] \rangle + \langle \dot{F} \rangle$
nehme im weiteren an, dass $\langle \dot{F} \rangle = 0$
außerdem $H = \frac{P^2}{2m} + V(X)$ und $F = X$ bzw. P

$$[X, H] = \frac{1}{2m} [X, P^2] = \frac{2i\hbar}{2m} P$$

$$[P, H] = [P, V(X)] = -i\hbar V'(X)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \frac{d}{dt} \langle X \rangle (t) &= \frac{1}{m} \langle P \rangle (t) \\ \Rightarrow \frac{d}{dt} \langle P \rangle (t) &= -\langle V'(X) \rangle (t) \end{aligned} \left. \right\} \text{„Ehrenfest-Theorem“} \quad (4.24)$$

Die Erwartungswerte genügen den klassischen Gleichungen.

Bemerkung: Allerdings ist im Allgemeinen $\langle V'(X) \rangle \neq V'(\langle X \rangle)$

³ $\{f, H\} = \frac{\partial f}{\partial q} \frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial q}$

⁴ $[X, f(P)] = f'(P) \cdot [X, P] = i\hbar f'(P)$

• **Deformations-Quantisierung**

klassischer Phasenraum $(q, p) \xrightarrow{\hbar}$ Quantenphasenraum $(q, p)_{\hbar}$

Wahl der Operator-Ordnungsvorschrift: „Weyl-Ordnung“ (symmetrische Ordnung)

z.B. $q^2 p \mapsto \frac{1}{3}(Q^2 P + Q P Q + P Q^2)$

damit gibt es eine 1:1-Korrespondenz zwischen Operatoren $F(Q, P)$ und Funktionen $f(q, p)$ vermöge

$$\begin{aligned} F(Q, P) &= f(q \rightarrow Q, p \rightarrow P) \Big|_{\text{Weyl-Ordnung}} \\ f_{\hbar}(q, p) &= F_*(Q \rightarrow q, P \rightarrow p) \end{aligned} \tag{4.26}$$

Wobei F_* gebildet ist mit einem neuen Produkt:

$$(f * g)(q, p) = f(q, p) \cdot e^{\frac{i\hbar}{2}(\overleftarrow{\partial}_q \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_q)} \cdot g(q, p) = fg + \frac{i\hbar}{2}\{f, g\} + \dots \quad \begin{array}{l} \text{„Stern-“ oder} \\ \text{„Moyal-Produkt“} \end{array} \tag{4.27}$$

damit: $[F, G] \rightarrow f * g - g * f = i\hbar\{f, g\} + \mathcal{O}(\hbar^2)$

$$\frac{d}{dt} f_{\hbar} = -\frac{i}{\hbar}(f_{\hbar} \star H - H \star f_{\hbar}) = \{f_{\hbar}, H\} + \mathcal{O}(\hbar^2) \tag{4.28}$$

Operatoren	\longleftrightarrow	Funktionen
$F(Q, P)$	$\begin{array}{c} \xrightarrow{\Phi} \\ \xleftarrow{\Phi^{-1}} \end{array}$	$f(q, p)$

Multiplikation	\longleftrightarrow	Stern – Multiplikation
$\Phi(f) \cdot \Phi(g) = \Phi(f \star g)$		$\Phi^{-1}(F) \star \Phi^{-1}(G) = \Phi^{-1}(FG)$

f, g	\longrightarrow	$f \star g$
$\Phi \downarrow$		$\downarrow \Phi$
F, G	\longrightarrow	FG

$$\left. \begin{array}{l} f \star g = fg + \frac{i\hbar}{2}\{f, g\} + \mathcal{O}(\hbar^2) \\ + \text{Assoziativität} \end{array} \right\} \Rightarrow \text{Eindeutigkeit bis auf Koordinatentransformation}$$

d) Wahrscheinlichkeitsstrom

Zustandsnorm $\langle \psi | \psi \rangle$ ist zeitlich konstant (bei unitärer Zeitentwicklung):

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi | \psi \rangle &= i\hbar \langle \dot{\psi} | \psi \rangle + i\hbar \langle \psi | \dot{\psi} \rangle = -\langle \psi | H | \psi \rangle + \langle \psi | H | \psi \rangle = 0 \\ &\Rightarrow \langle \psi | \psi \rangle(t) = \text{const.} \end{aligned} \tag{4.29}$$

Im Ortsraum:

$$0 = \frac{d}{dt} \int |\psi(x, t)|^2 dx = \frac{d}{dt} \int w(x, t) dx = \int \frac{\partial}{\partial t} w(x, t) dx \stackrel{\text{kann sein}}{=} - \int \frac{\partial}{\partial x} j(x, t) dx = -j \Big|_{\text{Rand}}$$

Kontinuitätsgleichung für Wahrscheinlichkeitsdichte:

$$\partial_t w(x, t) + \partial_x j(x, t) = 0 \tag{4.30}$$

„Wahrscheinlichkeits-Erhaltung“.

Was ist j ? Sei $H = \frac{P^2}{2m} + V(X)$

$$\leadsto i\hbar\partial_t\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi(x,t) + V(x)\psi(x,t)$$

also:

$$\begin{aligned} \partial_t w &= (\partial_t\psi^*)\psi + \psi^*(\partial_t\psi) \\ &= \frac{i}{\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi^* + V(x)\psi^*\right)\psi - \frac{i}{\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi + V(x)\psi\right)\psi^* \\ &= \frac{i\hbar}{2m}(\psi^*\partial_x^2\psi - \psi\partial_x^2\psi^*) \\ &= -\partial_x\left(\frac{\hbar}{2mi}(\psi^*\partial_x\psi - \psi\partial_x\psi^*)\right) \\ &\leadsto j(x,t) = \frac{\hbar}{2mi}(\psi^*\partial_x\psi - \psi\partial_x\psi^*) \end{aligned} \quad (4.31)$$

$$\left[\text{Dimension} > 1 : \quad \vec{j} = \frac{\hbar}{2mi}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*); \partial_t\varrho + \nabla\cdot\vec{j} = 0 \right]$$

Beispiel: ebene Welle: $\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}$

$$\Rightarrow w = \frac{1}{2\pi\hbar} = \text{const.}, \quad j = \frac{1}{2\pi\hbar}\frac{\hbar}{2mi}\left(\frac{i}{\hbar}p - \frac{-i}{\hbar}p\right) = \frac{1}{2\pi\hbar}\frac{p}{m} = w \cdot v = \text{const.}$$

allgemein: $\psi(x,t) = \sqrt{w(x,t)}e^{\frac{i}{\hbar}S(x,t)}$

$$\stackrel{(4.31)}{\leadsto} j(x,t) = \frac{1}{m}w(x,t)\partial_x S(x,t) \quad \left[d > 1 : \vec{j} = \frac{w}{m}\nabla S \right] \quad (4.32)$$

e) Lösen der Schrödinger-Gleichung

$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi\rangle = H|\psi\rangle$, Lösung: $|\psi(t)\rangle = U(t) \cdot |\psi(0)\rangle$

falls $\partial_t H = 0$, dann $U(t) = e^{\frac{i}{\hbar}tH}$

dann gilt auch: $i\hbar\frac{d}{dt}\langle H \rangle = \langle [H, H] \rangle = 0 \leadsto \langle H \rangle = \text{const.}$

Die Lösung ist einfach in der Eigenbasis von H : $H|E\rangle = E|E\rangle$, $E \in S(H) \setminus \text{Spektrum von } H$

$$U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}tE}|E\rangle = |E(t)\rangle \quad (4.33)$$

Wellenfunktion im E -Raum: $\psi(E,t) = \langle E|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\langle E|\psi(0)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi(E,0)$

$|E(t)\rangle$ heißen „stationäre Zustände“

Erwartungswerte sind zeitunabhängig für stationäre Zustände $|\psi(t)\rangle = |E(t)\rangle$

Ist ω ein Eigenwert von Ω . Wahrscheinlichkeiten:

$$W_\omega(|E(t)\rangle) \stackrel{\text{nicht entartet}}{=} |\langle\omega|E(t)\rangle|^2 = |\langle\omega|E\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}Et}|^2 = |\langle\omega|E\rangle|^2 = \text{const.}$$

falls $\partial_t H \neq 0$ (Vorsicht: $[\partial_t H, H] \neq 0$)

$$\rightarrow U(t) = T e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t H(t')dt'} = \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_0^t \int_0^{t_1} \dots \int_0^{t_{n-1}} H(t_1)\dots H(t_n) dt_n \dots dt_1 \quad \text{„Dyson-Reihe“} \quad (4.34)$$

wobei $t \geq t_1 \geq t_2 \geq \dots \geq t_n$

Zeitordnung:

$$TA(t)B(t') = \begin{cases} A(t)B(t') & \text{falls } t > t' \\ B(t')A(t) & \text{falls } t < t' \end{cases}$$

zentral ist das Eigenwertproblem

$$H |E\rangle = E |E\rangle \quad (4.35)$$

hierzu kommt man auch durch *Separationsansatz* für die Schrödinger-Gleichung: $|\psi(t)\rangle = f(t) \cdot |\Phi\rangle$

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle &= H |\psi(t)\rangle &\leadsto & i\hbar \frac{d}{dt} |\Phi\rangle = H |\Phi\rangle \\ \stackrel{\partial_t H=0}{\leadsto} \text{ rechte Seite zeitunabhängig} &&\leadsto & \text{ linke Seite ebenfalls} \\ \leadsto i\hbar \frac{d}{dt} f &= E = \text{const.} &\leadsto & f(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \end{aligned}$$

wir dürfen schreiben: $|\Phi\rangle = |E\rangle \leadsto |\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} |E\rangle$
 und $H |\Phi\rangle = E |\Phi\rangle$ bzw. $H |E\rangle = E |E\rangle \quad \checkmark$

im Ortsraum: $\langle x|E\rangle = \Phi_E(x)$, $\langle x|E(t)\rangle = \psi_E(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \Phi_E(x)$
 für $H = \frac{P^2}{2m} + V(X)$ lautet (4.35):

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + V(x) \right) \Phi_E(x) = E \cdot \Phi_E(x) \quad \text{„stationäre Schrödinger-Gleichung“} \quad (4.36)$$

Wahl einer Basis

1. **Beispiel:** $H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{\cosh^2(X)}$

Ortsbasis: $-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \Phi_E + \frac{1}{\cosh^2(x)} \Phi_E = E \Phi_E$

Impulsbasis: $\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{\cosh^2(i\hbar\partial_p)} \right) \tilde{\Phi}_E(p) = E \tilde{\Phi}_E(p)$

2. **Beispiel:** $H = \frac{P^2}{2m} + f \cdot X$

Ortsbasis: $-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \Phi_E + f \cdot x \cdot \Phi_E = E \Phi_E$

Impulsbasis: $\frac{p^2}{2m} \tilde{\Phi}_E + i\hbar f \partial_p \tilde{\Phi}_E = E \tilde{\Phi}_E$

Warnung: Ortseigenwerte = physikalische Raumkoordinaten?

→ O.k. für ein Teilchen, z.B. in 3 Dimensionen:

$$X_i |x_1, x_2, x_3\rangle = x_i |x_1, x_2, x_3\rangle$$

→ aber für zwei Teilchen gibt es zwei Sätze von Operatoren:

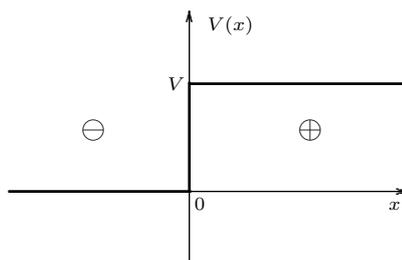
$$X_i^{(1)}, X_i^{(2)}; \quad i = 1, 2, 3; \quad \alpha = 1, 2$$

$$\leadsto X_i^{(\alpha)} |x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, x_3^{(1)}, x_1^{(2)}, x_2^{(2)}, x_3^{(2)}\rangle = x_i^{(\alpha)} |\dots\rangle$$

→ Wellenfunktion $\psi(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)})$ lebt in 6D-Zustandsraum (besser: Konfigurationsraum)

V Einfache Systeme (1D)

a) Potentialstufe



zu lösen: $-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\Phi_E(x) + V(x)\Phi_E(x) = E\Phi_E(x)$
für den Fall $V(x) = \Theta(x)V$

$$\Phi_E'' = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\Phi_E(x) \rightsquigarrow \begin{cases} E - V > 0 & \rightsquigarrow \text{Oszillation} \\ E - V < 0 & \rightsquigarrow \text{exponentiell} \end{cases}$$

an der Stufe gilt:

$$\Phi'' \sim V \sim \text{Stufe} \quad \square \quad \Phi' \sim \int^x V \sim \text{Spitze} \quad \vee \quad \Phi \sim \int^x \int^x V \sim \text{glatt}$$

$$\rightarrow \text{Fallunterscheidung: } \Phi_E(x) = \begin{cases} \Phi_E^-(x) & \text{für } x < 0 \\ \Phi_E^+(x) & \text{für } x > 0 \end{cases}$$

$$\text{mit } \Phi_E^{\pm''}(x) = -k_{\pm}^2\Phi_E^{\pm}(x), \quad \text{wobei } \hbar k_- = \sqrt{2mE}, \quad \hbar k_+ = \sqrt{2m(E - V)} \quad (5.1)$$

definiere $k_{\pm} =: i\kappa_{\pm}$, falls imaginär

Welche E-Werte sind möglich? 5 Fälle:

	k_-^2	k_+^2	Φ_E^-	Φ_E^+
$\alpha) E > V$	> 0	> 0	$Ae^{ik_-x} + Be^{-ik_-x}$	$Ce^{ik_+x} + De^{-ik_+x}$
$\beta) E = V$	> 0	$= 0$	—''—	$C'x + D'$
$\gamma) 0 < E < V$	> 0	< 0	—''—	$Ce^{-\kappa_+x} + De^{\kappa_+x}$
$\delta) E = 0$	$= 0$	< 0	$A'x + B'$	—''—
$\varepsilon) E < 0$	< 0	< 0	$Ae^{-\kappa_-x} + Be^{\kappa_-x}$	—''—

$\Phi_E^{\pm}(x)$ beschränkt für $|x| \rightarrow \infty$

$$\rightsquigarrow \delta), \varepsilon): A = D = A' = 0 \rightsquigarrow \text{nicht differenzierbar bei } x = 0$$

$$\alpha), \beta), \gamma) \text{ o.k. } \rightarrow \text{Spektrum } S(H) = \mathbb{R}_+, \text{ d.h. } E > 0$$

Anschlussbedingungen:

$$\Phi_E^-(0) = \Phi_E^+(0), \quad \Phi_E^{-'}(0) = \Phi_E^{+'}(0) \quad (5.2)$$

Für $E > 0$ sind die Anschlussbedingungen (5.2) zwei Gleichungen mit vier Unbekannten.

\rightarrow 2 lineare Beziehungen für A, B, C, D

$$\begin{array}{lll} \alpha) E > V & Ae^{ik_-x} + Be^{-ik_-x} & Ce^{ik_+x} + De^{-ik_+x} \\ \beta) E = V & \text{—''—} & C'x + D' \\ \gamma) 0 < E < V & \text{—''—} & Ce^{-\kappa_+x} + De^{\kappa_+x} \end{array}$$

Lösung des linearen Gleichungssystems:

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = Q(E) \cdot \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \quad \text{mit Transmissionsmatrix } Q(E) = \frac{1}{2k_+} \begin{pmatrix} k_+ + k_- & k_+ - k_- \\ k_+ - k_- & k_+ + k_- \end{pmatrix} \quad (5.3)$$

Wie hängen einlaufende und auslaufende Amplituden zusammen?

$$\begin{pmatrix} C \\ B \end{pmatrix} = S(E) \cdot \begin{pmatrix} A \\ D \end{pmatrix} \quad \text{mit Streumatrix } S(E) = \frac{1}{k_+ + k_-} \begin{pmatrix} 2k_- & k_+ - k_- \\ k_- - k_+ & 2k_+ \end{pmatrix} \quad (5.4)$$

Einschränkung durch Zusatzbedingung: $D = 0$, von rechts läuft nichts ein.

$$\rightsquigarrow B = \frac{k_- - k_+}{k_+ + k_-} A; \quad C = \frac{2k_-}{k_+ + k_-} A \quad (5.5)$$

Wahrscheinlichkeitsstromdichten

$$j = \frac{\hbar}{2m}(\Phi^* \partial_x \Phi - \Phi \partial_x \Phi^*)$$

$$\curvearrowright j_- = j_A - j_B = \frac{\hbar k_-}{m}(|A|^2 - |B|^2), \quad j_+ = \frac{\hbar k_+}{m}|C|^2 =: j_C$$

$$\text{check: } j_- = \frac{\hbar k_-}{m}|A|^2 \left(1 - \left(\frac{k_- - k_+}{k_+ + k_-}\right)^2\right) = \frac{\hbar k_-}{m}|A|^2 \left(\frac{4k_+ k_-}{(k_+ + k_-)^2}\right) = \frac{\hbar k_+}{m}|A|^2 \underbrace{\left(\frac{2k_-}{k_+ + k_-}\right)^2}_{|C|^2} = j_+ \quad \checkmark$$

$$\left. \begin{array}{l} \text{Reflexionskoeffizient:} \quad R := \frac{j_B}{j_A} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left(\frac{k_- - k_+}{k_+ + k_-}\right)^2 \\ \text{Transmissionskoeffizient:} \quad T := \frac{j_C}{j_A} = \frac{k_+}{k_-} \cdot \frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{4k_+ k_-}{(k_+ + k_-)^2} \end{array} \right\} R + T = 1 \quad (5.6)$$

Grenzfälle

→ $E \gg V$ (Fall α):

$$k_+ \approx k_-, \quad B \approx 0, \quad C \approx A \quad \Rightarrow R \searrow 0, \quad T \nearrow 1$$

→ $E = V$ (Fall β):

$$k_+ \rightarrow 0, \quad B \approx A, \quad C \approx 2A \quad \Rightarrow R \nearrow 1, \quad T \searrow 0$$

→ $0 < E < V$ (Fall γ):

$$\Phi_E^- = A e^{ik_- x} + B e^{-ik_- x}, \quad \Phi_E^+ = C e^{-\kappa_+ x} \quad (k_+ = i\kappa_+)$$

Aus den Anschlussbedingungen (5.2) folgt

$$A + B = C, \quad ik_-(A - B) = -\kappa_+ C$$

$$B = \frac{k_- - i\kappa_+}{k_- + i\kappa_+} A, \quad C = \frac{2k_-}{k_- + i\kappa_+} A \quad (5.7)$$

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = 1 \quad \Rightarrow T = 0 \quad \text{Totalreflexion} \quad (\text{verwende } (a + ib)/(a - ib) = e^{i\varphi})$$

$$\text{Phasenshift } \delta(E) \text{ über } \frac{B}{A} =: -e^{2i\delta(E)} \quad (5.8)$$

$$\tan \delta = \frac{k_-}{k_+} = \sqrt{\frac{E}{V - E}} \quad \text{Grenzfälle} \quad \curvearrowright \quad \begin{cases} E = V & \delta = \frac{\pi}{2} \\ E \searrow 0 & \delta = 0 \end{cases}$$

lokalisiertes Wellenpaket, bei $t = 0$ auf Stufe treffend

$$x < 0: \quad \psi(x, t) = \int_0^\infty dE \langle E | \psi(0) \rangle e^{-iEt/\hbar} \left(e^{ik_- x} + \frac{k_- - k_+}{k_+ + k_-} e^{-ik_- x} \right) = \psi_{\text{in}}(x, t) + \psi_{\text{R}}(x, t)$$

$$x > 0: \quad \psi(x, t) = \int_0^\infty dE \langle E | \psi(0) \rangle e^{-iEt/\hbar} \frac{2k_-}{k_+ + k_-} e^{ik_+ x} = \psi_{\text{T}}(x, t)$$

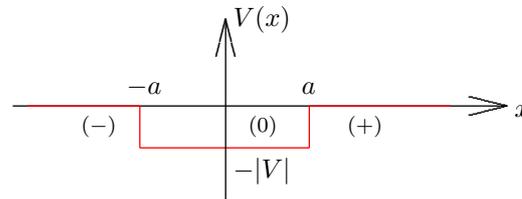
lokalisiere $\langle E | \psi(0) \rangle$ um $E = E_0 = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} > V \quad \curvearrowright \quad k_- \approx k_0, \quad k_+ \approx \sqrt{\frac{E_0 - V}{E_0}} k_0$

\curvearrowright Paket lokalisiert um

$$x(t) = \begin{cases} \frac{\hbar k_0}{2m} t & \text{für } t < 0 \\ -\frac{\hbar k_0}{2m} t \text{ und } \frac{\hbar k_0}{2m} \sqrt{\frac{E_0 - V}{E_0}} t & \text{für } t > 0 \end{cases}$$

$$R = \int dx |\psi_{\text{R}}|^2, \quad T = \int dx |\psi_{\text{T}}|^2 \quad \text{falls} \quad \int dx |\psi|^2 = 1 \quad (\text{normiert}) \quad (5.9)$$

b) Potentialtopf



Drei Regionen \leadsto zwei Anschlusspunkte $x = \pm a$

Definiere dimensionslose „Stärke“ des Potentialtopfes $\zeta = \frac{p_0 a}{\hbar} = \sqrt{2m|V|} \cdot \frac{a}{\hbar}$

$$\Phi_E'' = -k^2 \Phi_E \quad \text{mit} \quad \hbar^2 k^2 = \begin{cases} \hbar^2 k_{\pm}^2 = 2mE & \text{im Bereich (+), (-)} \\ \hbar^2 k_0^2 = 2m(E + |V|) & \text{im Bereich (0)} \end{cases}$$

Energiespektrum

- Kontinuum für $E > 0$ (Fall α)
- möglicherweise auch $|V| < E \leq 0$ (Fall β)

Fall β : $k_{\pm}^2 < 0 \quad \leadsto \quad k_{\pm} = i\kappa = \frac{i}{\hbar} \sqrt{2m|E|}$

Lösung:

$$\Phi_E^- = C_- e^{\kappa x}, \quad \Phi_E^0 = A \cos k_0 x + B \sin k_0 x, \quad \Phi_E^+ = C_+ e^{-\kappa x}$$

Verwende $c \equiv \cos k_0 a$ und $s \equiv \sin k_0 a$.

Anpassung bei $x = -a$:

$$C_- e^{-\kappa a} = Ac - Bs \quad (1)$$

$$\kappa C_- e^{-\kappa a} = k_0 As + k_0 Bc \quad (2)$$

Anpassung bei $x = a$:

$$C_+ e^{-\kappa a} = Ac + Bs \quad (3)$$

$$-\kappa C_+ e^{-\kappa a} = -k_0 As + k_0 Bc \quad (4)$$

$$\frac{(2)}{(1)} \leadsto \kappa = k_0 \frac{As + Bc}{Ac - Bs} \quad \frac{(4)}{(3)} \leadsto -\kappa = k_0 \frac{-As + Bc}{Ac + Bs}$$

Vergleichen liefert:

$$\begin{aligned} (As + Bc)(Ac + Bs) &= (As - Bc)(Ac - Bs) \\ AB(s^2 + c^2) &= -AB(s^2 + c^2) \end{aligned}$$

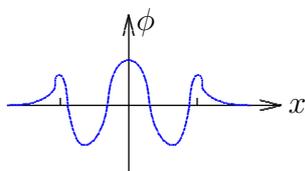
$\Rightarrow AB = 0 \quad \leadsto \quad A = 0$ (sin im Potentialtopf) oder $B = 0$ (cos im Potentialtopf).

Es kann keine Superposition von cos und sin im Potentialtopf sein!

Zwei Fälle:

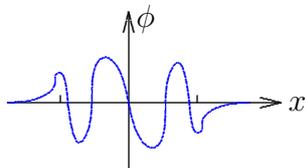
- gerade Zustände $B = 0$ symmetrisch $\cos \quad C_+ = C_-$

Bedingung an E aus (2)/(1): $\kappa = k_0 \tan k_0 a$



- ungerade Zustände $A = 0$ antisymm. \sin $C_+ = -C_-$

Bedingung an E aus (2)/(1): $\kappa = -k_0 \cot k_0 a$



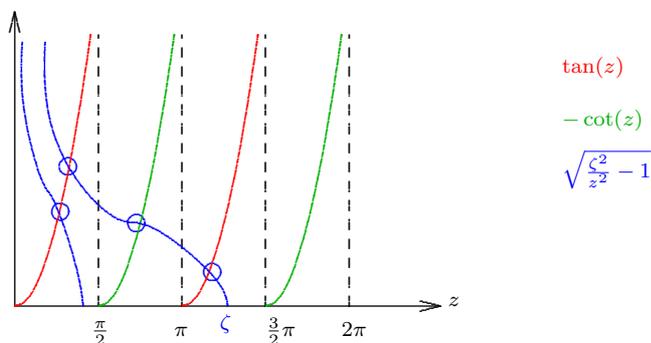
Für beide Fälle:

$$\left. \begin{array}{l} \tan k_0 a \\ -\cot k_0 a \end{array} \right\} = \frac{\kappa}{k_0} = \sqrt{\frac{2m|E|}{2m(-|E| + |V|)}} = \sqrt{\frac{|V|}{|V| - |E|} - 1} = \sqrt{\frac{|V|a^2/\hbar^2}{(|V| - |E|)a^2/\hbar^2} - 1}$$

$$= \sqrt{\frac{\zeta^2}{k_0^2 a^2} - 1} \quad (5.10)$$

Definiere $z := k_0 a$ dimensionslos.

$$\curvearrowleft \left. \begin{array}{l} \tan z \\ -\cot z \end{array} \right\} = \sqrt{\frac{\zeta^2}{z^2} - 1} \quad \text{Gleichung für } z \rightarrow k_0 \rightarrow E \quad 0 < z \leq \zeta$$

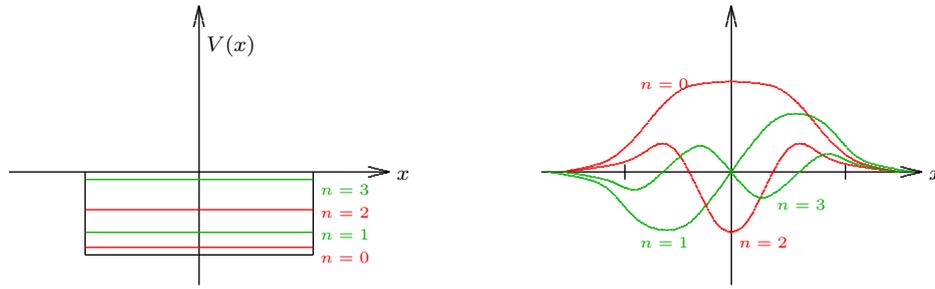


ζ angegeben \curvearrowleft Schnittpunkte \Rightarrow Lösungen $z = z_n$
 $\#$ Lösungen hängen von ζ ab.
 \exists mindestens eine Lösung

Energien:

$$E_n = -|V| + \frac{\hbar^2}{2m} k_{0,n}^2 = |V| \left(\frac{\hbar^2 k_{0,n}^2}{2m|V|} - 1 \right) = |V| \left(\frac{z_n^2}{\zeta^2} - 1 \right) \quad (5.11)$$

nur diskrete Energien zugelassen.



Grundzustandsenergie $E_0 = -|V| + \frac{\hbar^2}{2m} k_{0,0}^2 > -|V|$
 Grenzfall $V \rightarrow 0$: $\zeta \searrow 0$, $\tan z \approx z \searrow 0$, $E_0 \rightarrow -2m \frac{V^2 a^2}{\hbar^2} \searrow 0$

Parität

Definiere den **Spiegelungsoperator** P durch:

$$(Pf)(x) = f(-x) \tag{5.12}$$

Klar: $P^2 = 1 \Rightarrow$ EW von P müssen ± 1 sein.

Beispiel: symmetrisches Potenzial

$PV = V$ und sogar $PHf = HPf \Leftrightarrow (PHP)Pf = H'f' \Leftrightarrow H'f' = Hf' \Leftrightarrow [H, P] = 0$

Daraus folgt: $H\phi_E = E\phi_E \overset{P}{\rightsquigarrow} H(P\phi_E) = E(P\phi_E) \rightsquigarrow P\phi_E$ löst die Schrödinger-Gleichung zum gleichen Eigenwert. Wir können H, P gleichzeitig diagonalisieren:

$$\begin{aligned} \phi_g(x) &= \phi(x) + \phi(-x) = ((\mathbb{1} + P)\phi)(x) \quad \text{zum Eigenwert „+1“} \\ \phi_u(x) &= \phi(x) - \phi(-x) = ((\mathbb{1} - P)\phi)(x) \quad \text{zum Eigenwert „-1“} \end{aligned}$$

\Rightarrow Wir können eine E -Basis aus geraden und ungeraden Eigenfunktionen wählen.

\Rightarrow 2fache Entartung wird nur vermieden, falls $\phi_g \equiv 0$ oder $\phi_u \equiv 0$

$\rightsquigarrow \phi$ ist symmetrisch oder antisymmetrisch.

Komplexe Konjugation

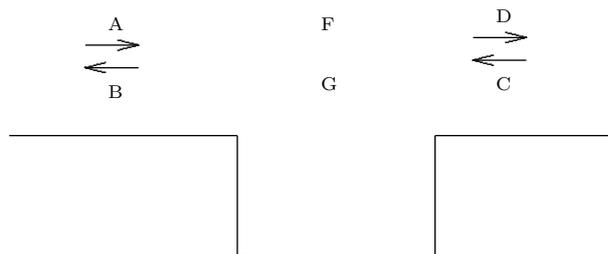
$H\phi_E = E\phi_E \rightsquigarrow H\phi_E^* = E\phi_E^*$ (falls $V = V^*$) \rightarrow Konjugation vertauscht mit H

Eigenfunktionen zur Konjugation sind $\text{Re } \phi_E, \text{Im } \phi_E \Rightarrow$ entweder zweifache Entartung (Streuzustände) oder keine Entartung $\phi_E^* \sim \phi_E$ (Bindungszustände)

Fall α : $E > 0$ kontinuierliches Spektrum

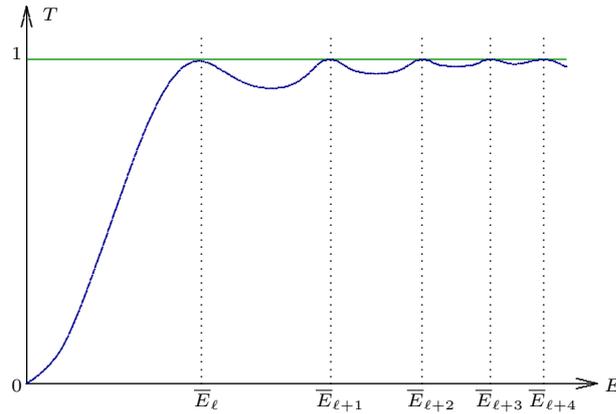
$$\begin{aligned} \phi_E^- &= Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \\ \phi_E^0 &= Fe^{ik_0x} + Ge^{-ik_0x} \\ \phi_E^+ &= Ce^{ikx} + De^{-ikx} \end{aligned} \quad \leftarrow \text{setze } D = 0$$

(A: einfallend, B: reflektiert, C: transmittiert)



→ definiere $S(E)$ durch: $C = Ae^{-2ika} \cdot S(E)$, $k = \sqrt{2mE}/\hbar$, $k_0 = \sqrt{2m(E + |V|)}/\hbar$

$$\begin{aligned} \text{Transmissionsamplitude} \quad S(E) &= \dots = \left[\cos 2k_0 a - \frac{i}{2} \left(\frac{k}{k_0} + \frac{k_0}{k} \right) \sin 2k_0 a \right]^{-1} \\ \text{Transmissionskoeffizient} \quad T(E) &= |S(E)|^2 = \left[1 + \frac{\sin^2 2k_0 a}{4 \frac{E}{|V|} (1 + \frac{E}{|V|})} \right]^{-1} \end{aligned} \quad (5.13)$$



Resonanzen bei $E = \bar{E}_n \Leftrightarrow T(\bar{E}_n) = 1$

→ **Bedingung:** $\sin 2\bar{k}_{0,n} a = 0 \Leftrightarrow \bar{k}_{0,n} = \frac{n\pi}{2a}$, $n = 0, 1, 2, \dots$ und $\bar{E}_n > 0$

Energien $\bar{E}_n = \frac{\hbar^2 \bar{k}_{0,n}^2}{2m} - |V| \stackrel{!}{>} 0$, erfüllt für $n \geq$ einem gewissen ℓ

Andere interessante Eigenschaften von $S(E)$:

- Pole bei negativen Energien: $-|V| < E < 0$ ($k = i\kappa$)

$$\begin{aligned} \rightarrow \text{Bedingung: } \cos 2k_0 a &= \frac{i}{2} \left(\frac{i\kappa}{k_0} + \frac{k_0}{i\kappa} \right) \sin 2k_0 a \Leftrightarrow \tan 2k_0 a = 2 \left(\frac{k_0}{\kappa} - \frac{\kappa}{k_0} \right)^{-1} \\ &\Leftrightarrow \tan k_0 a = \frac{\kappa}{k_0} \quad \vee \quad -\cot k_0 a = \frac{\kappa}{k_0} \end{aligned}$$

(unter Verwendung der Identität $\tan 2x = 2(\cot x - \tan x)^{-1}$)

- Pole im Komplexen nahe der Resonanzen \bar{E}_n :

→ Bedingung: $\tan 2\bar{k}_{0,n} a = 0$, setze $k_0 \approx \bar{k}_{0,n}$

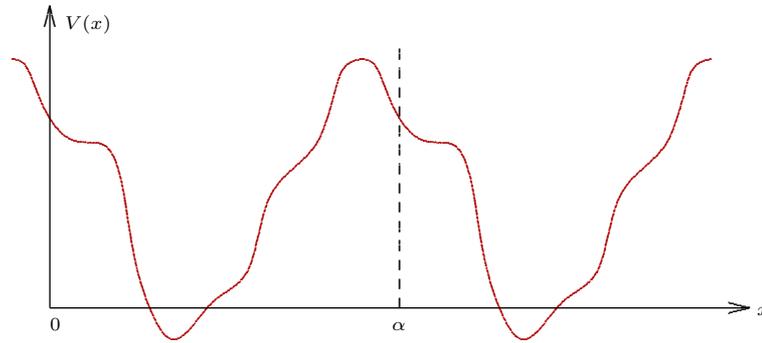
$$\Leftrightarrow E \approx \bar{E} + \mathcal{O}(E - \bar{E}) \Leftrightarrow \left(\frac{k}{k_0} + \frac{k_0}{k} \right) \tan 2k_0 a = \frac{4}{\Gamma} (E - \bar{E}) + \dots$$

$$\begin{aligned} \Leftrightarrow S(E) &= \left[\cos 2k_0 a \left(1 - \frac{i}{2} \left(\frac{k}{k_0} + \frac{k_0}{k} \right) \tan 2k_0 a \right) \right]^{-1} \\ &\approx \frac{1}{\cos 2k_0 a} \left(1 - \frac{2i}{\Gamma} (E - \bar{E}) \right)^{-1} \approx \frac{\pm \frac{i\Gamma}{2}}{E - \bar{E} + \frac{i\Gamma}{2}} \end{aligned}$$

$$\Leftrightarrow \text{Pol bei } E = \bar{E} - \frac{i\Gamma}{2} \Leftrightarrow T(E) \approx \frac{\frac{\Gamma^2}{4}}{(E - \bar{E})^2 + \frac{\Gamma^2}{4}}$$

- Wurzelschnitt von $S(E)$ auf positiver reeller Achse $S = f(\hbar k) = f(\sqrt{2mE})$
 $\Rightarrow S(E)$ in komplexer E -Ebene

c) Periodisches Potenzial



Symmetrie unter $x \mapsto x + n\alpha$, $n \in \mathbb{Z}$

Translationen im Ortsraum implizieren Transformationen im Zustandsraum

$$T_\alpha : |x\rangle \mapsto |x - \alpha\rangle \text{ verschiebt den Eigenwert von } X$$

Dies wird geleistet von $T_\alpha = e^{\frac{i}{\hbar}\alpha P}$

Eigenschaften

$$T_\alpha T_\beta = T_{\alpha+\beta}, \quad T_\alpha^\dagger = T_{-\alpha} \Rightarrow T_\alpha^\dagger T_\alpha = \mathbf{1} \rightarrow \text{unitär!}$$

$$\text{Auf Zuständen: } \langle x|\psi\rangle \mapsto \langle x|T_\alpha\psi\rangle = \langle x + \alpha|\psi\rangle$$

Eigenwerte: Phasen $e^{ik\alpha}$ für $k \in \mathbb{R}$

Spektrum: Einheitskreis im Komplexen

$$\text{Symmetrie } \Leftrightarrow [H, T_\alpha] = 0$$

Gemeinsame Eigenfunktionen von $H, T_\alpha \longleftrightarrow$ Zustände $|E, k\rangle$ mit
$$\begin{cases} H|E, k\rangle = E|E, k\rangle \\ T_\alpha|E, k\rangle = e^{ik\alpha}|E, k\rangle \end{cases}$$

Vorsicht: $\langle x + \alpha|k\rangle = \langle x|T_\alpha|k\rangle = e^{ik\alpha}\langle x|k\rangle$, periodisch bis auf Phase: „quasi-periodisch“

$$\rightarrow \text{mache periodisch: } |u_k\rangle := e^{ikx}|k\rangle \Leftrightarrow \langle x|u_k\rangle = e^{-ikx}\langle x|k\rangle$$

$$\curvearrowright \langle x + \alpha|u_k\rangle = \langle x|T_\alpha|u_k\rangle = e^{-ik(x+\alpha)}\langle x + \alpha|k\rangle = e^{-ik(x+\alpha)}e^{ik\alpha}\langle x|k\rangle = e^{-ikx}\langle x|k\rangle = \langle x|u_k\rangle \checkmark$$

$$\text{Zugehörige Wellenfunktion: } \langle x|k\rangle =: \phi_k(x) = e^{ikx}\langle x|u_k\rangle =: e^{ikx}u_k(x)$$

quasi-periodisch: „Blochwelle“, $|k\rangle$: „Blochzustand“

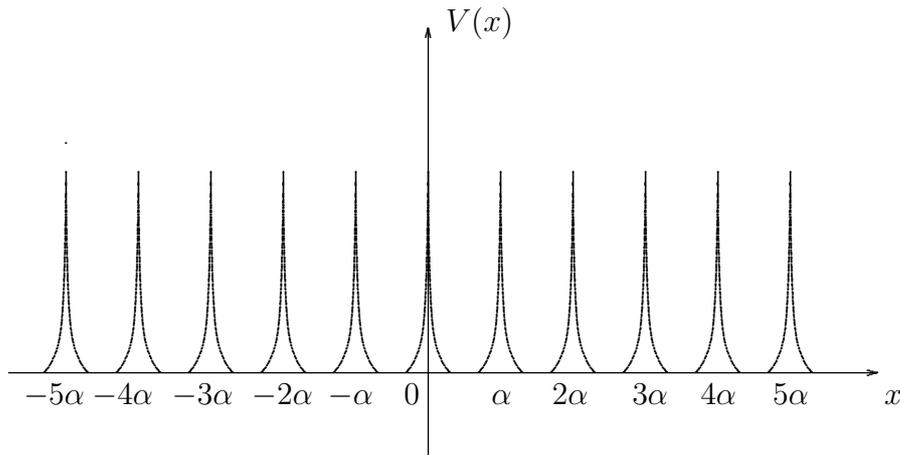
$$|\phi_k| < \infty \Rightarrow k \text{ reell, } e^{ikx} = e^{i(k + \frac{2\pi n}{\alpha})x} \curvearrowright \text{beschränkt auf Intervall } -\frac{\pi}{\alpha} \leq k \leq \frac{\pi}{\alpha} \text{ „Brioullin-Zone“}$$

Im Ortsraum: Gitterzelle $0 \leq x \leq \alpha$

Frage: $|k\rangle = |E, k\rangle$ Welche $E = E(k)$ sind für gegebenes Potenzial V erlaubt?

rechenbares Beispiel: Dirac-Kamm (Kronig-Penney-Potential)

$$V(x) = w \sum_{-\infty}^{\infty} \delta(x - n\alpha), \quad w > 0$$



Ansatz: $\phi_{E,k}(x) = Ae^{iqx} + Be^{-iqx}$

dann: $E = E(q) = \frac{\hbar^2 q^2}{2m} \Leftrightarrow \hbar q = \sqrt{2mE} \geq 0 \quad (V=0 \curvearrowright q = \pm k)$
 \rightarrow gesucht : erlaubte Werte $q(k)$

2 Bedingungen an $\phi_{E,k}$:

1. Periodizität von $u_k(x) = e^{-ikx} \phi_{E,k}(x)$

$$e^{-ik\alpha} \phi_{E,k}(\alpha) = e^{-i0} \phi_{E,k}(0) \curvearrowright Ae^{i(q-k)\alpha} + Be^{-i(q+k)\alpha} = A + B \quad (*)$$

2. Anschluss an den Zacken:

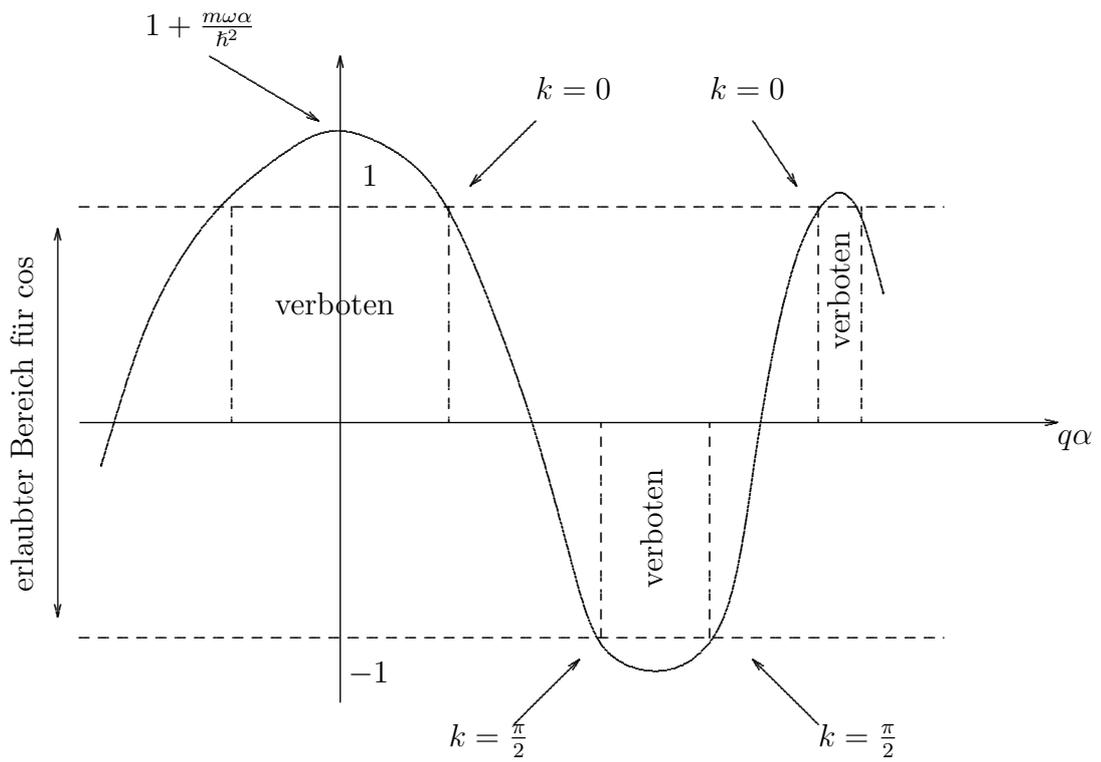
$$\begin{aligned} (E + \frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2) \phi_{E,k}(x) &= \sum w \delta(x - n\alpha) \phi_{E,k}(x) \quad | \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \\ \Leftrightarrow E \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \phi_{E,k}(x) dx + \frac{\hbar^2}{2m} (\phi'_{E,k}(\epsilon) - \phi'_{E,k}(-\epsilon)) &= w \phi_{E,k}(0) \quad | \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \\ \Leftrightarrow \frac{\hbar^2}{2m} (\phi'_{E,k}(0^+) - \phi'_{E,k}(0^-)) &= w \phi_{E,k}(0) \\ \text{verwende } \phi'_{E,k}(0^-) &= e^{-ik\alpha} \phi'_{E,k}(\alpha^-) \\ \curvearrowright \frac{\hbar^2}{2m} iq(A - B - Ae^{i(q-k)\alpha} + Be^{-i(q+k)\alpha}) &= w(A + B) \quad (**) \end{aligned}$$

\Rightarrow (*), (**) sind 2 homogene lineare Gleichungen für A, B

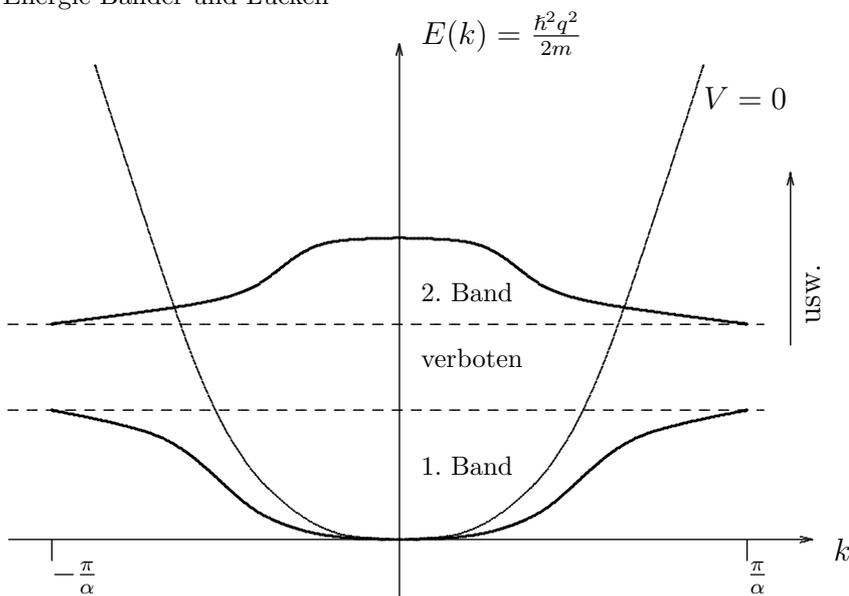
\Rightarrow Koeffizienten-Determinante muss = 0 sein für nicht-triviale Lösung

$$\curvearrowright \cos(k\alpha) - \cos(q\alpha) - \frac{mw}{\hbar^2 q} \sin(q\alpha) = 0 \curvearrowright q = q(k) \curvearrowright E = \frac{\hbar^2 q^2}{2m} = E(k)$$

\rightarrow graphische Lösung: $\cos(k\alpha) = \cos(q\alpha) + \frac{mw\alpha}{\hbar^2} \cdot \frac{\sin(q\alpha)}{q\alpha}$

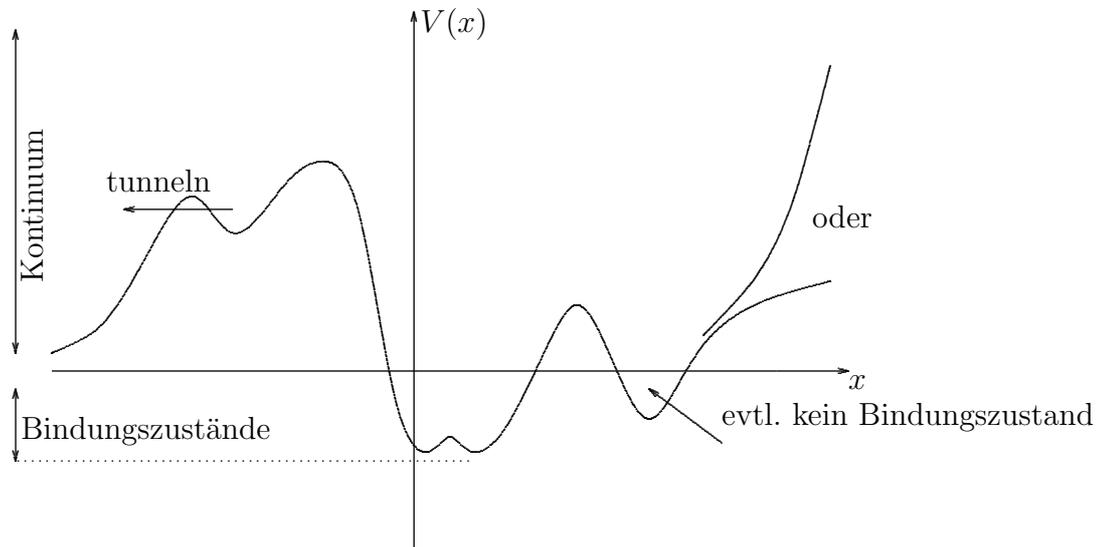


⇒ Energie-Bänder und Lücken



effektive Masse m^* : $E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + O(k^3)$

d) Allgemeine Resultate



1. nur $E > V_{min}$
2. für $E > E_{asympt.}$: Kontinuum 2-fach entartet
3. in tiefster Mulde gibt es mindestens einen Bindungszustand E_0 , ϕ_0 hat keinen Knoten
4. Bindungszustände bilden diskretes Spektrum
5. Bindungszustände sind nicht entartet

Beweis durch Widerspruch:

$$(1) H\phi_1 = E\phi_1 \quad | \cdot \phi_2 \quad (2) H\phi_2 = E\phi_2 \quad | \cdot \phi_1$$

$$(1) - (2) \Rightarrow \phi_2\phi_1'' - \phi_1\phi_2'' = 0 \quad \curvearrowright \quad (\phi_2\phi_1' - \phi_1\phi_2')' = 0$$

$$\curvearrowright \quad \phi_2\phi_1' - \phi_1\phi_2' = const. = c$$

Bindungszustände $\searrow 0$ für $|x| \rightarrow \infty$, also $c = 0$

$$\curvearrowright \quad \frac{\phi_1'}{\phi_1} = \frac{\phi_2'}{\phi_2} \quad \curvearrowright \quad (\ln\phi_1 - \ln\phi_2)' = 0 \quad \curvearrowright \quad \ln\frac{\phi_1}{\phi_2} = const. = d$$

$$\curvearrowright \quad \phi_1 = e^d \cdot \phi_2 \quad (\text{proportional}) \quad \curvearrowright \quad \text{keine Entartung} \quad \#$$

6. mit E zunehmend haben die Bindungszustände $\phi_n(x)$, $n = 1, 2, \dots$ genau n Knoten; falls $V(-x) = V(x)$, gilt $\phi_n(-x) = (-1)^n \phi_n(x)$
7. Asymptotik bei $|x| \rightarrow \infty$, falls $V(x) \xrightarrow{|x| \rightarrow \infty} \sim -x^{-s}$
dann $\begin{cases} s > 2 : \text{ Bindungszustände nahe } 0: \# < \infty \\ s < 2 : E_n \text{ haben Häufungspunkt } (n \rightarrow \infty) \text{ bei } E=0 \end{cases}$
8. singuläre Potentiale (z.B. Singularität $V(x \rightarrow 0) \rightarrow -\infty$) $V(\approx 0) \sim -x^{-r}$
dann $\begin{cases} r < 2 : \text{ Energien nach unten beschränkt, d.h. } E_n \geq E_{min} = E_0 \\ r > 2 : E_n \text{ Spektrum nach unten beschränkt!} \end{cases}$
9. hochangeregte Bindungszustände haben Ortsraum-Wahrscheinlichkeitsdichten $|\phi_n|^2$, die um die klassischen Umkehrpunkte von V konzentriert sind
10. E_0 liegt wenigstens um $\Delta E = \frac{\hbar}{2} \sqrt{V^n(x_{min})/m}$ über $V_{min} = V(x_{min})$

e) Der harmonische Oszillator

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} X^2 \quad (5.14)$$

(universell wegen harmonischer Näherung: $V(x) = V_0 + \frac{1}{2}V_0''(x-x_0)^2 + \dots$ mit $V'(x_0) = 0$, $V_0 = V(x_0)$, $V_0'' = V''(x_0) \geq 0 \rightsquigarrow \omega^2 = \frac{V_0''}{m}$)

charakteristische Größen:

$$E_0 = \hbar\omega, p_0 = \sqrt{mE_0} = \sqrt{\hbar m\omega}, x_0 = \frac{\hbar}{p_0} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad (5.15)$$

→ skaliere Dimension raus!

$$E = \epsilon E_0, p = \pi p_0, x = \xi x_0 \rightsquigarrow \epsilon, \pi, \xi \text{ dimensionslos}$$

$$\Rightarrow H = \frac{\hbar\omega}{2} \left(\frac{P^2}{\hbar m\omega} + \frac{m\omega}{\hbar} X^2 \right) \rightsquigarrow \frac{H}{E_0} = \frac{1}{2} (\Pi^2 + \Xi^2)$$

mit Π : Operator mit EW= π , Ξ : Operator mit EW= ξ

Vertauschungsrelation:

$$[\Xi, \Pi] = \frac{1}{x_0 p_0} [X, P] = \frac{1}{\hbar} i\hbar = i$$

$$\text{stationäre Schrödinger-Gleichung: } \frac{H}{\hbar\omega} |\phi\rangle = \frac{1}{2} (\Pi^2 + \Xi^2) |\phi\rangle = \epsilon |\phi\rangle \quad (5.16)$$

gesucht: diskretes Energiespektrum $\{E_n\}$ und Eigenkets $|\phi_n\rangle$

Ortsraum: $\Xi \rightarrow \xi, \Pi \rightarrow -i\partial_\xi$

$$\text{Schrödinger-Gleichung: } -\partial_\xi^2 \phi(\xi) + \xi^2 \phi(\xi) = 2\epsilon \phi(\xi) \quad |\phi| < \infty, \int |\phi|^2 d\xi = 1$$

noch besser: Faktorisierung

- klassisch: $\xi^2 + \pi^2 = (\xi + i\pi)(\xi - i\pi)$
- quantentheoretisch: $\Xi^2 + \Pi^2 = \frac{1}{2}(\Xi + i\Pi)(\Xi - i\Pi) + \frac{1}{2}(\Xi - i\Pi)(\Xi + i\Pi)$

definiere:

$$a := \frac{1}{\sqrt{2}}(\Xi + i\Pi) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} X + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} P$$

$$a^\dagger := \frac{1}{\sqrt{2}}(\Xi - i\Pi) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} X - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} P$$

⇒ a, a^\dagger nicht hermitesch!

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

$$[\Xi, \Pi] = i \rightsquigarrow [a, a^\dagger] = 1 \quad (5.17)$$

$$H = \frac{1}{2} \hbar\omega (a^\dagger a + a^\dagger a + [a, a^\dagger]) = \hbar\omega (a^\dagger a + \frac{1}{2}) =: \hbar\omega (N + \frac{1}{2}), \quad \text{mit } N = a^\dagger a \text{ hermitesch} \quad (5.18)$$

zu lösen:

$$\text{Eigenwertproblem für } N: N|n\rangle = n|n\rangle \quad \text{mit ON-Basis: } \langle n|m\rangle = \delta_{n,m} \quad (5.19)$$

Heisenberg-Algebra: $[a, a^\dagger] = 1$ ($[a, 1] = 0 = [a^\dagger, 1]$)

Oszillator-Algebra: $[N, a] = -a, [N, a^\dagger] = a^\dagger$ zusätzlich zur H-Algebra

denn: $[N, a] = a^\dagger a a - a a^\dagger a = -[a, a^\dagger] a = -a, [N, a^\dagger] = a^\dagger a a^\dagger - a^\dagger a^\dagger a = a^\dagger [a, a^\dagger] = a^\dagger$

- $n = \langle n|N|n \rangle = \langle n|a^\dagger a|n \rangle = (\langle n|a^\dagger)(a|n \rangle) = \|a|n \rangle\|^2 \geq 0$ (Hilbertraum: Norm² ≥ 0)

- $N(a|n \rangle) = Na|n \rangle = aN|n \rangle + [N, a]|n \rangle = aN|n \rangle - a|n \rangle = (n-1)a|n \rangle$
 $\curvearrowright a|n \rangle \sim |n-1 \rangle$; Normierung: $|n-1 \rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}a|n \rangle$, d.h.: $a|n \rangle = \sqrt{n}|n-1 \rangle$

iteriere:

$$a^2|n \rangle = \sqrt{na}|n-1 \rangle = \sqrt{n(n-1)}|n-2 \rangle$$

$$a^k|n \rangle = \sqrt{n(n-1) \cdots (n-k+1)}|n-k \rangle; a \text{ heisst „Absteiger“ oder „Vernichter“}$$

- Problem: beim Absteigen finden wir Eigenwerte $n, n-1, n-2, \dots, n-k, \dots \rightarrow$ wird irgendwann negativ
 \exists Eigenzustände $|n-k \rangle$ mit $\| |n-k \rangle \|^2 < 0$ für k genügend groß!

Ausweg: $|n \rangle \xrightarrow{a} |n-1 \rangle \xrightarrow{a} \dots \xrightarrow{a} |1 \rangle \xrightarrow{a} |0 \rangle \xrightarrow{a} 0$ Abbruch, da $a|0 \rangle = 0$ (Vorsicht: $|0 \rangle \neq 0!$)

$$\exists \text{ Grundzustand „Vakuu“ } |0 \rangle \text{ mit } a|0 \rangle = 0 \Rightarrow \text{Spektrum}(N) = \{0, 1, 2, 3, \dots\} \quad (5.20)$$

- $N(a^\dagger|n \rangle) = Na^\dagger|n \rangle = a^\dagger N + [N, a^\dagger]|n \rangle = a^\dagger n|n \rangle + a^\dagger|n \rangle = (n+1)(a^\dagger|n \rangle)$
Normierung: $|n+1 \rangle = \frac{1}{\sqrt{n+1}}a^\dagger|n \rangle$, weil $\langle n+1|n+1 \rangle = \frac{1}{n+1}\langle n|aa^\dagger|n \rangle = \frac{1}{n+1}\langle n|N+1|n \rangle = 1$, d.h.:
 $a^\dagger|n \rangle = \sqrt{n+1}|n+1 \rangle$

iteriere, starte bei $n=0$:

$$|1 \rangle = a^\dagger|0 \rangle, \quad |2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}a^{\dagger 2}|0 \rangle, \quad |3 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot 3}}a^{\dagger 3}|0 \rangle$$

$$|n \rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n|0 \rangle \quad a^\dagger \text{ heisst „Aufsteiger“ oder „Erzeuger“} \quad (5.21)$$

- Konstruktion der Wellenfunktion
zuerst finden: $\phi_0(\xi) := \langle \xi|0 \rangle \quad a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Xi + i\Pi) \doteq \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi + i\frac{1}{i}\partial_\xi)$
definiere Gleichung: $\langle \xi|a|0 \rangle = 0 \quad \curvearrowright \quad (\partial_\xi + \xi)\phi_0(\xi) = 0$

$$\text{Lösung: } \phi_0(\xi) = \pi^{-\frac{1}{4}}e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \quad \text{minimales Gauss-Paket} \quad (5.22)$$

angeregte Zustände:

$$\phi_n(\xi) = \langle \xi|n \rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\langle \xi|(a^\dagger)^n|0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}2^{-\frac{n}{2}}(-\partial_\xi + \xi)^n\phi_0(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}}H_n(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \quad (5.23)$$

Hermite-Polynome: $H_n(\xi) = e^{\frac{1}{2}\xi^2}(\xi - \partial_\xi)^n e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \stackrel{\text{Identität}}{=} (-1)^n e^{\xi^2} \partial_\xi^n e^{-\xi^2} = 2^n \xi^n + \mathcal{O}(\xi^{n-2})$

– orthogonal bzgl. des Integrationsmaßes $d\mu = d\xi e^{-\xi^2}$, d.h.: $\int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-\xi^2} H_n(\xi)H_m(\xi) = \sqrt{\pi} 2^n n! \delta_{n,m}$

– erzeugende Funktion: $e^{-t^2+2t\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} t^n H_n(\xi)$

– erfüllen Dgl.: $(\partial_\xi^2 - 2\xi\partial_\xi + 2n)H_n(\xi) = 0$

– Symmetrie und Knotenzahl: $H_n(-\xi) = (-1)^n H_n(\xi)$, H_n hat n Knoten

Beispiele: $H_0 = 1, H_1 = 2\xi, H_2 = 4\xi^2 - 2, H_3 = 8\xi^3 - 12\xi, H_4 = 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12, \dots$

- Form der Operatoren in Energie-Eigenbasis $\{|n \rangle\}$:

$$a \doteq (a_{lm}) \quad a_{lm} = \langle l|a|m \rangle = \sqrt{m} \langle l|m-1 \rangle = \sqrt{m} \delta_{l,m-1}$$

$$a_{lm}^\dagger = \langle l|a^\dagger|m \rangle = \sqrt{m+1} \langle l|m+1 \rangle = \sqrt{m+1} \delta_{l,m+1}$$

$$N_{lm} = \langle l|N|m \rangle = m \langle l|m \rangle = m \delta_{l,m}$$

$$\begin{aligned}
(a_{lm}) &\doteq \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & \dots & \vdots \\ \vdots & & 0 & \sqrt{3} & \vdots \\ & & & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \end{pmatrix} & (a_{lm}^\dagger) &\doteq \begin{pmatrix} 0 & \dots & \dots & 0 \\ \sqrt{1} & 0 & & \vdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \end{pmatrix} \\
aa^\dagger &\doteq \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 2 & 0 & & \vdots \\ \vdots & & 3 & & \vdots \\ & & & 4 & \vdots \\ 0 & & & & \ddots \end{pmatrix} & a^\dagger a &\doteq \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & & \vdots \\ \vdots & & 2 & \ddots & \vdots \\ & & & 3 & \vdots \\ 0 & & & & \ddots \end{pmatrix} \Rightarrow aa^\dagger - a^\dagger a = \mathbb{1}
\end{aligned}$$

man sieht explizit, dass $\dim \mathcal{H} = \infty$ nötig:

$$0 = \text{tr}(aa^\dagger) - \text{tr}(a^\dagger a) = \text{tr}(aa^\dagger - a^\dagger a) = \text{tr}([a, a^\dagger]) = \text{tr}(\mathbb{1}) = \dim \mathcal{H}$$

$\leadsto \dim \mathcal{H} = \infty$

zurück zu dimensionalen Größen:

$$\langle x|n\rangle = \phi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}, \quad E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad (\text{da } H = \hbar\omega(N + \frac{1}{2})) \quad (5.24)$$

- Schwankungen und Erwartungswerte:

$$X = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger)x_0 \quad P = \frac{1}{i\sqrt{2}}(a - a^\dagger)p_0$$

$$\langle n|X|n\rangle \sim \langle n|a + a^\dagger|n\rangle = 0, \quad \langle n|P|n\rangle = 0$$

$$\begin{aligned}
df(\Delta X)^2 \text{ für } |n\rangle &= \langle n|X^2|n\rangle = \frac{1}{2}x_0^2 \langle n|a^2 + aa^\dagger + a^\dagger a + a^{\dagger 2}|n\rangle \\
&= \frac{1}{2}x_0^2 \langle n|2N + 1|n\rangle = \frac{1}{2}x_0^2(2n + 1)
\end{aligned}$$

$$(\Delta P)^2 \text{ für } |n\rangle = \frac{1}{2}p_0^2(2n + 1)$$

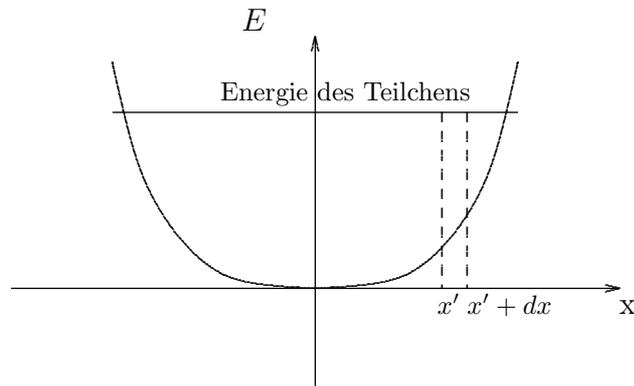
$$\Rightarrow \Delta X \Delta P = x_0 p_0 \left(n + \frac{1}{2}\right) = \hbar \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (5.25)$$

Virialsatz: $\langle n|T|n\rangle = \langle n|V|n\rangle = \frac{1}{2} = \frac{1}{2}\hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$

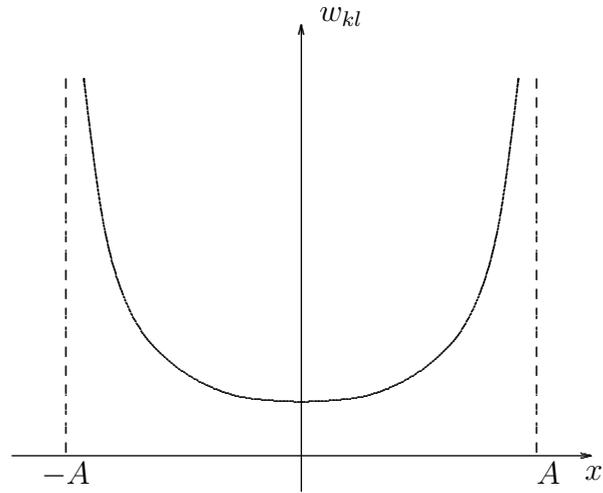
- Wellenpaket für $n \rightarrow \infty$ (klassischer Grenzwert):

Wahrscheinlichkeitsverteilung im Ortsraum: $w_x(|\psi\rangle) = |\langle x|\psi\rangle|^2$

klassisch: $w_{kl}(x)dx = \frac{dt}{T}$ mit $dt =$ Aufenthaltsdauer in $[x, x + dx]$, $T = \frac{2\pi}{\omega}$, $x(t) = A \sin \omega t$, $E = \frac{1}{2}m\omega^2 A^2$

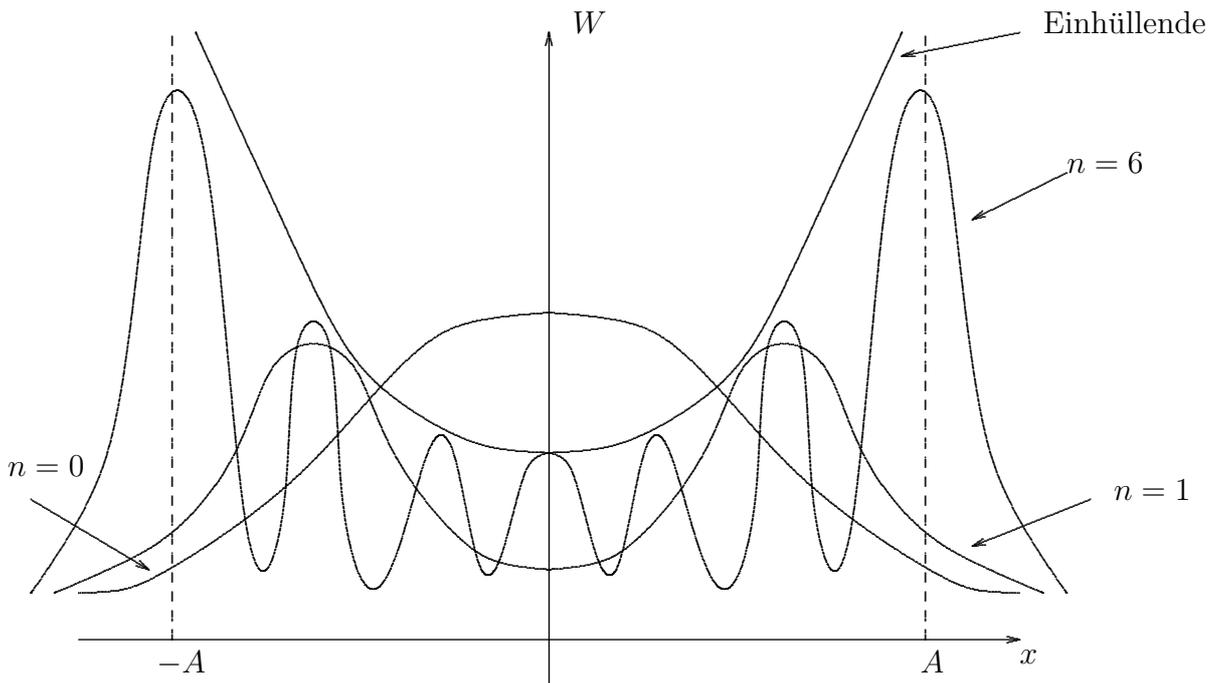


$$\leadsto w_{kl}(x) = \frac{1}{T} \frac{dt}{dx} = \frac{\omega}{2\pi} (\dot{x})^{-1} = \frac{1}{2\pi\sqrt{A^2 - x(t)}}$$



quantenmechanisch: gebe $|n\rangle$ vor ($E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$)

$$w_x(|n\rangle) = |\langle x|n\rangle|^2 \propto H_n\left(\frac{x}{x_0}\right)^2 e^{(-\frac{x}{x_0})^2}$$



Einhüllende $\xrightarrow{n \rightarrow \infty} w_{kl}$

VI Drehimpuls

a) Symmetrien in der Quantentheorie

klassisch: kanonische Transformation mit $H' = H$ im Phasenraum:

$$(q, p) \mapsto (q'(q, p), p'(q, p))$$

Betrachte eine Schar solcher Transformationen mit Parameter ε (und $\varepsilon = 0 \rightsquigarrow$ Identität).

Noether:

- \exists Erhaltungsgröße $g(q, p)$, d.h. $\frac{d}{dt} g(q, p) = 0$
- g „erzeugt“ die Symmetrie-Transformation vermöge $\delta\omega = \varepsilon \{ \omega, g \}$
 $\delta\omega$: infinitesimale Transformation von $\omega(q, p)$

quantentheoretisch: observabel sind nur die Erwartungswerte

$$\langle \psi | \Omega | \psi \rangle \mapsto \langle \psi | \Omega | \psi \rangle' \text{ so, dass } \langle \psi | H | \psi \rangle, \langle \psi | \psi \rangle \text{ invariant ist.}$$

Realisiert durch unitäre Transformation U :

$$|\psi\rangle \mapsto |\psi'\rangle = U |\psi\rangle, \quad U^\dagger U = \mathbf{1}$$

\rightsquigarrow **Wigner-Theorem**: Symmetrie-Transformationen sind unitär (oder anti-unitär)

$$\langle \psi | U^\dagger H U | \psi \rangle \stackrel{!}{=} \langle \psi | H | \psi \rangle \rightsquigarrow U^\dagger H U = H \rightsquigarrow [U, H] = 0; \quad (6.1)$$

Für eine Schar $U(\varepsilon)$ mit $U(0) = \mathbf{1}$:

infinitesimal:

$$U(\varepsilon) = \mathbf{1} - \frac{1}{\hbar} \varepsilon G + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \text{ definiert „Erzeugende“ oder „Generator“ } G \quad (6.2)$$

$$U^\dagger U = \mathbf{1} \Leftrightarrow G^\dagger = G, \quad [U, H] = 0 \Leftrightarrow [G, H] = 0 \quad (6.3)$$

Noether aus Ehrenfest:

$$\frac{d}{dt} \langle G \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [G, H] \rangle = 0, \text{ denn } \partial_t G = 0, [G, H] = 0 \quad (6.4)$$

Umkehrung:

$$U(\varepsilon) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\mathbf{1} - \frac{i\varepsilon}{\hbar N} G \right)^N \text{ endliche Transformation} \quad (6.5)$$

Alternativ: **Transformation von Observablen**

$$\Omega \rightarrow \Omega' = U^\dagger \Omega U = e^{\frac{i\varepsilon}{\hbar} G} \Omega e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar} G} \stackrel{\text{BCH}}{=} e^{\frac{i\varepsilon}{\hbar} \text{ad } G} \text{ mit } \text{ad } G \cdot \Omega := [G, \Omega] \quad (6.6)$$

Beispiel: Translationen

$$\begin{aligned} U(\varepsilon) &= e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar} P} \\ \psi'(x) &= \langle x | \psi \rangle' = \langle x | U(\varepsilon) | \psi \rangle \quad \left| \quad P \doteq \frac{\hbar}{i} \partial_x \right. \\ &= e^{-\varepsilon \partial_x} \langle x | \psi \rangle = \langle x - \varepsilon | \psi \rangle = \psi(x - \varepsilon) \quad \checkmark \\ X' &= U^\dagger(\varepsilon) X U(\varepsilon) = X + \varepsilon \mathbf{1}, \quad P' = P \end{aligned}$$

Symmetrie, falls

$$[U, H] = 0 \Leftrightarrow [P, H] = 0 \Leftrightarrow V'(X) = 0 \Leftrightarrow V = \text{const} \quad \left| \quad H = \frac{P^2}{2m} + V(X) \right.$$

Erzeugende = P

b) Drehimpulsalgebra und ihre Darstellungen

jetzt gilt $d = 3$

klassisch:

$$\vec{M} = \vec{r} \times \vec{p}$$

quantentheoretisch:

$$\vec{M} = \vec{R} \times \vec{P} \Leftrightarrow M_i = \varepsilon_{ijk} X_j P_k \quad [X_i, P_j] = i\hbar \delta_{ij}$$

praktischer: $\vec{L} = \frac{1}{\hbar} \vec{M}$ dimensionslos, $L_i^\dagger = L_i$ hermitesch, außerdem ist $\vec{L}^2 = \sum_{i=1}^3 L_i^2$

Kommutatoren

$$\begin{aligned} [L_i, X_j] &= \frac{1}{\hbar} [\varepsilon_{ikl} X_k P_l, X_j] = \frac{1}{\hbar} \varepsilon_{ikl} X_k [P_l, X_j] = \frac{1}{\hbar} \varepsilon_{ikl} X_k (-i\hbar \delta_{lj}) = i\varepsilon_{ijk} X_k \\ [L_i, P_j] &= i\varepsilon_{ijk} P_k \end{aligned}$$

Struktur:

$$[L_i, \text{Vektor}_j] = i\varepsilon_{ijk} \text{Vektor}_k \quad (\text{kann als Definition eines „Vektor-Operators“ dienen}) \quad (6.9)$$

$$\begin{aligned} [L_i, \vec{R}^2] &= \left[L_i, \sum_k X_k^2 \right] = \sum_k (X_k [L_i, X_k] + [L_i, X_k] X_k) = i \sum_k \varepsilon_{ikl} (X_k X_l + X_l X_k) = 0 \\ [L_i, \vec{P}^2] &= 0 \\ [L_i, \vec{P} \vec{R}] &= 0 \end{aligned}$$

Struktur:

$$[L_i, \text{Skalar}] = 0 \quad (6.10)$$

Beispiel

$$[L_i, H] = \left[L_i, \frac{P^2}{2m} + V(\vec{R}) \right] = [L_i, V(\vec{R})] = 0, \text{ falls } V \text{ rotationsinvariant ist, d.h. } V = f(\vec{R}^2)$$

Was ist $[L_i, L_j]$?

$$\begin{aligned} [L_i, L_j] &= \frac{1}{\hbar} [L_i, \varepsilon_{jkl} X_k P_l] = \frac{1}{\hbar} \varepsilon_{jkl} (X_k [L_i, P_l] + [L_i, X_k] P_l) \\ &= \frac{1}{\hbar} (\varepsilon_{jkl} \varepsilon_{ilm} X_k P_m + \varepsilon_{jkl} \varepsilon_{ikm} X_m P_l) \\ &= \frac{1}{\hbar} [(\delta_{jm} \delta_{ki} - \delta_{ji} \delta_{km}) X_k P_m + (\delta_{ji} \delta_{lm} - \delta_{jm} \delta_{il}) X_m P_l] \\ &= \frac{1}{\hbar} (X_i P_j - X_j P_i) = i\varepsilon_{ijk} L_k \end{aligned}$$

$$[L_i, L_j] = i\varepsilon_{ijk} L_k \quad \text{Kurzschreibweise: „}\vec{L} \times \vec{L} = i\vec{L}\text{“} \quad (6.11)$$

$$[\vec{L}^2, L_j] = 0 \quad \vec{L}^2 \text{ ist ein sogenannter „Casimir-Operator“} \quad (6.12)$$

Konsequenzen

$$(\Delta L_1)(\Delta L_2) \geq \frac{1}{2} |\langle L_3 \rangle| \quad \text{aber } \vec{L}^2, L_3 \text{ simultan scharf}$$

$$(\Delta L_3)(\Delta X_2) \geq \frac{1}{2} |\langle X_1 \rangle| \quad \curvearrowright \text{ in Eigenzustand von } L_3 \text{ ist } \Delta L_3 = 0$$

\Rightarrow Ebenso ist dann $\langle X_1 \rangle = \langle X_2 \rangle = \langle P_1 \rangle = \langle P_2 \rangle = 0$.

Definiere nützliche Linearkombinationen

$$L_{\pm} := L_1 \pm iL_2 \quad , \quad L_+^{\dagger} = L_- \quad (6.13)$$

Wir erhalten damit das neue Tripel $\{L_1, L_2, L_3\} \longrightarrow \{L_+, L_-, L_3\}$ mit L_+, L_- wie oben.

Kommutatoren:

$$\left. \begin{aligned} [L_3, L_+] &= L_+ \\ [L_3, L_-] &= -L_- \end{aligned} \right\} [L_3, L_{\pm}] = \pm L_{\pm} \quad (6.14)$$

$$[L_+, L_-] = 2L_3 \quad (6.15)$$

$$[\vec{L}^2, L_{\pm}] = 0 \quad (6.16)$$

Anmerkung: Diese Gleichungen lassen sich auch als Eigenwert-Gleichung für ad L_3 lesen.

$$\left. \begin{aligned} \vec{L}^2 &= L_+L_- + L_3^2 - L_3 \\ &= L_-L_+ + L_3^2 + L_3 \end{aligned} \right\} L_{\mp}L_{\pm} = \vec{L}^2 - L_3^2 \mp L_3 \quad (6.17)$$

Finde das gemeinsame Eigenwertspektrum von \vec{L}^2 und L_3 !

Trick: L_{\pm} verbinden verschiedene Eigenkets $|\lambda, \mu\rangle$, definiere $\vec{L}^2 |\lambda, \mu\rangle = \lambda |\lambda, \mu\rangle, L_3 |\lambda, \mu\rangle$, normiert auf 1

Was wird mit $L_{\pm} |\lambda, \mu\rangle$?

$$\begin{aligned} \vec{L}^2 (L_{\pm} |\lambda, \mu\rangle) &= L_{\pm} \vec{L}^2 |\lambda, \mu\rangle \\ &= \lambda (L_{\pm} |\lambda, \mu\rangle) \\ L_3 (L_{\pm} |\lambda, \mu\rangle) &= L_{\pm} L_3 |\lambda, \mu\rangle + [L_3, L_{\pm}] |\lambda, \mu\rangle \\ &= \mu L_{\pm} |\lambda, \mu\rangle \pm L_{\pm} |\lambda, \mu\rangle \\ &= (\mu \pm 1) (L_{\pm} |\lambda, \mu\rangle) \end{aligned}$$

d.h.

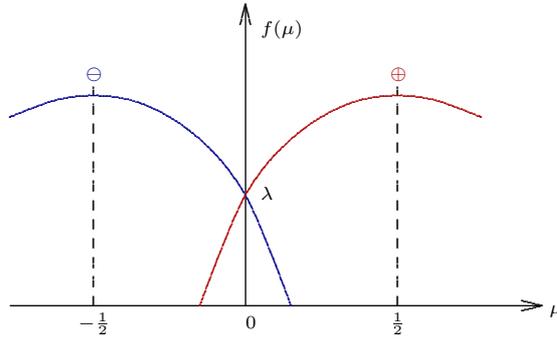
$$L_{\pm} : |\lambda, \mu\rangle \longmapsto N_{\lambda, \mu} |\lambda, \mu \pm 1\rangle \quad \text{„Leiter-Operatoren“}$$

iteriert:

$$\left. \begin{aligned} \vec{L}^2 (L_{\pm}^m |\lambda, \mu\rangle) &= \lambda (L_{\pm}^m |\lambda, \mu\rangle) \\ L_3 (L_{\pm}^m |\lambda, \mu\rangle) &= (\mu \pm m) (L_{\pm}^m |\lambda, \mu\rangle) \end{aligned} \right\} (*)$$

Einschränkungen an (λ, μ) durch Positivität der Norm: $\langle \lambda, \mu | \lambda, \mu \rangle = 1$

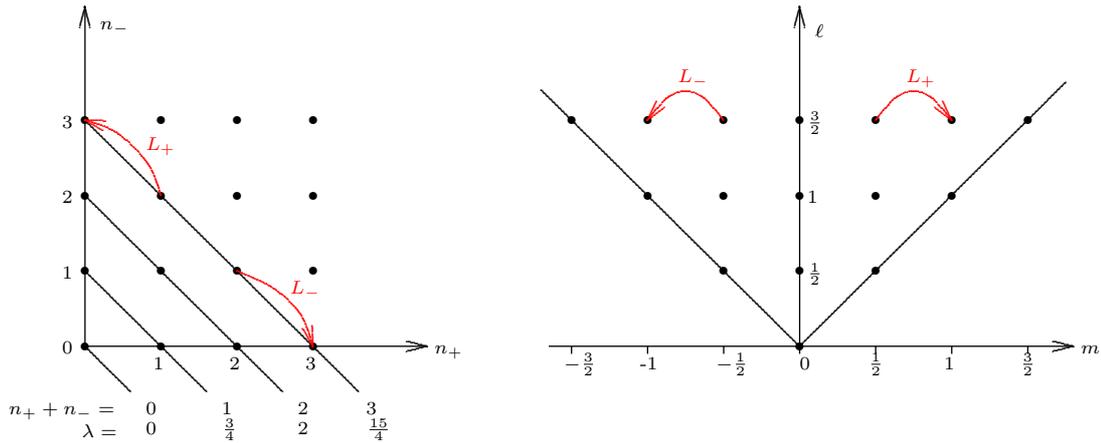
$$\begin{aligned} |L_{\pm} |\lambda, \mu\rangle|^2 &= \langle \lambda, \mu | L_{\mp} L_{\pm} |\lambda, \mu\rangle \\ &\stackrel{6.17}{=} \langle \lambda, \mu | (\vec{L}^2 - L_3^2 \mp L_3) |\lambda, \mu\rangle \\ &= \lambda - \mu^2 \mp \mu \stackrel{!}{\geq} 0 \\ |L_{\pm}^{m+1} |\lambda, \mu\rangle|^2 &= \langle \lambda, \mu | L_{\mp}^{m+1} L_{\pm}^{m+1} |\lambda, \mu\rangle \\ &= \langle \lambda, \mu | L_{\mp}^m (L_{\mp} L_{\pm}) L_{\pm}^m |\lambda, \mu\rangle \\ &= \langle \lambda, \mu | L_{\mp}^m (\vec{L}^2 - L_3^2 \mp L_3) L_{\pm}^m |\lambda, \mu\rangle \\ &\stackrel{*}{=} \langle \lambda, \mu | L_{\mp}^m (\lambda - (\mu \pm m)^2 \mp (\mu \pm m)) L_{\pm}^m |\lambda, \mu\rangle \\ &= [\lambda - (\mu \pm m)^2 \mp (\mu \pm m)] \cdot |L_{\pm}^m |\lambda, \mu\rangle|^2 \\ &\stackrel{\text{iteriere}}{=} \prod_{k=0}^m \underbrace{[\lambda - (\mu \pm k)^2 \mp (\mu \pm k)]}_{f(\mu \pm k)} \cdot | |\lambda, \mu\rangle|^2 \stackrel{!}{\geq} 0 \end{aligned}$$



Diese Faktoren werden irgendwann negativ, es sei denn einer verschwindet. D.h. es muss ein n_+ und ein n_- geben mit $L_{\pm}^{n_{\pm}+1} |\lambda, \mu\rangle = 0 \Leftrightarrow \lambda - (\mu \pm n_{\pm})^2 \mp (\mu \pm n_{\pm}) = 0$ (Abbruchbedingungen). Differenz liefert:

$$\begin{aligned} (n_+ + n_- + 1)(2\mu + n_+ - n_-) &= 0 \quad \leadsto \quad 2\mu + n_+ - n_- = 0 \quad \leadsto \quad \mu = \frac{n_- - n_+}{2} \\ \leadsto \quad \mu + n_+ &= \frac{n_+ + n_-}{2}, \mu - n_- = -\frac{n_+ + n_-}{2} \quad \leadsto \quad \lambda = (\mu + n_+)(\mu + n_+ + 1) \stackrel{!}{=} \frac{n_+ + n_-}{2} \left(\frac{n_+ + n_-}{2} + 1 \right) \end{aligned}$$

Für jedes Paar (n_+, n_-) gibt es genau eine Lösung $(\lambda, \mu) \longleftrightarrow$ Eigenket $|\lambda, \mu\rangle$.



Bessere Notation:

$$\begin{aligned} \frac{n_- - n_+}{2} &= \mu =: m \quad \text{„Gewicht“} \\ \frac{n_- + n_+}{2} &=: \ell \quad \text{„Spin“} \quad \longrightarrow \quad \lambda = \ell(\ell + 1) \end{aligned}$$

Mögliche Werte: $\ell = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$ und $m = -\ell, -\ell + 1, \dots, \ell - 1, \ell$ für festes ℓ

Wir erhalten eine Orthonormalbasis $\{|\ell, m\rangle\}$ von „Gewichtsvektoren“ $|\ell, m\rangle$ mit $\langle \ell, m | \ell', m' \rangle = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}$ und $|L_{\pm} |\ell, m\rangle|^2 = \lambda - \mu^2 \mp \mu = \ell(\ell + 1) - m^2 \mp m = (\ell \pm m + 1)(\ell \mp m)$. Es gilt:

$$L_{\pm} |\ell, m\rangle = \sqrt{(\ell \pm m + 1)(\ell \mp m)} |\ell, m \pm 1\rangle \quad (6.18)$$

$$L_3 |\ell, m\rangle = m |\ell, m\rangle \quad (6.19)$$

$$\vec{L}^2 |\ell, m\rangle = \ell(\ell + 1) |\ell, m\rangle \quad (6.20)$$

Speziell: $L_+ |\ell, \ell\rangle = 0$ und $L_- |\ell, -\ell\rangle = 0$ „höchster bzw. tiefster Gewichtsvektor“

Für jeden erlaubten ℓ -Wert haben wir einen $(2\ell+1)$ -dimensionalen Vektorraum $\mathcal{R}_{\ell} = \langle |\ell, -\ell\rangle, \dots, |\ell, +\ell\rangle \rangle$ ($2\ell+1$

Basisvektoren) gefunden. Auf \mathcal{R}_ℓ operieren die L_i , d.h. wir haben eine hermitesche (irreduzible) Darstellung \mathcal{D}_ℓ der Drehimpulsalgebra konstruiert:

$$\mathcal{D}_\ell: L_i \mapsto \mathcal{D}_\ell(L_i) \quad (2\ell + 1) \times (2\ell + 1)\text{-Matrix}$$

$$(\ell = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots \Rightarrow 2\ell + 1 = 1, 2, 3, 4, 5, \dots)$$

Dies sind **alle** irreduziblen endlich-dimensionalen (\longleftrightarrow hermiteschen) Darstellungen.

Beispiel:

Spin 0 trivial, $L_i = 0$

Spin $\frac{1}{2}$ $\mathcal{D}_{\frac{1}{2}}$ ist zweidimensional, $\mathcal{R}_{\frac{1}{2}} = \langle |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle, |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \rangle = \langle \vec{e}_1, \vec{e}_2 \rangle$

$$\begin{aligned} L_+ |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle &= |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle & L_- |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle &= 0 \\ L_+ |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle &= 0 & L_- |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle &= |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \end{aligned}$$

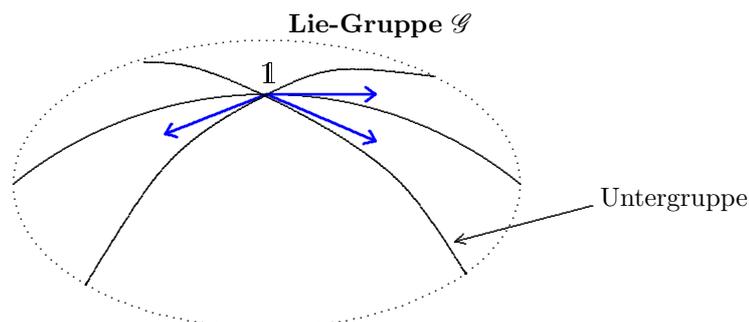
$$\left. \begin{aligned} L_+ &\doteq \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ L_- &\doteq \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \begin{cases} L_1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \sigma_1 \\ L_2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \sigma_2 \\ L_3 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \sigma_3 \end{cases}$$

$$\text{Spin 1} \quad L_3 \doteq \begin{pmatrix} 1 & & \\ & 0 & \\ & & -1 \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{Basiswechsel}} L_3 \doteq \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Auf den \mathcal{R}_ℓ operiert die Darstellung \mathcal{U}_ℓ der Drehgruppe durch Exponentiation der Darstellung \mathcal{D}_ℓ der Drehimpulsalgebra.

$$\mathcal{U}_\ell(e^{-i\theta^j L_j}) = e^{-i\theta^j \mathcal{D}_\ell(L_j)}$$

Wir haben schon einen Darstellungsraum, nämlich $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$, aber dieser ist ∞ -dimensional.



Tangentialvektoren bilden Tangentialraum an das $\mathbf{1}$ -Element
Tangentialraum = Lie-Algebra \mathcal{L}

Gruppe U : $\mathcal{G} \ni g \mapsto U(g)$ unitäre $d \times d$ -Matrix

Lie-Algebra \mathcal{D} : $G \mapsto \mathcal{D}(G)$ hermitesche $d \times d$ -Matrizen

Erzeugende G : $G = \alpha^i G_i \in \mathcal{L}$

Drehgruppe $\mathcal{G} SO(3) \leftrightarrow$ Drehimpulsalgebra $\mathcal{L} = so(3)$
Dim.=3 Generatoren L_i $i = 1, 2, 3$
 $[L_i, L_j] = i\varepsilon_{ijk} L_k$

Es gibt irreduzible Darstellungen jeder Dimension $d = 2\ell + 1$, $\ell = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots$ heißt Spin (diese sind vollständig und eindeutig)

Bezeichnung: \mathcal{D}_ℓ

Darstellungsraum \mathcal{R}_ℓ mit Basis $\{|\ell, m\rangle : m = -\ell \dots + \ell\}$

$$\text{Eigenkets zu } \begin{cases} \vec{L}^2 |\ell, m\rangle &= \ell(\ell + 1) |\ell, m\rangle \\ L_z |\ell, m\rangle &= m |\ell, m\rangle \end{cases}$$

Es gibt eine unendlich-dimensionale Darstellung \mathcal{D}_∞ auf $L^2(\mathbb{R}^3)$. (Darstellung auf Funktionen im \mathbb{R}^3)

$$L_i = \frac{1}{\hbar} \varepsilon_{ijk} X_j P_k \doteq \underbrace{\frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} x_j \frac{\partial}{\partial x^k}}_{\mathcal{D}_\infty(L_i)}, \quad \text{d.h. } \vec{L} \doteq \frac{1}{i} \vec{r} \times \vec{\nabla}$$

Prüfe $[\mathcal{D}_\infty(L_i), \mathcal{D}_\infty(L_j)] = i\varepsilon_{ijk} \mathcal{D}_\infty(L_k)$

z.B. $\vec{r} = (x, y, z)$ $[\frac{1}{i}(y\partial_z - z\partial_y), \frac{1}{i}(z\partial_x - x\partial_z)] f \stackrel{!}{=} (x\partial_y - y\partial_x)f$

$$\begin{aligned} [L, \vec{R}^2] = 0 &\quad \curvearrowright \quad \mathcal{D}_\infty(L_i) \text{ sind gebaut aus } \Theta, \Phi, \partial_\Theta, \partial_\Phi \text{ in Kugelkoordinaten, kein } r, \partial_r \\ &\quad \curvearrowright \quad \mathcal{R}_\infty = L^2(S^2) \text{ Funktionen auf Sphäre } \psi(\Theta, \Phi) \end{aligned}$$

explizit:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_\infty(L_3) &= \frac{1}{i} \partial_\Phi \\ \mathcal{D}_\infty(L_\pm) &= e^{\pm i\Phi} (\pm \partial_\Theta + i \cot \Theta \partial_\Phi) \\ \mathcal{D}_\infty(\vec{L}^2) &= -\frac{1}{\sin \Theta} \partial_\Theta \sin \Theta \partial_\Theta - \frac{1}{\sin^2 \Theta} \partial_\Phi^2 \end{aligned} \quad (6.21)$$

Eigenbasis gegeben durch Kugelflächenfunktionen $Y_{\ell m}(\Theta, \Phi)$, $\ell = 0, 1, 2, 3, \dots$ $m = -\ell, \dots, +\ell$

$$\mathcal{D}_\infty(L_3) Y_{\ell m} = m Y_{\ell m}, \quad \mathcal{D}_\infty(\vec{L}^2) Y_{\ell m} = \ell(\ell + 1) Y_{\ell m} \quad (6.22)$$

vollständige Basis \rightarrow jede Funktion in Θ, Φ läßt sich in $Y_{\ell m}$ entwickeln.

\mathcal{D}_∞ ist reduzibel:

$$\begin{array}{rccccccc} \mathcal{D}_\infty & = & \mathcal{D}_0 & \oplus^5 & \mathcal{D}_1 & \oplus & \mathcal{D}_3 & \oplus & \dots \\ \mathcal{R} & = & \mathcal{R}_0 & \oplus & \mathcal{R}_1 & \oplus & \mathcal{R}_2 & \oplus & \dots \\ & & \uparrow & & \uparrow & & \uparrow & & \\ \text{Basis:} & & Y_{00} & & Y_{11} & & Y_{2m} & & \\ & & & & Y_{10} & & m = -2, -1, 0, 1, 2 & & \\ & & & & Y_{1-1} & & \vdots & & \end{array} \quad (6.23)$$

Warum nur ganzzahlige Spins ℓ ? $e^{im\Phi}$ ist nur dann mit der Periode 2π periodisch, falls $m \in \mathbb{Z}$

c) Addition von Drehgruppen

zusammengesetztes System aus 2 Komponenten („bipartit“)

Zustände sind Linearkombinationen von $|\text{Teil 1}\rangle \otimes |\text{Teil 2}\rangle$ ⁶

additive Observable: $O_{\text{total}} = \widehat{O}_{(1)} + \widehat{O}_{(2)} := (O_{(1)} \otimes \mathbf{1}) + (\mathbf{1} \otimes O_{(2)})$

Symmetrien: Generatoren G_i wie Observablen $G^{\text{total}} = \alpha^i (G_i^{(1)} \otimes \mathbf{1}) + \alpha^i (\mathbf{1} \otimes G_i^{(2)})$

endliche Transformation:

$$\begin{aligned} e^{-iG^{\text{total}}} &= e^{-i\alpha^i (G_i^{(1)} \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes G_i^{(2)})} = e^{-i\alpha^i G_i^{(1)} \otimes \mathbf{1}} e^{-i\alpha^i \mathbf{1} \otimes G_i^{(2)}} \\ &= \left(e^{-i\alpha^i G_i^{(1)}} \otimes \mathbf{1} \right) \left(\mathbf{1} \otimes e^{-i\alpha^i G_i^{(2)}} \right) = e^{-i\alpha^i G_i^{(1)}} \otimes e^{-i\alpha^i G_i^{(2)}} \end{aligned}$$

⁵ \oplus ist die direkte Summe

⁶ \otimes ist das Tensorprodukt

Rechenregel für Operatoren: $(A \otimes B)(C \otimes D) = (AC) \otimes (BD)$

Achtung: $[A \otimes B, C \otimes D] \neq [A, C] \otimes [B, D]$

Speziell zum Drehimpuls: Drehimpuls von Teil 1 heie $\vec{L} \rightsquigarrow \hat{L}_i = L_i \otimes \mathbf{1}$
 Drehimpuls von Teil 2 heie $\vec{S} \rightsquigarrow \hat{S}_i = \mathbf{1} \otimes S_i$
 Totaler Drehimpuls heie $\vec{J} \rightsquigarrow J_i = \hat{L}_i + \hat{S}_i$

Test das \vec{J} ein Drehimpuls ist:

$$\begin{aligned} [J_i, J_j] &= [L_i \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes S_i, L_j \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes S_j] \\ &= [L_i, L_j] \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes [S_i, S_j] \\ &= i\varepsilon_{ijk} L_k \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes i\varepsilon_{ijk} S_k = i\varepsilon_{ijk} J_k \quad \checkmark \end{aligned}$$

verwende

$$\begin{aligned} \vec{J}^2 &= \sum_i (L_i \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes S_i)^2 = \sum_i (L_i^2 \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes S_i^2 + 2L_i \otimes S_i) \\ &= \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{L}\hat{S} = \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{L}_3\hat{S}_3 + \hat{L}_+\hat{S}_- + \hat{L}_-\hat{S}_+ \end{aligned} \quad (6.24)$$

Kommutatoren:

$$\begin{aligned} [\hat{L}_i, \hat{S}_j] &= 0 \\ [\vec{J}^2, \hat{L}^2] &= 0 = [\vec{J}^2, \hat{S}^2] \\ [J_3, \hat{L}_3] &= 0 = [J_3, \hat{S}_3] \\ \text{aber: } [\vec{J}, \hat{L}_3] &\neq 0 \neq [\vec{J}, \hat{S}_3] \\ [\vec{J}^2, \hat{L}_3 + \hat{S}_3] &= 0 = [\vec{J}^2, J_3] \end{aligned} \quad (6.25)$$

Basis 1 Eigenkets von $\hat{L}^2, \hat{S}^2, \hat{L}_3, \hat{S}_3 \longrightarrow |\ell, s, m_\ell, m_s\rangle = |\ell, m_\ell\rangle \otimes |s, m_s\rangle \stackrel{\text{kurz}}{\underset{\ell, s \text{ fest}}{=}} |m_\ell, m_s\rangle$ (6.26)

Basis 2 Eigenkets von $\hat{L}^2, \hat{S}^2, \vec{J}^2, J_3 \longrightarrow |\ell, s, j, m\rangle \stackrel{\text{kurz}}{\underset{\ell, s \text{ fest}}{=}} |j, m\rangle$

einfachstes Beispiel:

$\ell = \frac{1}{2}, \quad s = \frac{1}{2} \rightarrow$ Darstellungsraum: $R_{1/2} \otimes R_{1/2} \quad \dim = 2 \cdot 2 = 4$

Darstellung: $\mathcal{D}_{1/2} \otimes \mathcal{D}_{1/2} =: \mathcal{D}_{1/2}^2 \quad m_\ell, m_s \in \{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\}$

Basis 1: $\{|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle, |-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, |-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle\} =: \{|+, +\rangle, |+, -\rangle, |-, +\rangle, |-, -\rangle\}$ (6.27)

Konstruktion von Basis 2: diagonalisiere \vec{J}^2 und J_z

$\mathcal{D}_{1/2}^2(\hat{L}_i) = \frac{1}{2}\sigma_i \otimes \mathbf{1}, \quad \mathcal{D}_{1/2}^2(\hat{S}_i) = \mathbf{1} \otimes \frac{1}{2}\sigma_i$

z.B. $\mathcal{D}_{1/2}^2(\hat{L}_3) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{D}_{1/2}^2(\hat{S}_3) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \boxed{1} & & & \\ & \boxed{-1} & & \\ & & & \boxed{1} \\ & & & & \boxed{-1} \end{pmatrix}$

$\rightsquigarrow \mathcal{D}_{1/2}^2(\hat{J}_3) = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & \boxed{0} & & \\ & & \boxed{0} & \\ & & & -1 \end{pmatrix}$ klar weil $m = m_\ell + m_s$ entartet!

$\mathcal{D}_{1/2}^2(\vec{J}^2) = \dots = \begin{pmatrix} 2 & & & \\ & \boxed{1} & \boxed{1} & \\ & & \boxed{1} & \boxed{1} \\ & & & 2 \end{pmatrix}$

bilde Linearkombination $|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle) \rightsquigarrow \vec{J}^2 |00\rangle = 0, \quad J_3 |00\rangle = 0$
 $|10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle) \rightsquigarrow \vec{J}^2 |10\rangle = 2|10\rangle, \quad J_3 |00\rangle = 0$ (6.28)

neue Notation: $\begin{matrix} |11\rangle & = & |++\rangle \\ |1-1\rangle & = & |--\rangle \end{matrix}$

in neuer Basis $\{|11\rangle, |00\rangle, |10\rangle, |1-1\rangle\}$

$$\hat{J}_3 \doteq \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & \boxed{\begin{matrix} 0 & \\ & 0 \end{matrix}} & & \\ & & & -1 \end{pmatrix} \quad \vec{J}^2 \doteq \begin{pmatrix} 2 & & & \\ & \boxed{\begin{matrix} 0 & \\ & 2 \end{matrix}} & & \\ & & & 2 \end{pmatrix}$$

umordnen: $\{|00\rangle, |11\rangle, |10\rangle, |1-1\rangle\} \Rightarrow$ **Basis 2** (6.29)

wir haben gefunden:

$$J_3 \doteq \left(\begin{array}{c|ccc} 0 & & & \\ \hline & 1 & & \\ & & 0 & \\ & & & -1 \end{array} \right), \quad \vec{J}^2 \doteq \left(\begin{array}{c|ccc} 0 & & & \\ \hline & 2 & & \\ & & 2 & \\ & & & 2 \end{array} \right)$$

Fazit: $\mathcal{D}_{1/2}^2 = \underset{j=0}{\mathcal{D}_0} \oplus \underset{j=1}{\mathcal{D}_1}$ (6.30)

Dimension: $2 \cdot 2 = 1 + 3 \quad \checkmark$ kurz: $\frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2} = 0 \oplus 1$ oder: $\underline{2} \otimes \underline{2} = \underline{1} \oplus \underline{3}$

$$\underbrace{\mathcal{D}_{1/2} \otimes \mathcal{D}_{1/2}}_{\text{mit Basis 1}} = \underbrace{\mathcal{D}_0 \oplus \mathcal{D}_1}_{\text{mit Basis 2}} \quad (6.31)$$

Basis 1: $\{|+\rangle, |-\rangle\} \otimes \{|+\rangle, |-\rangle\} = \{|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle\}$

Basis 2: $\underbrace{\{|0,0\rangle\}}_{j=0} \oplus \underbrace{\{|1,1\rangle, |1,0\rangle, |1,-1\rangle\}}_{j=1}$

Vollständiger Satz kommutierender Observablen:

Basis1: $|m_l, m_s\rangle : \hat{L}^2, \hat{S}^2, \hat{L}_3, \hat{S}_3$ Basis 2: $|j, m\rangle : \hat{L}^2, \hat{S}^2, \hat{J}^2, J_3 \quad m = m_l + m_s$

Basistransformation $1 \rightarrow 2$: $|j, m\rangle_2 = \sum_{m_l, m_s, m=m_l+m_s} |m_l, m_s\rangle_1 \underbrace{\langle m_l, m_s | j, m \rangle_2}_{\text{Clebsch-Gordon-Koeff.}}$

Bsp: $|1, 0\rangle_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle) \rightsquigarrow \langle +- | 1, 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}, \langle -+ | 1, 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}, \langle ++ | 1, 0 \rangle = 0, \langle -- | 1, 0 \rangle = 0$

allgemeine Situation $l \geq s$:

$\mathcal{D}_l \otimes \mathcal{D}_s$: Darstellungsraum $\mathcal{R}_l \otimes \mathcal{R}_s$ hat Dimension $d = (2l+1)(2s+1)$. aber $\mathcal{D}_l \otimes \mathcal{D}_s$ ist reduzibel, d.h. \exists Basis 2 in der für $\vec{J} = \hat{L} + \hat{S}$ gilt :

$$(\mathcal{D}_l \otimes \mathcal{D}_s)(J_i) \doteq \begin{bmatrix} \mathcal{D}_?(J_i) & 0 & & \\ 0 & \mathcal{D}_{?'}(J_i) & & \\ & & \ddots & \end{bmatrix} = \mathcal{D}_?(J_i) \oplus \mathcal{D}_{?'}(J_i) \oplus \dots \quad (6.32)$$

Frage: welche Werte von j tauchen auf?

Lösungstechnik

- beginne mit maximalen $m = m_l + m_s = l + s \rightsquigarrow \exists j = j^{max} = l + s$ „höchstes Gewicht“: $|l, s\rangle = |l + s, l + s\rangle_2$ ist eindeutig

- steige ab innerhalb der Darstellung \mathcal{D}_{l+s} mit $J_- = L_- \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes S_-$:

$$\begin{aligned} J_- |l, s\rangle_1 &= L_- |l\rangle \otimes |s\rangle + |l\rangle \otimes S_- |s\rangle = \sqrt{2l} |l-1, s\rangle_1 + \sqrt{2s} |l, s-1\rangle_1 \\ &= J_- |l+s, l+s\rangle_2 = \sqrt{2(l+s)} |l+s, l+s-1\rangle_2 \end{aligned}$$

- usw. \rightarrow erhalte $|l+s, l+s\rangle_2, |l+s, l+s-1\rangle_2, |l+s, l+s-2\rangle_2, \dots, |l+s, -(l+s)\rangle_2$ als Linearkombination der $|m_l, m_s\rangle \Rightarrow \mathcal{D}_{l+s}$
- „entferne“ \mathcal{D}_{l+s} aus $\mathcal{D}_l \otimes \mathcal{D}_s$ durch Projektion und starte erneut mit $\mathcal{D}_l \otimes \mathcal{D}_s \ominus \mathcal{D}_{l+s}$
- iteriere den Prozeß und erhalte $\mathcal{D}_{l+s}, \mathcal{D}_{l+s-1}, \mathcal{D}_{l+s-2}, \dots, \mathcal{D}_{l-s}$ Frage: Warum bis $l-s$?

$$\rightarrow \text{Dimensionscheck: } d = \sum_{j=l-s}^{l+s} (2j+1) = \frac{1}{2} \underbrace{[2(l+s)+1 + 2(l-s)+1]}_{=\text{Mittelwert}} \cdot \underbrace{(2s+1)}_{\text{Anzahl}} = (2l+1)(2s+1) \quad \checkmark$$

Fazit: ($l \geq s$)

$$\mathcal{D}_l \otimes \mathcal{D}_s = \bigoplus_{j=l-s}^{l+s} \mathcal{D}_j \quad \text{oder (kurz) } l \otimes s = \bigoplus_{j=l-s}^{l+s} j \quad \text{„Auswahlregel“: } |l-s| \leq j \leq l+s \quad (6.33)$$

Bsp: $l = \frac{3}{2}, s = 1$

Skizze fehlt

Clebsch-Gordon-Reihe:

$$|ls, jm\rangle_2 = \sum_{m_l, m_s, m_l+m_s=m} |ls, m_l m_s\rangle_1 \langle ls, m_l m_s | ls, jm\rangle_2 \quad (6.34)$$

d) Der Spin

Wechselwirkung mit elektromagn. Feld (Potentiale $\phi(\vec{x}, t), \vec{A}(\vec{x}, t)$)

„minimale Kopplung“: ersetze $\vec{P} \mapsto \vec{P} - \frac{e}{c} \vec{A}$ in H :

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m} \left(\vec{P} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e\phi \quad \text{wobei } \vec{A} = \vec{A}(\vec{X}, t), \phi(\vec{X}, t) \\ &= \frac{1}{2m} \left(\vec{P}^2 - \frac{e}{c} \vec{P} \vec{A} - \frac{e}{c} \vec{A} \vec{P} + \frac{e^2}{c^2} \vec{A}^2 \right) + e\phi \quad \text{Coulomb-Eichung } \vec{\nabla} \vec{A} = 0 \Leftrightarrow \vec{P} \vec{A} = \vec{P} \vec{A} \\ &= \frac{1}{2m} \left(\vec{P}^2 - 2\vec{A} \vec{P} + \frac{e^2}{c^2} \vec{A}^2 \right) + e\phi \quad \text{setze } \phi = 0, \text{ vernachlässige } \vec{A}^2\text{-Term} \\ &\approx \frac{1}{2m} \vec{P}^2 - \frac{e}{mc} \vec{A} \vec{P} \quad \vec{B} = \text{const.} \curvearrowright \vec{A} = -\frac{1}{2} \vec{R} \times \vec{B} \\ &= \frac{1}{2m} \vec{P}^2 + \frac{e}{2mc} (\vec{R} \times \vec{B}) \vec{P} \quad \vec{R} \equiv \vec{X} = (X_1, X_2, X_3) \\ &= \frac{1}{2m} \vec{P}^2 - \frac{e}{2mc} (\vec{R} \times \vec{P}) \vec{B} \\ &= \frac{1}{2m} \vec{P}^2 - \vec{\mu} \vec{B} \quad \text{mit } \vec{\mu} = \frac{e}{2mc} \vec{M} \text{ magn. Dipolmoment } (\vec{M} = \text{Drehimpuls}) \end{aligned}$$

$$\curvearrowright H = H_0 + H_{\text{WW}} \text{ mit } H_{\text{WW}} = -\vec{\mu} \vec{B} = -\frac{e\hbar}{2mc} \vec{L} \vec{B} \quad \frac{|\vec{\mu}|}{|\vec{M}|} = \frac{|e|\hbar}{2mc} \text{ gyromagn. Verhältnis} \quad (6.35)$$

neuer Freiheitsgrad erforderlich: „Spin“ zusätzlich: $\vec{M}' = \hbar \vec{S}$, Zustände $|s, m_s\rangle$ (innere Struktur der Teilchen)
neuer abstrakter Spinraum \mathcal{R}_s (bei Elektronen, Quarks $s = \frac{1}{2}$)

$$[S_i, S_j] = i\varepsilon_{ijk} S_k, [S_i, L_j] = 0, [S_i, X_j] = 0 = [S_i, P_j] \quad (\vec{L} = \frac{1}{\hbar} \vec{R} \times \vec{P})$$

gyromagn. Verhältnisse $\frac{|\vec{\mu}|}{|M|} = g \frac{|e|}{2mc}$ variieren (g=„Landé-Faktor“): Bahndrehimpuls hat $g = 1$, Spin hat $g = 2 \cdot (1,00116\dots)$ für Elektronen, andere Werte für Protonen, Neutronen, etc...

vollständiger Zustandsraum ist $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{alt}} \otimes \mathcal{R}_s$, Basis $\{|\psi_{\text{alt}}^i\rangle \otimes |s, m_s\rangle\}$

$$\text{allgemeiner Zustand: } |\psi, s\rangle = \sum_{m_s=-s}^{+s} |\psi_{m_s}\rangle \otimes |s, m_s\rangle \quad \text{zweifache Entartung} \quad (6.36)$$

neues Postulat

P VI. Die Ortskomponenten X_i und die Spinkomponente S_3 (+evtl. weitere innere Freiheitsgrade) bilden eine vollständige Basis vertauschbarer Observablen eines Teilchens

einfachster Fall: $s = \frac{1}{2}$:

$$|\psi\rangle = |\psi_+\rangle \otimes |+\rangle + |\psi_-\rangle \otimes |-\rangle \doteq \begin{pmatrix} |\psi_+\rangle \\ |\psi_-\rangle \end{pmatrix}$$

solche Objekte $\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \in \mathcal{R}_{1/2}$ heißen Pauli-Spinoren $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$.

Projektion:

$$\begin{aligned} \langle \pm | \psi \rangle &= |\psi_{\pm}\rangle \\ \langle x | \psi \rangle &= \psi_+(x) |+\rangle + \psi_-(x) |-\rangle \\ (\langle \pm | \otimes \langle x |) | \psi \rangle &= \psi_{\pm}(x) \text{ Spin-Wellenfunktion} \end{aligned}$$

Vollständigkeitsrelation: $\mathbf{1}_s = |+\rangle\langle +| + |-\rangle\langle -|$

Spingruppe: $\mathcal{D}_{1/2}(S_i) = \frac{1}{2} \curvearrowright \mathcal{U}_{1/2}(e^{-i\theta \vec{n} \cdot \vec{S}}) = e^{-\frac{g}{2} \vec{n} \cdot \vec{\sigma}}$ 2×2 -Matrix wirkt auf Spinoren

lokaler Hamiltonoperator: $H = H_0 + H_{\text{WW}} + H_{\text{WW}'}$

$$H_{\text{WW}} + H_{\text{WW}'} = -\frac{e\hbar}{2mc} \vec{L} \cdot \vec{B} - \frac{e\hbar}{2mc} g \vec{S} \cdot \vec{B} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} \quad (6.37)$$

$$\text{mit } \vec{\mu} = \vec{\mu}_{\text{Bahn}} + \vec{\mu}_{\text{Spin}} \underset{s=\frac{1}{2}, g \approx 2}{\text{für Elektronen}} \approx -\frac{e\hbar}{2mc} \left(\hat{L} + s \frac{\hat{\sigma}}{2} \right) = -\frac{e\hbar}{2mc} (\vec{L} \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \vec{\sigma}) \quad (6.38)$$

Schrödinger-Gleichung für Elektronen mit Spin $\frac{1}{2}$ im Magnetfeld \vec{B} :

$$i\hbar \partial_t \begin{pmatrix} |\psi_+\rangle \\ |\psi_-\rangle \end{pmatrix} = \left[\left(\frac{\vec{P}^2}{2m} + V(\vec{X}) - \frac{e\hbar}{2mc} \vec{L} \cdot \vec{B} \right) \mathbf{1}_{2 \times 2} - \underbrace{\frac{e\hbar}{2mc} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}}_{\begin{pmatrix} B_z & B_x - iB_y \\ B_x + iB_y & -B_z \end{pmatrix}} \right] \begin{pmatrix} |\psi_+\rangle \\ |\psi_-\rangle \end{pmatrix} \quad \text{Pauli-Gleichung} \quad (6.39)$$

VII Zentralpotential

a) Separation der Schrödinger-Gleichung

$V = V(R)$ mit $R = \sqrt{\vec{R}^2} \Leftrightarrow [L_i, H] = 0 \quad \curvearrowright$ Kugelkoordinaten

klassisch:

$$E_{\text{kin}} = \frac{\vec{p}^2}{2m} = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{\vec{M}^2}{2mr^2} \quad \text{mit } p_r = \vec{e}_r \cdot \vec{p} \quad \text{und } \vec{M} = \vec{r} \times \vec{p}$$

quantenmechanisch:

$$H_{\text{kin}} = \frac{\vec{P}^2}{2m} = \frac{1}{2m} \left(P_r^2 + R^{-2} \vec{M}^2 \right) \quad \text{aber was ist } P_r? \quad (7.1)$$

Wir haben

$$\begin{aligned}
\vec{M}^2 &= (\vec{R} \times \vec{P})^2 = \varepsilon_{ijk} X_j P_k \varepsilon_{ilm} X_l P_m \\
&= \vec{R}^2 \vec{P}^2 - \vec{R} \vec{P} \vec{R} \vec{P} + i\hbar \vec{R} \vec{P} \stackrel{!}{=} \vec{R}^2 \vec{P}^2 - \vec{R}^2 P_r^2 \\
\curvearrowright P_r^2 &= R^{-2} (\vec{R} \vec{P})^2 - i\hbar R^{-2} \vec{R} \vec{P} \\
\text{es gilt: } P_r &= \frac{1}{2} \left(\frac{\vec{R}}{R} \vec{P} + \vec{P} \frac{\vec{R}}{R} \right) = \frac{\vec{R}}{R} \vec{P} - i\hbar \frac{1}{R} = \frac{\vec{R}}{R^2} \vec{P} R
\end{aligned} \tag{7.2}$$

in Ortsdarstellung $\langle r, \theta, \varphi | \psi \rangle = \psi(r, \theta, \varphi)$

$$\begin{aligned}
\mathcal{D}_\infty : \quad \vec{R} &\longrightarrow \vec{r}, \quad \vec{P} \longrightarrow \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}, \quad \vec{R} \vec{P} \longrightarrow \frac{\hbar}{i} \vec{r} \vec{\nabla} = \frac{\hbar}{i} \partial_r, \quad P_r \longrightarrow \frac{\hbar}{i} \left(\partial_r + \frac{1}{r} \right) = \frac{\hbar}{ir} \partial_r r \\
\vec{P}^2 &= P_r^2 + R^{-2} \vec{M}^2 \longrightarrow -\hbar^2 \frac{1}{r} \partial_r r \frac{1}{r} \partial_r r + \hbar^2 \frac{1}{r^2} \mathcal{D}_\infty (\vec{L}^2) = -\hbar^2 \left(\partial_r^2 + \frac{2}{r} \partial_r - \frac{1}{r^2} \mathcal{D}_\infty (\vec{L}^2) \right)
\end{aligned} \tag{7.3}$$

mit $\mathcal{D}_\infty (\vec{L}^2) = -\frac{1}{\sin \theta} \partial_\theta \sin \theta \partial_\theta - \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\varphi^2 \curvearrowright \mathcal{D}_\infty (\vec{P}^2) = -\hbar^2 \Delta$ in Kugelkoordinaten

Schrödinger-Gleichung (lasse \mathcal{D}_∞ weg)

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \right) \psi = E\psi \curvearrowright \left[\frac{\hbar^2}{2m} \left(\partial_r^2 + \frac{2}{r} \partial_r - \frac{\vec{L}^2}{r^2} \right) + V(r) - E \right] \psi = 0 \tag{7.4}$$

wir wissen:

$$\vec{L}^2 Y_{\ell m} = \ell(\ell+1) Y_{\ell m} \longrightarrow \text{Separationsansatz: } \psi_E(r, \theta, \varphi) = R_{E\ell}(r) \cdot Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \tag{7.5}$$

ergibt

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r} \partial_r^2 r - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right) + V(r) - E \right) R_{E\ell} = 0$$

E hängt nicht von m ab $\longrightarrow \ell(\ell+1)$ -fache Entartung.

$$\text{Substitution: } R_{E\ell}(r) = \frac{u(r)}{r} \tag{7.6}$$

wir multiplizieren die Gleichung mit r und erhalten

$$\curvearrowright \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_r^2 + \underbrace{\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} + V(r) - E}_{V_{\text{eff}}(r)} \right) u(r) = 0 \tag{7.7}$$

\longrightarrow eindimensionale Schrödinger-Gleichung mit effektivem Potential $V_{\text{eff}}(r)$ und $r \in [0; \infty]$
Normierungsbedingungen bei Bindungszuständen:

$$1 = \langle \psi | \psi \rangle = \int_0^\infty r^2 dr \underbrace{\int d^2\Omega |Y_{\ell m}|^2}_{=1} |R_{E\ell}|^2 = \int_0^\infty dr |u_{E\ell}|^2$$

denn die Kugelflächenfunktionen $Y_{\ell m}$ sind normiert.

Randbedingungen bei $r = 0$ für nicht-singuläres Potential:

$$\Delta \psi = \Delta \left(\frac{1}{r} u_{E\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \right) \curvearrowright -4\pi \delta^{(3)}(\vec{r}) u_{E\ell}(0) Y_{\ell m} + \dots \curvearrowright u_{E\ell}(0) = 0$$

es sein denn, $V(r) \sim \delta^{(3)}(\vec{r})$.

Bemerkung

P_r ist bezüglich des Skalarproduktes $\int_0^\infty dr r^2 \dots$ hermitesch:

$$\int_0^\infty dr r^2 f(P_r g) = \int_0^\infty dr r^2 f \frac{\hbar}{i} \partial_r (r \cdot g) = \int_0^\infty dr (rf) \partial_r (rg) \frac{\hbar}{i} \quad \checkmark$$

b) allgemeine Resultate

eindimensionale Schrödinger-Gleichung mit $V_{\text{eff}} = V + \hbar^2 \frac{\ell(\ell+1)}{2mr^2}$, Randbedingungen bei $r = 0$: $u(0) = 0$

1. Eigenschaften von $u(r)$ für $r \rightarrow 0$: Annahme $V(r)$ weniger singular als r^{-2} \leadsto Zentrifugalterm dominiert bei $r \rightarrow 0$:

$$u_\ell'' \approx \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} u_\ell$$

Lösung:

$$u_\ell(r \rightarrow 0) \approx A r^{\ell+1} + B r^{-\ell} \stackrel{u(0)=0}{\leadsto} u_\ell(r) = r^{\ell+1} (a_0 + a_1 r + a_2 r^2 + \dots)$$

2. Eigenschaften von $u(r)$ für $r \rightarrow \infty$: Annahme $\lim_{r \rightarrow \infty} V(r) = 0$. Ansatz:

$$\leadsto u_{E\ell}(r) = f_{k\ell}(r) e^{\pm ikr} \text{ mit } k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}$$

$$\leadsto -f_{k\ell}'' \mp 2ik f_{k\ell}' + \frac{2m}{\hbar} V_{\text{eff}} \cdot f_{k\ell} = 0$$

Falls $f_{k\ell}$ langsam variiert, können wir annehmen, $f_{k\ell}'' \approx 0$

$$\leadsto f_{k\ell}(r) = f(r_0) \exp\left(\mp \frac{im}{\hbar^2 k} \int_{r_0}^r dr' V_{\text{eff}}(r')\right)$$

Dann ist

$$u_{E\ell}(r \rightarrow \infty) \propto \exp\left[\pm i\left(kr - \frac{m}{\hbar^2 k} \int^r V_{\text{eff}}\right)\right]$$

unabhängig von ℓ .

Im Fall von Bindungszuständen haben wir $k = i\kappa$

$$\leadsto u_E \propto \exp\left(-\kappa r - \frac{m}{\hbar^2 \kappa} \int^r V_{\text{eff}}\right)$$

c) freies Teilchen

Kein Potential: $V(r) = 0$, $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_r^2 + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} - E\right) u_{E\ell} = 0 \quad u_{E\ell} = r \cdot \text{dot} R_{E\ell}$$

Substitution $\rho = kr$:

$$u_{E\ell}(r) = u_{E\ell}\left(\frac{\rho}{k}\right) =: W_{E\ell}(\rho) \stackrel{\text{Asymptotik}}{=} \begin{cases} \rho^{\ell+1} e^{\pm i\rho} p(\rho) & \text{Ansatz für } E > 0 \\ \rho^{\ell+1} e^{-\rho} p(\rho) & \text{Ansatz für } E < 0, \rho = \kappa r \end{cases}$$

$$\Rightarrow \partial_r^2 = k^2 \partial_\rho^2 \text{ bzw. } \kappa^2 \partial_\rho^2.$$

Dabei ist $p(\rho)$ ein Polynom in ρ .

$$\left(\partial_\rho^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} \pm 1 \right) W_{E\ell} = 0 \quad \text{mit} \quad \begin{array}{l} + \text{ für } E > 0 \\ - \text{ für } E < 0 \end{array} \quad (7.8)$$

Da aber $V = 0$ ist, folgt $E > 0$, also

$$\begin{aligned} \left(-\partial_\rho^2 + \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} \right) W_{E\ell} &= W_{E\ell} \\ \Rightarrow \left[\left(\partial_\rho + \frac{\ell+1}{\rho} \right) \left(-\partial_\rho + \frac{\ell+1}{\rho} \right) \right] W_{E\ell} &= W_{E\ell} \end{aligned} \quad (7.9)$$

Lösung:

$$\left. \begin{array}{l} W_{E\ell} \propto \rho j_\ell(\rho) \text{ oder } \rho n_\ell(\rho) \\ \Rightarrow \text{Radialfunktion } R_{E\ell} = c_{E\ell} j_\ell(kr) \end{array} \right\} \quad (7.10)$$

mit den Besselfunktionen

$$j_\ell(\rho) = (-\rho)^\ell \left(\frac{1}{\rho} \partial_r \right)^\ell \frac{\sin \rho}{\rho} \quad \text{sphärische Besselfunktion} \quad (7.11)$$

$$n_\ell(\rho) = (-\rho)^\ell \left(\frac{1}{\rho} \partial_r \right)^\ell \frac{\cos \rho}{\rho} \quad \text{sphärische Neumannfunktion} \quad (7.12)$$

$$(7.13)$$

Grenzwerte

für $\rho \rightarrow \infty$:

$$j_\ell \rightarrow \frac{1}{\rho} \sin \left(\rho - \frac{\ell\pi}{2} \right) \quad n_\ell \rightarrow \frac{1}{\rho} \cos \left(\rho - \frac{\ell\pi}{2} \right) \quad \text{Kugelwellen} \quad (7.14)$$

für $\rho \rightarrow 0$:

$$j_\ell \rightarrow \frac{\rho^\ell}{(2\ell+1)!!} \text{ regulär } \checkmark \quad n_\ell \rightarrow (2\ell+1)!! \rho^{-(\ell+1)} \text{ singular!}$$

Doppelfakultät: $n!! := n(n-2)(n-4) \dots$ endet auf 1 oder 2.

Energie-Eigenbasis

$$\psi_{E\ell m}(r, \theta, \varphi) = j_\ell(kr) Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \text{ mit } E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \text{ kontinuierlich } \geq 0$$

Normierung

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dr r^2 j_\ell(kr) j_\ell(k'r) &= \frac{2}{\pi k^2} \delta(k - k') \\ \leadsto \langle E\ell m | E'\ell' m' \rangle &= \int d^3r \psi_{E\ell m}^* \psi_{E'\ell' m'} = \frac{2}{\pi k^2} \delta(k - k') \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'} \end{aligned}$$

Vollständigkeit

$$1 = \int_0^\infty dE \frac{\pi m}{\hbar^3} \sqrt{2mE} \sum_{\ell, m} |E\ell m\rangle \langle E\ell m|$$

allgemeine Lösung

$$\langle r, \theta, \varphi | \psi(t) \rangle = \int_0^\infty dE \sum_{\ell, m} a_{E\ell m} j_\ell(kr) Y_{\ell m}(\theta, \varphi) e^{-\frac{i}{\hbar} Et} \quad (7.15)$$

vergleiche mit

$$\langle x, y, z | \psi(t) \rangle = \int d^3 k \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} b_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}} e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

Umrechnung zwischen kartesischen Koordinaten und Kugelkoordinaten

$$e^{i\vec{k}\vec{r}} = 4\pi \sum_{\ell, m} i^\ell Y_{\ell m}^*(\theta_k, \varphi_k) j_\ell(kr) Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \quad (7.16)$$