

Theo D – Kühn – Mitschrieb SS 2005

Christian Barth & Christian Benz

2. Juni 2005

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung – einfache eindimensionale Probleme	5
1.1	Elektromagnetische Wellen & Photonen	5
1.1.1	Zusammenhang zwischen Energie und Frequenz	5
1.1.2	Ausbreitung	5
1.1.3	Spektralzerlegung	6
1.2	Materie-Wellen	7
1.3	Wellenpakete	7
1.3.1	Freies Teilchen ($V = 0$)	7
1.3.2	Zusammenhang zwischen $\Psi(x, t = 0)$ und $g(x)$	8
1.3.3	Zeitliche Entwicklung eines Freien Wellenpaketes	9
1.4	Zeitunabhängiges Potential	10
1.4.1	Separation der Variablen $\vec{r}, t$, stationäre Zustände	10
1.4.2	Stufenpotentiale (qualitativ)	11
1.4.3	Stufenpotentiale (quantitativ)	14
1.4.4	Beispiel: Stufe bei $x_0 = 0$ $E > V_0$	15
1.4.5	Stufe $E < V_0$	16
1.4.6	Potentialtopf	17
2	Mathematische Hilfsmittel	21
2.1	Wellenfunktionen als Zustandsraum	21
2.1.1	Zustandsraum $\mathfrak{F}$	21
2.1.2	Orthonormierte Basis	23
2.1.3	Ebene Wellen und andere verallgemeinerte Basiszustände	24
2.2	Dirac-Notation	26
2.2.1	Einführung	26
2.2.2	„ket“ und „bra“ liefert Bracket	26
2.2.3	Lineare Operatoren	27
2.2.4	Hermitisch konjugierter ($\hat{=}$ adjungierter) Operator	27
2.3	Darstellungen im Zustandsraum	28
2.4	Eigenwert-Gleichungen / Observablen	29
2.4.1	Eigenwerte / Eigenvektoren	29
2.4.2	Observable	30
3	Postulate der Quantenmechanik	33
3.1	Allgemeine Prinzipien	33
3.2	Schrödinger Gleichung / allgemeine Resultate	35
3.2.1	Erhaltung der Wahrscheinlichkeit	35
3.2.2	Wahrscheinlichkeitsdichten und Ströme	36
3.2.3	Zeitliche Entwicklung von Erwartungswerten	37
3.2.4	Zeitliche Entwicklung von Zuständen	37
4	Der Harmonische Oszillator (HO)	39
4.1	Einführung – H.O. in der klassischen Mechanik	39
4.2	Harmonischer Oszillator in der Quantenmechanik	39
4.2.1	Analytische Lösung der DGL	39

4.2.2	H.O. Algebraische Lösung	41
4.3	Diskussion der Resultate	45
4.3.1	Erwartungswerte	45
4.3.2	Qualitativer Beitrag zum Grundzustand	45
4.4	Dreidimensionaler Harmonischer Oszillator in kartesischen Koordinaten .	45

Literaturangaben

- Cohen–Tannoudji, Diu, Laloë (Grundlage dieser Vorlesung)
- Landau Lifshitz (knapp)
- Messiah (ausführlich)
- Dawydow (Viele Anwendungsbeispiele)
- Nolting Band 5 (O–Ton: „billig“)
- Schwabl

Historische Entwicklung (1900–1925/27)

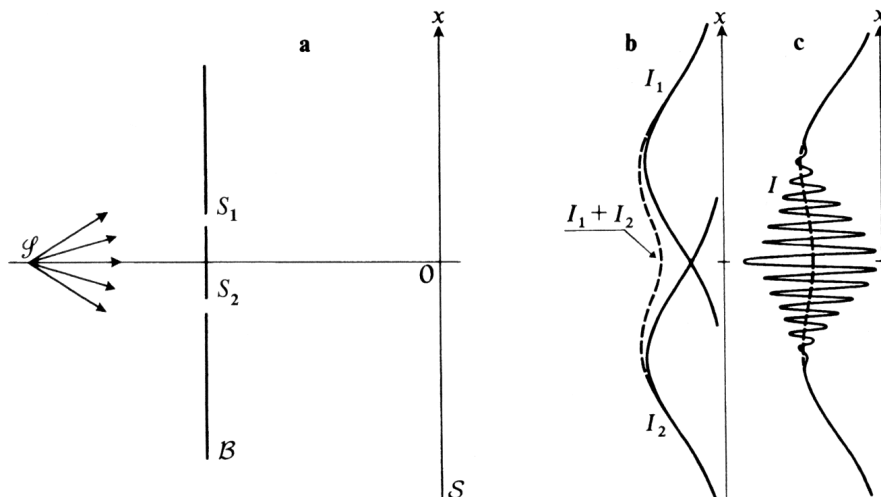
Planck → Heisenberg / Schrödinger

„Kopenhagener Interpretation“

Dualität zwischen Wellenbild und Teilchenbild fürs Photon

Dualität zwischen Wellenbild und Teilchenbild fürs Elektron

Doppelspalt Experiment



1 Einführung – einfache eindimensionale Probleme

- Die Quantenmechanik findet in fast allen Gebieten der Physik Verwendung
- Die Stabilität der Materie beruht auf der Quantenmechanik
- Diskrete Atomniveaus $\Rightarrow$ diskrete Übergangsenergie $\rightarrow$ Farben
- Halbleiter: Bändermodell
- Kernphysik: Statistischer Charakter des radioaktiven Zerfalls
- Verschränkte Zustände: EPR-Paradoxon (Einstein, Podolski, Rosa)
- Verknüpfung von QM & Relativitätstheorie $\Rightarrow$ Existenz von Antiteilchen

1.1 Elektromagnetische Wellen & Photonen

1.1.1 Zusammenhang zwischen Energie und Frequenz

Planck: $E = hf = \hbar\omega$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} \quad h = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{Js, „Wirkungsquantum“}$$

Erinnerung: Wirkung $\equiv \int_{t_1}^{t_2} p(t) \cdot \dot{q}(t) dt$

Später: Energie-Differenz von Atomniveaus $= \hbar\omega_{\text{Photon}}$

entsprechend: Impuls $\leftrightarrow$ Wellenlänge

Compton-Streuung

$\gamma + e \rightarrow \gamma + e$ (mit anderen Impulsen)

Impulserhaltung: $\underbrace{\vec{p}}_{\text{Impuls}} = \hbar \underbrace{\vec{k}}_{2\pi/\lambda}$

1.1.2 Ausbreitung

Intensität (Energiedichte / Zeiteinheit) $I(x) \sim |E(x)|^2$

Beitrag der durch den Spalt 1 bzw. 2 fallenden Welle

$$E(x) = E_1(x) + E_2(x)$$

$$I \sim |E_1(x) + E_2(x)|^2 = I_1(x) + I_2(x) + \underbrace{2E_1(x)E_2(x)}_{\text{Interferenzterm}}$$

Entsprechender Ansatz für Wellenfunktion:

$I(x) \Rightarrow$ Wahrscheinlichkeitsverteilung auf dem Schirm. Die Bahn eines einzelnen Photons kann nicht vorhergesagt werden.

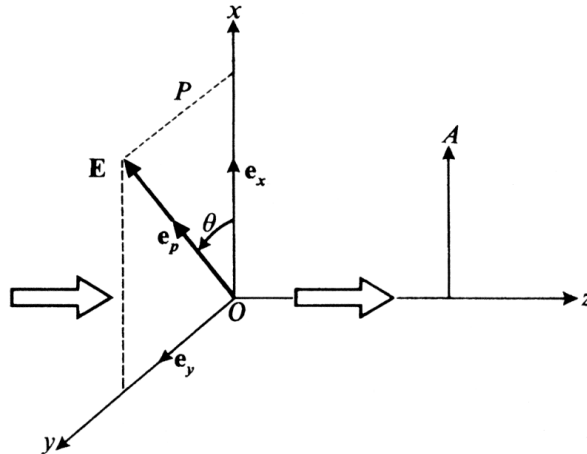
Anmerkungen

- Superpositionsprinzip
 $E_1(x), E_2(x)$ sind Lösungen der Maxwell-Gleichungen
 $\Rightarrow E(x) = \lambda_1 E_1(x) + \lambda_2 E_2(x)$ ist ebenfalls Lösung, denn E genügt linearen DGL!
 (gilt auch für Wellenfunktion Ψ in der QM)

- $I(x)$ = Wahrscheinlichkeitsverteilung. Eine große Zahl von Photonen ist erforderlich für Interferenzmuster.
- Wichtiger Unterschied: Elektrisches Feld ist reell. Gelegentliche Beschreibung durch komplexe Zahlen: $\Re(Ee^{i\omega t} \hat{=} E \cos \omega t)$
QM: $\Re[\Psi]$ und $\Im[\Psi]$ sind wesentlich

1.1.3 Spektralzerlegung

Polarisiertes Licht mit Ausbreitungsrichtung $\vec{e}_z$ fällt auf Analysator A



Klassisch: P polarisiert Licht in $\vec{e}_P$ Richtung

$$E(\vec{r}, t) = E_0 \vec{e}_P e^{i(kz - \omega t)} \text{ Intensität } E_0^2 \text{ hinter P}$$

$$\text{Intensität hinter A: } E'(\vec{r}, t) = E_0' \vec{e}_x e^{i(kz - \omega t)}, \text{ wobei } E_0' = E_0 \vec{e}_x \vec{e}_P = E_0 \cos \theta$$

$$I_A = E_0'^2 = E_0^2 \cos^2 \theta$$

QM: Photon wird in Analysator gestoppt (Wahrscheinlichkeit = $\sin^2 \theta$) oder durchgelassen (Wahrscheinlichkeit = $\cos^2 \theta$) $\Rightarrow$ 2 mögliche Resultate. (klassisch: Welle wird geschwächt)

Nach A würde das Photon weitere Analysatoren (bezüglich x-Richtung) sicher durchlaufen: Nach A ist es „im Eigenzustand zu A“.

Es gibt hier zwei Eigenzustände mit Polarisation $\vec{e}_x$ und $\vec{e}_y$. Für diese ist das Messresultat in A sicher.

Jeder Zustand kann in Eigenzustände von A zerlegt werden:

$$\vec{e}_P = \cos \theta \vec{e}_x + \sin \theta \vec{e}_y$$

elektromagnetisches Feld

- $I(x) \sim |E(x)|^2$

- Überlagerungsprinzip

$$E_1, E_2 \text{ Lösung} \Rightarrow E = \lambda E_1 + \lambda E_2$$

E ist Lösung

- Spektralzerlegung

Jeder Zustand mit Polarisation $\vec{e}_P$ kann in Eigenzustand $\vec{e}_x$ und $\vec{e}_y$ zerlegt werden.

1.2 Materie–Wellen

Übertragung der Dualität von Wellen und Teilchen auf Teilchen mit Masse $m \neq 0$ (de Broglie) ... Schrödinger

1. Klassische Trajektorie $x(t)$

$\Rightarrow$ Zeitlich veränderliche Wellenfunktion

$$\boxed{\Psi(\vec{r}, t)}$$

2. Wahrscheinlichkeitsdichte = $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$

(Kopenhagener Interpretation), das Teilchen am Ort $\vec{r}$ zur Zeit t zu finden.

$\Rightarrow$ Normierung $\int |\Psi|^2 dV = 1$

3. Klassische Bewegungsgleichung $\Rightarrow$ Schrödingergleichung

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \partial_t \Psi(\vec{r}, t)}$$

Lineare, partielle DGL, homogen $\Rightarrow$ Überlagerungsprinzip erster Ordnung in t

Anfangswertproblem: $\Psi(\vec{r}, t)|_{t_0}$ legt $\Psi(\vec{r}, t) \forall t$ fest.

1.3 Wellenpakete

1.3.1 Freies Teilchen ($V = 0$)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \partial_t \Psi(\vec{r}, t) \quad (1)$$

DGL mit konstanten Koeffizienten.

$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = A e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega_k t)}$ ebene Welle, $A, \vec{k}$ beliebig

$$\omega_k = \frac{\hbar k^2}{2m}; (\hat{=} E = \frac{p^2}{2m})$$

$|\Psi|^2 = |A|^2$ konstant $\Rightarrow$ nicht integrierbar

Lineare DGL: jede Überlagerung von Lösungen mit verschiedenen k ist Lösung. Normierbare Überlagerung von ebenen Wellen $\Rightarrow$ Wellenpaket

$$\int \frac{dk}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} g(\vec{k}) e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega_k t)} = \Psi(\vec{r}, t) \quad (2)$$

ist Lösung von (1).

Bei fester Zeit $t (= 0 \text{ per Konvention})$

$g(\vec{k}) = \text{Fouriertransformation von } \Psi(\vec{r}, t = 0)$

$$g(\vec{k}) = \int \frac{d\vec{r}}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} g(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{r}} = \Psi(\vec{r}, t = 0) \quad (3)$$

Zu einer festen Zeit $t (= 0)$ kann zu $\Psi(\vec{r}, 0)$ immer die Fouriertransformation angegeben werden. Gleichung (2) legt dann $\Psi(\vec{r}, t) \forall t$ fest. (Bei Anwesenheit eines Potentials gilt aber nicht mehr $E = \hbar\omega_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$)

Zeitliche Entwicklung eines Wellenpaketes:

$\Rightarrow$ elektromagnetische Welle im Vakuum

$\omega = ck$ ($f = c/\lambda$) – lineares Dispersionsprinzip

$\Rightarrow$ Form des Wellenpakets bleibt erhalten.

Im Medium oder in Halbleitern: $\omega(k)$ ist Funktion von $k \Rightarrow$ Wellenpaket wird verformt.

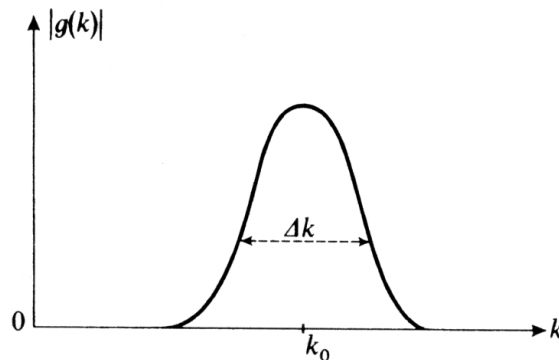
$$v_{\text{Phaseng.}} = \frac{\omega(k)}{k} \quad v_{\text{Gruppeng.}} = \frac{d\omega}{dk}$$

1.3.2 Zusammenhang zwischen $\Psi(x, t = 0)$ und $g(x)$

Frage: „Breite“ von $\Psi(x, 0)$ und $g(k)$

Ansatz oBdA: $g(x) = \underbrace{|g(x)|}_{\text{Betrag}} \underbrace{e^{\alpha(k)}}_{\text{Phase}}$

Annahmen: 1. g ist glatt, und nur im $[k_0 - \frac{\Delta k}{2}; k_0 + \frac{\Delta k}{2}]$ wesentlich von 0 verschieden



2. $\alpha(k)$ variiert nur wenig in diesem Bereich:

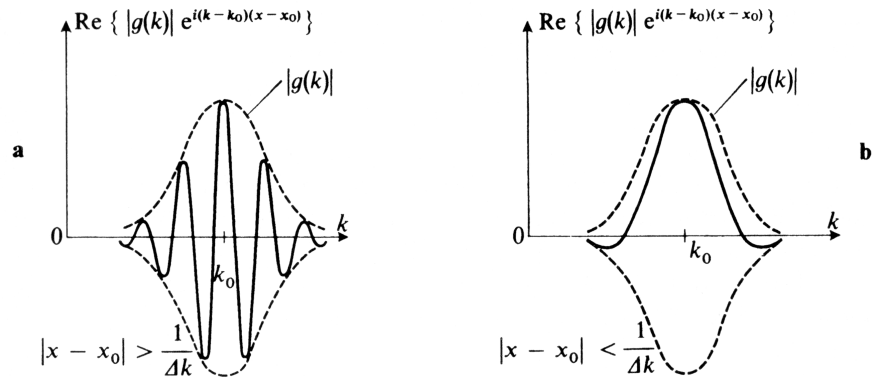
$$\Rightarrow \text{daher Taylor: } \alpha(k) = \alpha(k_0) + (k - k_0) \underbrace{\frac{d\alpha}{dk}}_{=-X_0} \Big|_{k=k_0}$$

Konsequenz für $\Psi(x, 0)$

$$\begin{aligned} \Psi(x, t = 0) &= \int \frac{dk}{2\pi} e^{ikx} \\ &= \int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} \cdot |g(k)| e^{i[\alpha(k_0) - (k - k_0)x_0 + \overbrace{k_0 x - k_0 x + kx}^{\text{erweitert}}]} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \Psi(x, t = 0) = e^{i[\alpha k_0 + k_0 x]} \int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} |g(k)| e^{i[k - k_0][x - x_0]}$$

- Falls $x = x_0$ dann $e^{(\dots)} = 1 \rightarrow$ nur positive Beiträge
 $\Rightarrow |\Psi|$ ist maximal
- Für $|x - x_0| \gg \frac{1}{\Delta k}$: viele Oszillationen innerhalb des Integrationsgebiet
 $\Rightarrow |\Psi|$ ist klein



$\rightarrow$ Auslöschung für:

$$(x - x_0)\Delta k \gg 1$$

$\rightarrow$ Maximum des Wellenpakets im Ortsraum bei:

$$x_0 = -\left[\frac{d\alpha}{dk}\right]_{k=k_0} \text{ (Methode der stationären Phase)}$$

$\rightarrow$ Breite im Ortsraum:

$$\Delta x \sim \frac{1}{\Delta k}$$

Physikalische Bedeutung / Nutzen $p = \hbar k$

$\Rightarrow$ Zusammenhang zwischen Breite der Verteilung im Ortsraum: $\frac{dN}{dx} = |\Psi(x, 0)|^2$
 und der Breite im Impulsraum: $\frac{dN}{dp} = |\tilde{\Psi}(p, 0)|^2$ mit: $\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \tilde{\Psi}(p, 0) e^{i\frac{p}{\hbar}x}$

1.3.3 Zeitliche Entwicklung eines Freien Wellenpaketes

ebene Welle:

$$\Psi(x, t) = e^{i(kx - \omega t)} \text{ mit } \omega = \omega(k) v_{\text{Phase}} = v_{\varphi}(k) = \frac{\omega}{|k|}$$

em Welle im Vakuum: [ein Wellenpaket]

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} g(k) e^{i(kx - \omega t)} &= \\ &= \underbrace{\int_0^{\infty} \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} g(k) e^{i|k|(x - ct)}}_{f_1(x - ct)} + \underbrace{\int_{-\infty}^0 \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} g(k) e^{i|k|(x + ct)}}_{f_2(x + ct)} \end{aligned}$$

in QM:

$$\int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} g(k) e^{i(\alpha(k) - \omega(k)t)}$$

also $\alpha(k) - \omega(k)t$ statt $\alpha(k)$ wie vorher

$$x_{max}(t) = -\frac{d}{dk}(\alpha(k) - \omega(k)t)$$

$\Rightarrow$ Maximum verschiebt sich um: $\frac{d\omega(k)}{dk}|_{k_0} t$

$$v_{gr} = \frac{d\omega}{dk}|_{x_0} = \frac{\hbar k_0}{m} = \frac{p_0}{m}$$

wie im klassischen, nur mit Ψ da (Funktion der Zeit breiter)

1.4 Zeitunabhängiges Potential

1.4.1 Separation der Variablen $\vec{r}, t$, stationäre Zustände

Schrödingergleichung:

$$\underbrace{i\hbar \partial_t \Psi(\vec{r}, t)}_{\text{Ableitung nach } t} = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}, t) + \overbrace{V(\vec{r})}^{\text{Abhängigkeit von } \vec{r}, \text{ nicht } t}}_{\text{Ableitung nach } \vec{r}} \Psi(\vec{r}, t)$$

Ansatz: $\Psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r}) \cdot \chi(t)$

$$\Rightarrow \underbrace{\frac{1}{\chi(t)} i\hbar \partial_t \chi(t)}_{\text{Funktion von } t, \text{ unabhängig von } \vec{r} \Rightarrow \text{const.} \equiv \hbar\omega} = \underbrace{\frac{1}{\varphi(\vec{r})} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi(\vec{r}) + V(\vec{r}) \varphi(\vec{r}) \right)}_{\text{Funktion von } \vec{r} \text{ unabhängig von } t}$$

1. Lösung für $x(t)$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} x(t) = \hbar\omega x(t)$$

$$x(t) = A e^{-i\omega t}$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right) \varphi(\vec{r}) = \hbar\omega \varphi(\vec{r})$$

Planck-Einstein, $\hbar\omega \varphi(\vec{r})$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right) \varphi(\vec{r}) = E \varphi(\vec{r}) \quad \leftarrow : \text{Zeitunabhängige Schrödinger Gleichung}$$

Eigenwert-Gleichung eines linearen Operator mit:

E = Eigenwert

φ = Eigenfunktion

$\Psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r}) \cdot e^{-i\omega t}$: stationärer Zustand.

$|\Psi(\vec{r}, t)|^2$ ist unabhängig von der Zeit.

Schrödinger-Gleichung $\Rightarrow$ Zeitentwicklung der Wellenfunktion Ψ

Zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung $\Rightarrow$ stationäre Zustände und deren Energien.

Im Allgemeinen gibt es mehrere Lösungen

$$H \varphi_n(\vec{r}) = E_n \varphi_n(\vec{r}),$$

stationäre Zustände: $\Psi(\vec{r}, t) = e^{iE_n t/\hbar} \varphi_n(\vec{r})$

Dann ist

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_1 c_n \varphi_n(\vec{r}) e^{iE_n t/\hbar} \quad (4)$$

Lösung der Schrödinger Gleichung.

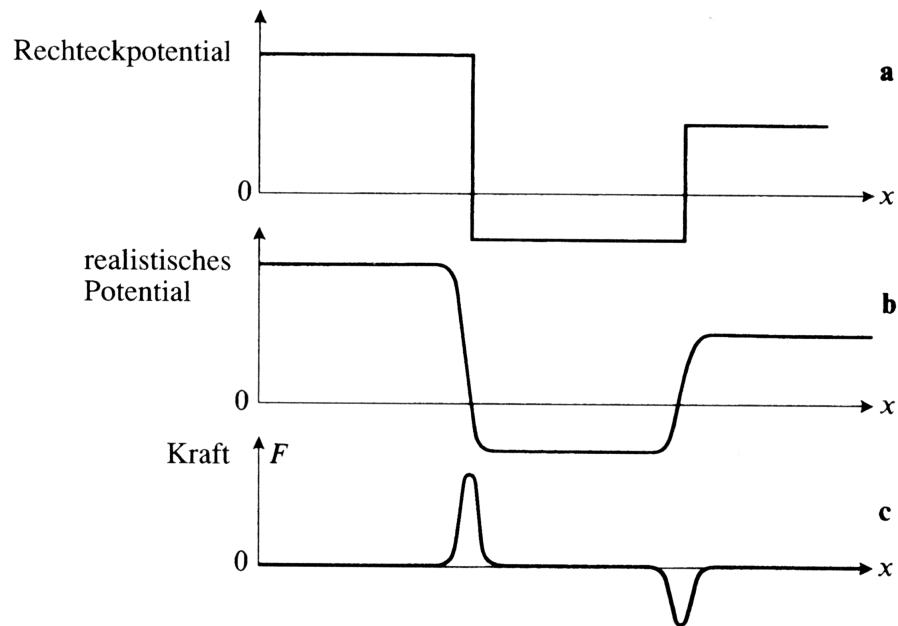
$|\Psi(\vec{r}, t)|^2$ ist im Allgemeinen zeitabhängig, Beispiel: $c_1 = c_2 = 1$

$$\begin{aligned} |\Psi|^2 &= \left| \varphi_1 e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} + \varphi_2 e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}} \right|^2 \\ &= |\varphi_1|^2 + |\varphi_2|^2 + \text{Interferenzterm (ist zeitabhängig)} \end{aligned}$$

Später: Jede Lösung der Schrödinger-Gleichung kann auf die Form (5) gebracht werden.

1.4.2 Stufenpotentiale (qualitativ)

Idealisierung von Grenzflächen



klassisches Teilchen: läuft von links nach rechts über die Stufe, solange $E > V_0$, oder wird reflektiert für $E < V_0$

Stationäre Schrödinger-Gleichung

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

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \right) \varphi(x) = 0$$

Analogie zur Optik: Ansatz für elektrisches Feld:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{e} E(x) e^{-i\omega t}$$

Wellengleichung im Medium:

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - \frac{n^2}{c^2} \frac{d^2}{dt^2} \right) E(x) e^{-i\omega t} = 0$$

$$\boxed{\left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{n^2 \omega^2}{c^2} \right) E(x) = 0}$$

für große $n \rightarrow$ kleine Phasengeschwindigkeit

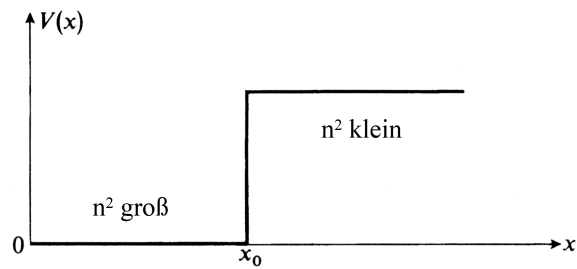
Analogie in QM: $\frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \hat{=} \frac{n^2 \omega^2}{c^2}$

$n^2 \begin{pmatrix} > 0 \\ < 0 \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} \text{transparent} \\ \text{totalreflektierendes} \end{pmatrix} \text{ Medium, z.B. } \begin{pmatrix} \text{Glass} \\ \text{Metal} \end{pmatrix}$

$$\text{Ausbreitung: } \begin{cases} e^{\pm i k x} & k = \frac{\omega}{c} \sqrt{n^2} & n^2 > 0 \\ e^{\pm i \varrho x} & \varrho = \frac{\omega}{c} \sqrt{n^2} & n^2 < 0 \end{cases}$$

Beispiele:

Stufe :



Brechungsindex:

$$n_1 = \frac{c}{\hbar\omega} \sqrt{2mE}$$

$$n_2 = \frac{c}{\hbar\omega} \sqrt{2m(E - V_0)}$$

$$E > V_0 \implies n_1^2 > n_2^2 > 0$$

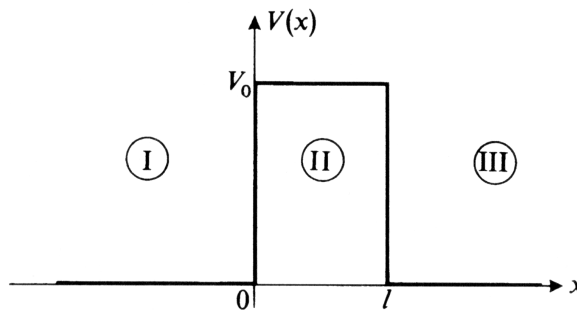
Teilchenreflexion an der Grenzschicht zwischen zwei Medien. *klassisch: Teilchen läuft langsam weiter.*

$$V_0 > E > 0 \quad n_1^2 > 0; \quad n_2^2 < 0$$

$$n_2 = i \frac{c}{\hbar\omega} \sqrt{2m(V_0 - E)}$$

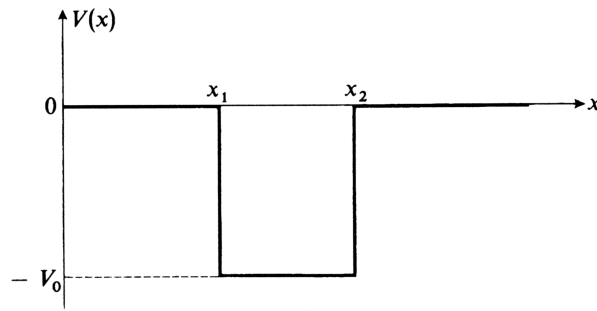
Totalreflexion, aber Eindringen in die Grenzschicht.

Barriere :



Optik: Welle dringt von (1) nach (2) ein, wird dort gedämpft (ein Teil wird auch reflektiert), läuft bis zum rechten Rand, und dort zum Teil weiter.

Topf :



klassisch: beliebige Energien sind zulässig

Optik: oszillierende Wellen im Bereich (2)

Dämpfung im Bereich (1), (3), stehende Wellen nur für diskrete Werte von k . $E > 0$

klassisch: teilweise Transmission jedoch keine Reflektion bei: Luft|Glas|Luft

1.4.3 Stufenpotentiale (quantitativ)

Ausgangspunkt: $\left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\right)\varphi(x) = 0$

V stückweise konstant.

$$1. \ E > V \quad \varphi(x) = Ae^{ikx} + A'e^{-ikx}$$

A, A' komplex, beliebig

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E - V$$

$$2. \ E < V \quad \varphi(x) = Be^{\alpha x} + Be^{-\alpha x} \text{ mit } \frac{(\hbar\alpha)^2}{2m} = V - E$$

$$3. \ E = V \quad \varphi(x) = c + c'x$$

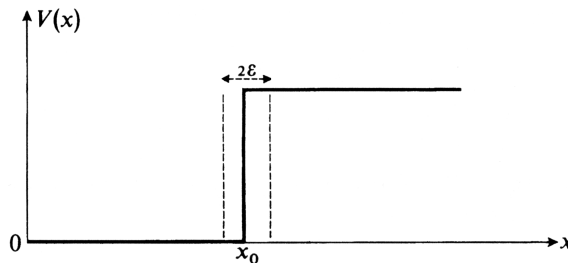
Anschlussbedingungen bei der Sprungstelle:

1. φ ist stetig an der Sprungstelle

2. Ψ ist stetig an der Sprungstelle

$$3. \ \frac{d^2}{dx^2}\Psi(x_0 + \varepsilon) - \frac{d^2}{dx^2}\Psi(x_0 - \varepsilon) = \frac{2m}{\hbar^2}(V(x_0 + \varepsilon) - V(x_0 - \varepsilon))\varphi(x_0)$$

Ersetze den Sprung durch glatten Übergang in einem Intervall $[-\varepsilon, \varepsilon]$



integriere die Schrödinger Gleichung von $x_0 - \varepsilon$ bis $x_0 + \varepsilon$

$$\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} dx \frac{d^2}{dx^2} \Phi(x) = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} dx \left[\underbrace{(V_\varepsilon(x) - E)}_{\text{beschränkt}} \underbrace{\Phi(x)}_{\text{sei beschränkt}} \right]$$

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\frac{d}{dx} \Phi(x_0 + \varepsilon) \right) - \left(\frac{d}{dx} \Phi(x_0 - \varepsilon) \right) = 0$$

1. Ableitung ist stetig (gilt nicht bei ∞ hoher Barriere)

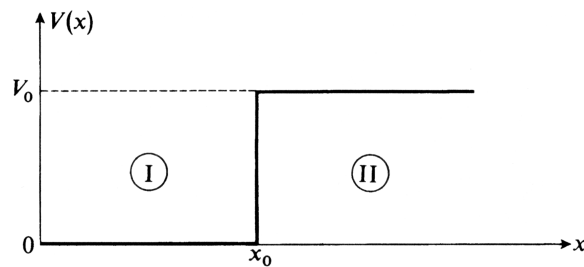
2. $\Rightarrow$ Funktion Φ ist stetig

3. Schrödinger Gleichung: $\frac{d^2}{dx^2} \varphi(x_0 + \varepsilon) - \frac{d^2}{dx^2} \varphi(x_0 - \varepsilon) = \frac{2m}{\hbar^2} (V(x_0 + \varepsilon) - V(x_0 - \varepsilon)) \varphi(x_0)$
(plus Terme $O(\varepsilon)$)

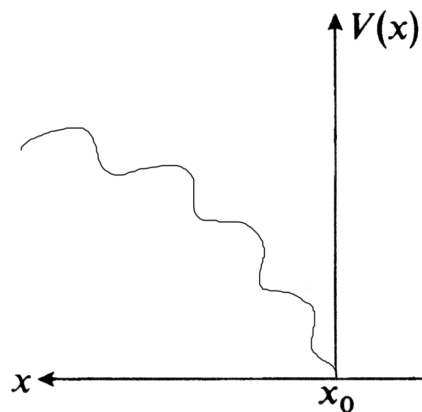
ΔV ist $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (V(x_0 + \varepsilon) - V(x_0 - \varepsilon)) = \frac{2m}{\hbar^2} \Delta V(x_0) \varphi(x_0)$

ist automatisch erfüllt, wenn (1), (2) gilt und k, ϱ korrekt gewählt werden.

Wenn Barriere ∞ hoch ist $\Rightarrow \varphi$ stetig; verschwindet im verbotenen Bereich. Anschlussbedingung: $\varphi(x_0) = 0$



1.4.4 Beispiel: Stufe bei $x_0 = 0$ $E > V_0$



in (1): $k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \longrightarrow \Phi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A'_1 e^{-ik_1 x}$

in (2): $k_2 = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}} \longrightarrow \Phi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + A'_2 e^{-ik_2 x}$

1. $A_1 + A'_1 = A_2 + A'_2$
2. $k_1(A_1 - A'_1) = k_2(A_2 + A'_2)$
3. folgt aus (1),(2) (nachrechnen!) 2 Gleichungen mit 4 Unbekannten $\implies$?
 - Normierung ist irrelevant, bleibt unbestimmt. Entweder nur Verhältnisse: $\frac{A_2}{A_1}$; $\frac{A'_2}{A'_1}$; $\dots$
oder wir setzen $A_1 = 1$
 - in (2) nur auslaufende Welle $\implies A'_2 = 0$ Randbedingung

In (1) einlaufende und auslaufende Welle (= reflektierte Welle)

$$(1),(2)(A'_2 = 0) \implies \begin{aligned} \frac{A'_1}{A_1} &= \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}, \\ \frac{A_2}{A_1} &= \frac{2k_1}{k_1 + k_2}, \end{aligned}$$

Wähle $A \equiv 1$

$$\varphi(x) = \begin{cases} e^{ik_1x} + \frac{k_1-k_2}{k_1+k_2}e^{-ik_1x} & x < 0 \\ \frac{2k_1}{k_1+k_2}e^{ik_2x} & x > 0 \end{cases}$$

Reflexionskoeffizient: $R = \left| \frac{k_1-k_2}{k_1+k_2} \right|^2$

Transmissionskoeffizient: $T = \left| \frac{2k_1}{k_1+k_2} \right|^2 \cdot \left(\frac{k_2}{k_1} \right) = \frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2}$

[bild]

$\left(\frac{k_1}{k_2} \right) \hat{=}$ Verhältnis der Geschwindigkeiten

$$\boxed{R + T = 1} \quad \frac{(k_1-k_2)^2}{(k_1+k_2)^2} + \frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2} = 1$$

1.4.5 Stufe $E < V_0$

$$\implies k_2 \rightarrow i\varrho_2 = i\sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}$$

$$\Phi_2 = B_2 e^{\varrho_2 x} + \Phi_2 = B'_2 e^{-\varrho_2 x}$$

Forderung: $B_2 = 0$ wegen exponentiellem Abfall im verbotenen Bereich.

Lösung wie oben mit $k_2 \rightarrow i\varrho_2$,

$$\varphi \begin{cases} e^{ik_1x} + \frac{k_1-i\varrho_2}{k_1+i\varrho_2}e^{-ik_1x} & x < 0 \\ \frac{2k_1}{k_1+i\varrho_2}e^{-\varrho_2x} & x > 0 \end{cases}$$

Transmission = 0; $\varphi \rightarrow 0$ für $x \rightarrow +\infty$

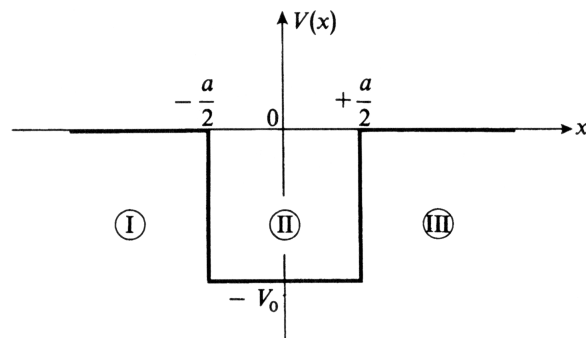
$$R = \left| \frac{k_1 - i\varrho_2}{k_1 + i\varrho_2} \right|^2 = 1;$$

$$\frac{k_1 - i\varrho_2}{k_1 + i\varrho_2} = e^{-2i\delta}$$

$$\delta = \arctan \frac{\varrho_2}{k_1}$$

1.4.6 Potentialtopf

$$-V_0 < E < 0$$



$$\begin{aligned}\phi_1 &= B_1 e^{\varrho x} + B'_1 e^{-\varrho x} \\ \phi_3 &= B_3 e^{\varrho x} + B'_3 e^{-\varrho x} \\ \phi_2 &= A_2 e^{\varrho x} + A'_2 e^{-\varrho x}\end{aligned}$$

mit:

$$\varrho = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}} \quad k = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2} \underbrace{(V_0 + E)}_{>0}}$$

1 Teilchen: $\Rightarrow$ quadratintegrale Lösung $B_3 = 0 \quad \int dx |\Phi(x)|^2 = 1 \quad B'_1 = 0$

4 Konstanten - 1 Normierung - 4 Anschlussbed.: $\Rightarrow$ System ist überbestimmt, hat nur Lösung für bestimmte diskrete E bzw ϱ oder k .

Anschlussbedingungen: bei $x = -\frac{a}{2}$,

$$\begin{aligned}\varphi \text{ stetig} \quad B_1 e^{-\varrho \frac{a}{2}} &= A_2 e^{-ik \frac{a}{2}} A'_2 e^{+ik \frac{a}{2}} \\ \varphi' \text{ stetig} \quad \varrho B_1 e^{-\varrho \frac{a}{2}} &= ik A_2 e^{-ik \frac{a}{2}} - ik A'_2 e^{ik \frac{a}{2}}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A_2 &= B_1 \left(\frac{ik + \varrho}{2ik} \right) e^{(ik - \varrho) \frac{a}{2}} \\ A'_2 &= B_1 \left(\frac{ik - \varrho}{2ik} \right) e^{(-ik - \varrho) \frac{a}{2}} \end{aligned}$$

$$\boxed{\frac{A_2}{A'_2} = \left(\frac{ik + \varrho}{ik - \varrho} \right) e^{ika} \quad \left| \quad \frac{A_2}{A'_2} = \left(\frac{ik - \varrho}{ik + \varrho} \right) e^{-ika} \text{ bei } y = +\frac{a}{2}} \quad (5)$$

identisch für $\varrho \rightarrow -\varrho \quad a \rightarrow -a$

- a) Normierung bleibt zunächst unbestimmt
 b) Gleichung Gl. (5) und Gl. (5) können zusammen nur für bestimmte Energien

erfüllt werden: $\Rightarrow \boxed{\left(\frac{ik - \varrho}{ik + \varrho} \right)^2 = e^{2ika}}$

Eigenwert-Gleichung für E bzw.

$$k = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2} (V_0 + E)} \quad \varrho = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}}$$

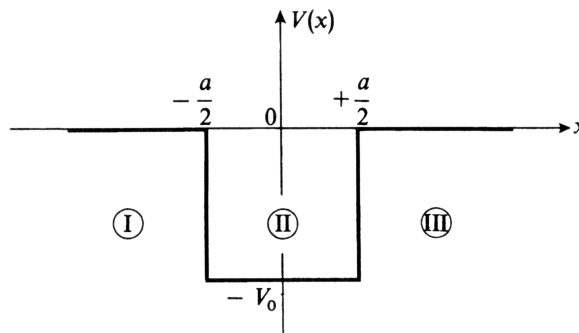
Zwei Lösungssystem:

$$\frac{ik - \varrho}{ik + \varrho} = \begin{cases} e^{ika} \\ -e^{ika} \end{cases} \quad \boxed{\frac{ka}{2} = \arctan \frac{\varrho}{k}}$$

Potentialtopf $E < 0$

Nur beschränkte Zahl von Lösungen.

$$\text{Ansatz: } \begin{cases} \varphi_1 = B_1 e^{+\varrho x} & x < -\frac{a}{2} \\ \varphi_3 = B_2 e^{-\varrho x} & x > \frac{a}{2} \\ \varphi_2 = A_2 e^{ikx} + A'_2 e^{-ikx} & -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2} \end{cases}$$



4 Anschlussbedingungen für B_1, B_2, A_2, A'_2

Zunächst nur Verhältnisse festgelegt $\Rightarrow$ System überbestimmt
 $\Rightarrow$ Gleichung für E;

$$\text{Anschluss bei } x = -\frac{a}{2}: \quad \frac{A_2}{A'_2} = \left(\frac{ik+\varrho}{ik-\varrho} \right) e^{ika}$$

$$x = \frac{a}{2}: \quad \frac{A_2}{A'_2} = \left(\frac{ik-\varrho}{ik+\varrho} \right) e^{-ika}$$

$$\left(\frac{ik-\varrho}{ik+\varrho} \right)^2 = e^{2ika}$$

Eigenwert-Gleichung für E mit $k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 + E)}$, $\varrho = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(-E)}$

Aus der Form

$$\left(\frac{ik-\varrho}{ik+\varrho} \right)^2 \cdot e^{2ika} = 1$$

sieht man, dass $\frac{A_2}{A'_2} = \pm 1$ ist.

$\Rightarrow$ Zwei Lösungssysteme: Gerade und ungerade.

$$\frac{ik-\varrho}{ik+\varrho} = +e^{ika} \quad \text{und} \quad -e^{ika}$$

Etwas trickreiche Algebra für den ersten Fall ($+e^{ika}$):

$$\underbrace{\frac{k+i\varrho}{k-i\varrho}}_{\text{Betrag}=1} = e^{2i\theta}$$

Betrag = 1

mit $\tan \theta = \frac{\varrho}{k}$; oder $\theta = \arctan \frac{\varrho}{k}$

$$\begin{aligned} e^{2i\theta} &= e^{ika} \\ e^{i\theta} &= e^{ika/2} \\ \frac{ka}{2} &= \theta = \arctan \frac{\varrho}{k} \end{aligned}$$

$$\boxed{\frac{\varrho}{k} = \tan \frac{ka}{2}}$$

Umformung:

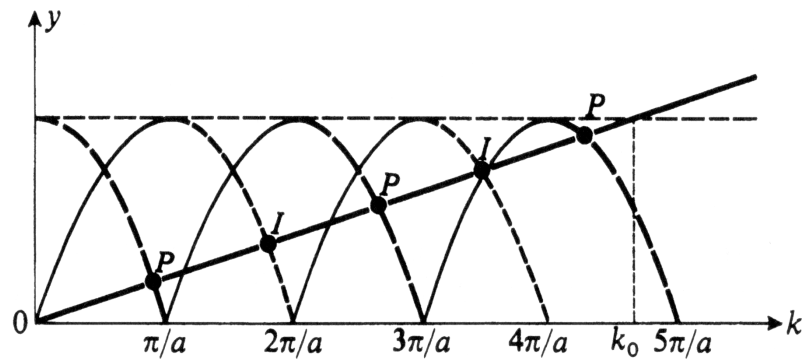
$$\frac{1}{\cos^2 \frac{ka}{2}} = 1 + \tan^2 \frac{ka}{2} = 1 + \frac{\varrho^2}{k^2} = \frac{k^2 + \varrho^2}{k^2} = \frac{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}{k^2} = \frac{k_0^2}{k^2}$$

Mit $k_0 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$

$$\boxed{\left| \cos \frac{ka}{2} \right| = \frac{k}{k_0} \quad \tan \frac{ka}{2} > 0} \quad \text{gerade Lösung}$$

Aus $\left(\frac{ik-\varrho}{ik+\varrho}\right) = e^{ika}$ folgt:

$\left \sin \frac{ka}{2}\right = \frac{k}{k_0} \quad \tan \frac{ka}{2} < 0$	ungerade Lösung
--	-----------------



Für diese Wahl von k_0 gibt es $\binom{3}{2}$ Lösungen vom Typ $\begin{pmatrix} G \\ U \end{pmatrix}$. Aus k folgen dann A_2, A'_2, B_1, B'_3 . Mit wachsendem k_0 ; (V_0) erhalten wir immer mehr Lösungen und die Werte für k liegen approximativ bei $n(\frac{\pi}{a})$.

Für $V_0 \rightarrow \infty$: unendlich tiefer Topf

$$k_n = n\left(\frac{\pi}{a}\right); \quad E_n = \frac{1}{2m}\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2$$

Für beliebig kleine k_0 gibt es immer noch eine Lösung. (Schnittpunkt mit $\cos$)

2 Mathematische Hilfsmittel

Wellenfunktion $\Phi(x, t)$ ist sehr spezielle Beschreibung eines Systems.

$|\Psi|^2 \Rightarrow$ Verteilung als Funktion von x

$|\tilde{\Psi}|^2 \Rightarrow$ Verteilung als Funktion von p

Alternativ: Angabe von E_n für gebundenen Zustand, oder: Mehrere E_n und relative Amplitude falls Überlagerung verschiedener Energie-Eigenzustände vorliegt.

Im Allgemeinen viele Möglichkeiten (Messgrößen, Observable) für die Charakterisierung. Umgekehrt gibt es verschiedene Möglichkeiten die gleiche Messung zu beschreiben:

Z.B.: Erwartungswert des Impulses:

$$\langle p \rangle = \int dp \tilde{\Psi}^*(p) p \tilde{\Psi}(p) = \int dx \Psi^*(x) \left(\frac{\hbar \delta_x}{i} \right) \Psi(x)$$

Ziel: Abstrakte Beschreibung eines Zustandes (statt Bahnkurve in klassischer Mechanik) als Element eines Vektorraumes (genauer: eines Hilbertraumes) und der Messgröße ($\equiv$ Observable) durch hermitesche (genauer: selbstadjungierte) Operatoren unabhängig von einer Basis. Die Messung entspricht Matrixelement dieses Operators.

2.1 Wellenfunktionen als Zustandsraum

2.1.1 Zustandsraum $\mathfrak{F}$

{ Quadratintegrable Funktion } $\equiv L^2$

Hier oft zusätzliche Einschränkungen, abhängig vom Problem (z.B. stetig, differenzierbar, beschränkt oder nur in einem Intervall $\neq 0, \dots$)

$\mathfrak{F} = \{ \text{genügend reguläre Funktionen} \in L^2 \}$

- $\mathfrak{F}$ linearer Raum $\rightarrow$ Superpositionsprinzip

$\Psi_1, \Psi_2, \in \mathfrak{F} \Rightarrow \Psi = \lambda_1 \Psi_1 + \lambda_2 \Psi_2 \in \mathfrak{F}$ da $|\Psi|^2$ ebenfalls quadratintegrabel.

$$\text{Beweis: } |\Psi|^2 = |\lambda_1|^2 |\Psi_1|^2 + |\lambda_2|^2 |\Psi_2|^2 + \underbrace{2\Re\{\lambda_1 \lambda_2^* \Psi_1 \Psi_2^*\}}_{< |\lambda_1 \lambda_2|^2 (|\Psi_1|^2 |\Psi_2|^2)}$$

$$\Rightarrow \int dx |\Psi|^2 < |\lambda_1|^2 \int dx |\Psi_1|^2 + \dots$$

- Skalarprodukt

$$(\varphi, \Psi) \equiv \int d\vec{r} \varphi^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r})$$

Es gilt $(\varphi, \Psi)^* = \Psi, \varphi)$

$\rightarrow (\varphi, \Psi)$ ist $\left\{ \begin{smallmatrix} \text{linear} \\ \text{antilinear} \end{smallmatrix} \right\}$ bezüglich $\left\{ \begin{smallmatrix} \Psi \\ \varphi \end{smallmatrix} \right\}$

d.h. $(\varphi, \lambda \Psi) = \lambda (\varphi, \Psi); \quad (\lambda \varphi, \Psi) = \lambda^* (\varphi, \Psi)$

Falls $(\varphi, \Psi) = 0 \equiv \varphi, \Psi$ sind orthogonal

Ferner: $(\varphi, \Psi) = 0 \Leftrightarrow \Psi = 0$

$(\varphi, \Psi)^{\frac{1}{2}} = \text{Normierung} = \|\Psi\|$

Schwarzsche Ungleichung

$$|(\Psi_1, \Psi_2)| \leq \|\Psi_1\| \cdot \|\Psi_2\|$$

Beweis: Betrachte $\left(\frac{\Psi_1}{\|\Psi_1\|} + \frac{\Psi_2}{\|\Psi_2\|}\right)^2 \geq 0$

- Lineare Operatoren:

Lineare Abbildung $A : \varphi A \Psi$ mit $\Psi, \varphi \in \mathfrak{F}$

$$A(\lambda_1 \Psi_1 + \lambda_2 \Psi_2) = \lambda_1 A \Psi_1 + \lambda_2 A \Psi_2$$

Beispiele:

- Ortsoperator $X \hat{=}$ Multiplikation der Wellenfunktion im Ortsraum mit x

$$X \Psi(x, y, z) = x \Psi(x, y, z)$$

- Ableitungsoperator:

$$D_x \Psi(x, y, z) = \frac{d}{dx} \Psi(x, y, z)$$

- Paritätsoperator:

$$\Pi \Psi(x, y, z) = \Psi(-x, -y, -z)$$

- Hamiltonoperator:

$$H \Psi(x, y, z) = \left(-\frac{\hbar \Delta}{2m} + V(x, y, z) \right) \Psi(x, y, z)$$

Anmerkung: Der Operator A ist i.A. nicht für alle Zustände definiert, Bsp

$$\text{dazu: } \Psi(x) = \sqrt{\frac{a}{2}} \frac{1}{a+|x|}$$

$$\int dx |\Psi(x)|^2 = 1 \text{ aber } \int dx \Psi^*(x) \Psi(x) x$$

- Produkt: AB definiert durch $(AB)\Psi = A(B\Psi)$

i.A.: $AB \neq BA$

$$\boxed{[AB] = AB - BA}$$

Bsp: $[x, D_x]$

$$\begin{aligned} [x, D_x] \Psi(\vec{r}) &= \left(x \frac{d}{dx} - \frac{d}{dx} x \right) \Psi = x \left(\frac{d}{dx} \Psi \right) - \frac{d}{dx} (x \Psi) \\ &= -\Psi \\ \rightarrow [x, D_x] &= -1 \text{ oder } [x, \underbrace{\frac{\hbar D_x}{i}}_p] = i\hbar \\ [x, p] &= i\hbar \end{aligned}$$

2.1.2 Orthonormierte Basis

- Vektor wird charakterisiert durch seine Komponenten bezüglich orthonormaler Basis $\{u_i\}$
 $u_i(\vec{r}) \in \mathfrak{F} \quad i = 1 \dots n \text{ (oder eventuell } \infty)$
 $(u_i, u_j) = \delta_{ij} \Leftrightarrow \text{orthonormiert}$
 $\{u_i\}$ ist „Basis“, wenn jedes $\Psi \in \mathfrak{F}$ geschrieben werden kann als
 $\Psi(\vec{r}) = \sum_i^\infty (c_i u_i(\vec{r})).$
- Berechnung der c_i :

ausführliche Schreibweise	Kurznotation
$\Psi(\vec{r}) = \sum_i c_i u_i(\vec{r})$	$\Psi = \sum_i c_i u_i$
$\int d\vec{r} u_j^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) = \sum_i c_i \int d\vec{r} \underbrace{u_j^*(\vec{r}) u_i(\vec{r})}_{\delta_{ij}}$	$(u_j, \Psi) = \sum_i c_i \underbrace{(u_j, u_i)}_{\delta_{ij}}$
$\int d\vec{r} u_j^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) = c_j$	$(u_j, \Psi) = c_j$

- Skalarprodukt in Komponentenschreibweise

ausführlich	kurz
$\varphi = \sum_i G_i u_i(\vec{r}); \quad \Psi(\vec{r}) = \sum_j c_j u_j(\vec{r})$	$\varphi = \sum_i G_i u_i; \quad \Psi = \sum_j c_j u_j$
$\int d\vec{r} \varphi^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) = \sum_i G_i^* c_i$	$(\varphi, \Psi) = \sum_i G_i^* c_i$

speziell $(\Psi, \Psi) = \sum_i |c_i|^2$

Analogie zu Basisvektoren $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$ in $\mathbf{R}^3$ ist offensichtlich.

- Vollständigkeitsrelation: Jede Funktion $\Psi(\vec{r}) \in \mathfrak{F}$ kann dargestellt werden in der Form

$$\begin{aligned}
 \Psi(\vec{r}) &= \sum_i c_i u_i(\vec{r}) \quad \Psi = \sum_i c_i u_i \\
 &= \sum_i \left(\int d\vec{r}' \underbrace{u_i^*(\vec{r}') \Psi(\vec{r}')}_{=c_i} \right) u_i(\vec{r}) = \sum_i \underbrace{(u_i \Psi)}_{=c_i} u_i \\
 &\quad \int d\vec{r}' \Psi(\vec{r}') \underbrace{\sum_i u_i(\vec{r}') u_i(\vec{r}')}_{\delta(\vec{r}-\vec{r}')} = \sum_i u_i u_i = 1
 \end{aligned}$$

$\Rightarrow \sum_i u_i^*(\vec{r}) u_i(\vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$

2.1.3 Ebene Wellen und andere verallgemeinerte Basiszustände

(nur eindimensional)

Ebene Welle: $v_p(x) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$ nicht normierbar; $p \hat{=}$ Index

Zerlegung eines Wellenpaketes nach ebenen Wellen $\hat{=}$ Entwicklung nach Basis $\{v_p\}$

Fourier-Transformation:

$$\begin{aligned}
 \Psi(x) &= \int \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} \tilde{\Psi}(p) e^{ipx/\hbar} \\
 &= \int \underbrace{dp}_{\hat{=}\sum_i} \underbrace{\tilde{\Psi}(p)}_{\hat{=}\sum_i} \underbrace{v_p}_{\hat{=}\sum_i}
 \end{aligned}$$

$\Rightarrow$ Darstellung des Vektors

Umkehrung:

$$\begin{aligned}
 \underbrace{\tilde{\Psi}(p)}_{c_i} &= \int \frac{dx}{\sqrt{2\pi\hbar}} \Psi(x) e^{-ipx/\hbar} \\
 &= \underbrace{\int dx v_p^* \Psi(x)}_{\hat{=}(u_i, \Psi)}
 \end{aligned}$$

$\Rightarrow$ Berechnung der Koeffizienten

Parseval'sche Gleichung

$$\begin{aligned}
 \int dx \Psi^*(x) \Psi(x) &= \int dp \tilde{\Psi}^*(p) \tilde{\Psi}(p) \\
 (\Psi, \Psi) &= \sum_i |c_i|^2
 \end{aligned}$$

Vollständigkeit: $\sum_i u_i(x) u_i^*(x') = \delta(x' - x)$

Hier:

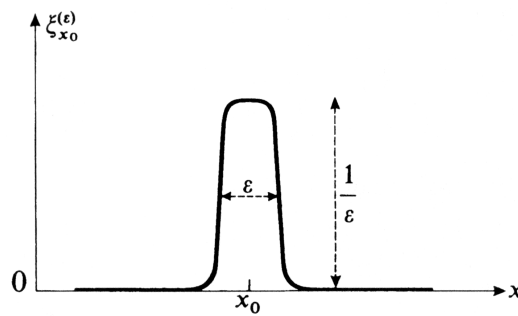
$$\int dp \left(\frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \right) \left(\frac{e^{-ipx'/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \right) = \delta(x' - x)$$

Orthonormiertheit:

$$(v_p, v_{p'}) \int \frac{dx}{2\pi\hbar} e^{\frac{-ipx}{\hbar} + \frac{ip'x}{\hbar}} = \delta(p - p')$$

in Analogie zu δ_{ij}

Entsprechendes gilt für den Ortsraum mit der verallgemeinerten Basis $\{\xi_{x_0}(x)\}$ mit $\xi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0)$



Aufgabe: Entwickle $\xi_{x_0}(x)$ bezüglich v_p und umgekehrt v_p bezüglich $\xi_{x_0}(x)$. Wie lauten Vollständigkeitsrelationen und Orthonormiertheit für $\{\xi\}$?

Verallgemeinerung auf beliebige konstante Basis $\{W_\alpha\}$

$$\begin{aligned} (W_\alpha, W_{\alpha'}) &= \delta(\alpha - \alpha') && \text{orthonormiert} \\ \int d\alpha W_\alpha(x) W_{\alpha'}^*(x') &= \delta(x - x') && \text{vollständig} \end{aligned}$$

gemischte Basis (Bindungs- und Streuzustände)

$$\begin{aligned} \{u_i, w_\alpha\} & \quad ; \quad i \text{ diskret, } \alpha \text{ kontinuierlich} \\ (u_i, u_j) &= \delta_{ij} \\ (w_\alpha, w_{\alpha'}) &= \delta_{\alpha - \alpha'} \\ (u_i, w_\alpha) &= 0 \end{aligned}$$

Vollständigkeit:

$$\sum_i u_i(x) u_i^+(x') + \int d\alpha w_\alpha(x) w_\alpha^*(x') = \delta(x - x')$$

2.2 Dirac–Notation

2.2.1 Einführung

Zustand eines Teilchens kann charakterisiert werden durch $\Psi(\vec{r})$ oder durch Komponenten bezüglich einer Basis.

Basis	Index	Komponenten	$\Psi(\vec{r})$	Bezeichnung
$u_i(\vec{r})$	i	c_i	$\sum_u c_u u_u(\vec{r})$	allgemein
$v_{\vec{p}}(\vec{r})$	$\vec{p}$	$\tilde{\Psi}(\vec{r})$	$\int d\vec{p} \tilde{\Psi}(\vec{p}) v_{\vec{p}}(\vec{r})$	Impulsdarstellung
$\xi(\vec{r}_0)$	$\vec{r}_0$	$\Psi(\vec{r}_0)$	$\int d\vec{r}_0 \Psi(\vec{r}_0) \xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})$	Orstdarstellung
$w_{E_n}(\vec{r})$	n	c_n	$\sum_n c_n w_{E_n}(\vec{r})$	Energiedarstellung für gebundene Zustände

Analogie zum Vektor in $\mathbb{R}_3$:

$$\vec{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \sum_i a_i \vec{e}_i \quad \text{bezüglich Basis } \vec{e}_1 \vec{e}_2 \vec{e}_3$$

Basiswechsel: neue Basisvektoren: $\vec{e}_i = \underbrace{O}_{\text{orthogonale Matrix}} \vec{e}'_i$

$$\vec{a} = \sum_i a'_i \vec{e}'_i \quad \text{wobei } a'_j = \sum_i a_i (\vec{e}'_j, \vec{e}_i) = \sum_i a_i \underbrace{\vec{e}'_j O \vec{e}_i}_{O_{ij}}$$

$\vec{a}$ hat Bedeutung unabhängig von Basis.

$\vec{a} \cdot \vec{b}$ liefert das gleiche Resultat in jeder Basis.

2.2.2 „ket“ und „bra“ liefert Bracket

Abstrakte Beschreibung eines Zustandes ohne Bezug auf Wellenfunktionen.

- „ket“ $\equiv$ Element der Zustandsmenge symbolisiert durch $\langle a|$ charakterisiert den Zustand ohne Bezug auf Basis.
- „bra“: Zu jeder „ket“ $|\varphi\rangle$ gehört eine „bra“ $\langle\varphi|$ die zusammen mit einer beliebigen „ket“ $|\varphi\rangle$ eine komplexe Zahl definiert:

$$\langle\varphi|\Psi\rangle = \text{komplexe Zahl}$$

(entspricht dem Skalarprodukt wie in Abschnitt 2.1)

Es gelten folgende Rechenregeln:

$$\begin{aligned} \langle\varphi|\Psi\rangle^* &= \langle\Psi|\varphi\rangle \\ \langle\varphi|\lambda_1\Psi_1 + \lambda_2\Psi_2\rangle &= \lambda_1\langle\varphi|\Psi_1\rangle + \lambda_2\langle\varphi|\Psi_2\rangle && \text{linear} \\ \langle\lambda_1\varphi_1 + \lambda_2\varphi_2|\Psi\rangle &= \lambda_1^*\langle\varphi_1|\Psi\rangle + \lambda_2^*\langle\varphi_2|\Psi\rangle && \text{antilinear} \end{aligned}$$

2.2.3 Lineare Operatoren

$A|\Psi\rangle$ ist wieder „ket“, $|A\Psi\rangle$ und $\langle\varphi|(A|\Psi\rangle)$ einerseits Skalarprodukt von $\langle\varphi|$ mit dem „ket“ $(A|\Psi\rangle)$, andererseits kann es als Matrix interpretiert werden.

Beispiel für linearen Operator:

Gegeben sei $|\Psi_1\rangle$ und $\langle\varphi_1|$ (fest gewählt). Dann definiert $|\Psi_1\rangle\langle\varphi_1|$ einen linearen Operator auf beliebige „ket“ $|\Psi\rangle$ durch

$$|\Psi_1\rangle\langle\varphi_1|\Psi\rangle$$

Analogie für Vektoren:

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} : a \cdot b = \sum_i a_i \cdot b_i \quad \text{Skalarprodukt}$$

$$ba^* = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1^* & \dots & a_n^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 a_1^* & b_2 a_2^* & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_n a_1^* & \dots & \dots & b_n a_n^* \end{pmatrix}$$

Projektor:

Es sei $\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$

$P_\Psi \equiv |\Psi\rangle\langle\Psi|$ Operator

$$P_\Psi|\varphi\rangle = \underbrace{|\Psi\rangle}_{\text{Richtung}} \underbrace{\langle\Psi|\varphi\rangle}_{\text{Gewicht}}$$

Projektor auf $1 - P$ Unterraum.

$$\text{Es gilt } P_\Psi^2 = P_\Psi$$

Es seien $|\Psi_1\rangle \dots |\Psi_q\rangle$ orthonormierte „ket“, d.h. $\langle\Psi_i|\Psi_j\rangle = \delta_{ij}$ für $1 \leq i, j \leq q$. Dann ist $P = \sum_{1 \leq i, j \leq q} |\Psi_j\rangle\langle\Psi_i|$ Projektor auf den durch $|\Psi_1\rangle \dots |\Psi_q\rangle$ aufgespannten Raum.

Zeige dass $P^2 = P$ (Nachrechnen!)

2.2.4 Hermitisch konjugierter ($\hat{=}$ adjungierter) Operator

A auf „ket“ $|\Psi\rangle$ liefert $(A|\Psi\rangle)$; ist wieder „ket“.

Wirkung von A auf „bra“ $\langle\varphi|$ (liefert „bra“ $\langle\varphi|A$) ist festgelegt durch die Forderung:

$$(\langle\varphi|A)|\Psi\rangle = \langle\varphi|(A|\Psi\rangle) \quad \forall \Psi$$

und wir schreiben in Analogie zur Matrixnotation:

$$(\langle \varphi | A) | \Psi \rangle = \langle \varphi | (A | \Psi \rangle) = \langle \varphi | A | \Psi \rangle$$

Der zu A adjungierte (hermitisch konjugierte) Operator A^+ ist definiert durch

$$\langle \varphi | A^+ | \Psi \rangle \equiv \langle \Psi | A | \varphi \rangle^*$$

in Analogie zu Matrizen: $(M^+)_{ij} = M_{ji}^*$

$$\begin{aligned} \text{Beachte: } |A\Psi\rangle &= A|\Psi\rangle \\ \langle A\Psi| &= \langle \Psi|A^+ \quad (\text{wie } \langle \lambda\Psi| = \lambda^* \langle \Psi|) \\ \text{Es gilt: } A^{++} &= A, \quad (\lambda A)^+ = \lambda^* A^+ \\ (AB)^+ &= B^+ A^+ \end{aligned}$$

2.3 Darstellungen im Zustandsraum

Wahl einer Darstellung $\hat{=}$ Wahl einer normierten Basis

Zustände werden dann „dargestellt“ durch die Komponenten dieser Basis.

Operatoren : Matrizen

Zusammenstellung der wesentlichen Formeln (nur für diskreten Index):

$\{|u_i\rangle\}$ orthonormierte Basis

Jeder ket $|\Psi\rangle$ kann geschrieben werden als $|\Psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle$

Es gilt $\forall i : P_i = |u_i\rangle\langle u_i|$ ist Projektor.

$$\sum_i P_i = \mathbf{1}$$

$$\begin{aligned} \text{Beispiel: } \langle \varphi | \Psi \rangle &= \langle \varphi | \mathbf{1} | \Psi \rangle = \langle \varphi | \sum_i P_i | \Psi \rangle \\ &= \sum_i \langle \varphi | u_i \rangle \langle u_i | \Psi \rangle \end{aligned}$$

ket $|\Psi\rangle$ in der durch $\{|u_i\rangle\}$ festgelegten Darstellung entspricht der einspaltigen Matrix:

$$\begin{pmatrix} \langle u_1 | \Psi \rangle \\ \langle u_2 | \Psi \rangle \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

bra $\langle \Psi |$ in der durch $\{|u_i\rangle\}$ festgelegten Darstellung entspricht der einzeiligen Matrix:

$$(\langle \Psi | u_1 \rangle \quad \langle \Psi | u_2 \rangle \quad \dots) = (c_1^* \quad c_2^* \quad \dots)$$

Operator A $A_{ij} = \langle u_i | A | u_j \rangle$

Produkt von A mit $|\Psi\rangle$: $A|\Psi\rangle$ in der durch $\{|u_i\rangle\}$ charakterisierten Basis.

$$\begin{aligned} |\Psi'\rangle &= A|\Psi\rangle \\ c'_i &= \sum_j A_{ij} c_j \end{aligned}$$

Basis-Wechsel $\hat{=}$ „Wechsel der Darstellung“

Übergang von Basis $\{|u_i\rangle\}$ zu Basis $\{|t_k\rangle\}$

Regel wird festgelegt durch die Komponenten jedes der neuen Basisvektoren bezüglich der alten Basis.

$$\begin{aligned} |t_k\rangle &= \sum_i \underbrace{\langle u_i | t_k \rangle}_{\text{Komponenten von } t_k \text{ bezüglich } u_i} |u_i\rangle \\ S_{ik} &\equiv \langle u_i | t_k \rangle \quad \text{Transformationsmatrix} \\ (S)_{ki}^+ &= (S_{ik})^* = \langle t_k | u_i \rangle \end{aligned}$$

S ist unitär: $SS^+ = S^+S = \mathbf{1}$

Beweis: $(SS^+)_{ij} = \sum_k \langle u_i | \underbrace{|t_k\rangle\langle t_k|}_{=1} | u_j \rangle = \underbrace{\langle u_i | u_j \rangle}_{\delta_{ij}}$ Neue Komponenten

- von ket: $\langle t_k | \Psi \rangle = \sum_i (S^+)_{ki} c_i$
- von bra: $\langle \varphi | t_k \rangle = \sum_i b_i^* S_{ik}$

2.4 Eigenwert-Gleichungen / Observablen

2.4.1 Eigenwerte / Eigenvektoren

$$A|\Psi\rangle = \underbrace{\lambda}_{\text{Eigenwert}} \underbrace{|\Psi\rangle}_{\text{Eigenvektor}}$$

2 Fälle:

λ ist einfacher Eigenwert $\Leftrightarrow$ der zu λ gehörige Eigenvektor ist eindeutig festgelegt.

λ ist g -facher Eigenwert $\Leftrightarrow$ linear unabhängiger Eigenvektor zu $\lambda : |\Psi^i\rangle; i = 1 \dots g$ Diese spannen Eigenwertgleichung in bestimmter Darstellung

$$\begin{aligned} A|\Psi\rangle &= \lambda|\Psi\rangle \\ c_i &\equiv \langle u_i | \Psi \rangle; \quad A_{ij} = \langle u_i | A | u_j \rangle \\ \langle u_i | A \underbrace{\quad}_{\sum_j |u_j\rangle\langle u_j|} |\Psi\rangle &= \lambda \langle u_i | \Psi \rangle \end{aligned}$$

$$\boxed{\sum_j A_{ij} c_j = \lambda c_i}$$

$$\boxed{\sum_j \underbrace{(A_{ij} - \lambda \delta_{ij})}_{\sum_j M_{ij} c_j = 0} c_j = 0}$$

Homogenes Gleichungssystem; hat nur Lösungen $\neq 0$ wenn $\text{Det}(A_{ij} - \lambda \delta_{ij}) = 0$

„Säkulargleichung“

Für $N \times N$ -Matrix $\Rightarrow$ Gleichung N -ten Grades für $\lambda \Rightarrow N$ Wurzeln, reell oder komplex, einfach oder vielfach. c_j ist für festes λ Lösung der komplexen Gleichung.

Für hermitesche Operatoren gilt:

Falls die Säkulargleichung die Wurzel λ n -fach hat, so gibt es n linear unabhängige Eigenvektoren zu λ .

2.4.2 Observable

Im folgenden sei A hermitisch

$\Rightarrow$ Eigenwerte reell

Denn es gilt: $A|\Psi\rangle = \lambda|\Psi\rangle$ für Eigenvektor $|\Psi\rangle$

$$\langle\Psi|A|\Psi\rangle = \lambda\langle\Psi|\Psi\rangle$$

$$\lambda^*\langle\Psi|\Psi\rangle = \langle\Psi|A|\Psi\rangle^* = \langle\Psi|A^+|\Psi\rangle$$

$$\text{da } A \text{ hermitisch} = \langle\Psi|A|\Psi\rangle = \lambda\langle\Psi|\Psi\rangle$$

Ferner: $A|\varphi\rangle$

$$\begin{aligned} \langle\Psi|A|\varphi\rangle & \stackrel{\text{Definition von } A^+}{=} \langle\varphi|A^+|\Psi\rangle^* \stackrel{A \text{ hermitisch}}{=} \langle\varphi|A|\Psi\rangle^* = \lambda^*\langle\varphi|\Psi\rangle^* \\ & = \lambda\langle\Psi|\varphi\rangle \Rightarrow \boxed{\langle\Psi|A = \lambda\langle\Psi|} \end{aligned}$$

Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten stehen orthogonal aufeinander.

$$\begin{aligned} A|\Psi\rangle & = \lambda|\Psi\rangle; \quad A|\varphi\rangle = \mu|\varphi\rangle; \quad \lambda \neq \mu \\ \langle\varphi|A|\Psi\rangle & = \begin{cases} \lambda\langle\varphi|\Psi\rangle & \text{Wirkung nach rechts} \\ \lambda\langle\mu|\Psi\rangle & \text{Wirkung nach links} \end{cases} \\ \Rightarrow \lambda \neq \mu & \Rightarrow \langle\varphi|\Psi\rangle = 0 \end{aligned}$$

Endlich dimensionaler Raum, hermitesche Matrix:

{Eigenvektor} = Basis

Hier: Forderung: Hermitescher Operator O dessen Eigenvektor eine Basis bilden $\equiv$ Observable.

D.h. Jeder Zustand kann entwickelt werden nach Eigenvektor von O .

Bsp.: Hamilton Operator: Energie-Eigenzustände sind vollständig.

Behauptung:

Falls $[A, B] = 0 \Rightarrow \exists$ Orthogonale Basis mit Basisvektoren die simultan Eigenvektoren zu A und B sind

Vollständiger Satz von Observablen $A, B, C, \dots$

1. Alle Operatoren vertauschen untereinander

2. Das System der Eigenvektoren ist nicht mehr entartet, d.h. zwei Eigenvektoren zu A, B, C unterscheiden sich in wenigstens einem Eigenwert. Die Eigenvektoren sind eindeutig durch ihre Eigenwerte charakterisiert.

Beispiel: Eindimensionales Potential x oder p

		x oder p
Eindimensionale Box	[Bild]	k_n oder Energie
		$k_n = \frac{n\pi}{a}$

Anmerkungen:

- Wenn O mit allen Operatoren eines vollständigen Satzes von Operatoren vertauscht, so ist O eine Funktion dieser Operatoren.
Beispiel: 1-dimensional $[O, x] = 0$, dann ist O eine Funktion von x .
- Zustände ket (oder bra) werden oft durch die Eigenwerte eines vollständigen Satzes charakterisiert.
 $|p\rangle$ ebene Welle mit Impuls p
 $|E_1\rangle$ Grundzustand des Hamilton Operators (1-dim. Problem)
 $|n, l, m\rangle$ Energie-Eigenzustand mit $E_n \sim n^2$, mit $(\text{Drehimpuls})^2 = l(l+1)\hbar^2$, und $l_z = m\hbar$
 Impuls: $\{\text{Eigenzustände } |p_0\rangle\} = \text{Basis}; \quad \langle p_0 | p'_0 \rangle = \delta(p_0 - p'_0)$
 Impulsdarstellung: $\langle p_0 | \Psi \rangle \tilde{\Psi}(p)$

 Ort: $\{\text{Eigenzustand: } |x\rangle\} = \text{Basis} \quad \langle x | x' \rangle = \delta(x - x')$
 Ortsdarstellung: $\langle x | \Psi \rangle = \Psi(x)$

 Energie: $\{\text{Eigenzustand } |E_n\rangle \text{ oder } |n\rangle\} = \text{Basis}$
 Energiezustand $\langle E_n | \Psi \rangle$
- Funktionen eines Operators: $f(H)$
Entweder: Wähle Darstellung, in welcher A diagonal ist.

$$\langle i | A | j \rangle = a_i \delta_{ij} = \begin{pmatrix} a_1 & & & \\ & a_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & a_n \end{pmatrix}$$

$$\langle i | f(A) | j \rangle = f(a_i) \delta_{ij} = \begin{pmatrix} f(a_1) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & f(a_2) & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & f(a_n) \end{pmatrix}$$

Falls $f(u) = \sum_n c_n u^n$, dann $f(A) = \sum_n c_n A^n$

Wichtige Beispiele:

$\mathcal{P}$ sei Impulsoperator, a Konstante

$$e^{ia\mathcal{P}/\hbar}$$

Impulsdarstellung:

$$\begin{aligned}\langle p'_0 | e^{ia\mathcal{P}/\hbar} | p_0 \rangle &= e^{ia\mathcal{P}/\hbar} \delta(p'_0 - p_0) \\ \langle p_0 | e^{ia\mathcal{P}/\hbar} | \Psi \rangle &= \int dp'_0 \langle p_0 | e^{ia\mathcal{P}/\hbar} | p' \rangle \langle p' | \Psi \rangle \\ &= e^{ia\mathcal{P}/\hbar} \tilde{\Psi}(p_0)\end{aligned}$$

Ortsdarstellung:

$$\begin{aligned}e^{ia\mathcal{P}/\hbar} &\hat{=} e^{a \frac{d}{dx}} = \sum_n \frac{1}{n!} \left(a \frac{d}{dx}\right)^n \\ \langle x | e^{ia\mathcal{P}/\hbar} | \underbrace{\int dx' |x'\rangle \langle x'|}_{\Psi} \rangle &= \int dx' \langle x | \sum_n \frac{1}{n!} \left(a \frac{d}{dx}\right)^n |x'\rangle \langle x' | \Psi \rangle \\ &= \int dx' \sum_n \frac{1}{n!} \left(a \frac{d}{dx}\right)^n \delta(x - x') \Psi(x') \\ &= \sum_n \frac{1}{n!} \left(a \frac{d}{dx}\right)^n \Psi(x) = \sum_n \frac{1}{n!} a^n \Psi^{(n)}(x) \\ &= \Psi(x + a)\end{aligned}$$

Hamilton-Operator in Orts- bzw. Impulsdarstellung

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x); \quad p = \text{Impulsoperator} \quad x = \text{Ortsoperator}$$

- Ortsdarstellung

$$\begin{aligned}\langle x_0 | P^2 | x'_0 \rangle &= \left(i\hbar \frac{d}{dx_0}\right)^2 \delta(x_0 - x'_0) \\ \langle x_0 | V(x) | x'_0 \rangle &= V(x_0) \delta(x_0 - x'_0) \\ \langle x | \mathcal{H} | \Psi \rangle &= \int dx'_0 \langle x_0 | \mathcal{H} | x'_0 \rangle \langle x'_0 | \Psi \rangle \\ &= \int dx'_0 \left[\frac{1}{2m} \left(i\hbar \frac{d}{dx_0}\right)^2 + V(x_0) \right] \delta(x_0 - x'_0) \Psi(x'_0) \\ &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d}{dx_0}\right)^2 + V(x_0) \right) \Psi(x_0)\end{aligned}$$

- Impulsdarstellung

$$\begin{aligned}
 \langle p_0 | P^2 | p'_0 \rangle &= p_0^2 \delta(p_0 - p'_0) \\
 \langle p_0 | V(x) | p'_0 \rangle &= \int dx_1 dx_2 \underbrace{\langle p_0 | x_1 \rangle}_{\delta(p_0 - x_1)} \underbrace{\langle x_1 | V(x) | x_2 \rangle}_{V(x_1)} \underbrace{\langle x_2 | p'_0 \rangle}_{\delta(x_2 - p'_0)} \\
 &= \int dx_1 dx_2 V_{p_0}(x_1)^* \delta(x_1 - x_2) V_{p'_0}(x_2) \\
 &= \frac{dx_1}{2\hbar\pi} e^{i(p'_0 - p_0)x_1/\hbar} V(x_1) \\
 &= \tilde{V}(p'_0 - p_0) / \sqrt{2\pi\hbar} \\
 \underbrace{\langle p_0 | \mathcal{H} | p'_0 \rangle}_{|p'_0\rangle\langle p'_0|} | \Psi \rangle &= \frac{p_0^2}{2m} \tilde{\Psi}(p_0) + \int \frac{dp'}{\sqrt{2\pi\hbar}} \tilde{V}(p'_0 - p_0) \tilde{\Psi}(p'_0)
 \end{aligned}$$

$$\boxed{\langle p_0 | \mathcal{H} | \Psi \rangle = E \langle p_0 | \Psi \rangle} \quad \text{Integralgleichung}$$

3 Postulate der Quantenmechanik

3.1 Allgemeine Prinzipien

Zwei Jahre Intensive Diskussion 1925/26 (Kopenhagener Interpretation)

Klassisches mechanisches System:

Zur Zeit t_0 : Zustand festgelegt durch die verallgemeinerten Koordinaten $q_i(t_0), p_i(t_0)$, Bewegung im Phasenraum.

(Bild - beliebiger Zeitpunkt: $q_i(t), p_i(t)$ aus den hamilton'schen Gleichungen)

Quantenmechanik

- Zur Zeit t_0 : Zustand festgelegt durch $|\Psi(t_0)\rangle$. Jede Messung wird beschrieben durch die Wirkung eines Operators der auf $\Psi(t_0)$ wirkt. $\rightarrow$ „Observable“
- Messung $\rightarrow$ Eigenwert von A
z.B. Energieeigenwerte, Spin bei Stern Gerlach
- Wahrscheinlichkeit, den Eigenwert a_n zu finden (ohne Entartung)

$$P(a_n) = |\langle u_n | \Psi \rangle|^2$$

$$a_n \text{ g-fach entartet } P(a_n) = \sum_{i,\dots,g} |\langle u_n^i | \Psi \rangle|^2$$

Falls A kontinuierliches Spektrum:

$$\text{Dichte } dP(\alpha) = |\langle \nu_\alpha | \Psi \rangle|^2 d\alpha$$

Beispiel: Dichte im Ortsraum:

$$\begin{aligned} dP(x) &= |\langle x|\Psi\rangle|^2 dx = |\Psi(x)|^2 dx \\ dP(p) &= |\langle p|\Psi\rangle|^2 dp = |\tilde{\Psi}(p)|^2 dp \end{aligned}$$

„Reduktion des Wellenpaketes“

Nach der Messung ist das System (Wahrscheinlichkeit 1) im Unterraum, der durch a_n charakterisiert wird:

$$|\Psi\rangle \rightarrow \frac{a_n}{\sqrt{\langle\Psi|P_n|\Psi\rangle}} P_n |\Psi\rangle$$

P_n ist der Projektor auf den durch a charakterisierten Unterraum (falls keine Entartung $P_n = |u_n\rangle\langle u_n|$).

Beispiel: Ortsmessung

Teilchen zwischen ∞ hohen Wänden im Grundzustand:

(3 Zeichnungen)

Teilchen nicht mehr im Energiegrundzustand. Überlagerung von allen Energie-Eigenzuständen.

Anmerkung: Sukzessive Messungen von Observablen aus vollständigem Satz führt auf einen Zustand, der Eigenzustand zu all diesen Operatoren ist. Der Zustand ist dann eindeutig festgelegt.

$$\text{Zeitentwicklung: } \boxed{i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = \mathcal{H}(t) |\Psi(t)\rangle}$$

In der Quantenmechanik werden Observable häufig aus klassischen Größen dediziert:

$$\begin{aligned} \text{In Ortsdarstellung: } x &\rightarrow X \\ p &\rightarrow P = i\hbar \frac{d}{dx} \end{aligned}$$

alle anderen Observablen, die klassische Funktionen von x und p sind, werden durch diese Substitution gewonnen. $\Rightarrow$ „Korrespondenzprinzip“

Erwartungswerte (diskretes, nicht entartetes Spektrum)

Einzelne Messung liefert einen der Eigenwerte a_n mit der Wahrscheinlichkeit

$$P_n = |\langle u_n|\Psi\rangle|^2$$

$$\begin{aligned} \text{viele Messungen: } \sum_n a_n P_n &= \sum_n \langle\Psi|u_n\rangle \underbrace{a_n \langle u_n|}_{A} \Psi\rangle \\ &= \langle\Psi|A|\Psi\rangle \end{aligned}$$

Schwankungen um den Mittelwert

$$|\Psi\rangle(\Delta A)^2 \equiv |\Psi\rangle (A - \langle\Psi|A|\Psi\rangle)^2 |\Psi\rangle$$

Heisenberg'sche Unschärfe-Beziehung

Ausgangspunkt: $[Q, P] = i\hbar$

Trick: Betrachte $|\varphi\rangle = (Q + i\lambda P) \underbrace{|\Psi\rangle}_{\text{beliebig}}$

$$0 \leq \langle\varphi|\varphi\rangle = \langle\Psi| \underbrace{(Q + i\lambda P)(Q - i\lambda P)}_{Q^2 + \lambda^2 P^2 + i\lambda(QP - PQ)} |\Psi\rangle$$

$$[Q, P] = i\hbar$$

$$0 \leq \langle\Psi|Q^2|\Psi\rangle + \lambda^2 \langle\Psi|P^2|\Psi\rangle - \lambda \hbar \underbrace{\langle\Psi|\Psi\rangle}_{=1} \quad \forall \lambda$$

Wähle $\lambda = \frac{\hbar}{2} \langle P^2 \rangle_\Psi$; $\langle P^2 \rangle_\Psi = \langle\Psi|P^2|\Psi\rangle$

$$\boxed{\langle Q^2 \rangle_\Psi \langle P^2 \rangle_\Psi \geq \frac{\hbar^2}{4}}$$

Gleichheitszeichen gilt nur für Gauß-Paket.

3.2 Schrödinger Gleichung / allgemeine Resultate

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = \mathcal{H}(t) |\Psi(t)\rangle$$

Für gegebenes $|\Psi(t_0)\rangle$ liegt $|\Psi(t)\rangle$ für alle t bekannt.

3.2.1 Erhaltung der Wahrscheinlichkeit

$$\underbrace{\langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle}_{\text{zeitlich konstant}}$$

$$\begin{aligned} \text{Beweis: } \frac{d}{dt} \langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle &= \underbrace{\left[\frac{d}{dt} \langle\Psi(t)| \right]}_{\frac{d}{dt} \Psi = -\frac{1}{i\hbar} \langle\Psi|\mathcal{H}(t)} |\Psi(t)\rangle + \langle\Psi(t)| \underbrace{\frac{d}{dt} \Psi(t)}_{\frac{1}{i\hbar} \mathcal{H}(t)|\Psi\rangle} \\ \Rightarrow &= 0 \end{aligned}$$

Im Ortsraum:

$$\int d\vec{r} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \text{ zeitlich konstant} = 1$$

3.2.2 Wahrscheinlichkeitsdichten und Ströme

$$\begin{aligned}\rho(\vec{r}, t) &= |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \\ \vec{j}(\vec{r}, t) &= \frac{\hbar}{2mi} \left(\Psi^* \vec{\nabla} \Psi - \Psi \vec{\nabla} \Psi^* \right)\end{aligned}$$

Plausibilität:

$$\vec{v} = \frac{\vec{p}}{m} = \frac{\hbar}{i} \frac{\vec{v}}{m}$$

Klassische Stromdichte = Dichte · Geschwindigkeit

Für ebene Wellen:

$$\begin{aligned}\Psi(\vec{r}, t) &= A e^{i(\vec{p}\vec{r} - Et)/\hbar} \\ \Rightarrow \rho &= |A|^2 \\ \vec{j} &= |A|^2 \left(\frac{i\vec{p}}{\hbar} - \left(-\frac{i\vec{p}}{\hbar} \right) \right) \frac{\hbar}{2mi} = |A|^2 \underbrace{\frac{\vec{p}}{m}}_{v_{\text{Gruppe}}}\end{aligned}$$

Lokale Erhaltung

Elektrodynamik:

$$\frac{\partial}{\partial t} \underbrace{\rho(\vec{r}, t)}_{\text{Ladungsdichte}} + \nabla \cdot \underbrace{\vec{j}(\vec{r}, t)}_{\text{Stromdichte}} = 0$$

Hier:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} (\Psi^* \Psi) + \vec{\nabla} \cdot \frac{\hbar}{2mi} (\Psi^* \vec{\nabla} \Psi - \Psi \vec{\nabla} \Psi^*) \\ = \left(\frac{\partial}{\partial t} \Psi^* \right) \Psi + \Psi^* \left(\frac{\partial}{\partial t} \Psi \right) + \frac{\hbar}{2mi} (\vec{\nabla} \Psi^* \vec{\nabla} \Psi + \Psi^* \vec{\nabla}^2 \Psi - \vec{\nabla} \Psi \vec{\nabla} \Psi^* - \Psi \vec{\nabla}^2 \Psi^*) \\ = \left(\frac{\partial}{\partial t} \Psi^* - \frac{\hbar}{2m} \vec{\nabla}^2 \Psi^* \right) \Psi + \left(\frac{\partial}{\partial t} \Psi + \frac{\hbar}{2mi} \vec{\nabla}^2 \Psi \right) \Psi^* \quad \underbrace{\quad}_{\text{Schr. Gl. einsetzen}} = 0\end{aligned}$$

Schrödinger-Gleichung:

$$\begin{aligned}i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V \right) \Psi \quad | \cdot \Psi^* \\ -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi^* &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V \right) \Psi^* \quad | \cdot \Psi \\ -i\hbar \left[\left(\frac{\partial}{\partial t} \Psi \right) \Psi^* + \left(\frac{\partial}{\partial t} \Psi^* \right) \Psi \right] &= \Psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \Psi \right) + \Psi \left(\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \Psi^* \right)\end{aligned}$$

3.2.3 Zeitliche Entwicklung von Erwartungswerten

$$\begin{aligned}
 \langle A \rangle &= \langle \Psi(t) | A | \Psi(t) \rangle \\
 \frac{d}{dt} \langle A(t) \rangle &= \frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | A | \Psi(t) \rangle + \langle \Psi(t) | A | \frac{d}{dt} \Psi(t) \rangle + \langle \Psi(t) | \frac{\partial}{\partial t} A | \Psi(t) \rangle \\
 &= \frac{1}{i\hbar} \langle \Psi(t) | [A, H] | \Psi(t) \rangle + \langle \Psi(t) | \frac{\partial}{\partial t} A | \Psi(t) \rangle \\
 \Rightarrow \frac{d}{dt} \langle A(t) \rangle &= \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle + \langle \frac{\partial}{\partial t} A \rangle
 \end{aligned}$$

Insbesondere:

Falls $[A, H] = 0$ und falls $\frac{\partial}{\partial t} A = 0 \Rightarrow \frac{d}{dt} \langle A \rangle = 0$

Wähle speziell:

$A = R$ Ortsoperator

$A = P$ Impulsoperator

$$\begin{aligned}
 H = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad [R, H] &= \left[R, \frac{p^2}{2m} \right] = i\hbar \frac{p}{m} \\
 [P, H] &= [P, V(R)] = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} V(R) \\
 \frac{\partial}{\partial t} R &= 0 \quad ; \quad \frac{\partial}{\partial t} P = 0 \\
 \Rightarrow \frac{d}{dt} \langle R \rangle (t) &= \frac{\langle P \rangle t}{m} \\
 \frac{d}{dt} \langle P \rangle (t) &= -\langle \vec{\nabla} V(R) \rangle (t)
 \end{aligned}$$

$\Rightarrow$ Ehrenfest-Theorem analog zur Hamilton-Gleichung in der Mechanik

Beachte: $\langle \vec{\nabla} V(R) \rangle \neq \vec{\nabla} V(\langle R \rangle)$

Klassischer Grenzfall:

$$\begin{aligned}
 \langle \vec{\nabla} V(R) \rangle &\rightarrow \vec{\nabla} V(\langle R \rangle) \\
 \Rightarrow m \frac{d^2}{dt^2} \langle R \rangle &= -\vec{\nabla} V(\langle R \rangle)
 \end{aligned}$$

3.2.4 Zeitliche Entwicklung von Zuständen

Konservative Systeme $\frac{\partial}{\partial t} H = 0$

Eigenzustände / -werte zum Zeitpunkt $t = t_0$

$$H |\Psi_n(t_0)\rangle = E_n |\Psi_n(t_0)\rangle$$

Definiere Basis $\{|\Psi_n(t_0)\rangle\}$

Zeitliche Entwicklung von beliebigem Zustand

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |\Psi(t_0)\rangle$$

DGL für $c_n(t)$

$$\begin{aligned} i\hbar \sum_n \left(\frac{d}{dt} c_n(t) \right) |\Psi(t_0)\rangle &= \sum_n c_n(t) E_n |\Psi_n(t_0)\rangle \\ \Rightarrow i\hbar \frac{d}{dt} c_n(t) &= E_n c_n(t) \\ \Rightarrow c_n(t) &= c_n(t_0) e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} \\ |\Psi(t)\rangle &= \sum_n c_n(t_0) e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} |\Psi(t_0)\rangle \end{aligned}$$

Wichtige Konsequenz: Falls nur ein $c_n \neq 0$, $c_n = e^{i\varphi}$ O.B.d.A.

$$\begin{aligned} \langle A \rangle(t) &= \langle \Psi(t) | A | \Psi(t) \rangle \\ &= \langle \Psi(t_0) | e^{iE_n(t-t_0)/\hbar} A e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} | \Psi(t_0) \rangle \\ &= \langle A \rangle(t_0) \end{aligned}$$

Erwartungswerte ändern sich nicht „stationäre Zustände“ $\Leftrightarrow$ scharfe Energie

4 Der Harmonische Oszillator (HO)

4.1 Einführung – H.O. in der klassischen Mechanik

Teilchen der Masse m im Potential $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$

(Bild Potential)

Bewegungsgleichung: $m\ddot{x} = -\frac{dV}{dx} = -kx$

Lösung: $x(t) = x_M \cos(\omega t - \varphi)$

$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$; x_M, φ aus Anfangsbedingung

Energie:

$$E = T + V = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x_M^2$$

Bemerkung: Die potentielle Energie $U(x)$ vieler physikalischer Systeme hat bei $x = x_0$ ein Minimum.

Entwickeln von $x = x_0$

$$U(x) = \underbrace{U(x_0)}_{\text{konst.} = 0} + \underbrace{U'(x_0)}_{= 0}(x - x_0) + \frac{1}{2}\underbrace{U''(x_0)}_{\text{konst.}}(x - x_0)^2$$

(Bild $U(x)$)

Beschreibbar:

- Oszillationen von Atomen im Kristall, Molekül
- „Quantisierung“ von Feldern

4.2 Harmonischer Oszillator in der Quantenmechanik

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

Klassische Größen $\rightarrow$ Operatoren

Eigenwert-Gleichung $\mathcal{H}\Psi = E\Psi$ im Ortsraum:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right] \Psi = E\Psi$$

4.2.1 Analytische Lösung der DGL

Setze $\hat{x} = x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$, $\varepsilon = \frac{E}{\hbar\omega}$

$$\left(\frac{d^2}{d\hat{x}^2} - \hat{x}^2 + 2\varepsilon \right) \Psi(\hat{x}) = 0 \quad (6)$$

Verhalten für $\Psi(\hat{x})$ für große $\hat{x}$ ($\hat{x} \gg \varepsilon$)

Ansatz: $G_{\pm}(\hat{x}) = e^{\pm \frac{\hat{x}^2}{2}}$

$G_{\pm}(\hat{x})$ löst DGL:

$$\left(\frac{d^2}{d\hat{x}^2} - \hat{x}^2 \pm 1 \right) G_{\pm}(\hat{x}) = 0$$

Für große $\hat{x} \approx \hat{x} \pm 1 \approx \hat{x} + 2\varepsilon$

Normierbarkeit nur abfallende Lösung.

$\Rightarrow$ Ansatz für Gl. (6): $\Psi(\hat{x}) = h(\hat{x})e^{-\frac{\hat{x}^2}{2}}$

Einsetzen in Gl. (6):

$$\left(\frac{d^2}{d\hat{x}^2} - 2\hat{x}^2 \frac{d}{d\hat{x}} + (2\varepsilon - 1) \right) h(\hat{x}) = 0$$

Lösung mit Potenzreihenansatz

$$h(\hat{x}) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \hat{x}^{m+p}$$

$a_0 \neq 0$ ($a_i = 0$ für $i < 0$)

$(m+p+2)(m+p+1)a_{m+2} = (2m+2p-3\varepsilon+1)a_m$

$\frac{a_{m+2}}{a_m} \xrightarrow{m \rightarrow \infty} \frac{1}{m} \Rightarrow$ Normierbare Lösung nur, falls Potenzreihe abbricht.

1.

$$\begin{aligned} m = -2 &\Rightarrow p(p-1) = 0 \\ &\Rightarrow p = 0; \quad p = 1 \end{aligned}$$

2.

$$\begin{aligned} (2m+2p-2\varepsilon+1) &\stackrel{!}{=} 0 \\ \Rightarrow \varepsilon_n = m+p+\frac{1}{2} &= n+\frac{1}{2} \\ \Rightarrow E_n &= \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \end{aligned}$$

einsetzen in DGL:

$$\left(\frac{d^2}{d\hat{x}^2} - 2\hat{x}^2 \frac{d}{d\hat{x}} + 2n \right) h(\hat{x}) = 0 \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Hermite DGL

Lösung: Hermite Polynome $H_n(\hat{x})$

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

$$N_n = \sqrt{\pi} n! \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \dots$$

$$H_0(y) = 1$$

$$H_1(y) = 2y$$

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

Stationäre Zustände des H.O.

$$\varphi_n(\hat{x}) = N_n e^{-\frac{\hat{x}^2}{2}} H_n(\hat{x})$$

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

- $\Delta E = E_n - E_{n-1} = \hbar\omega = \text{konstant}$
- $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ heißt Nullpunktsenergie

Eigenschaften von $\varphi_n(\hat{x})$

- $\varphi_n(-\hat{x}) = (-1)^n \varphi_n(\hat{x})$
- $\varphi_n(\hat{x})$ hat n reelle Nullstellen
- Extrema liegen innerhalb der „klassischen Grenzen“

4.2.2 H.O. Algebraische Lösung

Def. dimensionslose Größen

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \quad \hat{p} = \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} p$$

$$\hat{H} = \frac{H}{\hbar\omega} = \frac{1}{2}(\hat{x}^2 + \hat{p}^2) \quad \varepsilon = \frac{E}{\hbar\omega}$$

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i$$

Eigenwertgleichung:

$$\hat{H}|\varphi_\nu\rangle = E_\nu|\varphi_\nu\rangle$$

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} + i\hat{p}) \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} - i\hat{p})$$

$$\hat{x} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger) \quad \hat{p} = \frac{i}{\sqrt{2}}[a^\dagger - a]$$

Eigenschaften von $a, a^\dagger$

1.

$$\begin{aligned} [a, a^\dagger] &= \frac{1}{2} [\hat{x} + i\hat{p}, \hat{x} - i\hat{p}] \\ &= \frac{1}{2} (i[\hat{x} - \hat{p}] + i[\hat{p}, \hat{x}]) \\ &= 1 \end{aligned}$$

2.

$$\underbrace{N}_{\text{Besetzungszahloperator}} = aa^\dagger = \frac{1}{2} (\hat{x}^2 + \hat{p}^2 - 1)$$

3.

$$H = a^\dagger a + \frac{1}{2} = N + \frac{1}{2}$$

$\Rightarrow$ Eigenzustände von $\hat{H}$ sind auch Eigenzustände von $\hat{N}$ und umgekehrt.

$\Rightarrow$ Lösen von $H|\varphi_\nu\rangle = E_\nu|\varphi_\nu\rangle$ ist äquivalent zur Lösung von $N|\varphi_\nu\rangle = \nu|\varphi_\nu\rangle$

Eigenschaften von N

1.

$$\begin{aligned} [N, a] &= [a^\dagger a, a] & [AB, C] &= A[B, C] + [A, C]B \\ &= [a^\dagger, a]a = -a \\ [N, a^\dagger] &= a^\dagger \end{aligned}$$

2. Eigenwerte ν von N $\nu \geq 0$

$$\begin{aligned} 0 &\leq ||(a|\varphi_\nu\rangle)|| \\ &= \langle a\varphi_\nu | a\varphi_\nu \rangle = \langle \varphi_\nu | a^\dagger a |\varphi_\nu \rangle = \langle \varphi_\nu | N |\varphi_\nu \rangle = \nu \underbrace{\langle \varphi_\nu | \varphi_\nu \rangle}_{>0} \\ \Rightarrow \nu &\geq 0 \end{aligned}$$

- niedrigster Eigenwert ≥ 0

- Falls $\nu > 0 \Rightarrow a|\varphi_\nu\rangle = 0$

3. Sei $|\varphi_\nu\rangle$ Eigenzustand von N zum Eigenwert $\nu - 1$, $a|\varphi_\nu\rangle \sim |\varphi_{\nu-1}\rangle \Rightarrow a^\dagger|\varphi_\nu\rangle$ ist Eigenzustand zum Eigenwert $\nu + 1$, $a^\dagger|\varphi_\nu\rangle \sim |\varphi_{\nu+1}\rangle$

$$Na^\dagger|\varphi_\nu\rangle = (a^\dagger + a^\dagger N)|\varphi_\nu\rangle = (\nu + 1)a^\dagger|\varphi_\nu\rangle$$

Analog für $a|\varphi_\nu\rangle$

Richtige Normierung $|\varphi_\nu\rangle$ sei 1. Normiert $\langle\varphi_\nu|\varphi_\nu\rangle = 1$

$$\begin{aligned}\langle a^\dagger \varphi_\nu | a^\dagger \varphi_\nu \rangle &= \langle \varphi_\nu | a a^\dagger | \varphi_\nu \rangle = \langle \varphi_\nu | a^\dagger a + 1 | \varphi_\nu \rangle - (\nu + 1) \langle \varphi_\nu | \varphi_\nu \rangle \\ \Rightarrow a^\dagger |\varphi_\nu\rangle &= \sqrt{\nu + 1} |\varphi_{\nu+1}\rangle \\ a |\varphi_\nu\rangle &= \sqrt{\nu} |\varphi_{\nu-1}\rangle\end{aligned}$$

Falls eine Eigenfunktion bekannt ist erhält man alle anderen sukzessive.

Anwendung von a und $a^\dagger$:

Falls $|\varphi_0\rangle$ bekannt

$$|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} a^\dagger |\varphi_{n-1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |\varphi_0\rangle$$

4. Eigenwerte ν von N sind $\in N_0$

Annahme: Es gibt $\bar{\nu}$ mit $n < \bar{\nu} < n + 1 \quad n \in N_0$

$$\begin{aligned}N(a^n |\varphi_{\bar{\nu}}\rangle) &= ([N, a] = -a; \quad [N, a^n] = -a^n) \\ &= \underbrace{(\bar{\nu} - n)}_{\geq 0} a^n |\varphi_{\bar{\nu}}\rangle \\ N(a^{n+1} |\varphi_{\bar{\nu}}\rangle) &= \underbrace{(\bar{\nu} - n - 1)}_{< 0} a^{n+1} |\varphi_{\bar{\nu}}\rangle\end{aligned}$$

D.h. wir haben

$$\begin{aligned}N|\varphi_n\rangle &= n|\varphi_n\rangle \\ \Rightarrow H|\varphi_n\rangle &= \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) |\varphi_n\rangle \quad n = 0, 1, 2, \dots\end{aligned}$$

Interpretation von $a, a^\dagger$:

$a^\dagger$ heißt Erzeugungsoperator

a heißt Vernichtungsoperator

(Bild: Parabel $n = 0, 1, 2, 3$)

5. Eigenzustände des Hamiltonoperators:

Besetzungsdarstellung

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{x} + i\hat{p}) \quad a|\varphi_0\rangle = 0$$

Im Ortraum:

$$\varphi_0(x) = \langle x | a | \varphi_0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{x} + \frac{d}{d\hat{x}} \right) \underbrace{\langle x | \varphi_0 \rangle}_{\varphi_0(\hat{x})}$$

Lösung: $\varphi_0(\hat{x}) = N_0 e^{-\hat{x}/2}$

Angeregte Zustände:

$$\begin{aligned}\langle x|\varphi_n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}}\langle x|(a^\dagger)^n|\varphi_0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}}\frac{1}{\sqrt{2^n}}\left(\hat{x} - \frac{d}{dt}\right)\varphi_0(x)\end{aligned}$$

Explizite Form von $H, N, a, a^\dagger, \hat{x}, \hat{p}$

Besetzungszahldarstellung $|\varphi_n\rangle = |n\rangle$

$$\begin{aligned}\langle m|N|n\rangle &= n\delta_{m,n} \\ \Rightarrow (N) &= \begin{pmatrix} 0 & & 0 \\ & 1 & \\ & & 2 \\ 0 & & & \ddots \end{pmatrix} \\ H &= \hbar\omega\left(N + \frac{1}{2}\right) \\ \Rightarrow H &= \hbar\omega\begin{pmatrix} 1/2 & & 0 \\ & 3/2 & \\ & & 5/2 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}a^\dagger|n\rangle &= \sqrt{n+1}|n+1\rangle \\ \langle m|a^\dagger|m\rangle &= \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}a^\dagger &= \begin{pmatrix} 0 & & & 0 \\ \sqrt{1} & 0 & & \\ & \sqrt{2} & 0 & \\ & & \sqrt{3} & \ddots \\ 0 & & & \ddots & 0 \end{pmatrix} \\ a &= \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & & 0 \\ & 0 & \sqrt{2} & \\ & & 0 & \sqrt{3} \\ & & & \ddots & \ddots \\ 0 & & & & 0 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Hinweis:

Berechnen Sie $a^\dagger a$ und vergleichen Sie die Spur und Determinante auf der linken und

rechten Seite.

$$\hat{x} = \frac{1}{\sqrt{2}} (a + a^\dagger) \quad (\hat{x}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & & & 0 \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & & \\ & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \\ & & \sqrt{3} & \ddots & \ddots \\ 0 & & & \ddots & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{p} = \frac{i}{\sqrt{2}} (a^\dagger - a) \quad (\hat{p}) = \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{1} & & & 0 \\ \sqrt{1} & 0 & -\sqrt{2} & & \\ & \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{3} & \\ & & \sqrt{3} & \ddots & \ddots \\ 0 & & & \ddots & 0 \end{pmatrix}$$

4.3 Diskussion der Resultate

4.3.1 Erwartungswerte

Für stationäre Zustände (Energieeigenzustände) gilt $\langle x \rangle = 0$; $\langle p \rangle = 0$ für alle Zeiten. $\langle n | x^2 | n \rangle$ wächst mit n und entspricht genau dem Wert, welchen man als zeitlichen Mittelwert von x^2 bei klassischer Bewegung erhalten würde. (Ohne Beweis)
Analog für p^2

4.3.2 Qualitativer Beitrag zum Grundzustand

Klassisch: $x = 0$, $p = 0$, $E = 0 \quad \forall t$

Quantenmechanik: Wellenfunktion ist ausgedehnt über Bereich $\sim \xi \sim$, $\langle V \rangle \approx \frac{1}{2} m \omega^2 \xi^2$
Erwartungswert $\langle p^2 \rangle \sim \frac{\hbar^2}{\xi^2}$ (Unschärferelation)

$\Rightarrow$ Kinetische Energie: $\langle T \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m\xi^2}$

$$\langle H \rangle = \frac{\hbar^2}{2m\xi^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 \xi^2$$

$\langle H \rangle$ wird minimal für $\xi^2 = \frac{\hbar}{m\omega}$ und man erhält $\langle V \rangle = \langle T \rangle$ und $\langle H \rangle \approx \hbar\omega$ als korrekte Größenordnung

4.4 Dreidimensionaler Harmonischer Oszillator in kartesischen Koordinaten

$$\left[\frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \vec{R}^2 \right] \varphi(\vec{R}) = E \varphi(\vec{R})$$

$$H = H_x + H_y + H_z \quad \text{mit } H_x = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

Es gilt weiterhin

$$[H_x, H_y] = 0; \quad [H_x, H_z] = 0; \quad [H_y, H_z] = 0$$

können gleichzeitig diagonalisiert werden; Problem entspricht drei ungekoppelten harmonischen Oszillatoren.

Ansatz: $\varphi(\vec{R}) = \varphi_x(x) + \varphi_y(y) + \varphi_z(z)$

$$\begin{aligned} H\varphi &= (H_x + H_y + H_z)\varphi = H_x\varphi_x\varphi_y\varphi_z + H_y\varphi_x\varphi_y\varphi_z + H_z\varphi_x\varphi_y\varphi_z \\ &\Rightarrow \underbrace{\frac{H_x\varphi_x}{\varphi_x}}_{=E_x} + \underbrace{\frac{H_y\varphi_y}{\varphi_y}}_{=E_y} + \underbrace{\frac{H_z\varphi_z}{\varphi_z}}_{=E_z} = E \\ &\Rightarrow \text{konstant} \end{aligned}$$

Drei entkoppelte Gleichungen und $E_x + E_y + E_z = E$

$$\begin{aligned} H_x\varphi_x &= E_x\varphi_x \\ H_y\varphi_y &= E_y\varphi_y \\ H_z\varphi_z &= E_z\varphi_z \end{aligned}$$

$\varphi_x^{n_x}(x)$ sei Lösung der 1-D Gleichung mit Energie $\hbar\omega(n_x + \frac{1}{2})$
 $\varphi_y^{n_y}(x) \rightarrow \hbar\omega(n_y + \frac{1}{2})$
 $\varphi_z^{n_z}(x) \rightarrow \hbar\omega(n_z + \frac{1}{2})$

$$E = \hbar\omega(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2})$$

Energie-Eigenwerte sind entartet angeregt von $n = n_x + n_y + n_z$, reicht nicht um den Zustand festzulegen. Die Angabe von n_x, n_y, n_z legt Zustand eindeutig fest.

Gegeben sei n . Wieviele n_x, n_y, n_z Kombinationen passen?

$$\Rightarrow \frac{(n+1)(n+2)}{2}$$