

Quantenmechanik

Die Schrödinger-Gleichung

Die Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{x}) \right) \Psi$$

siehe für freie Teilchen aus wie

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi \quad (\hat{p} = -i\hbar \vec{\nabla})$$

und hat die allgemeinen Lösungen

$$\Psi(\vec{r}, t) = C e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega(k) \cdot t)} \quad \text{mit} \quad E = \hbar \omega(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Diese sind nicht normierbar, weshalb dann mit Wellenpaketen (lokalisiert) gerechnet wird.

$$\Psi(\vec{r}, t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} g(k) \cdot e^{i(kx - \omega(k) \cdot t)}$$

mit $g(k) = |g(k)| \cdot e^{-i\alpha(k)}$ und $\phi(k) = kx - \alpha(k) - \omega(k) \cdot t$ kann gefaxiert werden

$$\phi(k) = \phi(k_0) + (k - k_0) \frac{\partial \phi}{\partial k} \bigg|_{k_0} + \frac{(k - k_0)^2}{2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial k^2} \bigg|_{k_0}$$

und, bei Annahme maximaler Interferenz für $x = x_0$ folgt: (stationäre Phase)

$$\Psi(x, t) = e^{i(k_0 x - \omega(k_0) \cdot t - \alpha(k_0))} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} |g(k)| e^{i(x - x_0 - v_g t)(k - k_0)} e^{-\frac{i}{2}(\alpha''(k_0) + \omega''(k_0) \cdot t)(k - k_0)^2}$$

mit Gruppengeschwindigkeit $v_g = \frac{\partial \omega(k)}{\partial k} \bigg|_{k=k_0}$ und Phasengeschwindigkeit $\frac{\omega(k_0)}{k_0}$.

Die zweite Ableitung in der Näherung führt zu Zerfließen der Wellenfunktion.

Normierbare Lösungen der Schrödingergleichung können als Maß der Aufenthaltswahrscheinlichkeit gesehen werden. Die Wahrscheinlichkeitsdichte für den Ort ist

$$S = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = S(\vec{r}, t). \quad \int d^3r S(\vec{r}, t) = 1$$

Observablen wie Ort und Impuls werden durch hermitesche Operatoren dargestellt. Da nur Wahrscheinlichkeiten bekannt sind, bietet es sich an, mit den Erwartungswerten $\langle \vec{r} \rangle$ und $\langle \vec{p} \rangle$ zu rechnen. Hieraus ergibt sich wegen

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{r} \rangle = \langle \vec{v} \rangle = \frac{1}{m} \langle \vec{p} \rangle; \quad \frac{d}{dt} \langle \vec{p} \rangle = \langle -\vec{\nabla} V \rangle$$

dass $\hat{p} = -i\hbar \vec{\nabla}$. Für beliebige Operatoren $\hat{A}$ gilt für die Zeitableitung des Erwartungswertes

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{A}] \rangle + \langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \rangle \quad \text{Ehrenfest-Theorem}$$

$$[\hat{H}, \hat{A}] = \hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H} \quad (\text{Kommutator})$$

klassisch war hier

$$\frac{d}{dt} f(\vec{p}, \vec{q}, t) = \{f, H\} + \frac{\partial f}{\partial t}$$

also folgt die kanonische Quantisierung

$$[\hat{f}, \hat{g}] = i\hbar \{f, g\}$$

Quantenmechanik

Schrödinger-Gleichung

Aus der Schrödingers-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi \quad \text{bzw.} \quad -i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \hat{H} \Psi^*$$

folgt die Kontinuitätsgleichung (berechne $\partial_t(\Psi^* \Psi)$)

$$\partial_t S + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0, \quad \text{wobei} \quad \vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\Psi^* [\vec{\nabla} \Psi] - [\vec{\nabla} \Psi^*] \Psi)$$

Für die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens im Volumen V gilt

$$P = \int_V d^3r \, S \quad ; \quad \partial_t P = - \int_V d^3r \, \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = - \int_V d^3r \, \vec{\nabla} \cdot \vec{j}$$

Hilbert-Räume & die Dirac-Notation

Ein Hilbert-Raum ist ein Vektorraum mit einem Skalarprodukt. Für die Wellenfkt. bietet sich der Raum $\mathcal{L}^2$ der quadratintegrierbaren Funktionen an. (auch: Spin)
Das zugehörige Skalarprodukt sei $\langle \phi | \psi \rangle$ mit

$$\langle \phi | \psi \rangle = \int d^3r \, \phi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r})$$

Dabei ist ein "bra" $\langle \phi |$ ein Objekt aus dem Dualraum V^* des Vektorraums V .
Es bildet einen Vektor $|\psi\rangle$ auf $\mathbb{C}$ ab.

Eine Basis an Eigenzuständen des Hilbertraums heißt orthonormal, wenn

$$\langle b_n | b_m \rangle = \delta_{nm}$$

und vollständig, wenn

$$\sum_n |b_n\rangle \langle b_n| = 1.$$

bei einer solchen Basis kann jeder Zustand $|v\rangle$ mithilfe des Projektionsoperators $P_n = |b_n\rangle \langle b_n|$ als Linearkombination der Basisvektoren dargestellt werden:

$$|v\rangle = \sum_n P_n |v\rangle = \sum_n |b_n\rangle \langle b_n | v \rangle = \sum_n c_n |b_n\rangle \quad ; \quad c_n = \langle b_n | v \rangle \quad ; \quad \sum_n |c_n|^2 = 1$$

Für eine gegebene Basis kann auch ein Operator durch sein Wirken auf die vollständige Basis definiert werden. (Matrizelemente)

$$A_{mn} = \langle b_m | A | b_n \rangle \quad ; \quad \hat{A} = \sum_{m,n} |b_m\rangle \langle b_m | \hat{A} | b_n \rangle \langle b_n| = \sum_{m,n} |b_m\rangle A_{mn} \langle b_n|.$$

Hermiteische Operatoren sind Operatoren mit reellen Erwartungswerten. Für sie gilt $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$, wobei adjungieren (†) definiert ist als

$$\langle \phi | \hat{A}^\dagger \psi \rangle = \langle \hat{A} \phi | \psi \rangle$$

Das Produkt zweier hermitescher Operatoren ist nur hermitisch, wenn die Operatoren kommutieren $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger = \hat{A} \hat{B} = \hat{A}\hat{B}$

Jeder hermitescher Operator hat eine vollständige, orthonormale Basis aus Eigenzuständen.

Quantenmechanik

Hilbert-Räume & die Dirac-Notation

Auch der Orts- & Impuls-Operator haben Eigenfunktionen mit

$$\delta(x-x') ; \quad |p\rangle = e^{ipx/\hbar}$$

mit

$$\langle x|\psi\rangle = \int dx' \delta(x-x') \psi(x') = \psi(x)$$

$$\langle p|\hat{x}|\psi\rangle = +i\hbar \partial_p \langle p|\psi\rangle$$

auch hier gilt Vollständigkeit

$$\langle p_1|p_2\rangle = 2\pi\hbar \delta(p_1-p_2) ; \quad \langle x_1|x_2\rangle = \delta(x_1-x_2)$$

woraus auch die "Vollständigkeitsrelation" folgt

$$\delta(x-x') = \sum_n \psi_n(x) \cdot \psi_n^*(x')$$

Messungen

Bei einer Messung eines Operators $\hat{O}$ wird ein Eigenwert o_n von $\hat{O}$ gemessen. Die Wahrscheinlichkeit dieser Messung ist

$$P_n = \langle \hat{P}_n \rangle = \langle \psi | o_n \rangle \langle o_n | \psi \rangle = |\langle o_n | \psi \rangle|^2$$

Dabei kollabiert die Wellenfunktion in die Eigenfunktion $|o_n\rangle$. Diese Entwicklung kann nicht durch eine unitäre Transformation erklärt werden. Zwei verschiedene Operatoren können demnach auch nur genau dann gleichzeitig exakt (scharf) gemessen werden, wenn eine gemeinsame Eigenfunktion existiert, in welche die Wellenfunktion kollabieren kann.

Für nicht-kommutierende Operatoren folgt aus der Cauchy-Schwarz-Ungl.

$$|f\rangle = [\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle] |\psi\rangle, \quad |g\rangle = [\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle] |\psi\rangle, \quad \langle f | f \rangle \langle g | g \rangle \geq |\langle f | g \rangle|^2$$

$$\Rightarrow \sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq |\langle f | g \rangle|^2 \geq |\text{Im}(\langle f | g \rangle)|^2 = \frac{1}{4} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|^2$$

beispielsweise gilt für $\hat{A} = \hat{x}$ und $\hat{B} = \hat{p}$: $\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2$.

Gemeinsame Eigenfunktionen

Wenn zwei Operatoren $\hat{A}$ und $\hat{B}$ kommutieren, so besitzen sie eine gemeinsame Basis an Eigenfunktionen. Kommutieren auch $\hat{A}$ und $\hat{C}$, so gilt das auch für sie. Jedoch müssen dies nicht unbedingt dieselben sein, und solange nicht $[\hat{B}, \hat{C}] = 0$ besitzen $\hat{B}$ & $\hat{C}$ nicht unbedingt gem. Eigenbasen.

Bew.:

$$\text{Ang. } [\hat{A}, \hat{B}] = 0, \quad \hat{A} |a_n\rangle = a_n |a_n\rangle$$

$$\Rightarrow \hat{A} \hat{B} |a_n\rangle = \hat{B} \hat{A} |a_n\rangle = \hat{B} a_n |a_n\rangle = a_n \hat{B} |a_n\rangle$$

Dadurch liegt $\hat{B} |a_n\rangle$ im Untervektorraum, der durch die EF zum selben EW a_n von $\hat{A}$ aufgespannt wird. In diesem kann eine Basis bzgl. $\hat{B}$ gefunden werden als Linearkombination der entsprechenden $|a_n\rangle$. Kommutiert auch $\hat{C}$ mit $\hat{A}$, kann auch dort eine Linearkombination gebildet werden. Wenn die EW von $\hat{A}$ nicht entartet sind, gibt es eine solche gem. Eigenbasis von $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$ und dann muss auch $[\hat{B}, \hat{C}] = 0$

$$\hat{B} \hat{C} |\psi\rangle = \hat{B} \hat{C} \sum_n c_n |a_n\rangle = \sum_n b_n c_n |a_n\rangle = \sum_n c_n b_n |a_n\rangle = \hat{C} \hat{B} |\psi\rangle.$$

Moderne Theoretische Physik

Quantenmechanik

Unitäre Operatoren

Ein Operator, der die Eigenschaft

$$\hat{U}^{-1} = \hat{U}^\dagger$$

erfüllt, heißt unitär. Er definiert eine Transformation der Zustände $|\psi\rangle, |\phi\rangle$ mit

$$|\psi'\rangle = \hat{U}|\psi\rangle ; |\phi'\rangle = \hat{U}|\phi\rangle$$

welche das Skalarprodukt erhält. ~~Ein~~ Ein Operator $\hat{A}$ ^{wird} gleichzeitig transformiert nach

$$\hat{A}' = \hat{U} \hat{A} \hat{U}^\dagger$$

und dann ist auch der Erwartungswert von $\hat{A}$ erhalten unter der Transformation.

Ist $\hat{H}' = \hat{H}$, so ist $\hat{U}$ ein Symmetrieeoperator. Dann ist $[\hat{H}, \hat{U}] = 0$ und so existiert eine zu dieser Symmetrie zugehörige Erhaltungsgröße.

Zeitentwicklung & Bilder

Für einen allg. ~~zeit~~ zeitabhängigen Hamiltonian sei der Zeitentwicklungsoperator $U(t, t_0)$ unitär und gegeben durch

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

dann ist

$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t, t_0) = H(t) U(t, t_0)$$

U unitär weil

$$-i\hbar \partial_t \hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger H, \quad -i\hbar \partial_t \hat{U} = H \hat{U}$$

$$\begin{aligned} -\dot{\hat{U}}^\dagger &= \hat{U}^\dagger \hat{U} \dot{\hat{U}}^\dagger \\ &= \frac{1}{i\hbar} H \hat{U} \end{aligned}$$

durch $\int$ integrieren dieser Gleichung und dann iterativem Lösen folgt

$$U(t, t_0) = \hat{T} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}(t') dt'\right) \quad (\text{Dyson Reihe})$$

oder in 1. Ordnung ^{Zeitordnungsoperator}

$$U(t, t_0) \approx 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}(t') dt'$$

Im Schrödingerbild ist die Wellenfunktion i.A. zeitabhängig und die Operatoren zeitunabhängig. Die unitäre Transformation

$$U(t_0, t) = U(t, t_0)^\dagger$$

transformiert ins Heisenberg-Bild, in dem die Zustände nicht mehr zeitabhängig sind, die Operatoren schon:

$$\hat{O}_H(t) = U(t, t_0)^\dagger \hat{O}_S U(t, t_0) ; |\psi_H\rangle = U(t, t_0)^\dagger |\psi_S\rangle$$

Für einen zeitunabhängigen Hamiltonian gilt hierbei dann für die Zeitentwicklung

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} |n\rangle, \quad \text{bei } |\psi(0)\rangle = \sum_n a_n |n\rangle$$

dabei sind die $|n\rangle$ die Eigenfkt., die bei Lösen der stationären Schrödingergln. $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$ sich ergeben.

Quantenmechanik

Unitäre Operatoren

Zeitentwicklung & Bilder

Im Heisenbergbild gibt es eine Bewegungsgleichung nicht für die Zustände, sondern für Operatoren

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{O}_H(t) = [\hat{O}_H(t), \hat{H}] + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{O}_H(t)$$

Ist der Hamiltonian nun nicht mehr vollständig zeitunabhängig, sondern von der Form

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$$

dann bietet sich die Transformation ins Wechselwirkungsbild (Dirac-Bild) an:

$$|\psi_I(t)\rangle = e^{\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}} |\psi(t)\rangle$$

$U(t,0)$ bei $\hat{H} = \hat{H}_0$

dann transformieren Operatoren wie

$$V_I(t) = e^{\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}} V(t) e^{-\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}}$$

und es folgt die Zeitentwicklung:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_I(t)\rangle = V_I(t) |\psi_I(t)\rangle \quad ; \quad |\psi_I(t)\rangle = U_I(t, t_0) |\psi_I(t_0)\rangle$$

mit

$$i\hbar \frac{d}{dt} U_I(t, t_0) = V_I(t) U_I(t, t_0) \Rightarrow U_I(t, t_0) = \hat{T} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt V_I(t)\right)$$

integrieren und dann iterativ

Der Paritätsoperator

~~Das Paritätsoperator~~ unitärer

Er ist ein ~~unitärer~~ Operator mit

$$\hat{P} \psi(x) = \psi(-x) \Rightarrow \hat{P}^2 \psi(x) = \psi(x) \Rightarrow P = \pm 1$$

sofern er mit dem Hamiltonian kommutiert, ~~ex. eine Eigenbasis aus~~ gerade oder ungerade Eigenfunktionen des Hamiltonian. ($\rightarrow$ Symmetriepoperator)

Sind zwei Wellenfunkf. ψ, χ und ein Operator $\hat{M}$ definit unger. $\hat{P}$, also ex. S_y, S_x, S_z mit

$$\hat{P} |\psi\rangle = S_y |\psi\rangle ; \hat{P} |\chi\rangle = S_x |\chi\rangle ; \hat{P} \hat{M} \hat{P}^\dagger = S_z \hat{M}$$

dann gilt:

$$\langle \psi | \hat{M} | \chi \rangle = \langle \psi | \hat{P} \hat{P}^\dagger \hat{M} \hat{P}^\dagger \hat{P} | \chi \rangle = S_y S_x S_z \langle \psi | \hat{M} | \chi \rangle$$

ist also $S_y \cdot S_x \cdot S_z = -1$, dann ist $\langle \psi | \hat{M} | \chi \rangle = 0$.

Moderne Theoretische Physik

Quantenmechanik

Der harmonische Oszillator

Betrachte den Hamiltonian

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

Nun kann die stationäre Schrödinger-Gleichung für dimensionslose Größen

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x ; \quad \epsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

erst für große ξ und dann mit Potenzreihenansatz gelöst werden, um auf

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right)$$

$$\psi_n(x) = C_n \cdot H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right) \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) ; \quad C_n = \frac{2^{-n/2}}{\sqrt{n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} ; \quad E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$$

mit den Hermite-Polynomen

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

Auch kann wegen $\langle \hat{x} \rangle = \langle \hat{p} \rangle = 0$ gefolgert werden, dass $\sigma_x^2 = \langle \hat{x}^2 \rangle$; $\sigma_p^2 = \langle \hat{p}^2 \rangle$ und daher mit der Unschärferelation gefunden werden, dass

$$E \geq E_{\min} = \frac{1}{2} \hbar\omega$$

was faktisch die minimale Energie im harmonischen Oszillator entspricht.

Andererseits können auch die Auf- & Absenkeoperatoren definiert werden:

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) ; \quad \hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} - \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right)$$

welche folgende Relation erfüllen:

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$$

Mit dem Operator $\hat{U} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$ (per Definition hermitisch) folgt durch Ausrechnen

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{U} + \frac{1}{2} \right)$$

weshalb Eigenfunktionen $|n\rangle$ von $\hat{H}$ auch Eigenfunktionen von $\hat{U}$ sind mit

$$\hat{U}|n\rangle = n|n\rangle$$

Aus den Kommutatorrelationen $[\hat{U}, \hat{a}] = -\hat{a}$, $[\hat{U}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger$ und $\langle n|\hat{U}|n\rangle = \langle n|\hat{a}^\dagger \hat{a}|n\rangle = n$ folgen dann

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad \hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$$

Aus $\hat{a}|0\rangle = 0$ erhalten wir eine Dgl für den Grundzustand (s.o.) woraus die weiteren Eigenfunktionen folgen als

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

auch ist

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

Quantenmechanik

Der harmonische Oszillator

In zwei Dimensionen funktioniert das Ganze mit $\hat{a}_1, \hat{a}_1^\dagger, \hat{a}_2, \hat{a}_2^\dagger$ analog. Aus

$$\psi_{0,0}(x,y) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \cdot e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x^2+y^2)}$$

folgen alle weiteren Eigenfunktionen mit

$$|n_1, n_2\rangle = \frac{(\hat{a}_1^\dagger)^{n_1} (\hat{a}_2^\dagger)^{n_2}}{\sqrt{n_1! n_2!}} |0,0\rangle$$

In N Dimensionen ist das n -te Energieniveau

$$\binom{n+N-1}{n}$$

-fach entartet. (Beweis durch Induktion)

Für einen gekoppelten harmonischen Oszillator in 2D mit

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} + \frac{k_1}{2} \hat{x}_1^2 + \frac{k_2}{2} \hat{x}_2^2 + K \hat{x}_1 \hat{x}_2 ; \omega_1 = \sqrt{\frac{k_1}{m}} ; \omega_2 = \sqrt{\frac{k_2}{m}} \\ &= \frac{1}{2m} \begin{pmatrix} \hat{p}_1 & \hat{p}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{p}_1 \\ \hat{p}_2 \end{pmatrix} + \frac{m}{2} \begin{pmatrix} \hat{x}_1 & \hat{x}_2 \end{pmatrix} \underbrace{\begin{pmatrix} \omega_1^2 & \Omega^2 \\ \Omega^2 & \omega_2^2 \end{pmatrix}}_A \begin{pmatrix} \hat{x}_1 \\ \hat{x}_2 \end{pmatrix} ; \Omega = \sqrt{\frac{K}{m}} \end{aligned}$$

mithilfe der kanonischen Transformation

$$\begin{pmatrix} \hat{x}_1 \\ \hat{x}_2 \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} \hat{x}_1 \\ \hat{x}_2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \hat{p}_1 \\ \hat{p}_2 \end{pmatrix} = (U^{-1})^T \cdot \begin{pmatrix} \hat{p}_1 \\ \hat{p}_2 \end{pmatrix}$$

Damit $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij}$ bleibt.

Mit $\vec{v}_1, \vec{v}_2$ als Eigenvektoren von A folgt:

$$U = M^{-1} = \begin{pmatrix} \vec{v}_1^T \\ \vec{v}_2^T \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \hat{H} = \frac{1}{2m} \begin{pmatrix} \hat{p}_1 & \hat{p}_2 \end{pmatrix}^T U \begin{pmatrix} \hat{p}_1 \\ \hat{p}_2 \end{pmatrix} + \frac{m}{2} \begin{pmatrix} \hat{x}_1 & \hat{x}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{x}_1 \\ \hat{x}_2 \end{pmatrix} = \hbar \Omega_1 (\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 + 1/2) + \hbar \Omega_2 (\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 + 1/2)$$

mit EW $A \vec{v}_i = \lambda_i \vec{v}_i$ und neuen Frequenzen $\Omega_i = \sqrt{\lambda_i}$

Zum Abszissoperator $\hat{a}$ zugehörige Eigenfunktionen bilden geeignete Wellenpakete, sog. kohärente Zustände. Trivial ergeben sich diese als (wie e^x Taylorn)

$$|\alpha\rangle \propto \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} |n\rangle, \Rightarrow |\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} |n\rangle$$

Moderne Theoretische Physik

Quantenmechanik

Drehimpulsartige Operatoren

Für den Drehimpuls gilt

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z, \quad [\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{L}_k$$

Dann für einen solchen Operator gilt $[\hat{L}_i, \hat{L}^2] = 0$. Sei $\hat{J}$ ein bel. Operator, der diese Kommutatorrelation erfüllt. Dann definiere

$$\hat{J}_{\pm} = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y; \Rightarrow [\hat{J}_z, \hat{J}_{\pm}] = \pm\hbar \hat{J}_{\pm}; [\hat{J}_{\pm}, \hat{J}^2] = 0; [\hat{J}_+, \hat{J}_-] = 2\hbar \hat{J}_z$$
$$\Rightarrow \hat{J}^2 = \hat{J}_- \hat{J}_+ + \hat{J}_z^2 + \hbar \hat{J}_z = \hat{J}_+ \hat{J}_- + \hat{J}_z^2 - \hbar \hat{J}_z$$

Dann besitzen $\hat{J}^2$ und $\hat{J}_z$ gemeinsame Eigenfunktionen. Definiere

$$\hat{J}_z |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle; \quad \hat{J}^2 |j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle$$

dann folgt auch (aus Kommutatoren und diesen Beschreibungen von $\hat{J}_{\pm}$):

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

Der Hamiltonian $\hat{H}$ bildet zusammen mit $\hat{J}^2$ und $\hat{J}_z$ ein vollständiges System kommutierender Observablen. Sie heben (zumindest bis zur Einführung des Spins) alle Entartungen der möglichen Zustände auf. (nicht in Energie, aber in beliebigen Eigenwerten)

Drehimpulsaddition

Zwei Drehimpulse $\vec{L}_1$ und $\vec{L}_2$ werden addiert zu $\vec{L} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2$

$$\vec{L}^2 = \vec{L}_1^2 + \vec{L}_2^2 + 2\vec{L}_1 \cdot \vec{L}_2; \quad L_z = L_{1,z} + L_{2,z}$$

mit

$$[\vec{L}_i^2, \vec{L}_j^2] = 0; \quad [\vec{L}_i^2, L_z] = 0$$

dadurch beschränkt sich die Wahl von Quantenzahlen an mit

$$|l, m, l_1, l_2\rangle \text{ statt } |l_1, m_1\rangle |l_2, m_2\rangle \quad \text{mit } [L_z, \vec{L}^2] \neq 0$$

Die Basis-Transformation zwischen diesen Systemen der Darstellung sieht aus wie

$$|l, m, l_1, l_2\rangle = \sum_{\substack{m_1, m_2 \\ m = m_1 + m_2}} |l_1, m_1\rangle |l_2, m_2\rangle \underbrace{\langle l_1, m_1 | l_2, m_2 | l, m, l_1, l_2 \rangle}_{\in \mathbb{R}}$$
$$= \sum_{\substack{m_1, m_2 \\ m = m_1 + m_2}} |l_1, m_1\rangle |l_2, m_2\rangle \langle l, m, l_1, l_2 | l_1, m_1, l_2, m_2 \rangle$$

mit den "Clebsch-Gordan" Koeffizienten

$$C_{m_1, m_2}^{l, l_1, l_2} = \langle l, m, l_1, l_2 | l_1, m_1, l_2, m_2 \rangle$$

Das direkte Produkt zweier Hilberträume wird mit " $\otimes$ " bezeichnet

$$|a\rangle \otimes |b\rangle = \begin{pmatrix} a_1 b_1 \\ \vdots \\ a_n b_n \end{pmatrix}; \quad \hat{A} \otimes \hat{B} = \begin{pmatrix} a_{11} \hat{B} & \dots & a_{1n} \hat{B} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} \hat{B} & \dots & a_{mn} \hat{B} \end{pmatrix}$$

Quantenmechanik

~~Beispiele unitärer Transformationen~~

Beispiele unitärer Transformationen

Der Operator

$$\hat{T}(\epsilon) = e^{-i\epsilon \hat{p}_x / \hbar}$$

Transformation eig. anders herum.

nach "rechts" verschoben

ist der Translationsoperator mit $\psi(\hat{x}+\epsilon) = T^\dagger(\epsilon) \psi(\hat{x}) T(\epsilon)$. $T(\epsilon) \psi(x) = \psi(x-\epsilon)$

wie hier

Der Operator

$$\hat{R}_j(\alpha) = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \hat{L}_j}$$

eher Rotation der Koordinaten, nicht der Funktion

beschreibt eine Rotation um die j -Achse.

$$\hat{R}_j(\alpha) \psi(x, y, z) = \psi \left(\begin{matrix} x, y, z \end{matrix} \right)$$

x, y, z mit dem Uhrzeigersinn um die j -Achse gedreht

gegen den Uhrzeigersinn

Der Operator

$$\hat{U}(\theta, \phi) = e^{-i\phi \frac{\hat{S}_z}{\hbar}} \cdot e^{-i\theta \frac{\hat{S}_x}{\hbar}}$$

beschreibt eine Rotation im Spin-Raum mit $\hat{S}_n = \hat{U} \hat{S}_z \hat{U}^\dagger$. $\hat{U} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \left| \frac{1}{2}, \uparrow \right\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\phi/2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi/2} \end{pmatrix}$

$$\hat{U}_n(\phi) = \cos(\phi/2) + i \vec{n} \cdot \vec{\sigma} \sin(\phi/2); \text{ mit } \phi = 2\pi \text{ wird } |\psi\rangle \rightarrow -|\psi\rangle$$

$\hat{U}_n$ Rot. um $\vec{n}$

Moderne Theoretische Physik

Quantenmechanik

Teilchen im Zentralpotential

Für zwei Teilchen an $\vec{r}_1, \vec{r}_2$ mit dem Hamiltonian

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \vec{\nabla}_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \vec{\nabla}_2^2 + V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$$

kann mittels Schwerpunkts- & Relativkoordinaten beschrieben werden als

$$\vec{R} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2}; \quad \vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2; \quad \frac{1}{m} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \quad \leftarrow \text{reduzierte Masse}$$

$$\Rightarrow \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)} \vec{\nabla}_R^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}_r^2 + V(\vec{r})$$

die Schwerpunktskoordinate verhält sich wie ein freies Teilchen, während sich die Relativkoordinate wie ein Teilchen im Potential $V(\vec{r})$ verhält. Ist

$$V(\vec{r}) = V(r)$$

dann handelt es sich um ein Zentralpotential. Es bieten sich Kugelkoordinaten zur Bestimmung des Verhaltens der Relativkoordinate an. Hier ist

$$\vec{\nabla}^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) = -\frac{1}{\hbar^2} \left(\hat{p}_r^2 + \frac{\hat{L}^2}{r^2} \right) \rightarrow [H, \vec{L}] = 0 \text{ bei } V(r) = V(r)$$

mit

$$\hat{p}_r = -i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r$$

Die Kugelflächenfunktionen

Wenn wir nun die gemeinsamen Eigenfunktionen von L^2 und L_z finden, sehen wir:

$$L_+ = L_x + iL_y = \hbar e^{i\phi} \left(i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial}{\partial \phi} \right); \quad L_- = L_x - iL_y = \hbar e^{-i\phi} \left(i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

$$L_z = i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$

für bel. ~~alle~~ Eigenfunktionen mit Separationsansatz $Y_{lm}(\theta, \phi) = \Phi_m(\varphi) \Theta_{lm}(\theta)$ folgt:

$$L_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar m Y_{lm}(\theta, \varphi) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \Phi_m(\varphi) \cdot \Theta_{lm}(\theta) \Rightarrow \Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \quad \leftarrow \text{aus Kugelsymmetrie} \Rightarrow m \in \mathbb{Z}$$

aus $L_+ Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ folgt eine DGL für $\Theta_{lm}(\theta)$, sodass wir

$$\Theta_{lm}(\theta) = C \cdot \sin^m \theta$$

folgt mit $L_- Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m-1)} Y_{l,m-1}(\theta, \varphi)$ alle weiteren Eigenfunktionen.

Allgemein bilden die Kugelflächenfunktionen

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}$$

assoziierte Legendre Polynome
 $P_l^m(x) = (-1)^m (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m P_l(x)}{dx^m}$
 mit Legendre Polynomen
 $P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2-1)^l$

eine vollständige, Orthonormale Basis

vollständig

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

orthonormal

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

Quantenmechanik

Teilchen im Zentralpotential

Mithilfe der Kugelflächenfunktionen lässt sich ein Separationsansatz an: $\psi(\vec{r}) = R(r) \cdot y(\theta, \phi)$

$$\left(\frac{1}{2m} \hat{p}_r^2 + \frac{1}{2m} \frac{\hat{L}^2}{r^2} + V(r) \right) R(r) y(\theta, \phi) = E \cdot R(r) y(\theta, \phi)$$

$$\Rightarrow \left(\frac{1}{2m} \hat{p}_r^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) \right) R(r) Y_{l,m}(\theta, \phi) = E \cdot R(r) Y_{l,m}(\theta, \phi)$$

$$\Rightarrow \left(\frac{\hat{p}_r^2}{2m} + V_{\text{eff}}(r) \right) R(r) = E \cdot R(r) \quad ; \quad \text{effektives Potential} \quad V_{\text{eff}}(r) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r)$$

Wasserstoffatom

Mit $V(r) = -\frac{e^2}{r}$ und der Einführung willkürlicher Größen

$$u(r) = r \cdot R(r); \quad x = 2kr; \quad \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = -E; \quad n^2 = -\frac{R_0}{E}; \quad R_0 = \frac{\hbar^2}{2ma_0^2}; \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}; \quad x = \frac{2Zr}{na_0}$$

folgt die Differentialgleichung

$$\frac{d^2 u}{dx^2} - \frac{l(l+1)}{x^2} u + \left(\frac{n}{x} - \frac{1}{4} \right) u = 0$$

welche für große x ($u \propto e^{\pm x/2}$) und kleine x ($u = Ax^{-l} + Bx^{l+1}$) und dann mit Potenzreihenansatz gelöst werden kann. Wir erhalten die Abbruchbedingung

$$(i_{\text{max}} + l + 1) - n = 0 \quad \Rightarrow n \in \mathbb{N} \quad \Rightarrow l \leq n-1$$

mit radialer Quantenzahl i_{max} und Hauptquantenzahl n .

Es folgen die allgemeinen Lösungen

$$\langle \vec{r} | n, l, m \rangle = \psi_{n,l,m}(\vec{r}) = R_{n,l}(r) \cdot Y_{l,m}(\theta, \phi)$$

$$R(r) = \frac{1}{r} \left(\frac{2r}{na_0} \right)^{l+1} \cdot e^{-\frac{2r}{na_0}} \cdot w_{i_{\text{max}}, l} \left(\frac{2r}{na_0} \right)$$

wobei $w_{i_{\text{max}}, l}$ Polynome l -ten Grades sind (assoziierte Laguerre-Polynome).

Moderne Theoretische Physik

Quantenmechanik

Teilchen in 1-Dimensionalem Potential

Für ein gegebenes Potential kann die stationäre Schrödinger-Gleichung stückweise gelöst werden. Bei einem endlichen Potential muss die Wellenfunktion und ihre Ableitung an Grenzen stetig sein. Für ein Delta-förmiges Potential $V(x) = V_0 \delta(x-a)$ folgt:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + V_0 \delta(x-a) \psi(x) \right) dx = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} E \cdot \psi(x) dx = 0$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} [\psi'(x)]_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} = -V_0 \psi(a)$$

gegebenfalls ergeben sich bei Ansetzen einer von links einlaufenden Welle ~~aus den~~ aus den Stetigkeitsbedingungen transzendente Gleichungen, die graphisch gelöst werden können.

Bei transmittierter Welle $C \cdot e^{-ikx}$ und einlaufender + reflektierter Welle $A e^{ikx} + B e^{-ikx}$, folgt für die transmissions- & reflektionskoeffizienten

$$T = \frac{k'}{k} \left| \frac{C}{A} \right|^2 ; R = \left| \frac{B}{A} \right|^2 ; T + R = 1$$

allgemein gilt hier

$$R \equiv \lim_{x \rightarrow -\infty} \left| \frac{j_{\text{refl.}}}{j_{\text{inc.}}} \right| ; T \equiv \lim_{x \rightarrow \infty} \left| \frac{j_{\text{trans.}}}{j_{\text{inc.}}} \right|$$

$$\text{mit } j(x) = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right).$$

Allgemeiner gilt in mehr Dimensionen für diese "Koeffizienten" die Wirkungsquerschnitt-Beziehung

$$d\sigma = \frac{\hat{n} \cdot \vec{j}_{\text{sc}} \cdot r^2 d\Omega}{|j_{\text{in}}|}$$

Ist das Potential symmetrisch ($\hat{P}\hat{V} = \hat{V}\hat{P}$), dann müssen symmetrische und antisymmetrische Eigenfunktionen existieren.

Selbst für ein sehr sehr kleinen Potentialtopf gibt es mind. einen gebundenen Zustand.

In der Dirac-Gleichung findet man für ein Potential $V(x) = V_0 \theta(x)$ das Klein'sche Paradoxon. Für $V_0 > E + mc^2$ wird wieder Transmission beobachtet. Relevant ist hier, dass für $x > 0$ die Gruppengeschwindigkeit $\frac{dE_p}{dp} < 0$ ist und die „Antiteilchen“ somit von rechts aus einlaufen. Daher ist $k < 0$ und es gilt trotzdem $T + R = 1$.

Quantenmechanik

Spin

Aus dem Stern-Gerlach-Experiment folgt, dass ein weiteres, mit dem Magnetfeld interagierender, intrinsischer Freiheitsgrad existieren muss. Aus verschiedenen Symmetriegründen, lieft sich es hier an, die Wellenfunktion als Spinor

$$\Psi(\vec{r}) = \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix}$$

zu definieren, wobei der Spinoperator ein drehimpulsartiger Operator $\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$ ist mit

Pauli-Matrizen

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \Rightarrow \hat{S}^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 = s(s+1) \hbar^2 \Rightarrow s = 1/2; \sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Der Spinraum bildet einen Hilbertraum, um den die eigentlichen Funktionen noch erweitert werden müssen.

Für ein ~~Teilchen~~ ^{Objekt} mit magnetischem Moment μ gilt für die Energie im Magnetfeld $V = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$ mit $\vec{\mu} = -g \vec{S} = -\mu_B \vec{\sigma}$, wobei $g \approx \frac{e}{mc}$; $\mu_B \approx \frac{e\hbar}{2mc}$ (siehe Pauli-Hamiltonian). Daraus folgt:

$$H \rightarrow H + \mu_B \vec{\sigma} \cdot \vec{B}$$

dies kann für einfache Probleme ($\vec{B} = B \hat{e}_z$) die Schrödingergleichung direkt gelöst werden. (Präzession des Spin)

Interagieren die Spins zweier Teilchen in einem System (siehe Helium-Atom) lieft sich nach Drehimpulsaddition die neue Basis durch $|S, m_S, S_1, S_2\rangle$ an. Hier ergeben sich Singulett & Triplett-Zustände. Es ergeben sich hier

$$\hat{S}_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \hat{S}_x + i\hat{S}_y; \hat{S}_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \hat{S}_x - i\hat{S}_y$$

womit die einzelnen Zustände berechnet werden können eig. eher allgemein und dann mit $S_\pm |s, m\rangle = \hbar \sqrt{s(s+1) - m(m \pm 1)} |s, m \pm 1\rangle$. Aus $S_\pm$ folgen eher erst S_x, S_y je nachdem wie man sieht.

Für die Pauli-Matrizen ^{gelten} die Relationen

$$[\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j] = 2i\epsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k; [\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{S}_k; \sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} + i\epsilon_{ijk}\sigma_k$$

$$e^{i\vec{u} \cdot \vec{\hat{\sigma}}} = 1 \cos \varphi + i(\hat{u} \cdot \vec{\hat{\sigma}}) \sin \varphi$$

Für interagierende Spins mit $\hat{H} = \frac{J}{\hbar^2} (\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2)$ lieft sich an, mit $\vec{S}^2 = \vec{S}_1^2 + \vec{S}_2^2 + 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$ und $\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = \frac{1}{2}(\vec{S}^2 - \vec{S}_1^2 - \vec{S}_2^2)$

$$\vec{S}^2 = \frac{3}{2} \hbar^2 + 2\hat{S}_{1,z}\hat{S}_{2,z} + \hat{S}_{1,+}\hat{S}_{2,-} + \hat{S}_{1,-}\hat{S}_{2,+}$$

zu rechnen. Damit kann für die Singulett & Triplett Zustände gefunden werden, was die Quantenzahlen & Clebsch-Gordan-Koeffizienten sind.

Moderne Theoretische Physik

Quantenmechanik

Teilchen in externem Magnetfeld

In einem klassischem elektromagnetischen Feld ist

$$\vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial A}{\partial t} - \vec{\nabla} \varphi ; \quad \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} ; \quad A^\mu = \left(\frac{\varphi}{c}, \vec{A} \right)$$

für den Hamiltonian (der aus dem Lagrangian kommt) gilt (minimale Kopplung)

$$\hat{H} = \frac{(\hat{\vec{p}} - \frac{q}{c} \vec{A})^2}{2m} + q\varphi$$

In "natürlichen" Einheiten kann bei konstantem $\vec{B}$ -Feld erweitert werden:

$$\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{B} \times \vec{r} \quad \text{Coulomb-Eichung } \vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{kin}} &= \frac{1}{2m} (-i\hbar \vec{\nabla} - q\vec{A})^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + \frac{i\hbar q}{2m} \vec{A} \cdot \vec{\nabla} + \frac{i\hbar q}{2m} \vec{\nabla} \cdot \vec{A} + \frac{q^2 \vec{A}^2}{2m} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + \frac{i\hbar q}{m} \vec{A} \cdot \vec{\nabla} + \frac{q^2 \vec{A}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + H_p + H_d \end{aligned}$$

mit paramagnetischem Term

$$\hat{H}_p = \frac{i\hbar q}{m} \vec{A} \cdot \vec{\nabla} = \frac{i\hbar q}{2m} (\vec{B} \times \vec{r}) \cdot \vec{\nabla} = \frac{i\hbar q}{2m} \vec{B} \cdot (\vec{r} \times \vec{\nabla}) = -\frac{q\hbar}{2m} \vec{B} \cdot \vec{L} = -\vec{\mu}_L \cdot \vec{B}$$

und diamagnetischem Term

$$\hat{H}_d = \frac{q^2 \vec{A}^2}{2m} = \frac{q^2}{8m} (\vec{B}^2 r^2 - (\vec{B} \cdot \vec{r})^2) \quad \leftarrow \text{meist irrelevant (bis } \sim 10^4 \text{ T)}$$

Fügen wir den Spin ein, so erhalten wir ein zusätzliches magnetisches Moment

$$\hat{\mu}_{\text{spin}} = -g \mu_B \frac{\hat{\vec{S}}}{\hbar} \quad \text{Landé-Faktor } g=2 \quad \leftarrow \text{folgt aus Dirac-Gleichung}$$

Dadurch wird der gesamte paramagnetische Term zu

$$-\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\left(-\mu_B \frac{\hat{\vec{L}} + g\hat{\vec{S}}}{\hbar} \right) \cdot \vec{B} \quad \text{Spin} \neq \text{Drehimpuls; hat höhere Gewichtung}$$

Zeeman-Effekt

Der "normale" Zeeman-Effekt bezeichnet die Wasserstoff-Atom-Betrachtung im Magnetfeld (ohne Spin). Für die Energien folgt dann ($\vec{B} = B \cdot \hat{e}_z$)

$$E_{n,l,m} = -\frac{R_y}{n^2} + \mu_B \cdot B \cdot m_l$$

Im "anormalen" Zeeman-Effekt (mit Spin) folgt trivial dann

$$E_{n,l,m,m_s} = -\frac{R_y}{n^2} + \mu_B B (m_l + g \cdot m_s)$$

Quantenmechanik

Teilchen in externem Magnetfeld

Allgemein folgt das Pauli-Hamiltonian $(g=2)$

$$\hat{H}_p = \left[\frac{(\hat{\vec{p}} + e\vec{A}(\vec{r}, t))^2}{2m} - e\varphi(\vec{r}, t) \right] + \mu_B \vec{S} \cdot \vec{B}(\vec{r}, t) = \frac{[\vec{S} \cdot (\hat{\vec{p}} + e\vec{A})][\vec{S} \cdot (\hat{\vec{p}} + e\vec{A})]}{2m} - e\varphi(\vec{r}, t) + \mu_B \vec{S} \cdot \vec{B}(\vec{r}, t)$$

Eichinvarianz

Klassisch verändert sich $\vec{B}$ und $\vec{E}$ nicht, wenn das 4-Vektorpotential eichtransformiert wird nach

$$\vec{A} \rightarrow \vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla} f(\vec{r}, t) ; \phi \rightarrow \phi' = \phi - \partial_t f(\vec{r}, t)$$

diese Transformation wird von der unitären Transformation

$$\hat{U} = e^{-i \frac{q}{\hbar} f(\vec{r}, t)}$$

Schrödinger-Gln. beschrieben, unter welcher die ~~Hamiltonian~~ dann unverändert bleibt:

$$i\hbar \partial_t |\psi_{A, \phi}\rangle = \left(\frac{1}{2m} \left(\hat{\vec{p}} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2 - \frac{q}{c} \phi \right) |\psi_{A, \phi}\rangle$$

$$i\hbar \partial_t |\psi_{A', \phi'}\rangle = \left(\frac{1}{2m} \left(\hat{\vec{p}} - \frac{q}{c} \vec{A}' \right)^2 - \frac{q}{c} \phi' \right) |\psi_{A', \phi'}\rangle$$

$$H' = \hat{U} H \hat{U}^\dagger + \hbar \partial_t \hat{U} ; |\psi'\rangle = \hat{U} |\psi\rangle$$

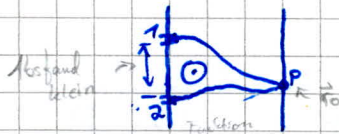
dabei transformiert auch die Wahrscheinlichkeitsdichte nur dann nicht, wenn

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2im} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - (\vec{\nabla} \psi^*) \psi) - \frac{q}{mc} \vec{A} |\psi|^2$$

Aharonov-Bohm-Effekt

Es sei ein Solenoid in einem Raum. Um diesen herum ist $\vec{B} = 0 \Rightarrow \vec{A} = \vec{\nabla} \chi$. Für die Wellenfunktion ohne Feld gelte $\psi_0(\vec{r})$. Nun sei noch ein Doppelspalt zu betrachten. Zwei in den Spalten ~~entstehende~~ ~~entstehende~~ Wellenfunktionen $\psi_0^{(1)}(\vec{r})$, $\psi_0^{(2)}(\vec{r})$ im Vektorpotential $\vec{A} = \vec{\nabla} \chi$ sind dann

$$\psi^{(1)}(\vec{r}) = e^{-i \frac{q}{\hbar c} \chi} \psi_0^{(1)}(\vec{r}) ; \psi^{(2)}(\vec{r}) = e^{-i \frac{q}{\hbar c} \chi} \psi_0^{(2)}(\vec{r}) ; \psi(\vec{r}) = \psi^{(1)}(\vec{r}) + \psi^{(2)}(\vec{r})$$



Für die Variable χ sind dann aufgrund der unterschiedlichen Pfade verschiedene Ergebnisse möglich

$$\chi(\vec{r}) = \chi(\vec{r}_0) + \int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}} \vec{A}(\vec{r}') \cdot d\vec{r}'$$

dadurch haben $\psi^{(1)}$ und $\psi^{(2)}$ verschiedene Phasen mit Phasendifferenz

$$\Delta\phi = \frac{q}{\hbar c} \oint \vec{A}(\vec{r}') \cdot d\vec{r}' = \frac{q}{\hbar c} \int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}} \vec{B} \cdot d\vec{f} = 2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0} ; \Phi_0 = \frac{h c}{q} = \frac{h}{e} \text{ mag. Flussquantum}$$

dies führt zu Interferenzverhalten.

Hieraus ist erkennlich, dass $\vec{A}$ einen Einfluss auf physikalische Ereignisse haben kann und, dass durch die Nichtlokalität in der Quantenmechanik die Teilchen das B-Feld spüren, ohne es je explizit zu durchqueren.

Moderne Theoretische Physik

Quantenmechanik

Teilchen in externem Magnetfeld Landau-Niveaus ($\vec{B} = B_z \hat{e}_z$)

Der kanonische Impuls ist $\vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla} - \frac{q}{c} \vec{A}$. Dann sei $\hat{\pi} = \hat{p}_x + i\hat{p}_y$.

Mit $\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m \omega_c}} (\hat{\pi} + i\hat{p}_z)$ folgt $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$. Dann folgt

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{q\hbar B_z}{4mc} \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hat{p}_z^2}{2m} \Rightarrow E_n = \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

$$\omega_c = \frac{B_z q}{mc}$$

$$\mu_B = \frac{\hbar q}{2mc}$$

$$\mu_B B = \hbar \omega_c / 2$$

Mit Spin folgt trivial

$$E_{n, m_s} = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \hbar \omega_c \left(n + m_s + \frac{1}{2} \right)$$

Alternativ kann mit geschickter Eichung $\vec{A} = (-B_z y, 0, 0)$ gerechnet werden.

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(p_x + \frac{qB_z}{c} y \right)^2 + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m}$$

Für x- & z-Koordinate folgt direkt $\Psi(\vec{r}) = e^{i(k_x x + k_z z)} u(y)$ und mit Einführung von $\tilde{k} = \frac{1}{m} \left(\frac{qB_z}{c} \right)^2$; $\tilde{E} = E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$ folgt $(y_0 = \frac{\hbar}{qB_z} \cdot k_x)$

$$\left(\frac{p_y}{2m} + \frac{\tilde{k}}{2} (y + y_0)^2 \right) u(y) = \tilde{E} u(y).$$

was wie ein harmonischer Oszillator gelöst werden kann zu

$$E_n = \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}; u_n(y) = \frac{2^{-n/2}}{\sqrt{n!}} \left(\frac{m \omega_c}{\pi \hbar} \right)^{1/4} \cdot H_n \left(\sqrt{\frac{m \omega_c}{\hbar}} (y + y_0) \right) \cdot \exp \left(-\frac{m \omega_c}{2 \hbar} (y + y_0)^2 \right)$$

Der Zustand ist um y_0 lokalisiert (kreisförmiger Orbit im Magnetfeld). Mit Längenskala $l_B = \sqrt{\frac{\hbar}{qB_z}}$ (magnetische Länge) und periodischen Randbed. in $A = L_x \cdot L_y$ folgt:

$$k_x = \frac{2\pi}{L_x} n_x; 0 < k_x < \frac{qB_z L_y}{\hbar} \Rightarrow N_{k_x} = \frac{qB_z L_y}{\hbar} \cdot \frac{L_x}{2\pi} = \frac{qB_z L_x L_y}{2\pi \hbar} = \frac{A}{2\pi l_B^2}$$

Orbits in A.

Spin-Bahn-Kopplung

In relativistischer Näherung finden wir später den folgenden Term im Hamiltonian:

$$\hat{H}_{so} = \frac{1}{2m^2 c^2} \left[\frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \right] \hat{L} \cdot \hat{S}$$

um dieses Problem anzugehen, sei $\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}$. Dann kommutieren $\hat{J}^2$, $\hat{J}_z$ und $\hat{L} \cdot \hat{S}$ und bilden gute Quantenzahlen j, m_j für die mithilfe von

$$\hat{J}^2 = \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{L}_z \hat{S}_z + \hat{L}_+ \hat{S}_- + \hat{L}_- \hat{S}_+; \hat{J}_\pm = \hat{L}_\pm + \hat{S}_\pm$$

die Eigenzustände berechnet werden können.

Quantenmechanik

Dichtematrix

Bei der Wellenfunktion des Systems $|\Psi\rangle = \sum_{\alpha} c_{\alpha} |\psi_{\alpha}\rangle$ mit $\sum_{\alpha} |c_{\alpha}|^2 = 1$ definieren wir die Dichtematrix als

$$\hat{\rho} = |\Psi\rangle\langle\Psi| = \sum_{\alpha} c_{\alpha} |\psi_{\alpha}\rangle\langle\psi_{\alpha}| c_{\alpha}^* = \sum_{\alpha} |c_{\alpha}|^2 |\psi_{\alpha}\rangle\langle\psi_{\alpha}| = \sum_i |p_i\rangle\langle p_i|$$

dann ist für bel. Operator $\hat{O}$:

$$\langle\hat{O}\rangle = \text{tr}(\hat{\rho}\hat{O})$$

Ist der Zustand $|\Psi\rangle$ rein, dann ist $\hat{\rho} = \hat{\rho}^2$. Allg. ist

$$\text{tr}(\hat{\rho}) = 1, \text{tr}(\hat{\rho}^2) \leq 1.$$

Allgemein ist ein Zustand dann nicht rein, wenn Ungewißheit darüber existiert, in welchem (reinen) Zustand sich das System befindet.

Unter der Annahme, dass die Wahrscheinlichkeiten fest sind ($\frac{dp_i}{dt} = 0$), folgt für die Dichtematrix aus der Schrödingergleichung

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

Die Informationsentropie (deren einziger Unterschied zur thermodynamischen Entropie ein Faktor k_B ist) ist ein Maß für die Ungewißheit des Systems, also dafür, wie viel Wissen durch eine Messung gewonnen werden kann.

$$S = - \sum_i p_i \log p_i = - \text{tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho})$$

aus der von-Neumann-Gln. folgt $\frac{\partial S}{\partial t} = 0$, es kann also bei $\frac{dp_i}{dt} = 0$ keine Entropieänderung stattfinden. Thermodynamisch ist

$$p_i = \frac{1}{Z} e^{-E_i/(k_B T)}, \quad Z = \sum_i e^{-E_i/(k_B T)}; \quad \hat{\rho} = \frac{e^{-\beta \hat{H}}}{\text{tr} e^{-\beta \hat{H}}}$$

Für zwei Systeme A, B ist die Dichtematrix allgemein

$$|\Psi\rangle = \sum_{n,m} a_{nm} |n\rangle_A \otimes |m\rangle_B \quad (\text{Zustand ist rein, wenn } a_{nm} = \alpha_n \beta_m \text{ (s.u.)})$$

Die Dichtematrix des Untersystems (o.B.d.A.) A ist

$$\hat{\rho}_A = \text{tr}_B(\hat{\rho}) = \sum_m \langle m | \Psi \rangle \langle \Psi | m \rangle_B$$

Für einen Operator $\hat{O}$ im System A ist $\langle\hat{O}\rangle = \text{tr}_A(\hat{\rho}_A \hat{O}) = \text{tr}(\hat{\rho} \hat{O})$.

Die Verschränkungsentropie ist

$$S_A = - \text{tr}(\hat{\rho}_A \ln \hat{\rho}_A)$$

Ist $\text{tr}(\hat{\rho}_A^2) < 1$, so ist A und B verschränkt. Ist $\text{tr}(\hat{\rho}_A^2) = 1$, so sind die Subsysteme nicht verschränkt und die Wellenfunktion kann geschrieben werden als

$$|\Psi\rangle = |\psi\rangle_A \otimes |\phi\rangle_B$$

Moderne Theoretische Physik

Quantenmechanik

Störungstheorie

Zeitunabhängige Störungstheorie

Der Hamiltonian sei $H = H_0 + V$, wobei die Lösungen von $H_0 |\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(0)}\rangle$ bekannt sind. Für $V \neq V(t)$ wollen wir $H \psi_n = E_n \psi_n$ lösen. Nun sei $H = H_0 + \lambda V$ mit kleinem λ . Wir können dann ψ_n und E_n entwickeln:

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \lambda \psi_n^{(1)} + \lambda^2 \psi_n^{(2)} + \dots ; E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots$$

wobei wir nun $(H_0 + \lambda V)(\psi_n^{(0)} + \lambda \psi_n^{(1)} + \dots) = (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \dots)(\psi_n^{(0)} + \lambda \psi_n^{(1)} + \dots)$ per Koeffizientenvergleich lösen können zu

$$H_0 \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)}$$

0. Ordnung in λ

$$H_0 \psi_n^{(1)} + V \psi_n^{(0)} = E_n^{(1)} \psi_n^{(0)} + E_n^{(0)} \psi_n^{(1)}$$

1. Ordnung in λ

$$H_0 \psi_n^{(2)} + V \psi_n^{(1)} = E_n^{(2)} \psi_n^{(0)} + E_n^{(1)} \psi_n^{(1)} + E_n^{(0)} \psi_n^{(2)}$$

2. Ordnung in λ

aus 1. Ordnung folgt, dass, wenn $\psi_n^{(1)}$ eine Lösung ist, auch $\psi_n^{(1)} = \alpha \psi_n^{(0)}$ eine Lösung ist. ~~Das ist~~ Aus Normierungsgründen ist

$$1 = \langle \psi_n | \psi_n \rangle = \langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(0)} \rangle + \lambda (\langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(1)} \rangle + \langle \psi_n^{(1)} | \psi_n^{(0)} \rangle) + \mathcal{O}(\lambda^2)$$

daher ~~es~~ ^{„sollte“} $\psi_n^{(1)}$ orthogonal zu $\psi_n^{(0)}$ gewählt sein, was aus obiger Begründung möglich ist.

In 1. Ordnung nicht-entarteter Zustände $\psi_n^{(0)}$, ~~folgt~~, kann angenommen werden, dass

$$\psi_n^{(1)} = \sum_{l \neq n} c_{nl} \psi_l^{(0)} = \sum_{l \neq n} |l^{(0)}\rangle \langle l^{(0)} | \psi_n^{(1)} \rangle$$

bei Multiplizieren der 1. Ordnung oben von links mit $\langle \psi_m^{(0)} |$ bei $m \neq n$ und bei $m = n$ folgt respektive

$$\psi_n^{(1)} = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m^{(0)} | V | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)} ; E_n^{(1)} = V_{nn} = \langle \psi_n^{(0)} | V | \psi_n^{(0)} \rangle$$

Dasselbe kann für die entsprechende Gleichung 2. Ordnung gemacht werden für

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \psi_m^{(0)} | V | \psi_n^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

Quantenmechanik

Störungstheorie

Zeitunabhängige Störungstheorie

Entartete Störungstheorie

Seien die Zustände $\psi_n^{(0)}, \dots, \psi_{n+q}^{(0)}$ alle entartet, dann kann V in dem aufgespannten Unterraum (in höherer Ordnung auch mit anderen Funktionen) off-diagonal-Elemente haben. Die Energiekorrekturen 1. Ordnung ergeben sich dann aus den Eigenwerten von V in diesem Unterraum. Sind diese verschieden, dann ist für die bestimmten Eigenvektoren die Entartung aufgehoben. Zu lösen ist daher

$$\det(V_{lm} - E^{(1)} \delta_{lm}) = 0 ; \quad V|\tilde{\psi}_l^{(0)}\rangle = E_{l,1}^{(1)} |\tilde{\psi}_l^{(0)}\rangle$$

innerhalb 0. Ordnung

Stark-Effekt

Es sei nun $H = H_0 + V$ mit $V = eE_0 z = eE_0 \cdot r \cdot \cos\theta$ und H_0 der relativkoordinaten-Hamiltonian im Wasserstoffatom. (angelegtes E-Feld)
Die „Auswahlregeln“ sind Regeln für welche der ~~Matrix~~ relevanten Übergangsmatrixelemente existieren können:

1.) $m = m'$ Da $[z, L_z] = 0$ folgt $\langle n, l, m | z | n', l', m' \rangle = 0$ für $m \neq m'$

2.) $l + l' = \text{ungerade}$ aus Paritätsgründen

2. da unwichtig

3.) $l' = l \pm 1$

Wigner-Eckart-Theorem anwenden

erleichtert einfachere Berechnung von Matrixelementen

Der Unterraum von $\{|2,0,0\rangle, |2,1,-1\rangle, |2,1,0\rangle, |2,1,1\rangle\}$ ist entartet. In ihm kann V dargestellt werden als

$$V = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \Delta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \Delta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \Delta = -3eE_0 a_0$$

= linearer Stark-Effekt

mit Eigenzuständen und Energien

$\frac{1}{\sqrt{2}}(|2,0,0\rangle + |2,1,0\rangle)$ mit Energiekorrektur $+\Delta$

$\frac{1}{\sqrt{2}}(|2,0,0\rangle - |2,1,0\rangle)$ mit Energiekorrektur $-\Delta$

$|2,1,-1\rangle$ & $|2,1,1\rangle$ weiter entartet und ohne Energiekorrektur

Für den Grundzustand (nicht-entartet) ist die 1. Ordnung Energiekorrektur nach den Auswahlregeln null. Die zweite ist

$$E_{1,0}^{(2)} = e^2 E^2 \sum_{n=2}^{\infty} \frac{\langle 1,0,0 | \hat{V} | n,1,0 \rangle^2}{E_{1,0}^{(0)} - E_{n,1}^{(0)}} = -\frac{9}{4} (4\pi\epsilon_0) a_0^3 \cdot E^2$$

unendliche Reihe

quadratischer Stark-Effekt

~~Quantenmechanik~~ Moderne Theoretische Physik

Quantenmechanik

Ritz'sches Variationsverfahren

Kann die stationäre Schrödingergleichung nicht explizit gelöst werden, so kann für eine geeignete Wellenfunktion

$$\Psi \Phi_v(\vec{r}) = \Phi_v(\lambda_i; \vec{r}) \quad , \lambda_i \text{ variierbare Parameter}$$

die Energie $\langle \Phi_v | \hat{H} | \Phi_v \rangle$ bzgl. λ_i minimiert werden. Die Lösung bietet eine gute Annäherung an den wahren Grundzustand des Problems.

Quantenmechanik

Störungstheorie

Zeitabhängige Störungstheorie

Ist nun der Hamiltonian gegeben durch

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V(t)$$

↑ zeitunabhängig

Eigenzustand
von $\hat{H}_0$

wobei $V(t) \neq 0$ nur für $t \in (t_i, t_f)$ gilt. Ist die Wellenfunktion zu Beginn $|\psi(t < t_i)\rangle = |n(t)\rangle$, so kann geschrieben werden:

$$|\psi(t > t_f)\rangle = \sum_m a_{n \rightarrow m} |m(t)\rangle$$

mit Übergangswahrscheinlichkeiten $P_{n \rightarrow m} = |a_{n \rightarrow m}|^2$

Übergangswahrscheinlichkeiten 1. Ordnung

Ist das System für $t_0 < t_i$ im Zustand $|n(t)\rangle$, so ist im W.W.-Bild $|\psi_I(t < t_i)\rangle = |n\rangle$ und für $t > t_f$:

$$|\psi_I(t)\rangle = U_I(t, t_0) |n\rangle \approx \left(1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_I(t') dt'\right) |n\rangle$$

die Übergangswahrscheinlichkeit in Zustand $|m\rangle \neq |n\rangle$ ist dann:

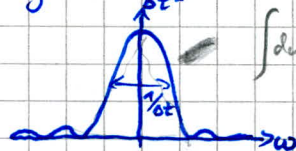
$$P_{n \rightarrow m} = |\langle m | \psi_I(t > t_f) \rangle|^2 \approx \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{t_0}^t \langle m | V_I(t') | n \rangle dt' \right|^2$$

Fermi's goldene Regel

Sei V zwischen t_i und t_f zeitunabhängig. Dann ist $\langle m | V_I(t) | n \rangle = V_{mn} e^{-i(E_n - E_m)t/\hbar}$

$$\Rightarrow P_{n \rightarrow m} \approx \frac{1}{\hbar^2} |V_{mn}|^2 \int_{t_0}^t e^{-i(E_n - E_m)t'/\hbar} dt' = \frac{1}{\hbar^2} |V_{mn}|^2 \frac{\sin^2(\omega_{mn} \Delta t/2)}{(\omega_{mn}/2)^2}$$

es folgt $\text{sinc}^2(\omega/2) \Delta t^2 \rightarrow 2\pi \Delta t \delta(\omega)$, da sinc recht schmal ist.



$$\int d\omega \frac{\sin^2 \frac{\omega \Delta t}{2}}{\omega^2} = 2\pi \Delta t$$

und daher

$$P_{n \rightarrow m} / \Delta t = \Gamma_{n \rightarrow m} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{mn}|^2 \delta(E_m - E_n)$$

Die Wahrscheinlichkeit, einen Zustand $|n\rangle$ zu verlassen, ist ($V_{mn} \approx \text{konst.}$)

$$P_{n \rightarrow} = \frac{2\pi}{\hbar} |V(E_n)|^2 \cdot \nu(E_n) \cdot \Delta t$$

Allgemein beschreibt die goldene Regel, dass jeder Zustand anderer Energie Übergangswahrscheinlichkeit 0 hat. Jedoch ist dies nur für den Übergang zum Integral die richtige Näherung. Dort ist $\int_m = \int_{m \neq n}$ und daher auch der Übergang zu $\delta(E_m - E_n)$ gerechtfertigt für leichtere Darstellung der Regel.

Moderne Theoretische Physik

Quantenmechanik

Störungstheorie

Zeitabhängige Störungstheorie

Harmonische Störung

Sei $V(t; t_0 < t < t_f) = V \cdot \cos(\omega t)$. Dann ist

$$\Gamma_{n \rightarrow m} = \frac{\pi}{2\hbar} |V_{mn}|^2 (\delta(E_m - E_n + \hbar\omega) + \delta(E_m - E_n - \hbar\omega))$$

Übergang zu verschiedenen Energien möglich

wieder nur im Integral die sinnvolle Darstellung der Übergangsrate.

Adiabatische Näherung

Die Amplitude nach der Störung ist $a_{n \rightarrow m} = \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_{mn}(t')$. Auf partieller Integration folgt:

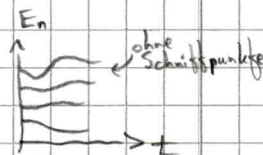
$$a_{n \rightarrow m} = -\frac{V_{mn}(t)}{\hbar\omega_{mn}} e^{i\omega_{mn}t} + \frac{1}{\hbar\omega_{mn}} \int_{t_0}^t dt' \left(\frac{\partial V_{mn}(t')}{\partial t'} \right) e^{i\omega_{mn}t'}$$

im W.W.-Bild ist unter Vernachlässigung des 2. Terms

$$|\psi_t(t)\rangle = |n\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{V_{mn}}{E_m - E_n} |m\rangle e^{+i \frac{E_m - E_n}{\hbar} t}$$

und daher im Schrödinger-Bild

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t} |n\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{V_{mn}}{E_m - E_n} |m\rangle e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t}$$



dies entspricht zeitunabhängiger Störungstheorie 1. Ordnung ohne Energiekorrektur für jeden Zeitpunkt explizit berechnen.

In adiabatischer Näherung ist $\frac{\partial V_{mn}(t)}{\partial t}$ klein und im Integral mit dem oszillierenden Term dann irrelevant. Die Zustände ändern sich hier trotzdem, aber in welchem Zustand wir uns befinden ändert sich nicht.

Quantenmechanik
Störungstheorie
Instantane Basis

Der Hamiltonian $H(t)$ sei abhängig von einem zeitabhängigen Satz an Parametern $\vec{R}(t)$; also $H = H(\vec{R}(t))$. Die instantane Basis sei dann die von $\vec{R}$ abhängige Eigenbasis von H zu beliebigen aber festen Zeitpunkten t . Dann ist folgendes eine unitäre Transformation:

$$\Omega(t, t_0) \equiv \sum_n |n(\vec{R}(t_0))\rangle \langle n(\vec{R}(t))| = \sum_n |n_0\rangle \langle n(\vec{R}(t))|$$

$\xrightarrow{\text{stationäre Lsg. zu } H}$ $\xrightarrow{\text{zeitabhängige Proportionalitätskonstante}}$

für $|\Psi(t)\rangle \propto |n(\vec{R}(t))\rangle$ ist $|\Phi(t)\rangle \propto |n_0\rangle$. In adiabatischer Näherung ist $|\Phi(t)\rangle$ nicht zeitabhängig. Allgemein gilt jedoch:

dann: $U(t, t_0) = [\Omega(t, t_0)]^{-1}$

$$i\hbar \partial_t |\Phi\rangle = i\hbar \Omega |\Psi\rangle = \dots = [\Omega H \Omega^{-1} + i\hbar \dot{\Omega} \Omega^{-1}] |\Phi\rangle =: \tilde{H} |\Phi\rangle$$

der erste Term ist diagonal und

$$\Omega H \Omega^{-1} = \sum_n E_n(\vec{R}(t)) |n_0\rangle \langle n_0| =: H_0(t)$$

der zweite Term sei wie eine Störung $V(t) = i\hbar \dot{\Omega} \Omega^{-1}$. Diese hat Diagonalelemente (1. Ordnung Störungstheorie analog) (hätten eig. auch zu H_0 dazugepasst)

$$V_{nn}(t) = \langle n_0 | i\hbar \dot{\Omega} \Omega^{-1} | n_0 \rangle = i\hbar \langle \dot{n}(\vec{R}(t)) | n(\vec{R}(t)) \rangle = i\hbar \dot{\vec{R}} \cdot \langle \vec{\nabla}_{\vec{R}} n(\vec{R}) | n(\vec{R}) \rangle$$

Es kommutieren also $[\tilde{H}_{\text{diag}}(t_1), \tilde{H}_{\text{diag}}(t_2)] = 0$, daher ist die Zeitentwicklung der Zustände $|n_0\rangle$ dann:

$$U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \tilde{H}_{\text{diag}}(t') dt'}$$

Hierfür müssen wir die adiabatische Näherung ansetzen, dass die außendiagonalelemente von $\tilde{H}$ null sind. Dann sind $|n_0\rangle$ (trivial) die Lösungen der stationären Schrödingergln. $E_n |n_0\rangle = \tilde{H} |n_0\rangle$ und wir erhalten mit obiger Zeitentwicklung

$$|\Phi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t [E_n(\vec{R}(t')) + V_{nn}(t')] dt'} |n_0\rangle$$

$\checkmark$ für $|\Phi(t)\rangle = |n_0\rangle$

wobei wir die zusätzlichen Phasen als dynamische & geometrische Phase bezeichnen:

$$\Phi_{D,n} = \frac{1}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' E_n(\vec{R}(t')) ; \quad \Phi_{B,n} = \frac{1}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_{nn}(t') = i \int_{\vec{R}(t_0)}^{\vec{R}(t)} d\vec{R} \cdot \langle \vec{\nabla}_{\vec{R}} n(\vec{R}) | n(\vec{R}) \rangle$$

$\downarrow$ Berry-Phase

die geometrische Phase ist hierbei vollständig zeitunabhängig und für geschlossene Wege $(\vec{R}(t) = \vec{R}(t_0))$ eindeutig. Relevant wird sie nur für Superpositionen von Eigenzuständen (W.W.-Bild)

Für die nicht-diagonalen Übergänge durch $V(t) = i\hbar \dot{\Omega} \Omega^{-1}$ gilt mit Übergang ins Dirac-Bild:

$$P_{n \rightarrow m} = \left| \int_{t_0}^t dt' \langle m(\vec{R}(t')) | n(\vec{R}(t')) \rangle \cdot \exp \left[-i \int_{t_0}^{t'} [E_n(\vec{R}(t'')) - E_m(\vec{R}(t''))] dt'' \right] \right|^2$$

Ein Beispiel bilden Landau-Zener-Übergänge bei $H(t) = -\frac{1}{2} E(t) \sigma_z + \Delta \sigma_x$ zw.

$$|0(R=E)\rangle = \cos(\eta/2) |\uparrow\rangle + \sin(\eta/2) |\downarrow\rangle ; \quad |1(R=E)\rangle = -\sin(\eta/2) |\uparrow\rangle + \cos(\eta/2) |\downarrow\rangle ; \quad \tan \eta = \frac{\Delta}{E}$$

wo gilt, dass (für t von $-\infty$ bis $+\infty$)

$$P_{0 \rightarrow 1} = e^{-\pi \gamma/2} \leftarrow \text{in unex. Näherung mit } \frac{\pi^2}{9} e^{-\pi \gamma/2}$$

$\gamma = \frac{\Delta^2}{\hbar v}$

Moderne Theoretische Physik

Quantenmechanik

Relativistik

Es ist $x^\mu = (x^0, x^1, x^2, x^3) = (ct, \vec{x})$ ein kontravarianter und $x_\mu = (x_0, -x^1, -x^2, -x^3) = g_{\mu\nu} x^\nu$ ein kovarianter 4-Vektor, wobei

$$g^{\mu\nu} = g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

die Minkowski-Metrik bezeichnet.

Die Ableitung $\partial_\mu = (\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \vec{\nabla})$ ist kovariant, $\partial_\mu x^\mu = 4$.
(Gradient)

Das elm. Vektorpotential ist $A^\mu = (A^0, \vec{A}) = (\phi, \vec{A})$ und der Feldstärketensor, ~~ist~~

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu = \begin{pmatrix} 0 & E_x & E_y & E_z \\ E_x & 0 & -B_z & B_y \\ E_y & B_z & 0 & -B_x \\ E_z & -B_y & B_x & 0 \end{pmatrix} \text{ in natürlichen Einheiten ;}$$

die kovariante Ableitung ($\sim$ minimale Kopplung) ist $D_\mu = \partial_\mu + i \frac{q}{\hbar c} A_\mu = (\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} + i \frac{q}{\hbar c} \phi, \vec{\nabla} - i \frac{q}{\hbar c} \vec{A})$

Lorentz-Transformationen

Transformationen, bei denen $x_\mu x^\mu$ konstant bleibt, definieren sich durch

$$x'^\mu = \Omega^\mu_\nu x^\nu, \quad x' = \Omega \cdot x, \quad \Omega^\mu_\nu \in \mathbb{R}, \quad x'_\mu = \Omega_\mu^\nu x_\nu, \quad x'^\mu = \Omega^\mu_\nu x^\nu$$

wobei $\Omega^\mu_\nu g_{\mu\alpha} \Omega^\alpha_\beta g^{\beta\gamma} = \delta^\gamma_\nu$, also $\Omega^T g \Omega = g$. Es ist $(\Omega_\mu^\nu) = (\Omega^\mu_\nu)^{-1}$, also

$$x^\mu = \Omega^\mu_\nu x'^\nu, \quad x_\mu = x'_\nu \Omega^\nu_\mu$$

Damit $x_\mu x^\mu$ lorentz-invariant ist, muss $\det[\Omega] = \pm 1$.

Die Lorentz-Gruppe ist die "Menge" aller solcher Transformationen. Sub-Gruppen sind u.a.

$\Omega^0_0 > 0$ (orthochrone Lorentz-Gruppe)

Zeitrichtung unverändert.

$\det[\Omega] = 1$ (eigentliche Lorentz-Gruppe)

$\Omega^0_0 > 0$ und $\det[\Omega] = 1$ (eigentliche orthochrone Lorentz-Gruppe)

beispiele sind Boosts/Rotationen (nur boosts keine sub-Gruppe)

Boost in x:

$$\begin{pmatrix} \gamma & -\gamma \beta & 0 & 0 \\ -\gamma \beta & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$\rightarrow$

$$\begin{pmatrix} x'^0 \\ x'^1 \\ x'^2 \\ x'^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cosh \eta & \sinh \eta & 0 & 0 \\ -\sinh \eta & \cosh \eta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^0 \\ x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix}; \quad \begin{pmatrix} x'^0 \\ x'^1 \\ x'^2 \\ x'^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & \sin \theta & 0 \\ 0 & -\sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^0 \\ x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix}$$

$\tanh(\eta) = \frac{v}{c}$

Geschwindigkeit nicht

ist Ω^μ_μ

rot um θ um θ

Der Impuls ist ein 4-Vektor $p^\mu = (E/c, \vec{p}) \rightarrow (i \hbar \partial_t, -i \hbar \vec{\nabla})$. $p_\mu p^\mu = (mc)^2$

Die Energie ist $E = \sqrt{m^2 c^4 + c^2 \vec{p}^2}$

Dadurch ergibt sich der Hamiltonian mit elm. Feld hier als

$$H = c \sqrt{(mc)^2 + (\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A})^2} + q \phi$$

Quantenmechanik

Relativistik

Klein-Gordon-Gleichung

Da eine Wurzel relativ hässlich ist, nehmen wir lieber die quadratische Form

$$\left[\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q\phi \right)^2 - c^2 \left(-i\hbar \vec{\nabla} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2 \right] \psi = (mc^2)^2 \psi \quad \leftarrow \text{dadurch offensichtlich dann negative Energien als Lösung}$$

oder in kovarianten Ableitungen

$$[\hbar^2 \partial_\mu \partial^\mu + (mc)^2] \psi = 0 \quad \leftarrow \text{trivial Lorentz-invariant}$$

ohne Feld ist $[\hbar^2 \partial_\mu \partial^\mu + (mc)^2] \psi = 0$. $\rightarrow$ ebene Wellen $\psi \propto e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p} \cdot \vec{r})}$

Aus der Gleichung kann der 4-Strom gefunden werden als

$$j^\mu = (c\rho, \vec{j}) = \frac{i\hbar}{2m} [\psi^* (\partial^\mu \psi) - (\partial^\mu \psi^*) \psi] \quad \leftarrow \text{Problem! Wsk.-Dichte kann negativ werden}$$

mit $\partial_\mu j^\mu = 0$ folgt

$$j^\mu = \frac{i\hbar}{2m} [\psi^* (\partial^\mu \psi) - (\partial^\mu \psi^*) \psi] = \frac{i\hbar}{2m} [\psi^* (\partial^\mu \psi) - (\partial^\mu \psi^*) \psi] - \frac{q}{mc} A^\mu \psi^* \psi$$

Dirac-Gleichung

Da die obige Gleichung mehrere Probleme mit sich bringt, denken wir sie als 3. Binomische Formel und finden

$$(\alpha_0 + \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc)(\alpha_0 - \vec{\alpha} \cdot \vec{p} - \beta mc)\psi = 0$$

wobei gelten muss

$$(\alpha_k)^2 = 1; \beta^2 = 1; \alpha_k \alpha_l + \alpha_l \alpha_k = 0 \quad (k \neq l); \alpha_k \beta + \beta \alpha_k = 0$$

Dirac fand, dass α, β dafür mindestens 4×4 -Matrizen sein müssen und wir erhalten z.B.:

$$\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix} = \sigma_x \otimes \vec{\sigma}; \quad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \sigma_z \otimes \sigma_0$$

so muss auch die Wellenfunktion 4 Komponenten besitzen. (kein 4-Vektor, aber bispinor)
Die Dirac-Gleichung lautet dann

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = c(\vec{\alpha} \cdot \vec{p})\psi + mc^2 \beta \psi$$

oder für $\psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$ mit zwei Spinoren φ, χ :

$$\left. \begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} &= c(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})\chi + mc^2 \varphi \\ i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} &= c(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})\varphi - mc^2 \chi \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{mit Feld} \\ \text{nicht negativ} \checkmark \\ \text{ohne Ableitungen} \checkmark \end{array}$$

Wahrscheinlichkeitsdichte & 4-Strom

Mit $\rho = \psi^\dagger \psi$ folgt $\vec{j} = c\psi^\dagger \vec{\alpha} \psi$, also $j^\mu = (c\rho, \vec{j}) = (c\psi^\dagger \psi, c\psi^\dagger \vec{\alpha} \psi)$ ($\partial_\mu j^\mu = 0$)

Mit elm. Feld wird $\vec{p} \rightarrow \vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A}$; $i\hbar \partial_t \rightarrow i\hbar \partial_t - q\phi$ und die Dirac-Gln. zu

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} - q\phi \psi = c\vec{\alpha} \cdot \left(\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right) \psi + mc^2 \beta \psi$$

der Strom ist weiterhin $\vec{j} = c\psi^\dagger \vec{\alpha} \psi$

Moderne Theoretische Physik

Quantenmechanik Relativistik

Dirac-Gleichung

Multiplizieren wir die Dirac-Gln. von links mit β , so erhalten wir die ~~kanonische~~ kovariante Form der Dirac-Gleichung

$$[ik \gamma^\mu \partial_\mu - mc] \psi = 0 \text{ bzw. } [\gamma^\mu (p_\mu - \frac{q}{c} A_\mu) - mc] \psi = [ik \gamma^\mu D_\mu - mc] \psi = 0$$

wobei $\gamma^\mu = (\gamma^0, \vec{\gamma})$ mit

$$\vec{\gamma} = \beta \vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^0 = \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}; \quad \gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}; \quad (\gamma^0)^\dagger = \gamma^0, (\gamma^k)^\dagger = -\gamma^k$$

meist wird auch die Schreibweise $\alpha \equiv \alpha_\mu \gamma^\mu$ verwendet. (Auch: $\gamma^5 = i\gamma^0 \gamma^1 \gamma^2 \gamma^3$)
 In dieser Form folgt für den 4-Strom ~~$j^\mu = (c\psi^\dagger \psi, c\psi^\dagger \vec{\alpha} \psi)$~~

$$j^\mu = (c\psi^\dagger \psi, c\psi^\dagger \vec{\alpha} \psi) = c\bar{\psi} \gamma^\mu \psi \text{ mit } \bar{\psi} = \psi^\dagger \gamma^0 = (\psi_1^*, \psi_2^*, -\psi_3^*, -\psi_4^*)$$

Form-Invarianz der Dirac-Gleichung

Die Dirac-Gleichung transformiert unter Lorentz-Transformation wie

$$(ik \gamma^\mu D_\mu(x) - mc) \psi(x) = 0 \rightarrow (ik \gamma'^\mu D'_\mu(x') - mc) \psi'(\Omega^{-1}x') = 0$$

wenn $\psi'(x') = \psi(\Omega^{-1}x')$, dann ist γ'^μ nicht mehr so unitär wie vorher.
 Wir wählen lieber $S(\Omega)$ sodass

$$\gamma'^\mu = \Omega^{\mu\nu} \gamma^\nu = S^{-1} \gamma^\nu S; \quad \psi'(x') = S(\Omega) \psi(\Omega^{-1}x')$$

an besten bleibt $\bar{\psi}\psi$ Lorentz-invariant, also $\gamma^0 S^\dagger \gamma^0 = S^{-1}$

$$\Rightarrow (ik \gamma^\nu D'_\nu(x') - mc) \psi'(x') = 0$$

Damit ist die Dirac-Gln. Form-invariant. ~~und~~ $S(\Omega)$ bilden ebenfalls eine Gruppe (Spin-Darstellung der Lorentz-Gruppe). Es gilt z.B. (angeordnet ...)

$$S(\Omega) = \exp\left(\frac{1}{2} \alpha_1 \eta\right) \text{ für boost in } x\text{-Richtung mit } \tanh \eta = v/c$$

$$S(\Omega) = \exp\left(\frac{i}{2} \begin{pmatrix} \sigma_z & 0 \\ 0 & \sigma_z \end{pmatrix} \theta\right) \text{ für Rotation um } z \text{ um } \theta$$

für $\theta = 2\pi$ ist $S(\Omega) = -1$

auch können die Transformationen infinitesimal definiert werden. Dann ist

$$\Omega = 1 + \frac{1}{2} \Theta_{\mu\nu} J^{\mu\nu}; \quad (J^{\mu\nu})^\alpha{}_\beta = g^{\mu\alpha} \delta^\nu{}_\beta - g^{\nu\alpha} \delta^\mu{}_\beta$$

$$\Rightarrow S(\Omega) = 1 - \frac{i}{4} \Theta_{\mu\nu} \alpha^{\mu\nu}; \quad \alpha^{\mu\nu} = \frac{i}{2} [\gamma^\mu, \gamma^\nu]$$

für einen boost in ein System mit Geschwindigkeit $\vec{v}$ zum alten System ist $\vec{p} = \gamma m \vec{v}$

$$\Omega^\nu{}_\mu = \begin{pmatrix} \gamma & \vec{p}^T/mc \\ \vec{p}/mc & \gamma + (\gamma-1) \frac{\vec{p} \vec{p}^T}{p^2} \end{pmatrix}, \quad S(\Omega) = \sqrt{\frac{E+mc^2}{2mc^2}} \left(1 - \frac{c \vec{\gamma} \cdot \vec{p}}{E+mc^2} \right) \gamma^0$$

Weder Spin, noch Drehimpuls kommutieren mit dem Dirac-Hamiltonian

$$H_D = c \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2; \text{ erhalten ist hier nur } \vec{J} = \vec{L} + \vec{S}, \text{ verwende } [\vec{\sigma}, \vec{p} \times \vec{\sigma}] = 2i \vec{p} \times \vec{\sigma} \quad (\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} + 2i \epsilon_{ijk} \sigma_k)$$

Relativistik → Quantenmechanik
→ Dirac-Gleichung

Um die Dirac-Gln. zu lösen, schreiben wir sie wieder in zwei Spinoren getrennt:

$$(E - mc^2)\psi_p = c(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})\chi_p ; (E + mc^2)\chi_p = c(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})\psi_p ; \psi = \psi_p e^{-\frac{i}{\hbar} p_\mu x^\mu}, \chi = \chi_p e^{-\frac{i}{\hbar} p_\mu x^\mu}$$

wenn wir nun ψ_p beliebig wählen, folgt $\chi_p = \frac{c\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{E + mc^2} \psi_p$ und, normiert auf $\bar{\psi}\psi = 1$

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{V}} \sqrt{\frac{mc^2 + E}{2mc^2}} e^{-\frac{i}{\hbar} p_\mu x^\mu} \begin{pmatrix} \psi_p \\ \frac{c(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})}{E + mc^2} \psi_p \end{pmatrix} \quad \text{geschickt für } E > 0$$

andererseits, wählen wir χ_p folgt:

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{V}} \sqrt{\frac{mc^2 + |E|}{2mc^2}} e^{-\frac{i}{\hbar} p_\mu x^\mu} \begin{pmatrix} \frac{c(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})}{E - mc^2} \chi_p \\ \chi_p \end{pmatrix} \quad \text{geschickt für } E < 0$$

geschickt seien auch Eigenzustände zu $\vec{p} \cdot \vec{\Sigma} = \vec{p} \cdot \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix}$ gewählt. Dieser Operator (Helizität) kommutiert mit H (anders als $\vec{S}$).

Um Probleme mit unendlich-Energie-Übergängen zu vermeiden, definiert Dirac alle Energieniveaus negativer Energie als besetzt

Ladungskonjugation

Wenn ψ ein Eigenzustand des Dirac-Hamiltonians ist, dann finden wir mit $U_c = i\gamma^2$ und $U_c(\gamma^\mu)^* U_c^{-1} = -\gamma^\mu$, dass $\psi^c = U_c \psi^* = i\gamma^2 \psi^*$ ein Eigenzustand von H_0 mit Energie $-E$ ist (ohne Feld). $U_c(\vec{\alpha})^* U_c^{-1} = -\vec{\alpha}$; $U_c \vec{p} U_c^{-1} = -\vec{p}$; $U_c \vec{S} U_c^{-1} = -\vec{S}$
Spin, Impuls, Energie flip

Nicht-relativistischer Limes

→ Für $E + mc^2 - q\phi \approx 2mc^2$ ($v \ll c$) folgt

$$\chi \approx \frac{(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})}{2mc} \psi \rightarrow (E - mc^2 - q\phi)\psi = \frac{(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})^2}{2m} \psi$$

mit $\tilde{E} := E - mc^2$ und $(\vec{\sigma} \cdot \vec{C})(\vec{\sigma} \cdot \vec{D}) = \vec{C} \cdot \vec{D} + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{C} \times \vec{D})$ folgt der Pauli-Hamiltonian für die stationäre Gleichung $H_p \psi = \tilde{E} \psi$:

$$H_p = \frac{(\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A})^2}{2m} - \frac{\hbar q}{2mc} \vec{B} \cdot \vec{\sigma} + q\phi \quad H_p = -\frac{q}{mc} \vec{B} \cdot \vec{S} = -\frac{1}{2} \mu_B \vec{B} \quad \text{mit } \vec{\mu} = \frac{q\hbar}{2mc} \vec{S}$$

mit „korrektem“ gyromagnetischem Faktor $g \approx 2$.
Unter Vernachlässigung des diamagnetischen Beitrags $\frac{q^2}{8mc^2} (\vec{B} \times \vec{r})^2$ folgt:

$$H_p = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{q}{2mc} \vec{B} \cdot (\vec{L} + 2\vec{S})$$

In höheren Ordnungen $\frac{v}{c}$ folgen noch

$$H = \frac{(\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A})^2}{2m} - \frac{\hbar q}{2mc} \vec{B} \cdot \vec{\sigma} + q\phi - \frac{(\vec{p})^4}{8mc^2} - \frac{q\hbar^2}{8mc^2} (\vec{\nabla} \cdot \vec{E}) + \frac{\hbar q}{8mc^2} \vec{\sigma} \cdot (\vec{p} \times \vec{E} - \vec{E} \times \vec{p})$$

Darwin-Term Spin-Bahn Kopplung

korrektur zur kin. En.

$V(r) = q\phi(r)$

$\propto \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \vec{L} \cdot \vec{S}$

Moderne Theoretische Physik

Quantenmechanik

Relativistike

Dirac-Gleichung

Für die Strom-Dichte im nicht-rel.-Limes ist $(\rho = \psi^\dagger \psi + \chi^\dagger \chi \approx \psi^\dagger \psi)$

$$\vec{j} = c \psi^\dagger \vec{\alpha} \psi = -\frac{i\hbar}{2m} (\psi^\dagger (\vec{\nabla} \psi) - (\vec{\nabla} \psi^\dagger) \psi) - \frac{q}{mc} \vec{A} \psi^\dagger \psi + \frac{\hbar}{2m} [\vec{\nabla} \times (\psi^\dagger \vec{\sigma} \psi)]$$

der letzte Term führt nicht zu ~~Strom~~ Ladungsstrom, da $\vec{\nabla}(\vec{\nabla} \times \dots) = 0$.
Er kann als Magnetisierung interpretiert werden mit

$$\vec{M}(\vec{r}, t) = -\frac{q}{\hbar} \mu_B \psi^\dagger \vec{S} \psi = -\mu_B \psi^\dagger \vec{\sigma} \psi$$

dabei muss jedoch der Ladungsstrom $\vec{j}_q = q \cdot \vec{j}$ betrachtet werden.
Für die Ladungsdichte folgt $\rho_q = q \cdot \rho$.

Im Wasserstoff-Atom mit Spin-Bahn-Kopplung folgt

$$E_{nj} = mc^2 \left[1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{(n-j)^2} \right]^{-1/2} ; \quad \epsilon_j = j + \frac{1}{2} - \sqrt{(j + \frac{1}{2})^2 - Z^2 \alpha^2}$$

Quantenmechanik

Identisches Teilchen

Eine Wellenfunktion sollte bei Vertauschung zweier Teilchen keine andere Wahrscheinlichkeitsdichte hervorbringen. Dazu definiere den Vertauschungsoperator

$$P_{12} |\psi(1,2)\rangle = |\psi(2,1)\rangle = \lambda |\psi(1,2)\rangle, \quad |\lambda| = 1, \quad \text{in 3D: } \lambda = \pm 1$$

es bietet sich demnach an, gemeinsame Eigenfunktionen des Hamiltonians und des Vertauschungsoperators zu finden.

Für zwei nicht-interagierende Teilchen mit Zuständen $H^{(1)} \psi_1 = E_1 \psi_1$ & $H^{(2)} \psi_2 = E_2 \psi_2$ ergeben sich

$$\psi(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(1)\psi_2(2) - \psi_1(2)\psi_2(1)) \quad \text{mit } \lambda = -1; \quad E = E_1 + E_2$$

und

$$\left. \begin{aligned} \psi(1,2) &= \psi_1(1)\psi_2(2), \quad E = 2E_1 \\ \psi(1,2) &= \psi_2(1)\psi_1(2), \quad E = 2E_2 \\ \psi(1,2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(1)\psi_2(2) + \psi_1(2)\psi_2(1)), \quad E = E_1 + E_2 \end{aligned} \right\} \text{ mit } \lambda = +1$$

Teilchen, die Zustände mit $\lambda = -1$ besetzen, haben halbzahliges Spin und heißen Fermionen. Teilchen, die Zustände mit $\lambda = +1$ besetzen, haben ganzzahliges Spin und heißen Bosonen.

Ein allg. Bosonischer Zustand ist

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = \left(\frac{n_1! n_2! \dots}{N!} \right)^{1/2} \sum_P \psi_{p_1}(1) \psi_{p_2}(2) \dots \psi_{p_N}(N)$$

ein fermionischer hingegen ist

$$|1_1, 1_2, \dots, 1_N\rangle = \left(\frac{1}{N!} \right)^{1/2} \sum_P (-1)^P \psi_{p_1}(1) \psi_{p_2}(2) \dots \psi_{p_N}(N)$$

dies ist die Definition einer Determinante in N -Dimensionen

$$|1_1, 1_2, 1_3\rangle = \left(\frac{1}{3!} \right)^{1/2} \begin{vmatrix} \psi_1(1) & \psi_2(1) & \psi_3(1) \\ \psi_1(2) & \psi_2(2) & \psi_3(2) \\ \psi_1(3) & \psi_2(3) & \psi_3(3) \end{vmatrix} \quad (\text{Slater-Determinante})$$

Helium Atom

Wir betrachten als Beispiel ein Helium-Atom mit

$$H = \frac{(\vec{p}_1)^2}{2m} + \frac{(\vec{p}_2)^2}{2m} - \frac{Ze^2}{|\vec{r}_1|} - \frac{Ze^2}{|\vec{r}_2|} + \underbrace{\frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}}_V = H^{(1)}(1) + H^{(1)}(2) + V$$

die Lösungen der 1-Teilchen-Hamiltonians sind

$$\psi_{k,p}(\vec{r}, m_s) = \phi_k(\vec{r}) \chi_p(m_s) \quad \chi_{\uparrow}(\frac{1}{2}) = 1, \chi_{\uparrow}(-\frac{1}{2}) = 0, \dots$$

da Elektronen Fermionen sind, folgt für den Grundzustand:

$$\psi_{gs}(1,2) = \phi_{1,0,0}(\vec{r}_1) \phi_{1,0,0}(\vec{r}_2) \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_{\uparrow}(m_1) \chi_{\downarrow}(m_2) - \chi_{\downarrow}(m_1) \chi_{\uparrow}(m_2)]$$

mit Energie $E_0 = -8 R_y = -8 \frac{\hbar^2}{2m a_0^2}$; $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$

mit Störungstheorie um V folgt $E_0 \approx (-8 + \frac{5}{2}) R_y$

Moderne Theoretische Physik

Quantenmechanik Identische Teilchen

~~Exakte~~ Helium Atom

Angeregte Zustände

Aufgrund der Ionisierungsenergie ist bei einem angeregten Helium Zustand eines der beiden Elektronen im Grundzustand. Die Zustände sind dann

$$\Psi_{-k_1, k_2, l_1, l_2, s_1, s_2}^{(1,2)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\phi_{100}(\vec{r}_1) \chi_{s_1}(m_1) \phi_{nlm}(\vec{r}_2) \chi_{s_2}(m_2) - \phi_{nlm}(\vec{r}_1) \chi_{s_2}(m_1) \phi_{100}(\vec{r}_2) \chi_{s_1}(m_2) \right]$$

Dies sind jedoch keine Eigenzustände des gesamten Hamiltonians. Da $\hat{L}$ & $\hat{L}_z$ mit V kommutieren, muss nur noch im Spin-Raum diagonalisiert werden. Mit ~~Kleiner~~ Ortswellenfunktionen

$$\phi_{k_1 k_2}^A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_{k_1}(\vec{r}_1) \phi_{k_2}(\vec{r}_2) - \phi_{k_1}(\vec{r}_2) \phi_{k_2}(\vec{r}_1)] \quad \text{antisymmetrisch}$$

$$\phi_{k_1 k_2}^S(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_{k_1}(\vec{r}_1) \phi_{k_2}(\vec{r}_2) + \phi_{k_1}(\vec{r}_2) \phi_{k_2}(\vec{r}_1)] \quad \text{symmetrisch}$$

Folgen für $|k_1, k_2, S, \mu_S\rangle$:

$$|k_1, k_2, 0, 0\rangle = \phi_{k_1 k_2}^S(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \cdot \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \quad \left. \begin{array}{l} \text{parahelium} \end{array} \right\}$$

$$|k_1, k_2, 1, 1\rangle = \phi_{k_1 k_2}^A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \cdot |\uparrow\uparrow\rangle$$

$$|k_1, k_2, 1, 0\rangle = \phi_{k_1 k_2}^A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \cdot \frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}$$

$$|k_1, k_2, 1, -1\rangle = \phi_{k_1 k_2}^A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \cdot |\downarrow\downarrow\rangle \quad \left. \begin{array}{l} \text{orthohelium} \end{array} \right\}$$

mit Energiekorrekturen

$$\delta E_{S=0} = I_{k_1 k_2} + J_{k_1 k_2}$$

$$\delta E_{S=1} = I_{k_1 k_2} - J_{k_1 k_2}$$

$$I_{k_1, k_2} = \int d^3r_1 d^3r_2 |\phi_{k_1}(\vec{r}_1)|^2 |\phi_{k_2}(\vec{r}_2)|^2 \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

$$J_{k_1, k_2} = \int d^3r_1 d^3r_2 \phi_{k_1}^*(\vec{r}_1) \phi_{k_2}^*(\vec{r}_2) \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \phi_{k_1}(\vec{r}_1) \phi_{k_2}(\vec{r}_2)$$

für festes k_1, k_2 ist dies der effektive Spin-Hamiltonian

$$H_{\text{ex}} = -\frac{J_{k_1 k_2}}{2} \left(1 + \frac{4}{\hbar^2} \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \right)$$

$$2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = \vec{S}^2 - \vec{S}_1^2 - \vec{S}_2^2 = \hbar^2 \left(S(S+1) - \frac{3}{2} \right)$$

Statistische Physik

Thermodynamik (klassisch)

Meist wird das thermodynamische Limit mit $N, V \rightarrow \infty$, aber $\frac{N}{V} = \text{const.}$, um idealisierte Systeme zu beschreiben.

Extensive Zustandsgrößen sind proportional zu N (V, U, S)
Intensive Zustandsgrößen sind nicht proportional zu N (p, T, μ) } beschreiben Makrozustand

Zustandsgleichungen zeigen Zusammenhänge im thermodynamischen Gleichgewicht an.

Zustandsänderungen können unterschieden werden in

- quasistatische Zustandsänderungen (langsam)
- reversible Zustandsänderungen (Zeitumkehr möglich $\rightarrow$ führt zu Ausgangszustand)
- irreversible Zustandsänderungen (Zeitumkehr führt in endl. Zeit nicht zurück)
- adiabatische Zustandsänderungen (ohne Wärmeaustausch mit der Umgebung)
- isochor, isobar, isotherm, ... ($V = \text{const.}$, $P = \text{const.}$, $T = \text{const.}$)

von Anfang definiert

bei reversiblen Prozessen bewegen sich die Zustandsgrößen auf der Ebene (Kontinuität) des Gleichgewichtszustände.

HS der Thermodynamik

Systeme

0. Temperatur existiert. Sind zwei Systeme im Gleichgewicht, ist ihre Temperatur gleich

1. $\Delta U = \delta Q - \delta W + \mu dN$

μ nicht vollständig (keine Zustandsgröße)

2. Kein Zustandsübergang kann nur Wärme in Arbeit umwandeln oder Wärme von kalt $\rightarrow$ warm transportieren.

3. $\lim_{T \rightarrow 0^+} S(T) = 0$

Carnot-Prozess

Ein Carnot-Prozess besteht aus vier Teilschritten.

1. isotherme Expansion ($+Q_2$) ($V_1 \rightarrow V_2$)
2. adiabatische Expansion ($T_1 \rightarrow T_2$) ($V_2 \rightarrow V_3$)
3. isotherme Kompression ($-Q_1$) ($V_3 \rightarrow V_4$)
4. adiabatische Kompression ($T_2 \rightarrow T_1$) ($V_4 \rightarrow V_1$)

$\Delta W = |Q_2| - |Q_1| = Q_2 - Q_1 \rightarrow \eta \equiv \frac{\Delta W}{Q_2} = 1 - \frac{|Q_1|}{Q_2} ; \frac{Q_1}{T_1} + \frac{Q_2}{T_2} = 0$

Der Carnot-Prozess ist der reversible Prozess maximaler Effizienz (Wirkungsgrad)

reversibel

(und minimaler?)
(Pos. durch W. d. d.)

Ein bel. Prozess kann als Kombination vieler Carnot-Prozesse gesehen werden. Es folgt

$\oint \frac{\delta Q}{T} = 0 ; dS \equiv \frac{\delta Q}{T} |_{\text{revers.}} \rightarrow dS \geq \frac{\delta Q}{T}$

$\oint \frac{\delta Q}{T} = 0$ $\oint \frac{\delta Q}{T} < 0$ mögl.

Moderne Theoretische Physik

Statistische Physik

Thermodynamik (klassisch)

Entropie $\rightarrow$ Mit $\delta Q = T \delta S$ und $\delta W = P \delta V$ folgt aus dem 1. HS:

$$\delta dU = T \delta S - P \delta V + \mu \delta N \Rightarrow dS = \frac{1}{T} dU + \frac{P}{T} dV - \frac{\mu}{T} dN$$

also $S = S(U, V, N)$ und

$$\frac{1}{T} = \left. \frac{\partial S}{\partial U} \right|_{V, N} ; \frac{P}{T} = \left. \frac{\partial S}{\partial V} \right|_{U, N} ; \frac{\mu}{T} = - \left. \frac{\partial S}{\partial N} \right|_{U, V}$$

für irreversible Prozesse ist $T \delta S > \delta Q$. Daher ist S im equilibrium maximal bei konstanten U, V, N . (Maximierung bzgl. mögl. übriger Parameter)

Euler-Gleichung

Da S extensiv ist, U, V, N aber auch, muss gelten: (additiv)

$$S(\lambda U, \lambda V, \lambda N) = \lambda S(U, V, N)$$

woraus aus $\frac{d(\lambda S)}{d\lambda} = S$ folgt:

$$TS = U + PV - \mu N$$

Thermodynamische Potentiale

Innere Energie

Wir invertieren $S(U)$ zu $U(S, V, N)$

$$\Rightarrow T = \left. \frac{\partial U}{\partial S} \right|_{V, N} ; P = - \left. \frac{\partial U}{\partial V} \right|_{S, N} ; \mu = \left. \frac{\partial U}{\partial N} \right|_{S, V} \Rightarrow \left. \frac{\partial T}{\partial V} \right|_{S, N} = - \left. \frac{\partial P}{\partial S} \right|_{V, N}$$

U ist im Gleichgewicht minimal

Freie Energie

Wir führen eine Legendre Transformation durch zu:

$$F = U - TS ; F = F(T, V, N) ; dF = -S dT - P dV + \mu dN$$

Enthalpie

Weiter mit

$$H = U + PV ; H = H(S, P, N) ; dH = T dS + V dP + \mu dN$$

Gibb'sche freie Enthalpie

$$G = H - TS ; G = G(T, P, N) ; dG = -S dT + V dP + \mu dN$$

Großkanonisches Potential

$$\Omega = F - \mu N = U - TS - \mu N (= -PV) ; \Omega = \Omega(T, V, \mu)$$

$$d\Omega = -S dT - P dV - N d\mu$$

Statistische Physik

Thermodynamik (klassisch)

Lineare Antwort

Bei Wärmezufuhr in ein System steigt die Temperatur linear an. Je nachdem, ob P oder V dabei konstant bleibt, ist

$$\delta Q = C_x dT ; C_x = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_x ; x = P, V$$

oder mit $U(T, V, N) = U(S(T, V, N), V, N)$:

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_{V, N}$$

Thermodynamisches Gleichgewicht

Zwei Systeme A, B seien zur Außenwelt isoliert, zueinander nicht. Die Entropie hängt dann von den Subsystemen ab:

$$S = S_A(U_A, V_A, N_A) + S_B(U_B, V_B, N_B) ; U = U_A + U_B = \text{const.}, N = N_A + N_B = \text{const.}, V = V_A + V_B = \text{const.}$$

$\rightarrow dU_A = -dU_B$

Damit $dS = 0$ folgt:

aus $U = \text{const.}$ folgt $T_A = T_B$

aus $V = \text{const.}$ folgt $P_A = P_B$

aus $N = \text{const.}$ folgt $\mu_A = \mu_B$

durch festhalten bestimmter Größen folgt im Gleichgewicht die Erhaltung der konjugierten Variablen.

Gibb'sches Paradoxon

Wir finden später

$$S(U, V, N) = N \cdot s_0 + N k_B \ln \left[\frac{V}{N} \left(\frac{U}{N} \right)^{\frac{3}{2}} \right]$$

daraus folgt für die Entropieänderung bei Mischung



$$\Delta S_i = N_i k_B \ln \left[\frac{V}{V_i} \right]$$

$$\Rightarrow \Delta S = \Delta S_1 + \Delta S_2 > 0$$

sind die Gase, sowie $\frac{V_i}{N_i}$; $\frac{U_i}{N_i}$ gleich, so muss jedoch $\Delta S = 0$. Das Gibb'sche Paradoxon lässt vermuten, dass identische Teilchen nicht unterschieden werden sollten.

Moderne Theoretische Physik

Statistische Physik

Grundlagen

Ein System aus N Teilchen kann im $6N$ -dimensionalen Phasenraum beschrieben werden. Dort können Trajektorien des Systems gefunden werden.

Eine Ansammlung an Systemen sei durch ~~die~~ die Gibbs-Verteilung definiert: $g(\vec{x}, t)$. Für eine Observable $O(\vec{x})$ ist der Erwartungswert

$$\bar{O}(t) = \int d\vec{x} g(\vec{x}, t) O(\vec{x}) = \int \frac{d^3x d^3p}{(2\pi\hbar)^{3N}} O(\vec{x})$$

Liouville-Gleichung

Die Wahrscheinlichkeit entlang einer Bahnkurve darf sich nicht ändern. $(g(\vec{x}, t) d\vec{x}_t)$
Aus dem Liouville-Theorem ändern sich auch die Volumenelemente nicht $(dx_t = dx_0, dt = dt_0)$
Es ist also $\frac{\partial g}{\partial t} = 0$, da $g(\vec{x}, t) = g(\vec{x}(t_0), t_0)$. Dadurch folgt die Liouville-Gleichung

$$\frac{\partial g}{\partial t} = \{H, g\}$$

Ergoden-Hypothese

Der Erwartungswert einer Observablen um eine Energie E ist derselbe, ob statistisch über Zustände um diese Energie gemittelt oder über eine lange Zeit einer Trajektorie bei dieser Energie:

$$\frac{1}{\sum(E) dE} \int_{E < H(\vec{x}) < E+dE} d\vec{x} O(\vec{x}) = \bar{O}_E = \bar{O}_T = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T O(\vec{x}(t)) dt$$

quantenmechanisch macht dies wenig sinn, stellt sich aber bei Betrachtung der Eigenschaft Thermalization Hypothesis (ETH) als näherungsweise sinnvoll heraus.

Die Größe $\sum(E) dE$ bezeichnet die Anzahl Zustandsdichte bei Energie $E < H(\vec{x}) < E+dE$. Wenn $\Omega(E)$ die Anzahl Zustände mit Energie $H(\vec{x}) < E$ bezeichnet, ist:

$$\Omega(E) = \int d\vec{x} \theta(E - H(\vec{x})) \rightarrow \sum(E) = \frac{d\Omega(E)}{dE} = \int d\vec{x} \delta(E - H(\vec{x}))$$

Die Gibbs-Verteilung für feste Energie (später: mikrokanonisches Ensemble) ist also sinnvoll gewählt als (im thermodyn. Gleichgewicht)

$$g(\vec{x})^{eq} = \frac{1}{\sum(E) dE}, \text{ für } E < H(\vec{x}) < E+dE; g(\vec{x})^{eq} = 0, \text{ sonst.}$$

Entropie (klassisch)

Die Entropie sei

$$S = -k_B \int g(\vec{x}) \ln(g(\vec{x})) d\vec{x}$$

für zwei unkorrelierte Systeme $g(\vec{x}) = g_A(x_A) \cdot g_B(x_B)$ ist dann

$$S = S_A + S_B$$

Für obige mikrokan. Gibbs-Verteilung folgt direkt

$$S = k_B \ln[\sum(E) dE] \approx k_B \ln[\Omega(E)]$$

Statistische Physik

Grundlagen

Maxwell-Boltzmann-Gas

Für freie Teilchen $H = \sum_i \frac{\vec{p}_i^2}{2m}$ kann mithilfe von

$$\Gamma(z) \equiv \int_0^\infty t^{z-1} e^{-t} dt \quad ; \quad N! \approx 2\pi N \left(\frac{N}{e}\right)^N, \quad \ln(N!) \approx N \ln(N/e)$$

Gamma-Funktion Stirling-Formel

die Entropie berechnet werden als (hier sei $\tilde{\Omega}(E) = \frac{1}{N!} \Omega(E)$ für id. Teilchen)

$$S(U, V, N) = k_B \ln(\tilde{\Omega}(E)) \approx k_B N \ln \left[\frac{V}{N} e^{5/2} \left(\frac{m U}{3\pi h^2 N} \right)^{3/2} \right] \quad S(\lambda U, \lambda V, \lambda N) = \lambda S(U, V, N)$$

wir erhalten hier klassische Ergebnisse

$$U = \frac{3}{2} N k_B T \quad ; \quad PV = N k_B T \quad ; \quad \mu = -k_B T \ln \left[\frac{V}{N} \left(\frac{m k_B T}{2\pi h^2} \right)^{3/2} \right]$$

jedoch ist $\lim_{T \rightarrow 0} S(T) \neq 0$ und $\lim_{T \rightarrow 0} c_V(T) \neq 0$

← Für die Berechnung in der Quantenmechanik wird aus der Gibbs-Verteilung eine Dichtematrix. Diese erfüllt analog zur Liouville-Gln. die von-Neumann-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = [\hat{H}, \hat{\rho}]$$

Nun können wir, je nach äußeren Gegebenheiten (festgehaltene Größen), verschiedene allgemeine Rechnungen anstellen:

Mikrokanonisches Ensemble

Halten wir die Energie fest, dann können wir, wie bereits beschrieben, ~~Ensemble~~ definieren mit

$$\hat{\rho} = \sum_n |\Psi_n\rangle W_n \langle \Psi_n|$$

wobei

$$W_n = \begin{cases} \frac{1}{\Omega(E)} & , E < E_n < E + dE \\ 0 & , \text{sonst.} \end{cases}$$

Quantenmechanische Entropie ist gegeben durch

$$S = -k_B \text{Tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}) = -k_B \sum_n W_n \ln W_n \quad ; \quad S = S_A + S_B$$

mikrokanonisch folgt:

$$S = k_B \ln[\Omega(E)].$$

Moderne Theoretische Physik

Statistische Physik

Grundlagen

Kanonisches Ensemble

Das System sei nun an ein großes System gekoppelt. Nur Wärmeaustausch sei erlaubt, kein Teilchenaustausch. Die Entropie soll nun für gegebene Energie $U = \langle E \rangle$ maximal sein ($\langle E \rangle = \sum_n W_n E_n$).

Mit der Lagrange'schen Multiplikationsregel folgt, dass S_L maximal sein muss mit:

$$S_L = -k_B \sum_n W_n \ln W_n - \lambda \left(\sum_n W_n - 1 \right) - \alpha \left(\sum_n W_n E_n - U \right); \frac{\partial S_L}{\partial W_n} = 0$$
$$\Rightarrow W_n \propto e^{-\frac{\alpha E_n}{k_B}} = e^{-\beta E_n}$$

mit Normierung folgt

$$W_n = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_n}; \quad Z = \sum_n e^{-\beta E_n} \quad (\text{Zustandssumme})$$

es gilt

$$S(\beta, V, N) = -k_B \sum_n W_n \ln W_n = -k_B \sum_n \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} [-\ln Z - \beta E_n] = k_B \ln Z + \beta U$$

$$U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z$$

mit $\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial U}$ folgt $\beta = \frac{1}{k_B T}$

$$\Rightarrow \text{Wkt } \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{H}}; \quad Z = \text{tr}(e^{-\beta \hat{H}})$$

$$F = U - TS = -k_B T \ln Z = F(T, V, N), \quad dF = -SdT - PdV + \mu dN$$

Alternativ kann Bad und System zusammen betrachtet werden. $E_{n,m} = E_n^S + E_m^B$, $E_n^S \ll E_m^B$
Zusammen bilden System & Bad ein mikrokanonisches System. Es gilt

$$W_{n,m} = \frac{1}{\Omega(E)} \quad \text{für } E < E_{n,m} < E + dE,$$

$$W_n = \sum_m W_{n,m} = \frac{\Omega^B(E - E_n)}{\Omega(E)}$$

Bad auch $\approx$ mikrokanonisch

$$\Rightarrow k_B \ln W_n = k_B \ln [\Omega^B(E - E_n)] - k_B \ln [\Omega(E)] \approx S^B(E) - \frac{\partial S^B}{\partial E} \cdot E_n - S = \text{const.} - \frac{E_n}{T}$$

$$\Rightarrow W_n \propto e^{-\frac{1}{k_B T} E_n}$$

$$\langle \Delta E \rangle^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = -\frac{\partial U}{\partial \beta} = k_B T^2 C_V \rightarrow \frac{\langle \Delta E \rangle^2}{\langle E \rangle} \propto \frac{1}{N} \rightarrow 0,$$

Statistische Physik

Grundlagen

Großkanonisches Ensemble

Nun sei ~~zu~~ Wärmeaustausch auch Teilchenaustausch mit dem Bad erlaubt. Wieder mit Lagrange-Multiplikatoren folgt:

$$W_n \propto e^{-\beta(E_n - \mu N_n)} ; W_n = \frac{1}{Z_G} e^{-\beta(E_n - \mu N_n)} ; Z_G = \sum_n e^{-\beta(E_n - \mu N_n)} = e^{-\beta \Omega}$$

dabei ist analog zu vorher $\beta = \frac{1}{k_B T}$, $\mu = \text{chem. Pot.}$
Es gilt $\Omega = F - \mu N = U - TS - \mu N$.

$$\Rightarrow \Omega = -k_B T \ln(Z_G) \quad (S \text{ ausschreiben}) \Leftrightarrow (U, N \text{ einsetzen})$$

Die alternative Herleitung funktioniert auch.

$$\frac{\Delta E}{\langle E \rangle} \propto \frac{1}{\sqrt{N}} \rightarrow 0 ; \frac{\Delta N}{\langle N \rangle} \propto \frac{1}{\sqrt{N}} \rightarrow 0 \quad (\text{alle Ensembles äquivalent im Limes})$$

Moderne Theoretische Physik

Statistische Physik

Maxwell-Boltzmann-Gas

Kanonisch ist für freie Teilchen (identische $\rightarrow 1/N!$)

$$Z = \frac{1}{N!} \sum_{\vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N} e^{-\beta \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m}} = \frac{1}{N!} \prod_{i=1}^N \sum_{\vec{p}_i} e^{-\beta \frac{\vec{p}_i^2}{2m}} = \frac{1}{N!} \left(\sum_{\vec{p}} e^{-\beta \frac{\vec{p}^2}{2m}} \right)^N = \frac{1}{N!} (Z_1)^N$$

1-Teilchen-Zustandssumme

mit 1-Teilchen-Zustandssumme

$$Z_1 = \sum_{\vec{p}} e^{-\beta \frac{\vec{p}^2}{2m}} = V \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\beta \frac{\vec{p}^2}{2m}} = \frac{V}{\lambda_T^3} ; \lambda_T = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{m k_B T}}$$

thermische (De Broglie) Wellenlänge

dies führt zu ca. denselben Ergebnissen wie im mikrokanonischen Fall.

Nur für $a = \frac{3}{4} \frac{V}{N} \gg \lambda_T$ ist das ganze eine gute Näherung

(Wasserstoff ja, Metall nein (100 K))

Großkanonisch funktioniert die Rechnung analog, wir erhalten $\mu(N)$ statt $\mu(N)$

$$Z_g(T, V, \mu) = \sum_n e^{-\beta(E_n - \mu N_n)} = \sum_N e^{\beta \mu N} \sum_j e^{-\beta E_j(N)} = \sum_N e^{\beta \mu N} Z(N) = \exp(Z_1 e^{\beta \mu})$$

$$\rightarrow \Omega = -k_B T e^{\beta \mu} \frac{V}{\lambda_T^3}, N = -\frac{\Omega}{k_B T}, S = -\frac{\Omega}{T} - \frac{\mu N}{T}, P = -\frac{\Omega}{V}$$

Quantengase

Nun ist $1/N!$ eine relativ schlechte Berücksichtigung identischer Teilchen. Stattdessen bezeichne λ einen Zustand, den ein Teilchen einnehmen kann (1-Teilchen Zustand). Für jeden Satz an Besetzungszahlen n_λ kann das System nur 1 Zustand einnehmen.

Für Bosonen ist

$$Z(N) = \sum_{\substack{n_\lambda \geq 0 \\ \sum n_\lambda = N}} e^{-\beta \sum n_\lambda \epsilon_\lambda}$$

$$Z_g(\mu) = \sum_{n_\lambda \geq 0} e^{-\beta \sum n_\lambda (\epsilon_\lambda - \mu)} = \prod_{\lambda} \sum_{n_\lambda=0}^{\infty} e^{-\beta n_\lambda (\epsilon_\lambda - \mu)} = \prod_{\lambda} Z_\lambda$$

Für $\mu < \epsilon_{\min}$ ist Z_λ als geom. Reihe

$$Z_\lambda = \sum_{n_\lambda=0}^{\infty} e^{-\beta n_\lambda (\epsilon_\lambda - \mu)} = \frac{1}{e^{-\beta (\epsilon_\lambda - \mu)} - 1}$$

die mittlere Besetzungszahl ist demnach

$$\langle n_\lambda \rangle = \sum_{n_\lambda=0}^{\infty} n_\lambda \frac{1}{Z_\lambda} = \frac{1}{Z_\lambda} \sum_{n_\lambda=0}^{\infty} n_\lambda e^{-\beta n_\lambda (\epsilon_\lambda - \mu)} = \frac{1}{e^{-\beta (\epsilon_\lambda - \mu)} - 1} = n_B(\epsilon_\lambda)$$

alternativ $\sum_{\lambda} \langle n_\lambda \rangle = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}$

dies ist die Bose-Funktion

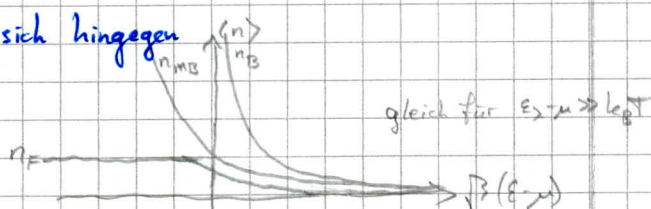
Für Fermionen ist nun

$$Z_g(\mu) = \prod_{\lambda} Z_\lambda ; Z_\lambda = \sum_{n_\lambda=0}^1 e^{-\beta n_\lambda (\epsilon_\lambda - \mu)} = 1 + e^{-\beta (\epsilon_\lambda - \mu)}$$

$$\langle n_\lambda \rangle = \sum_{n_\lambda=0}^1 n_\lambda \frac{1}{Z_\lambda} = \frac{1}{e^{\beta (\epsilon_\lambda - \mu)} + 1} = n_F(\epsilon_\lambda) \quad (\text{Fermi-Funktion})$$

Fürs Maxwell-Boltzmann-Gas ergibt sich hingegen

$$\langle n_\lambda \rangle = \frac{1}{e^{\beta (\epsilon_\lambda - \mu)} + 1}$$



Statistische Physik

Ideales Fermi-Gas

Für Fermionen mit Spin ist $\lambda = \{p, s_z\}$; $Z_g = \prod_{\lambda} Z_{\lambda}$; $Z_{\lambda} = 1 + e^{-\beta(\epsilon_{\lambda} - \mu)}$

$$\Rightarrow \Omega(T, V, \mu) = -k_B T \ln Z_g(T, V, \mu) = -k_B T \sum_{\lambda} \ln[1 + e^{-\beta(\epsilon_{\lambda} - \mu)}]; \langle N \rangle = \sum_{\lambda} \langle n_{\lambda} \rangle = \frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \Big|_{T, V}$$

meist rechnet man auch bei gegebenem Ω großkanonisch und invertiert dann zu $\mu(N)$

$$S = -\frac{\partial \Omega}{\partial T} \Big|_{V, \mu} = -k_B \sum_{\lambda} [\langle n_{\lambda} \rangle \ln \langle n_{\lambda} \rangle + (1 - \langle n_{\lambda} \rangle) \ln(1 - \langle n_{\lambda} \rangle)]; U = \Omega + TS + \mu N = \sum_{\lambda} \epsilon_{\lambda} n_{\lambda}(\epsilon_{\lambda}), P = -\frac{\Omega}{V}$$

Für $T=0$ ist $n_F(\epsilon_{\lambda}) = \theta(\mu - \epsilon_{\lambda})$. $\mu(T=0)$ ist die Fermi-Energie (höchste besetzte Energie) mit zugeh. Fermi-Impuls $p_F = p(\epsilon_F)$ & Fermi-Temperatur $T_F = \frac{\epsilon_F}{k_B}$.

$$\Omega(T, V, \mu) = \sum_{\lambda} (\epsilon_{\lambda} - \mu) \theta(\mu - \epsilon_{\lambda}); N = \sum_{\lambda} \theta(\mu - \epsilon_{\lambda}) = (2s+1) \int d\epsilon v(\epsilon) \theta(\mu - \epsilon)$$

mit Zustandsdichte $(\frac{d\lambda}{d\epsilon}) v(\epsilon) = \int \frac{d^d p}{(2\pi\hbar)^d} \delta(\epsilon - \epsilon_p)$. (pro Volumen, pro Spin) $v(\epsilon) = \frac{1}{(2s+1)V} \sum_{\lambda} \delta(\epsilon - \epsilon_{\lambda})$
Für $\epsilon = \frac{p^2}{2m}$ ist

$$v(\epsilon) = \frac{m^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \epsilon^{1/2}. \quad n = \frac{N}{V} = \frac{(2s+1)}{(2\pi\hbar)^3} \cdot \frac{4}{3} \pi p_F^3, \quad p_F = \sqrt{2m\epsilon_F}; \mu(T=0) = \epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{6s+2n}{2s+1} \right)^{2/3}$$

Für $T \ll T_F$ spricht man vom entarteten Fermi-Gas. Dort ist $n_F(\epsilon)$ ungefähr stufenförmig.

Sommerfeld-Theorie

Es ist

$$\Omega(T, V, \mu) = -k_B T (2s+1) V \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon v(\epsilon) \ln[1 + e^{-\beta(\epsilon - \mu)}]$$

mit zweifacher partieller Integration folgt: $(b''(\epsilon) = a'(\epsilon) = v(\epsilon))$

$$\Omega(T, V, \mu) = - (2s+1) V \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon b(\epsilon) (-n'_F(\epsilon)); -n'_F(\epsilon) = \left(4k_B T \cosh^2 \left(\frac{\epsilon - \mu}{2k_B T} \right) \right)^{-1}$$

$$\stackrel{\text{b um } \mu \text{ Taylorn}}{\approx} - (2s+1) V \left[b(\mu) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 v(\mu) + \dots \right]$$

$$\Omega(T, V, \mu) \approx (2s+1) V \left[a(\mu) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \frac{dv(\mu)}{d\mu} \right]$$

$$\Rightarrow n(T, \mu) = n(T=0, \mu) + (2s+1) \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \frac{dv(\mu)}{d\mu}$$

um nun zu $\mu(N)$ zu finden, bei konstantem n , benutze $n(T, \mu) = n(T=0, \mu(T=0)) = n(T=0, \epsilon_F)$

$$\Rightarrow \epsilon_F^{3/2} = \mu^{3/2} + \frac{\pi^2}{8\sqrt{\mu}} (k_B T)^2$$

$$\Rightarrow \mu = \epsilon_F \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{k_B T}{\epsilon_F} \right)^2 + \dots \right]$$

Weiter folgt direkt

$$S(T, V, \mu) = -\frac{\partial \Omega}{\partial T} \Big|_{V, \mu} = (2s+1) V \frac{\pi^2 v(\mu)}{3} k_B T$$

$$c_V = T \frac{\partial S}{\partial T} \Big|_{V, \mu} \approx N k_B \frac{\pi^2}{2} \frac{k_B T}{\epsilon_F} + O(T^3).$$

$$\left. \begin{array}{l} \lim_{T \rightarrow 0} S(T) = 0 \\ \lim_{T \rightarrow 0} c_V(T) = 0 \end{array} \right\}$$



Moderne Theoretische Physik

Statistische Physik

Ideales Fermi-Gas

Pauli-Paramagnetismus

Betrachte ein System mit Pauli-Hamiltonian, wobei wir alles mögliche ignorieren

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \mu_B \vec{B} \cdot \vec{\sigma}$$

Dann ist $\epsilon_\lambda = \epsilon_{\vec{p}} + \mu_B \vec{B} \cdot \vec{\sigma}$

$$\Omega(T, V, \mu) = -k_B T \sum_{\lambda} \ln[1 + e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu)}] = \Omega_0(T, V, \mu - \mu_B B) + \Omega_0(T, V, \mu + \mu_B B)$$

$$\Rightarrow -\frac{\partial \Omega}{\partial B} = -\mu_B (N_+ - N_-) = M \cdot V ; \mu = \chi B, \chi = 2\mu_B^2 \nu(\epsilon_F)$$

Fermi- vs. Bose-Gas bei hohen Temperaturen

Für hohe Temperaturen ($z \ll 1$) können wir Ω berechnen:

$$\Omega(T, V, \mu) = -k_B T (2s+1) \frac{V}{\lambda^3} \cdot \begin{cases} g_{5/2}(z) & \text{bei Bosonen} \\ f_{5/2}(z) & \text{bei Fermionen} \end{cases}$$

für kleine z ist hier:

$$\Omega(T, V, \mu) = -k_B T (2s+1) \frac{V}{\lambda^3} \left(z \pm \frac{z^2}{2^{5/2}} + \dots \right)$$

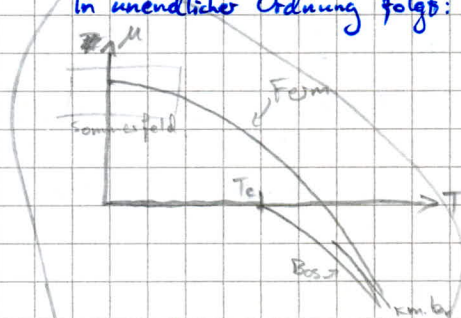
$$N(T, V, \mu) = (2s+1) \frac{V}{\lambda^3} \left(z \pm \frac{z^2}{2^{3/2}} + \dots \right)$$

In 1. Ordnung ist $z = \frac{N}{V} \cdot \frac{\lambda^3}{2s+1} \Rightarrow \mu \approx -\frac{3}{2} T \ln T$. Dies entspricht der Maxwell-Boltzmann-Lsg. In höherer Ordnung nehmen wir diese Lösung und setzen sie wieder ein.

$$\Rightarrow z = \frac{n \lambda_T^3}{2s+1} \left(1 \mp \frac{1}{2^{3/2}} \cdot \frac{n \lambda_T^3}{2s+1} + \dots \right)$$

$$\mu = \frac{1}{\beta} \ln z \approx k_B T \left[\ln \left(\frac{n \lambda_T^3}{2s+1} \right) \mp \frac{1}{2^{3/2}} \cdot \frac{n \lambda_T^3}{2s+1} \right]$$

dies entspricht einer Art Anziehung für Bosonen und Abstoßung für Fermionen. In unendlicher Ordnung folgt:



Auch ist

$$-\Omega = PV = k_B T N \left(1 \mp \frac{1}{2^{5/2}} \frac{n \lambda_T^3}{2s+1} \right)$$

Statistische Physik

Ideales Bose-Gas

Nun gilt:

$$Z_\lambda = \frac{1}{1 - e^{-\beta(E_\lambda - \mu)}} ; \mu < E_{\min}$$

sonst divergiert $Z_\lambda \Rightarrow$ unphysikalisch (Wkt. nicht normierbar)

$$\Omega(T, V, \mu) = k_B T \sum_\lambda \ln[1 - e^{-\beta(E_\lambda - \mu)}] ; \langle N \rangle = - \frac{\partial \Omega}{\partial \mu} = \sum_\lambda \langle n_\lambda \rangle$$

$$S_k = - \frac{\partial \Omega}{\partial T} \bigg|_{V, \mu} = - k_B \sum_\lambda [\langle n_\lambda \rangle \ln \langle n_\lambda \rangle - (1 + \langle n_\lambda \rangle) \ln(1 + \langle n_\lambda \rangle)]$$

$$U = \Omega + TS + \mu N = \sum_\lambda E_\lambda n_B(E_\lambda)$$

Bose-Einstein-Kondensation

Sei $z = e^{\beta\mu}$ die Fugazität. Dann ist

$$\Omega(T, V, \mu) = k_B T \sum_\lambda \ln[1 - z e^{-\beta E_\lambda}] ; N(T, V, \mu) = \sum_\lambda \frac{z e^{-\beta E_\lambda}}{1 - z e^{-\beta E_\lambda}}$$

$$\Rightarrow \Omega = k_B T (2s+1) V \int_0^\infty d\epsilon v(\epsilon) \ln[1 - z e^{-\beta \epsilon}] ; N = (2s+1) V \int_0^\infty d\epsilon v(\epsilon) n_B(\epsilon) ; n = (2s+1) \int_0^\infty d\epsilon v(\epsilon) n_B(\epsilon)$$

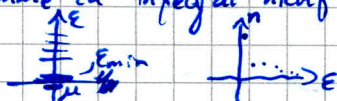
Ist T konstant, so kann n immer weiter erhöht werden. Dazu muss sich dann μ immer weiter erhöhen, damit das Integral in $n(T, V, \mu)$ die weiteren Teilchen unterbringen kann. Wenn der folgende Grenzwert $< \infty$ existiert, dann ist dies nicht möglich:

$$\lim_{\mu \rightarrow 0} \int_0^\infty d\epsilon v(\epsilon) n_B(\epsilon) = \int_0^\infty d\epsilon v(\epsilon) \cdot \frac{1}{e^{\beta \epsilon} - 1}$$

$$\Delta \epsilon \propto \left(\frac{2\pi\hbar}{L}\right)^2 \cdot \frac{1}{2m}, L \propto V^{1/3}$$

$$v(\epsilon) \propto \epsilon^{\frac{d}{2}-1} \rightarrow \frac{d}{2}-1 > 0 \text{ bed. } d > 2 : \text{ kond.}$$

Wir finden später $\mu \propto V^{-1}$, $\Delta \epsilon \propto V^{-2/3}$. Damit kann auch im thermodyn. Limes nicht umgangen werden, dass $\mu \ll \Delta \epsilon$ und somit der Schritt von Summe zu Integral nicht wohldefiniert ist



per Definition Integrand = 0 bei $\epsilon = 0$

wir ziehen den ersten Term also aus der Summe

$$\Omega = k_B T (2s+1) \ln[1 - z] + k_B T (2s+1) V \int_0^\infty d\epsilon v(\epsilon) \ln[1 - z e^{-\beta \epsilon}]$$

$$N = (2s+1) \frac{z}{1 - z} + (2s+1) V \int_0^\infty d\epsilon v(\epsilon) n_B(\epsilon) = - \frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \bigg|_{T, V}$$

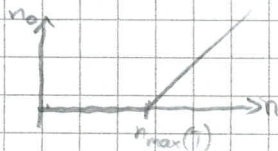
mit

$$N_0 = (2s+1) \frac{z}{1 - z} = (2s+1) \frac{1}{e^{\beta \mu} - 1} ; n_0 = \frac{(2s+1)}{V} \frac{z}{1 - z}$$

$$\Rightarrow n = n_0 + n_{\epsilon > 0}$$

Konvergiert das Integral nicht, so gibt es hier kein Problem mit maximalen Teilchenzahl dichten. Konvergiert es doch, dann ex. $\max[n_{\epsilon > 0}] = n_{\max}(T)$ für gegebene Temperatur mit $n_{\max}(T) = \lim_{\mu \rightarrow 0} n_{\epsilon > 0}$. Danach werden die weiteren Teilchen in n_0 untergebracht. Eigentlich ist $N_0 \neq 0$, aber im thermodyn. Limes ist vor Erreichen von $n_{\max}(T)$, $n_0 = 0$.

$$n_0(T) = \begin{cases} n - n_{\max}(T), & n > n_{\max}(T) \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$



$\rightarrow$ makroskopische Besetzung

Moderne Theoretische Physik

Statistische Physik

Ideales Bose-Gas

Bose-Einstein-Kondensation.

Stoff $T = \text{const.}$ sei nun $n = \text{const.}$ und T wird verändert. Sinkt T unter T_c , so sinkt $n_{\text{max}}(T)$ unter n und die restlichen Teilchen müssen im Kondensat untergebracht werden. Für nicht-rel. Bosonen in 3D ($\epsilon = \frac{p^2}{2m}$) ist:

$$\nu(\epsilon) = \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2} \epsilon^{1/2}; \quad n_{\text{max}}(T) = (2s+1) \int_0^\infty d\epsilon \frac{\nu(\epsilon)}{e^{\beta\epsilon} - 1} =: \gamma \cdot T^{3/2}$$

mit $n_{\text{max}}(T_c) = n$ folgt:

$$n = \gamma \cdot T_c^{3/2} \Rightarrow \frac{n_0}{n} = \frac{n_{\text{max}}(T)}{n} = \frac{\gamma(T_c^{3/2} - T^{3/2})}{\gamma T_c^{3/2}} \Rightarrow \frac{n_0(T)}{n} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}$$

n_0 ist dabei ein Ordnungsparameter des Phasenübergangs (= 0 auf einer Seite, $\neq 0$ auf der anderen). Nach Landau handelt es sich, da n_0 stetig, um einen Phasenübergang 2. Ordnung.

Für $T < T_c$ gilt:

$$n_0 = \frac{(2s+1)}{V} \frac{z}{1-z} \Rightarrow z \approx 1 - \frac{2s+1}{V n_0} \Rightarrow \mu \approx k_B T \ln(1-z) \approx -k_B T \frac{(2s+1)}{V n_0}$$

Wir wollen nun $\mu(T, V, n)$ finden, um in die kanonische Betrachtung über zu gehen

$$\Rightarrow \Omega(T, V, \mu) = k_B T (2s+1) \ln[1-z] - k_B T (2s+1) \frac{V}{\lambda^3} \cdot g_{5/2}(z)$$

$$\mu = (2s+1) \frac{z}{1-z} + (2s+1) \frac{V}{\lambda^3} \cdot g_{5/2}(z)$$

Weiter ist

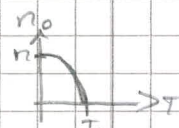
$$n_{\text{max}}(T_c) = (2s+1) \frac{g_{3/2}(1)}{\lambda_c^3} = n \Rightarrow \dots \Rightarrow 1 - 2\sqrt{\pi} \sqrt{1-z} \approx \left(\frac{T}{T_c}\right)^{-3/2} \Rightarrow \mu(T, V, n)$$

Die zweite Ableitung $\left. \frac{\partial^2 \Omega}{\partial T^2} \right|_{V, \mu}$ hat einen Sprung bei $T = T_c$.
 $\Rightarrow$ Phasenübergang (Nach Ehrenfest in 3. Ordnung, da $\frac{\partial^3 F}{\partial T^3}$ nicht stetig).

Wir können auch weitere Größen, wie P, S, U, c_v berechnen.

Im Grundzustand kann beim Bosegas aufgrund von Spin-Einfachheit eine Entropie $S \neq 0$ vorliegen. Aber nicht mehr im thermodyn. Gleichgewicht.

kritische Temp.



Eis $\rightarrow$ Wasser
 1. Ordnung

KERN-
 TIMES

Statistische Physik

Ideales Bose-Gas

Hohlraum-Strahlung

Photonen

Wir betrachten Bosonen mit $\epsilon_\lambda = \hbar k_\lambda$ (und Spin $\sigma = \pm 1$) im System. Wärmeaustausch mit der Umwelt findet statt. Obwohl ~~keine~~ Teilchenaustausch stattfindet, ist die Teilchenzahl im System durch Emission und Absorption nicht konstant. Durch Herleitung des W_λ wie im großkanonischen Fall finden wir, dass wir großkanonisch, aber mit $\mu = 0$ rechnen müssen. Dann folgt:

$$Z_g = \prod_\lambda Z_\lambda, \quad Z_\lambda = \sum_{n_\lambda=0}^{\infty} e^{-\beta n_\lambda \epsilon_\lambda} = \frac{1}{1 - e^{-\beta \epsilon_\lambda}}, \quad \langle n_\lambda \rangle = \frac{1}{e^{\beta \epsilon_\lambda} - 1}$$

$$\Omega = F - \mu N = F = -k_B T \ln Z_g = -k_B T \sum_\lambda \ln [1 - e^{-\beta \epsilon_\lambda}] = -V \frac{\pi^2}{45} \cdot \frac{(k_B T)^4}{(\hbar c)^3}$$

mit Strahlungsdruck

$$P = -\frac{\Omega}{V} = \frac{\pi^2}{45} \frac{(k_B T)^4}{(\hbar c)^3};$$

$$S = -\left. \frac{\partial F}{\partial T} \right|_V = -4 \frac{F}{T} = k_B V \frac{4\pi^2}{45} \frac{(k_B T)^3}{(\hbar c)^3}, \quad U = F + TS = 3F$$

Für Photonen ist dann

$$N_\omega d\omega = \langle n_\omega \rangle \cdot 2V \nu(\omega) \cdot d\omega = 2V \frac{4\pi\omega^2}{(2\pi c)^3} \cdot \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega} - 1}$$

mit $u(\omega, T) d\omega = \frac{1}{V} N_\omega \hbar \omega d\omega$ folgt das Plancksche Strahlungsgesetz

$$u(\omega, T) = \frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^3} \cdot \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega} - 1}$$

Für die in ein Raumwinkel $d\Omega$ abgestrahlte

Für die über eine Fläche S abgestrahlte Leistung gilt

$$\frac{dI(\theta)}{dS} = \sigma \cdot T^4 \quad (\text{Stefan-Boltzmann-Gesetz})$$

Moderne Theoretische Physik

Statistische Physik

Thermodynamik magnetischer Systeme

Für magnetische Systeme wählen wegen

$$\delta W = \vec{H} \cdot d\vec{M} \quad \delta W = -dU_{\text{Feld}} = -\int dV \frac{\vec{H} \cdot d\vec{B}}{4\pi} \quad \text{dann}$$

← eig. auch PdV aber meist wird nur eines betrachtet.

$$\Rightarrow dU = \delta Q - \delta W = TdS + \vec{H} \cdot d\vec{M}$$

$$\Rightarrow dF = dU - TdS - SdT = -SdT + \vec{H} \cdot d\vec{M}$$

$$\Rightarrow \vec{G} = F - \vec{H} \cdot \vec{M} \Rightarrow dG = -SdT - \vec{M} \cdot d\vec{H} \quad ; \quad \vec{M} = -\left. \frac{\partial G}{\partial \vec{H}} \right|_T$$

Da meist nur $\vec{H}_{\text{ext}}$ kontrollierbar ist, ist eher

$$\hat{H}_{\text{Hamiltonian}} = \hat{H}_U \quad \text{ohne Feld} \quad - \vec{H}_{\text{ext}} \cdot \vec{M}$$

$$U - \vec{H} \cdot \vec{M} = G$$

$$\Rightarrow G = -k_B T \ln Z \Rightarrow \vec{M} = -\left. \frac{\partial G}{\partial \vec{H}_{\text{ext}}} \right|_T$$

$$\text{tr} (e^{-\beta \hat{H}})$$

Prerequisites

- 1) Analytical Mechanics (Theo B)
- 2) Linear Algebra

Analytical Mechanics

$$S[\dot{q}(t)] = \int dt L(\dot{q}, \dot{q}, t) \text{ minimal for}$$

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = 0.$$

at the same time it holds

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}, \quad H = \sum_i p_i \dot{q}_i - L \Big|_{\dot{q} \rightarrow p}$$

$$S[q(t), p(t)] = \int dt \sum_i p_i \dot{q}_i - H(q, p) = \int dt \sum_i \left(\underbrace{\delta p_i}_{-\dot{q}_i} \dot{q}_i + p_i \underbrace{\delta \dot{q}_i}_{-\frac{\partial H}{\partial p_i}} - \frac{\partial H}{\partial q_i} \delta q_i \right)$$

for example for

$$L = \frac{1}{2} m \dot{q}^2 - \frac{1}{2} k q^2, \quad H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} k q^2 \quad (m=k=1) \rightarrow H = \frac{1}{2} (p^2 + q^2)$$

with

$$\begin{pmatrix} p' \\ q' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \vartheta & -\sin \vartheta \\ \sin \vartheta & \cos \vartheta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}. \quad \# \text{ stays constant.}$$

After a canonical transformation we have

$$\sum_i p_i \dot{q}_i - H(p, q) = \sum_i P_i \dot{Q}_i - \tilde{H}(P, Q) + \frac{d}{dt} F$$

where we have:

$$\dot{P}_i = -\frac{\partial \tilde{H}}{\partial Q_i}, \quad \dot{Q}_i = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial P_i}$$

Poisson-Brackets.

Let $f(p, q)$ be a function. Then

$$\frac{d}{dt} f(p(t), q(t)) = \frac{\partial f}{\partial p} \dot{p} + \frac{\partial f}{\partial q} \dot{q} = \left(\frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial q} + \frac{\partial f}{\partial q} \frac{\partial H}{\partial p} \right) = \{f, H\} = -\{H, f\}$$

then

$$\frac{d}{dt} f(p, q) = \{f, H\} \quad \text{if } f \text{ is the Hamiltonian}$$

We define

$$\{f, g\} \equiv \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial q_i} - \frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial p_i} \right)$$

where we find

$$\{q_i, f\} = \frac{\partial f}{\partial p_i}, \quad \{p_i, f\} = -\frac{\partial f}{\partial q_i}, \quad \{f, g_1 + g_2\} = \{f, g_1\} + \{f, g_2\}.$$

$$\{f, \{g, h\}\} + \{g, \{h, f\}\} + \{h, \{f, g\}\} = 0$$

The canonical quant. rule gives

$$\{f, H\} \rightarrow \frac{1}{i\hbar} [F, H], \quad \{q_i, q_j\} = 0 \rightarrow [\hat{q}_i, \hat{q}_j] = 0, \quad \{q_i, p_j\} = \delta_{ij} \rightarrow [\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij}$$

QM using Dirac-Notation

Orthonormal Basis

$\{|\varphi_n\rangle\}$ is a complete set ($n=1, \dots, \infty$)
 $|\varphi_n\rangle$ ket & $\langle\varphi_n| = [(|\varphi_n\rangle)]^\dagger \equiv \langle\varphi_n|$ bra

$\begin{cases} \langle\varphi_n|\varphi_m\rangle = \delta_{nm} : \text{orthonormality} \\ \sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = 1 : \text{completeness} \end{cases}$

$$|\varphi_{\bullet}\rangle = \begin{pmatrix} \varphi_{\bullet,1} \\ \vdots \\ \varphi_{\bullet,n} \end{pmatrix} \Rightarrow \langle \varphi_{\bullet}| = (\varphi_{\bullet,1}^*, \dots, \varphi_{\bullet,n}^*)$$

We can switch to different basis with orthonormal Matrices:

Consider the Matrix

$$M = (|\varphi_1\rangle | \dots | \varphi_n\rangle) \quad , \quad |\varphi_i\rangle = \begin{pmatrix} \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$$M^\dagger = (|\psi_1\rangle \dots |\psi_n\rangle)^\dagger = \begin{pmatrix} \langle \psi_1 | \\ \vdots \\ \langle \psi_n | \end{pmatrix}.$$

and

$$\mu^\dagger \mu = \begin{pmatrix} \langle \varphi_1 | \\ \vdots \\ \langle \varphi_n | \end{pmatrix} (|\varphi_1 \rangle | \dots | |\varphi_n \rangle) = \begin{pmatrix} \langle \varphi_1 | \varphi_1 \rangle & \langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle & \dots & \langle \varphi_1 | \varphi_n \rangle \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \langle \varphi_n | \varphi_1 \rangle & \dots & \dots & \langle \varphi_n | \varphi_n \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & 1 \end{pmatrix} = \mathbb{1}$$
$$u^t u u^t = u^t \Rightarrow \overset{u^{t+1}}{u^t} (\overset{u^{t+1}}{u u^t}) = u^t \Rightarrow u u^t = \mathbb{1}$$

$$\mu\mu^\dagger = \sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = \mathbb{1}$$

We can express a state $|\psi\rangle$ as follows

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cdot |e_n\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle\psi|\psi\rangle = \sum_n |a_n|^2 = 1$$

$\vec{V} = \sum_i v_i \vec{e}_i$
 $\rightarrow \langle \vec{e}_i | \vec{V} \rangle = v_i$

$$\vec{V} = \sum_i v_i \vec{e}_i$$

$$\rightarrow \langle \vec{e}_i | \vec{v} \rangle = v_i$$

Consider an Operator $\hat{O}$

$$\hat{O}|\varphi_n\rangle = \sum_m \underbrace{O_{mn}}_{\text{Matrix}} \cdot |\varphi_m\rangle \quad , \quad \sum_n \hat{O}|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = \sum_n \sum_m \underbrace{O_{mn}}_{\text{Vector}} |\varphi_m\rangle\langle\varphi_n|$$

$$\Rightarrow \hat{O} = \sum_{n,m} O_{mn} |\varphi_m\rangle\langle\varphi_n|$$

TheoD Saalübung

QM using Dirac-Notation
Operator.
Ex.

$$|\varphi_m\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \text{ at } m\text{th row} \\ \vdots \end{pmatrix}; \hat{O} = \begin{pmatrix} o_{11} & o_{12} & \dots & o_{1N} \\ \vdots & \ddots & & \vdots \\ o_{N1} & \dots & \dots & o_{NN} \end{pmatrix}, \hat{O}^+ = \begin{pmatrix} o_{11}^* & o_{12}^* & \dots & o_{1N}^* \\ \vdots & \ddots & & \vdots \\ o_{N1}^* & \dots & \dots & o_{NN}^* \end{pmatrix}$$

$$\hat{O}|\varphi_n\rangle = \sum_m o_{nm} |\varphi_m\rangle; \hat{O}^+ = \sum_{n,m} o_{nm}^* |\varphi_n\rangle \langle \varphi_m|$$

if follows $(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+ \hat{A}^+$

Expectation value & observable

Consider $|\psi\rangle$ & $\hat{O}$. Then $\langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle$ is a scalar quantity. For $\hat{O}$ to be a physical quantity it should be real:

$$\langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle^* = \langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle$$

this holds true when $\hat{O} = \hat{O}^+$ (hermitian condition), because

$$\langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle^* = \langle \psi | \hat{O}^+ | \psi \rangle = (\langle \psi |)^+ \hat{O}^+ (\langle \psi |)^+ = \langle \psi | \hat{O}^+ | \psi \rangle.$$

→ Eigenvectors & Eigenvalues

Let M be a square-matrix $M = (m_{ij})_{i,j=1}^N$. The Eigenequation $M\vec{v} = \lambda \cdot \vec{v}$ is ~~the same as~~

$$(M - \lambda \cdot \mathbb{1}) \cdot \vec{v} = 0 \Rightarrow \det(M - \mathbb{1} \cdot \lambda) = 0 \Rightarrow \lambda = \dots, \vec{v} = \dots$$

QM using Dirac-Notation

Expectation value & observable.

① If $\hat{O}$ is hermitian, then all Eigenvalues are real:

$$\langle \varphi_n | \hat{O} | \varphi_n \rangle = \lambda_n; \langle \varphi_n | \hat{O} | \varphi_n \rangle^* = \langle \varphi_n | \hat{O} | \varphi_n \rangle = \lambda_n = \lambda_n^*$$

if $\hat{O}$ is non-degenerate, $|\varphi_n\rangle$ & $|\varphi_m\rangle$ with $\lambda_n \neq \lambda_m$:

$$\begin{aligned} \langle \varphi_m | \hat{O} | \varphi_n \rangle &= \langle \varphi_m | \lambda_n | \varphi_n \rangle = \lambda_n \langle \varphi_m | \varphi_n \rangle \\ &= \langle \varphi_m | \lambda_m^* | \varphi_n \rangle = \langle \varphi_m | \lambda_m | \varphi_n \rangle = \lambda_m \langle \varphi_m | \varphi_n \rangle \end{aligned}$$

$$\Rightarrow (\lambda_m - \lambda_n) \langle \varphi_m | \varphi_n \rangle = 0 \Rightarrow \langle \varphi_m | \varphi_n \rangle = \delta_{nm}$$

Let $\hat{x}$ be an operator with $\hat{x}|\vec{x}_i\rangle = x_i |\vec{x}_i\rangle$, then
 $\langle \vec{x}_i | \vec{x}_j \rangle = \delta_{ij}; \sum_i |\vec{x}_i\rangle \langle \vec{x}_i| = \mathbb{1}_{N \times N}$

$$\hat{x} = \sum_i x_i |\vec{x}_i\rangle \langle \vec{x}_i|$$

we rewrite, for $a = \Delta x \neq$ difference (small) between Eigenvalues $\rightarrow 0$

$$\sum_i |\vec{x}_i\rangle \langle \vec{x}_i| = \int \frac{dx}{a} |x\rangle \langle x| = \int dx |\vec{x}\rangle \langle \vec{x}| = \mathbb{1}, |\vec{x}\rangle = \frac{1}{\sqrt{a}} |\vec{x}\rangle,$$

when $\langle \vec{x}_i | \vec{x}_j \rangle = \delta_{ij}$, then $\langle \vec{x}_i | \vec{x}_j \rangle = \delta(\vec{x}_i - \vec{x}_j)$

Theo D Saalübung

QM using Dirac-Notation

Discretization of space.

Consider the operator $\hat{p}$ with eigenvectors $|\vec{p}\rangle$ and eigenvalues p

$$\Rightarrow |\vec{p}\rangle = \int dx |\vec{x}\rangle \langle \vec{x} | \vec{p} \rangle ; \langle \vec{p} | 1 = \int dx \int dy \langle \vec{x} | \hat{p} | \vec{y} \rangle \langle \vec{y} |$$

With $[\vec{x}, \hat{p}] = i\hbar$, we get $\langle \phi | \psi \rangle$ bel.

$$\langle \phi | \hat{x} \hat{p} - \hat{p} \hat{x} | \psi \rangle = i\hbar \langle \phi | \psi \rangle$$

$$\Rightarrow \langle \phi | \int dx \int dy \langle \vec{x} | \hat{x} \hat{p} - \hat{p} \hat{x} | \vec{y} \rangle \langle \vec{y} | \psi \rangle = i\hbar \int dx \langle \phi | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | \psi \rangle$$

$$\Rightarrow \int dx \int dy (x-y) \langle \vec{x} | \hat{p} | \vec{y} \rangle \langle \phi | \vec{x} \rangle \langle \vec{y} | \psi \rangle = i\hbar \int dx \langle \phi | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | \psi \rangle$$

Let us guess $\langle \vec{x} | \hat{p} | \vec{y} \rangle = \frac{\hbar}{i} \partial_x \delta(x-y)$

$$\Rightarrow \int dx \int dy (x-y) \frac{\hbar}{i} \partial_x \delta(x-y) \langle \phi | \vec{x} \rangle \langle \vec{y} | \psi \rangle =$$

$$= \int dx \int dy \frac{\hbar}{i} [\cancel{\partial_x (x-y) \delta(x-y)} - \delta(x-y)] \langle \phi | \vec{x} \rangle \langle \vec{y} | \psi \rangle = i\hbar \int dx \langle \phi | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | \psi \rangle$$

In the discretization of space, $\langle \vec{x} | \hat{p} | \vec{y} \rangle = -i\hbar \partial_x \delta(x-y)$. With a bit of magic, this yields $\hat{p}$ is hermitian.

We also get

$$\langle \vec{x} | \hat{p} | \vec{p} \rangle = p \cdot \underbrace{\langle \vec{x} | \vec{p} \rangle}_{=: \tilde{p}_p(x)} = \int dx' \langle \vec{x} | \hat{p} | \vec{x}' \rangle \langle \vec{x}' | \vec{p} \rangle = \frac{\hbar}{i} \partial_x \langle \vec{x} | \vec{p} \rangle = \frac{\hbar}{i} \partial_x \tilde{p}_p(x)$$

$$\Rightarrow \langle \vec{x} | \vec{p} \rangle = c \cdot e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot x}$$

This is normalizable, when we confine x_i between 0 and L

Define 0 and L to be the same point (circular), then

$$|\vec{p}\rangle = \int dx \underbrace{\langle \vec{x} | \vec{p} \rangle}_{=: \tilde{p}_p(x)} \tilde{p}_p(x) , \tilde{p}_p \text{ is periodic } (\tilde{p}_p(x) = \tilde{p}_p(x+L))$$

then

$$1 = e^{\frac{i}{\hbar} p L} \Rightarrow p = n \cdot \frac{2\pi\hbar}{L} \text{ is discretized.}$$

We also now get

$$\langle p_n | p_m \rangle = \delta_{nm} ; \sum_n \langle p_n | \langle p_n | = 1, \int_0^L \frac{dp}{2\pi\hbar} |p_n\rangle \langle p_n| = 1 \text{ with } \Delta p = \frac{2\pi\hbar}{L}$$

define, as before,

$$|\vec{p}\rangle = \sqrt{L} \cdot |p\rangle . \langle \vec{p}_n | \vec{p}_m \rangle = L \delta_{nm} \cdot 2\pi\hbar$$

In total we have

$$\int dx |\vec{x}\rangle \langle \vec{x}| = 1 ; \langle \vec{x} | \vec{y} \rangle = \delta(x-y) ; \int \frac{dp}{2\pi\hbar} |p\rangle \langle p| = 1 ; \langle p_n | p_m \rangle = 2\pi\hbar \delta(p-p')$$

Suppose we have a Vector-space defined on the Lattice



periodic boundary: $N=0$

then for vectors $|x_i\rangle$ it holds:

$$\sum_{i=0}^N \langle x_i | x_i \rangle = 1 \quad ; \quad \langle x_i | x_j \rangle = \delta_{ij}$$

with similarly defined $|p_n\rangle$ we get:

$$\langle x_i | p_n \rangle \propto e^{i \frac{x_i p_n}{\hbar}} \equiv f_{p_n}(x_i) \Rightarrow f_{p_n}(x_{i=0}) = f_{p_n}(x_{i=N})$$

this is like a wave with $k_n = \frac{p_n}{\hbar}$, $\lambda = \frac{2\pi}{k_n} = \frac{2\pi\hbar}{p_n}$

The minimum wavelength on a wave in the given lattice is $\lambda = 2a$.
this yields:

$$|p_{\max}| = \frac{2\pi\hbar}{2a} = \hbar \cdot \frac{\pi}{a} \quad \begin{matrix} p_n = \frac{2n\pi\hbar}{L} \\ L = Na \end{matrix} \Rightarrow -\frac{N}{2} \leq n \leq \frac{N}{2}$$

if N is odd: $N = 2\alpha + 1$, $n = -\alpha, -\alpha+1, \dots, \alpha \rightarrow 2\alpha + 1 = N$ possible states
if N is even: $N = 2\alpha$, $n = -\alpha+1, \dots, \alpha \rightarrow 2\alpha = N$ possible states.

This yields the completeness in $|p_n\rangle$:

$$\sum_{n=1}^N |p_n\rangle \langle p_n| = 1 \quad ; \quad \langle p_i | p_j \rangle = \delta_{ij}$$

if we set $\langle x_i | p_n \rangle = c \cdot e^{i \frac{x_i p_n}{\hbar}}$, then $\langle p_n | x_i \rangle = \sum_{n=1}^N \langle x_i | p_n \rangle \langle p_n | x_i \rangle = \sum_{n=1}^N c^2 e^0 = N c^2$
 $\Rightarrow c = \frac{1}{\sqrt{N}}$

$$\langle x_i | p_n \rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i \frac{x_i p_n}{\hbar}}$$

we test

$$\langle p_n | p_m \rangle = \sum_j \langle p_n | x_j \rangle \langle x_j | p_m \rangle = \frac{1}{N} \sum_j e^{i \frac{x_j (p_m - p_n)}{\hbar}} = \delta_{nm} \quad ?$$

If we now say $a \rightarrow 0$, $L \rightarrow \infty$, $N = \frac{L}{a} \rightarrow \infty$, then

$$\sum_i |x_i\rangle \langle x_i| = 1 \rightarrow \int_0^L \frac{dx}{a} |x\rangle \langle x| = 1, \quad \sum_n |p_n\rangle \langle p_n| = 1 \rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} |p\rangle \langle p| = 1$$

set $|\bar{x}\rangle = \frac{1}{\sqrt{a}} |x\rangle$, $|\bar{p}\rangle = \sqrt{L} |p\rangle$, then we have

$$\int_0^L d\bar{x} |\bar{x}\rangle \langle \bar{x}| = 1, \quad \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{p}}{2\pi\hbar} |\bar{p}\rangle \langle \bar{p}| = 1 \quad ; \quad \langle \bar{x}_i | \bar{x}_j \rangle = \frac{1}{a} \delta_{ij}, \quad \langle \bar{x} | \bar{x}' \rangle = C_x \delta(x-x'), \\ \langle \bar{p}_i | \bar{p}_j \rangle = L \delta_{ij} ; \quad \langle \bar{p} | \bar{p}' \rangle = C_p \delta(p-p')$$

but what is C_p, C_x ?

$$\langle \bar{x} | \bar{p} \rangle = e^{i p x / \hbar} ; \quad \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{p}}{2\pi\hbar} |\bar{p}\rangle \langle \bar{p}| = 1$$

$$\Rightarrow \langle \bar{p}' | \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{p}}{2\pi\hbar} |\bar{p}\rangle \langle \bar{p} | \bar{p}' \rangle = C_p \delta(p'-p) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{p}}{2\pi\hbar} |C_p|^2 \delta(p'-p) \delta(p-p') \Rightarrow C_p = 2\pi\hbar$$

As $a \rightarrow 0$, $L \rightarrow \infty$, $N = \frac{L}{a} \rightarrow \infty$ we have:
For C_x we get (same calculation) $C_x = 1$.

In total, we have:

$$\int dx |x\rangle \langle x| = 1, \langle x|x'\rangle = \delta(x-x'), \int dp \frac{1}{2\pi\hbar} |p\rangle \langle p| = 1, \langle p|p'\rangle = 2\pi\hbar \delta(p-p'),$$

$$\langle x|p\rangle = \exp(i \frac{x p}{\hbar})$$

Similarity to Fourier-transformation.
Consider $f(x)$.

$$f(x) = \int \frac{dk}{2\pi} e^{ikx} \hat{f}(k) \quad ; \quad \hat{f}(k) = \int dx e^{-ikx} f(x).$$

then we get:

then we get:

$$\langle x | p \rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \langle x | p \rangle \langle p | f \rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{i\frac{xp}{\hbar}} \langle p | f \rangle \xrightarrow{p \rightarrow \hbar k} \int \frac{dk}{2\pi} e^{ikx} \langle k | f \rangle$$

$$\langle p | f \rangle = \int dx \langle p | x \rangle \langle x | f \rangle = \int dx e^{-ikx} \langle x | f \rangle$$

The Schrödinger-Equation in different Basis.
We know

$$\hat{H} |\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle, \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{x})$$

$$\Rightarrow \langle x | \hat{H} | \psi \rangle = \langle x | i \hbar \frac{\partial}{\partial t} | \psi \rangle$$

$$\Rightarrow \langle x | \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \right) \cdot \int dx' |x'\rangle \underbrace{\langle x' | \psi(t) \rangle}_{=\psi(x',t)} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle x | \psi(t) \rangle$$

$$\Rightarrow \left(\frac{p^2}{2m} + V(x) \right) \cdot \psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t)$$

Similarly, we can write

$$\langle p | \hat{H} | \psi \rangle = \langle p | i\hbar \frac{\partial}{\partial x} | \psi \rangle.$$

only with the V_{kin} term we get:

$$\begin{aligned} \langle p | \int dx V(x) | x \rangle \langle x | \psi(t) \rangle &= \langle p | \int dx V(x) | x \rangle \langle x | \int \frac{dp'}{2\pi\hbar} | p' \rangle \langle p' | \psi(t) \rangle \\ &= \int dx V(x) e^{-i\frac{px}{\hbar}} \int \frac{dp'}{2\pi\hbar} e^{i\frac{p'x}{\hbar}} \langle p' | \psi(t) \rangle \\ &= \int \frac{dp'}{2\pi\hbar} \underbrace{\left[\int dx V(x) e^{-i(p-p')\frac{x}{\hbar}} \right]}_{V(p-p'), \text{ Fourier-transf.}} \psi(p', t) = \int \frac{dp'}{2\pi\hbar} V(p-p') \psi(p', t) \end{aligned}$$

Measurement in Quantum Mechanics.

- Born rule.

Let $\hat{O}$ be observable and

$$\hat{O}|\vec{\varphi}_n\rangle = \sum_{n \in \mathbb{R}} \varphi_n |\vec{\varphi}_n\rangle \quad \text{with} \quad \langle \vec{\varphi}_n | \vec{\varphi}_m \rangle = \delta_{nm}; \quad \sum_n |\varphi_n|^2 = 1$$

The wavefunction

$$|\psi\rangle = \sum_n a_n |\vec{\varphi}_n\rangle$$

will collapse in a measurement to an Eigenstate $|\vec{\varphi}_n\rangle$ with the probability $p_n = |a_n|^2$

- Measurement of two commuting observables

Let $\hat{A}, \hat{B}$ commute. ~~then~~Assume $\hat{A}$ is non-degenerate,

$$\hat{A}|\vec{\alpha}_n\rangle = \alpha_n |\vec{\alpha}_n\rangle, \quad \alpha_n \neq \alpha_m \text{ for } n \neq m.$$

then

$$[\hat{A}, \hat{B}]a|\vec{\alpha}_n\rangle = \hat{A}\hat{B}|\vec{\alpha}_n\rangle - \hat{B}\hat{A}|\vec{\alpha}_n\rangle = \alpha_n \hat{B}|\vec{\alpha}_n\rangle - \hat{B}(\alpha_n |\vec{\alpha}_n\rangle) = 0$$

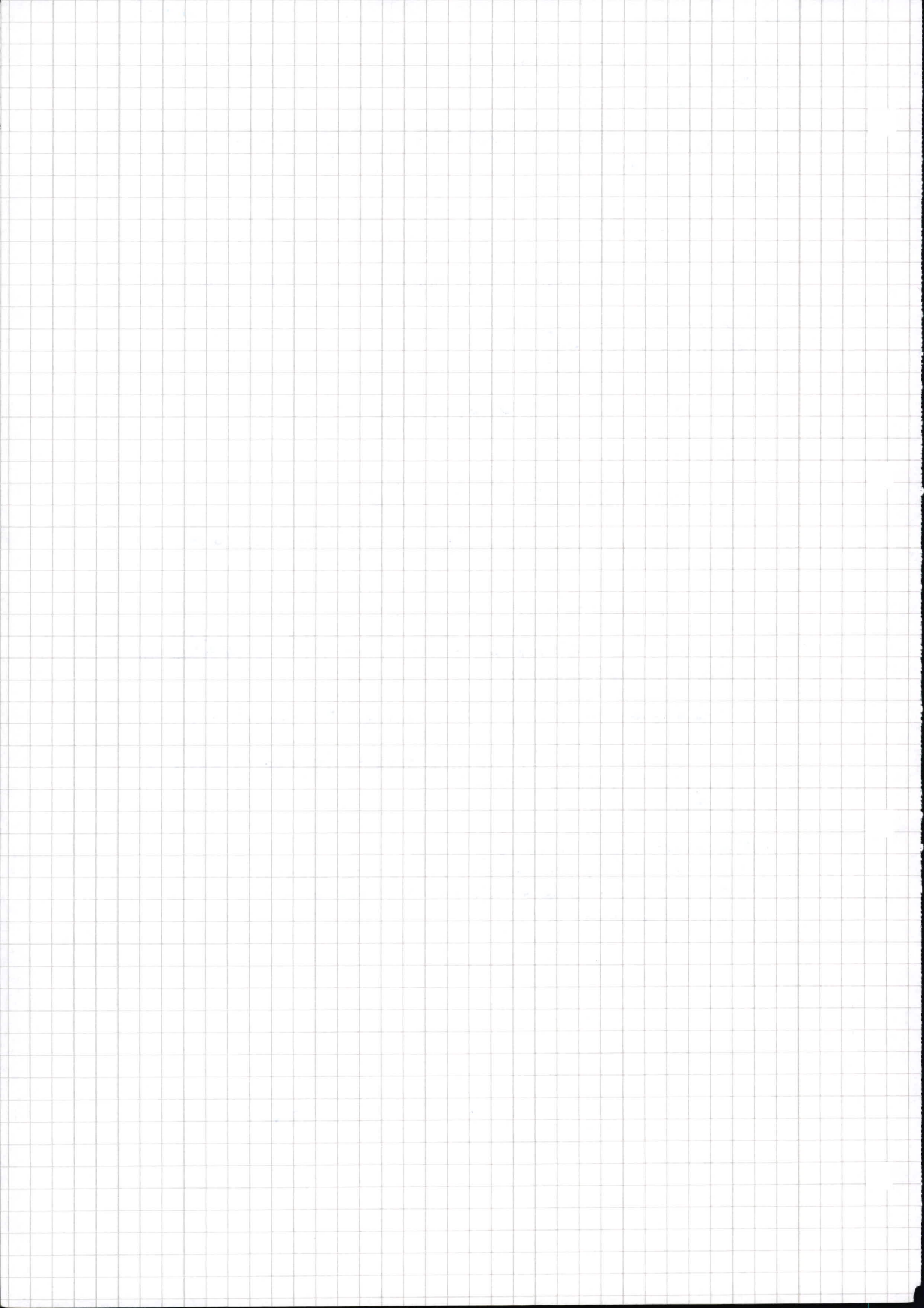
when $\hat{B}|\vec{\alpha}_n\rangle =: |\vec{\beta}_n\rangle$ then $\hat{A}|\vec{\beta}_n\rangle = \alpha_n |\vec{\beta}_n\rangle$. Then $|\vec{\beta}_n\rangle \propto |\vec{\alpha}_n\rangle$.
define

$$\hat{B}|\vec{\alpha}_n\rangle = b_n |\vec{\alpha}_n\rangle.$$

this means, that $|\vec{\alpha}_n\rangle$ are eigenvectors of $\hat{A}$ and $\hat{B}$ with possibly different ~~eigen~~ eigenvalues.~~the~~ $|\alpha_n, \beta_n\rangle$ is the combined eigenstate of $\hat{A}$ and $\hat{B}$.If we measure $\hat{A}$ and $\hat{B}$ simultaneously, then ψ collapses into an eigenstate of $\hat{A}$ and $\hat{B}$. This is the same eigenstate.
 ψ_n

- Measurement of two non-commuting observables.

There is no joint eigenstate $|\alpha_n, \beta_n\rangle$ here. Consider a wavefunction ψ .If we measure x to an ~~uncertainty~~ deviation of Δx then p , as a Fourier-transform of x , has a deviation of $\Delta p \geq \frac{\hbar}{2\Delta x}$.



1. Coupled harmonic oscillators.

Consider

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} + \frac{1}{2} k_1 \hat{x}_1^2 + \frac{1}{2} k_2 \hat{x}_2^2 + K \hat{x}_1 \hat{x}_2$$

we find two possible frequencies $\omega_1 = \sqrt{\frac{k_1}{m}}$, $\omega_2 = \sqrt{\frac{k_2}{m}}$.

Classically this ~~is~~ is equivalent to

$$m\ddot{x}_1 = -k_1 x_1 - K x_2, \quad m\ddot{x}_2 = -K x_1 - k_2 x_2$$

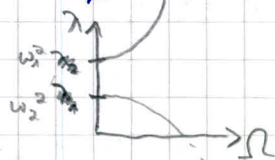
which is again equivalent to

$$\frac{d^2}{dt^2} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \omega_1^2 & \Omega^2 \\ \Omega^2 & \omega_2^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

if we diagonalize this matrix, we get:

$$\begin{vmatrix} \omega_1^2 - \lambda & \Omega^2 \\ \Omega^2 & \omega_2^2 - \lambda \end{vmatrix} = 0 = (\omega_1^2 - \lambda)(\omega_2^2 - \lambda) - \Omega^4 = 0 = \lambda^2 - (\omega_1^2 + \omega_2^2)\lambda + \omega_1^2 \omega_2^2 - \Omega^4$$

$$\Rightarrow \lambda_{1,2} = \frac{\omega_1^2 + \omega_2^2}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\omega_1^2 + \omega_2^2}{2}\right)^2 - \omega_1^2 \omega_2^2 + \Omega^4} = \frac{\omega_1^2 + \omega_2^2}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\omega_1^2 - \omega_2^2}{2}\right)^2 + \Omega^4}$$



when we reach $\omega_2^2 < 0$, $\omega_2 = i k \in \mathbb{I}$, we get $e^{\pm kt}$

In QM we can write

$$\frac{1}{m} \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \langle \hat{p}_1 \rangle \\ \langle \hat{p}_2 \rangle \end{pmatrix} = \underline{A} \begin{pmatrix} \langle \hat{x}_1 \rangle \\ \langle \hat{x}_2 \rangle \end{pmatrix}$$

now we use a canonical transformation which shall preserve $[x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}$

For this, define

$$\hat{x}_i = \sum_j U_{ij} \hat{x}_j, \quad \hat{p}_i = \sum_j V_{ij} \hat{p}_j$$

and we get

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = \sum_{kl} U_{ik} V_{jl} [\hat{x}_k, \hat{p}_l] = \sum_{kl} U_{ik} V_{jl} \cdot i\hbar \delta_{kl} \stackrel{!}{=} i\hbar \delta_{ij}$$

so we must have $UV^T = 1 \Rightarrow V = (U^{-1})^T$

As we have

$$H = \frac{1}{2m} \begin{pmatrix} \hat{p}_1 & \hat{p}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{p}_1 \\ \hat{p}_2 \end{pmatrix} + \frac{m}{2} \begin{pmatrix} \hat{x}_1 & \hat{x}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \omega_1^2 & \Omega^2 \\ \Omega^2 & \omega_2^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{x}_1 \\ \hat{x}_2 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} \hat{x}_1 \\ \hat{x}_2 \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} \hat{x}_1 \\ \hat{x}_2 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \hat{p}_1 \\ \hat{p}_2 \end{pmatrix} = (U^{-1})^T \begin{pmatrix} \hat{p}_1 \\ \hat{p}_2 \end{pmatrix}$$

with $\lambda_{1,2}$ we have

$$\begin{pmatrix} \omega_1^2 & \Omega^2 \\ \Omega^2 & \omega_2^2 \end{pmatrix} \cdot V_{1,2} = \lambda_{1,2} V_{1,2}$$

Theo D Saalübung

1. Coupled harmonic oscillator QM.

Now we have

$$\textcircled{*} \begin{pmatrix} \omega_1^2 & \Omega^2 \\ \Omega^2 & \omega_2^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{v}_1 \\ \vec{v}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{v}_1 \\ \vec{v}_2 \end{pmatrix} \overset{=M}{\left(\begin{matrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{matrix} \right)}, \quad \vec{v}_i \cdot \vec{v}_j = \delta_{ij}$$

$$\Rightarrow M^{-1} = \begin{pmatrix} \vec{v}_1^T \\ \vec{v}_2^T \end{pmatrix}; \quad \text{because} \quad M^{-1}M = \begin{pmatrix} \vec{v}_1^T \\ \vec{v}_2^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{v}_1 \\ \vec{v}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad \checkmark$$

We can rewrite $\textcircled{*}$ as

$$\begin{pmatrix} \omega_1^2 & \Omega^2 \\ \Omega^2 & \omega_2^2 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} M^{-1}.$$

now we get

$$\hat{V} = \frac{1}{2} m \begin{pmatrix} \hat{x}_1 & \hat{x}_2 \end{pmatrix} M \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} M^{-1} \begin{pmatrix} \hat{x}_1 \\ \hat{x}_2 \end{pmatrix} = \frac{m}{2} \begin{pmatrix} \hat{X}_1 & \hat{X}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{X}_1 \\ \hat{X}_2 \end{pmatrix}$$

and we have diagonalised the $\hat{V}$ problem.

For a canonical transformation we have to transform p as well.

$$\hat{T} = \frac{1}{2m} \begin{pmatrix} \hat{p}_1 & \hat{p}_2 \end{pmatrix} \mathbb{1} \begin{pmatrix} \hat{p}_1 \\ \hat{p}_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2m} \begin{pmatrix} \hat{p}_1 & \hat{p}_2 \end{pmatrix} M M^{-1} \begin{pmatrix} \hat{P}_1 \\ \hat{P}_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2m} \begin{pmatrix} \hat{P}_1 & \hat{P}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{P}_1 \\ \hat{P}_2 \end{pmatrix}$$

so we are left with two decoupled harmonic oscillators

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}_1^2}{2m} + \frac{1}{2} m \lambda_1 \hat{X}_1^2 + \frac{\hat{P}_2^2}{2m} + \frac{1}{2} m \lambda_2 \hat{X}_2^2 = \hbar \Omega_1 (a_1^\dagger a_1 + \frac{1}{2}) + \hbar \Omega_2 (a_2^\dagger a_2 + \frac{1}{2})$$

where

$$a_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{X}_1}{\xi_1} + i \frac{\hat{P}_1}{\hbar \xi_1} \right); \quad \xi_1 = \sqrt{\frac{\hbar}{m \Omega_1}}, \quad \xi_2 = \sqrt{\frac{\hbar}{m \Omega_2}}$$

then we get

$$|M_1, M_2\rangle = \phi_{M_1, M_2} = \frac{(a_1^\dagger)^{M_1} (a_2^\dagger)^{M_2}}{\sqrt{M_1! M_2!}} |0, 0\rangle,$$

$$E_{M_1, M_2} = \hbar \Omega_1 (M_1 + \frac{1}{2}) + \hbar \Omega_2 (M_2 + \frac{1}{2})$$

2. Interpretation of wave functions

Consider

$$|\psi\rangle; |\phi\rangle := e^{i \frac{\hat{p} a}{\hbar}} |\psi\rangle \quad \text{What is } |\phi\rangle?$$

We know $\hat{p} = -i\hbar \partial_x$.

$$\phi(x) = \exp\left(i \frac{a}{\hbar} (-i\hbar \partial_x)\right) \psi(x) = \exp(a \partial_x) \psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^n}{n!} \partial_x^n \psi(x) = \psi(x+a)$$

$\hat{U} = e^{i \frac{\hat{p} a}{\hbar}}$ is the translation operator

Now consider the Schrödinger-equation.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$$

① Find $\hat{H} = \sum_n E_n |n\rangle \langle n|$

② Find $\exp(-\frac{i}{\hbar} t \hat{H}) = U(t)$.

then

$$\exp(-\frac{i}{\hbar} t \hat{H}) \psi(0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \hat{H}^n \psi(0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} \partial_x^n \psi(0) = \psi(t)$$

$e^{-\frac{i}{\hbar} t \hat{H}}$ is the time-translation operator.

Schrödinger eq. with stationary $\hat{H}$:
 $\partial_t^n \psi = (-\frac{i}{\hbar} \hat{H})^n \psi$

For harmonic oscillators with $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2})$, $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$, we have $\hat{U} = e^{-i\hat{H}t/\hbar}$

$$\begin{aligned} \exp(i\omega \hat{U}) |\psi\rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} e^{i\omega \hat{U}} |n\rangle \langle n| \psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(i\omega)^m}{m!} \hat{U}^m |n\rangle \langle n| \psi\rangle \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} e^{i\omega n} |n\rangle \langle n| \psi\rangle \end{aligned}$$

In general consider an operator $\hat{U}$ with $\hat{U}^\dagger = \hat{U}$ and $\hat{U}|\psi\rangle = |\psi'\rangle$
~~then for an operator $\hat{A}$ we have~~

$$\hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U} = \hat{A}', \text{ as } \langle \phi | \hat{A} | \psi' \rangle = \langle \phi | \hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U} | \psi \rangle = \langle \phi | \hat{A}' | \psi \rangle$$

~~Now consider~~

and for states $|\phi\rangle, |\psi\rangle$ and an operator $\hat{A}$ we have

$$\hat{U}|\psi\rangle = \underbrace{|\psi'\rangle}_{\text{new state}}, \quad \hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U} = \hat{A}'; \quad \langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \phi | \hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U} | \psi \rangle = \langle \phi | \hat{A}' | \psi \rangle.$$

Now consider

$$e^{i\omega \hat{U}} \hat{a} e^{-i\omega \hat{U}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\omega)^n}{n!} \hat{U}^n \hat{a} e^{-i\omega \hat{U}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\omega)^n}{n!} \hat{a} (1+\hat{U})^n e^{-i\omega \hat{U}} = \hat{a} e^{i\omega \hat{U}}$$

$\hat{U} \hat{a} = \hat{a} (1+\hat{U})$
 if $(\hat{U}, \hat{a})$ commute they do

analog: $e^{i\omega \hat{U}} \hat{a}^\dagger e^{-i\omega \hat{U}} = e^{-i\omega \hat{U}} \hat{a}^\dagger$

Theo D Saalübung

3. Calculating expectation values

Consider

$$\hat{H} = \hbar \omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \text{ and a state } |\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|n\rangle + |n+2\rangle)$$

How do we calculate $\langle \phi | \hat{x} | \phi \rangle = \langle \hat{x} \rangle$ without integrals? We know $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$, $\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{x}}{\xi} + i \frac{\hat{p}}{\xi} \right) ; \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{x}}{\xi} - i \frac{\hat{p}}{\xi} \right), \hat{a} + \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\hat{x}}{\xi}, \hat{x} = \xi \frac{\hat{a} + \hat{a}^\dagger}{\sqrt{2}}, \xi = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

now we get:

$$\langle \phi | \hat{x} | \phi \rangle = \frac{1}{2} (\langle n | + \langle n+2 |) \frac{\xi}{\sqrt{2}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) (|n\rangle + |n+2\rangle) = \frac{\xi}{2\sqrt{2}} (\langle n | \hat{a} | n+2 \rangle + \langle n | \hat{a}^\dagger | n+2 \rangle + \langle n+2 | \hat{a} | n \rangle + \langle n+2 | \hat{a}^\dagger | n \rangle)$$

= 0

the expectation value is zero, as $|\phi|^2$ is even.

consider

$$\begin{aligned} \langle \phi | \hat{x}^2 | \phi \rangle &= \frac{1}{2} \frac{\xi^2}{2} (\langle n | + \langle n+2 |) (\hat{a}^2 + \overbrace{\hat{a} \hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger \hat{a}}^{= 2\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1} + (\hat{a}^\dagger)^2) (|n\rangle + |n+2\rangle) \\ &= \frac{\xi^2}{4} (\langle n | \hat{a}^2 | n+2 \rangle + 2 \langle n | \hat{a}^\dagger \hat{a} | n \rangle + 2 \langle n | \hat{a} \hat{a}^\dagger | n+2 \rangle + \langle n+2 | \hat{a}^2 | n \rangle) \\ &= \frac{\xi^2}{4} \left(\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} + 2n + 2(n+2) + \sqrt{n+1} \sqrt{n+2} \right) = \frac{\xi^2}{2} (\sqrt{n+1} \sqrt{n+2} + 2n+2) \end{aligned}$$

1. Parity Operator.

The parity-operator has the following properties:

$$\hat{P}|x\rangle = |-x\rangle \quad ; \quad \langle x|\hat{P}^\dagger = \langle -x|$$

Symmetry-Operators

$\hat{A}$ is a symmetry-operator of a system with a hamiltonian $\hat{H}$ if

$$\hat{A}^{-1} \hat{H} \hat{A} = \hat{H} \quad \Leftrightarrow \quad \hat{A}^\dagger \hat{H} = \hat{H} \hat{A} \quad \Leftrightarrow \quad [\hat{H}, \hat{A}] = 0$$

Consider $\hat{H}|\phi\rangle = E|\phi\rangle$ with $|x\rangle \equiv \hat{A}|\phi\rangle$. Then

$$\hat{H}|x\rangle = \hat{H}\hat{A}|\phi\rangle = \hat{A}\hat{H}|\phi\rangle = \hat{A}E|\phi\rangle = E|x\rangle$$

symmetry operators preserve the Energy of a state

Wigner-Theorem:

Symmetry-operators preserve the scalar product & are unitary.

$$|\psi\rangle = \sum_n a_n |n\rangle, \quad \langle \hat{A}\phi | \hat{A}\psi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle \quad \Leftrightarrow \quad \langle \phi | \hat{A}^\dagger \hat{A} | \psi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle \Rightarrow \hat{A}^\dagger \hat{A} = 1 \Leftrightarrow \hat{A}^\dagger = \hat{A}^{-1}$$

The parity Operator has the following properties (parity is a symmetry-operator)

$$\hat{P}^2|x\rangle = \hat{P}|-x\rangle = |x\rangle \Rightarrow \hat{P}^2 = 1 \Rightarrow \hat{P}^{-1} = \hat{P} = \hat{P}^\dagger$$

with $\langle x|\psi\rangle = \psi(x)$ we get $\langle x|\hat{P}|\psi\rangle = \langle -x|\psi\rangle = \psi(-x)$

In the momentum-basis we get

$$\langle x|\hat{P}|\psi\rangle = -i\hbar \partial_x \langle x|\psi\rangle \rightarrow \langle \hat{p}|\hat{P}|\psi\rangle = \hat{p} \langle \hat{p}|\psi\rangle = p \cdot \psi(p).$$

with $\langle x, p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{px}{\hbar}}$ we get

$$\begin{aligned} \langle \hat{p}|\hat{P}|\psi\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle \hat{p}|x\rangle \langle x|\hat{P}|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} dx \int_{\mathbb{R}} dq \langle \hat{p}|x\rangle \langle x|\hat{P}|q\rangle \langle q|\psi\rangle \\ &= \int_{\mathbb{R}^2} dx dq \langle \hat{p}|x\rangle \langle -x|q\rangle \langle q|\psi\rangle \\ &= \int_{\mathbb{R}^2} dx dq \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-i\frac{px}{\hbar}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-i\frac{qx}{\hbar}} \tilde{\psi}(q) \\ \delta(k) &= \int_{\mathbb{R}} \frac{dx}{2\pi} e^{ikx} \rightarrow \int_{\mathbb{R}} \frac{dq}{\hbar} \delta\left(\frac{p+q}{\hbar}\right) \tilde{\psi}(q) = \int_{\mathbb{R}} dq \delta(p+q) \tilde{\psi}(q) = \psi(-p) = \langle \hat{p}|\psi \rangle \end{aligned}$$

the parity operator acts the same way in momentum space

1. Parity Operator

From $\hat{P}|x\rangle = |-x\rangle$ how do you prove $\hat{P}^{-1} \hat{x} \hat{P} = -\hat{x}$? Consider the spectral representation:
 When $\hat{A}^\dagger \hat{A} = \hat{A} \hat{A}^\dagger$ the spectral theorem applies and we know the special cases:

1. $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ (hermitian)
2. $\hat{A}^\dagger \hat{A} = 1 = \hat{A} \hat{A}^\dagger \Rightarrow \hat{A}^\dagger = \hat{A}^{-1}$ (unitary).

Here, $\hat{x}$ is hermitian and we can write it as

$$\hat{x} = \int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle x \langle x|$$

Then we get

$$\begin{aligned} \hat{P}^{-1} \hat{x} \hat{P} &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \hat{P}^{-1} |x\rangle x \langle x| \hat{P} = \int_{-\infty}^{\infty} dx |-x\rangle x \langle -x| \stackrel{\text{subst.}}{=} \int_{-\infty}^{\infty} (-dx') |x'\rangle (-x') \langle x'| \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle (-x) \langle x| = -\hat{x}. \end{aligned}$$

Consider a standard hamiltonian

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

then we know

$$\hat{P}^{-1} \hat{p} \hat{P} = -\hat{p}, \quad \hat{P}^{-1} \hat{x} \hat{P} = -\hat{x}.$$

When is $\hat{P}$ a symmetry operator?

$$\begin{aligned} \hat{P}^{-1} \hat{H} \hat{P} &\stackrel{!}{=} \hat{H} = \hat{P}^{-1} \frac{\hat{p}^2}{2m} \hat{P} + \hat{P}^{-1} V(\hat{x}) \hat{P} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{d^n V}{dx^n} \Big|_{x=0} \hat{P}^{-1} \hat{x}^n \hat{P} \\ &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{d^n V}{dx^n} \Big|_{x=0} (-\hat{x})^n = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(-\hat{x}) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \text{Parity is a symmetry operator} \Leftrightarrow V(\hat{x}) = V(-\hat{x})$$

When can one simultaneously diagonalize two hermitian operators

Consider $\hat{A}$ with Eigenstates & values as follows: ($\hat{A}$ hermitian)

$$\hat{A}|\phi_n\rangle = \alpha_n |\phi_n\rangle; \quad \hat{A} = \sum_n \alpha_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n|$$

Now consider $\hat{B}$ (hermitian) with

$$\hat{B}|\chi_n\rangle = \beta_n |\chi_n\rangle; \quad \hat{B} = \sum_n \beta_n |\chi_n\rangle \langle \chi_n|$$

We want $|\psi_n\rangle$ with

$$\hat{A}|\psi_n\rangle = \alpha_n |\psi_n\rangle, \quad \hat{B}|\psi_n\rangle = \beta_n |\psi_n\rangle$$

$$\begin{aligned} \Leftrightarrow \hat{A} \hat{B} |\psi_n\rangle &= \beta_n \hat{A} |\psi_n\rangle = \beta_n \alpha_n |\psi_n\rangle = \hat{B} \hat{A} |\psi_n\rangle \Leftrightarrow [\hat{B}, \hat{A}] = 0 \quad (\text{Criterion}) \\ &= \alpha_n \hat{B} |\psi_n\rangle \end{aligned}$$

$\Leftrightarrow \hat{B} |\psi_n\rangle$ is an Eigenvector of $\hat{A}$ with Eigenvalue α_n .

Assume all α_n are different. Then $\hat{B} |\psi_n\rangle = \beta_n |\psi_n\rangle$

$\Rightarrow \alpha_n$ have to be different and $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$.

1. Parity Operator

If we now know, that $\hat{P}^{-1} \hat{H} \hat{P} = \hat{H}$, then

$$\hat{H} |\phi_n\rangle = E |\phi_n\rangle \Rightarrow \hat{P} |\phi_n\rangle = S_n |\phi_n\rangle; \hat{P} = 1 \Rightarrow S_n = \pm 1$$

$\Rightarrow$ All solutions for $|\phi_n\rangle$ must be only even or only odd.

Parity Selection Rules

Consider

$\langle \chi | \hat{U} | \psi \rangle$. Assume $\chi, \psi, \hat{U}$ are definite under parity, i.e. ~~$\hat{P} \chi = S_\chi \chi$~~

definite means

$$\hat{P} |\psi\rangle = S_\psi |\psi\rangle; \hat{P} |\chi\rangle = S_\chi |\chi\rangle; \hat{P}^{-1} \hat{U} \hat{P} = S_U \hat{U}$$

Then we get

$$\langle \chi | \hat{U} | \psi \rangle = \langle \chi | \hat{P} \hat{P}^{-1} \hat{U} \hat{P} \hat{P}^{-1} | \psi \rangle = \langle \chi | S_\chi S_U \hat{U} S_\psi | \psi \rangle = S_\chi S_U S_\psi \langle \chi | \hat{U} | \psi \rangle$$

if $S_\chi S_U S_\psi = -1$ then $\langle \chi | \hat{U} | \psi \rangle = 0$.

Example:

Consider the harmonic oscillator $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}^2$; We have the Eigenstates/-values:

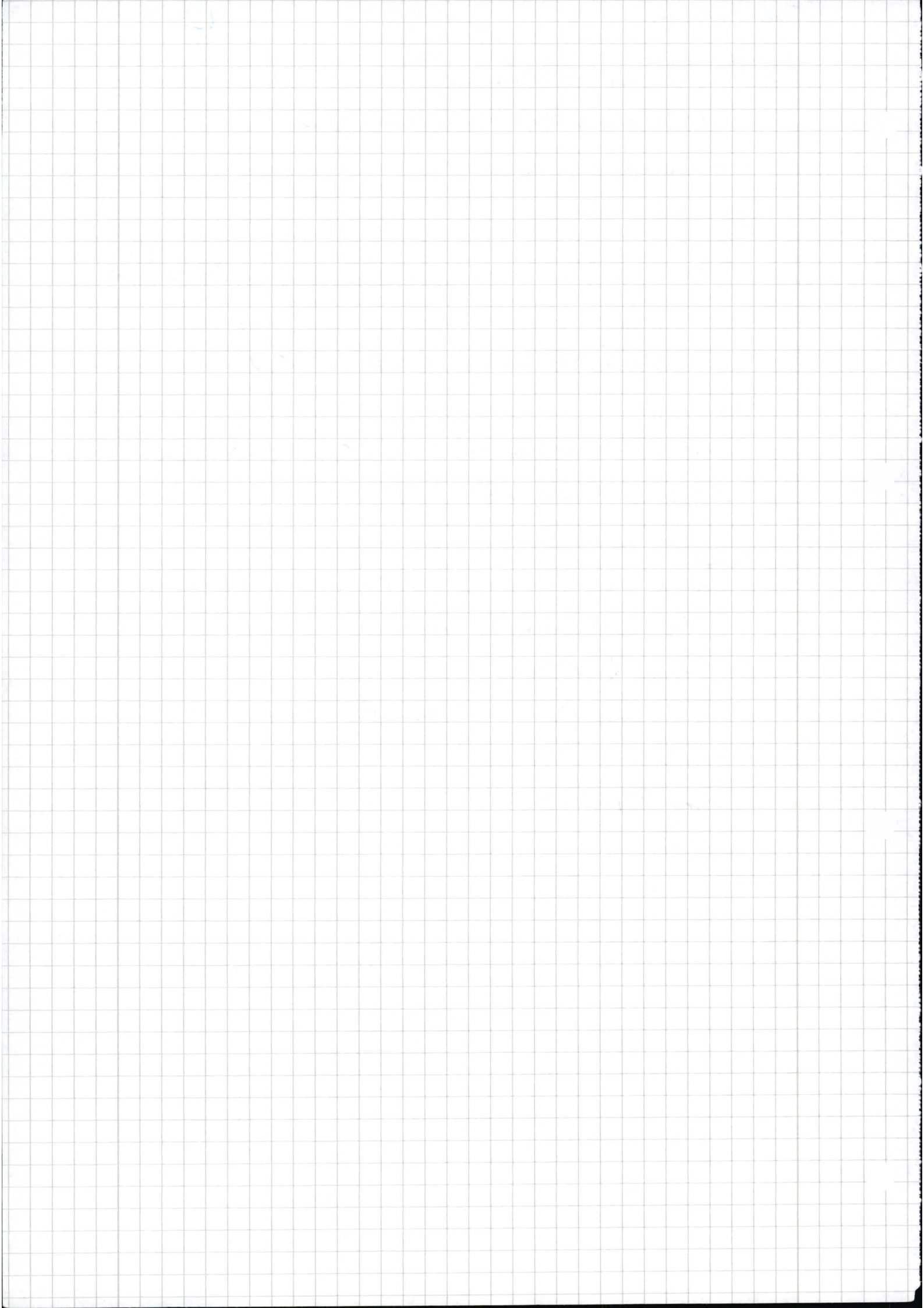
$$|n\rangle; E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}); \hat{P}|n\rangle = (-1)^n |n\rangle$$

evaluate $\langle n+1 | \hat{x}^2 | n \rangle$.

$$\text{Then we know: } \hat{P}|n+1\rangle = (-1)^{n+1} |n+1\rangle; \hat{P}^{-1} \hat{x}^2 \hat{P} = (-1)^2 \hat{x}^2; \hat{P}|n\rangle = (-1)^n |n\rangle$$

$$\Rightarrow S_{n+1} S_{x^2} S_n = (-1)^{n+1} \cdot (-1)^2 \cdot (-1)^n = -1$$

$$\Rightarrow \langle n+1 | \hat{x}^2 | n \rangle = 0.$$



1. Infinite well with delta-potential

Consider a particle of mass m in the potential

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0 \vee x > L \\ V_0 \delta(x-a), & x \in [0, L] \end{cases}$$

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



Now we try to solve $\hat{H}\psi = E\psi$.

Integrated over $[a-\epsilon, a+\epsilon]$ we get

$$\int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} -\frac{\hbar^2}{2m} dx \frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0 \cdot \psi(a) = E \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} dx \psi(x) \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} -\frac{\hbar^2}{2m} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} [\psi'(x)]_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} = -V_0 \psi(a)$$

→ If ψ' can be discontinuous, why does ψ have to be continuous?

Assume $\psi(x) = \psi_0 + \theta(x) \Rightarrow \psi'(x) = \delta(x)$. This is bad because $E_{kin} \propto \int dx (\psi'(x))^2 = \infty$

$$\int dx \delta(x) \delta(x) = \delta(0) = \infty$$

$\underbrace{\quad}_{=\psi(x)} \underbrace{\quad}_{=\delta(0)}$

we also get

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} (\psi(a+\epsilon) - \psi(a-\epsilon)) = 0.$$

using the borders at 0 and L we get for $x \neq a$: $\hat{H}\psi = E\psi$

$$\psi(x) = \begin{cases} \sin(kx), & x < a \wedge x \in [0, L] \\ A \cdot \sin(k(L-x)), & x > a \wedge x \in [0, L]. \end{cases}$$

$$\Rightarrow \psi'(x) = \begin{cases} k \cdot \cos(kx), & x \in (0, a) \\ -Ak \cos(k(L-x)), & x \in (a, L) \end{cases}$$

The found equations yield

$$\sin(ka) = A \sin(k(L-a)) \quad ; \quad -\frac{\hbar^2}{2m} (-Ak \cos(k(L-a)) - k \cos(ka)) = -V_0 \sin(ka)$$

with $k = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}$ we get:

$$A = \frac{\sin(ka)}{\sin(k(L-a))} \Rightarrow \frac{\sin(ka)}{\sin(k(L-a))} k \cos(k(L-a)) + k \cos(ka) + k \sin(ka) = 0$$

$$\cot(a-b) = \frac{\cot(a)\cot(b) + 1}{\cot a - \cot b}$$

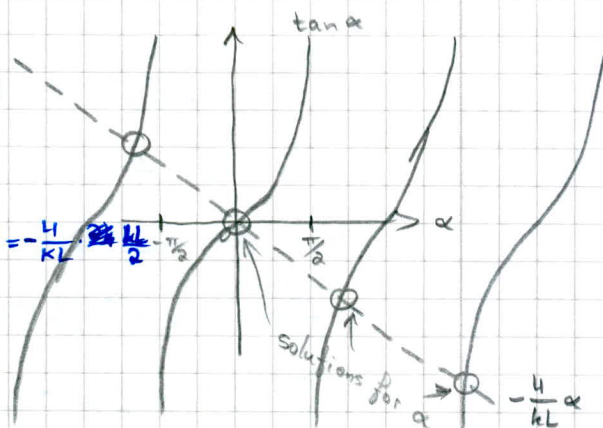
$$\Rightarrow k \cdot \cot(k(L-a)) + k \cdot \cot(ka) + \frac{k}{k} = 0$$

Consider the simplified problem $a = L/2$

$$\Rightarrow 2 \cot\left(\frac{kL}{2}\right) = -\frac{k}{k} \Rightarrow \tan\left(\frac{kL}{2}\right) = -\frac{2k}{k} = -\frac{4}{kL}$$

$$\alpha = \frac{kL}{2} \Rightarrow \tan(\alpha) = -\frac{4}{kL} \alpha$$

$$\text{for } k \rightarrow 0 \quad \alpha \rightarrow \frac{(2m+1)\pi}{2}$$



2. Angular momentum.

Consider the angular momentum

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} ; \quad \hat{L}_i = \sum_{j,k} \epsilon_{ijk} \hat{x}_j \hat{p}_k$$

we know

$$[L_i, L_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} L_k ; \quad L_{\pm} = L_x \pm iL_y ; \quad \hat{L}^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle ; \quad L_z |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle$$

and have derived

$$|l, m\rangle = f(\vartheta, \varphi).$$

Particle on a ring.

The wave function should be periodic:

$$\psi(\varphi + 2\pi) = \psi(\varphi)$$

$$\text{and } L_z \psi = \hbar m \psi, \text{ where } L_z = i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$L_z = x p_y - y p_x = -i\hbar (x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x})$$

$$\downarrow$$

$$= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$(x, y) \rightarrow (r, \varphi)$ with ~~$x = r \cos \varphi, y = r \sin \varphi$~~

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \varphi} \Big|_r &= \frac{\partial x}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial y} \\ &= r(-\sin \varphi) \frac{\partial}{\partial x} + r \cos \varphi \frac{\partial}{\partial y} \\ x &= r \cos \varphi, y = r \sin \varphi \end{aligned} \right.$$

we get:

$$\psi_m(\varphi) = e^{im\varphi}$$

for periodicity: $m \in \mathbb{Z}$

Particle on a sphere

we have

$$\hat{H} = \frac{\hat{L}^2}{2mR^2}, \quad \psi(\vartheta, \varphi)$$

we notice $[H, L_z] = 0$ so we can diagonalize $\hat{H}\psi = E\psi, L_z\psi = \hbar m\psi$ with

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) - \frac{\hbar^2}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

we solve the differential equations by separation:

$$\psi(\vartheta, \varphi) = A(\vartheta) \cdot B(\varphi) \Rightarrow B(\varphi) = e^{im\varphi}$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial A}{\partial \vartheta} \right) B(\varphi) - \frac{\hbar^2}{\sin^2 \vartheta} A \frac{\partial^2 B}{\partial \varphi^2} = \hbar^2 l(l+1) AB$$

$$\Rightarrow -\frac{\sin \vartheta}{A} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial A}{\partial \vartheta} \right) - \frac{1}{B} \frac{\partial^2 B}{\partial \varphi^2} = l(l+1) \sin^2 \vartheta$$

$$\stackrel{:= (m)^2}{\rightarrow} B(\varphi) = e^{im\varphi}$$

$$\Rightarrow -\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial A}{\partial \vartheta} \right) + \frac{m^2}{\sin^2 \vartheta} A = l(l+1) A \quad (*)$$

$$\begin{aligned} &\frac{\cos^2 \vartheta - \sin^2 \vartheta}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \cos \vartheta \right) + \frac{m^2}{\sin^2 \vartheta} = l(l+1) \sin^2 \vartheta \\ \Rightarrow &2 \sin^2 \vartheta - 1 + m^2 = l(l+1) \sin^2 \vartheta \\ \Rightarrow &m^2 - 1 = (l(l+1) - 2) \sin^2 \vartheta \end{aligned}$$

example solutions:

$$A=1, l=0, m=0 ; A=\cos \vartheta, m=0, l=1 ; A=\sin \vartheta, m=\pm 1, l=1$$

$$\begin{aligned} &-\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta (-\sin \vartheta) \right) + \frac{m^2}{\sin^2 \vartheta} \cos \vartheta = l(l+1) \cos \vartheta \\ \Rightarrow &2 + \frac{m^2}{\sin^2 \vartheta} = l(l+1) \end{aligned}$$

2. Angular momentum

We know now:

$$|1, \pm 1\rangle = e^{\pm i\varphi} \sin \vartheta; |1, 0\rangle = \cos \vartheta$$

with $L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$, $L_+ = \hbar e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$; $L_- = \hbar e^{-i\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$
 we should get:

$$L_z(L_+ \psi) = \hbar(m+1)(L_+ \psi) \quad \hat{L}_+ |1, 1\rangle = 0$$

$$\hbar e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) e^{i\varphi} \sin \vartheta = \hbar e^{i\varphi} (\cos \vartheta e^{i\varphi} - \cos \vartheta e^{i\varphi}) = 0$$

$\swarrow$ da $m=1=l=m_{\max}$

$$L_z(L_- \psi) = \hbar(m-1)(L_- \psi) \quad \hat{L}_- |1, 1\rangle \propto |1, 0\rangle$$

$$\hbar e^{-i\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) e^{i\varphi} \sin \vartheta = \hbar e^{-i\varphi} (-\cos \vartheta e^{i\varphi} - \cos \vartheta e^{i\varphi}) = -2\hbar \cos \vartheta$$

we also see that $L_+ \psi = 0$ when:

$$\hbar e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) A(\vartheta) e^{im\varphi} = \hbar e^{im\varphi} \left(A'(\vartheta) e^{im\varphi} - \frac{m}{\sin \vartheta} \cot \vartheta A(\vartheta) e^{im\varphi} \right) = 0$$

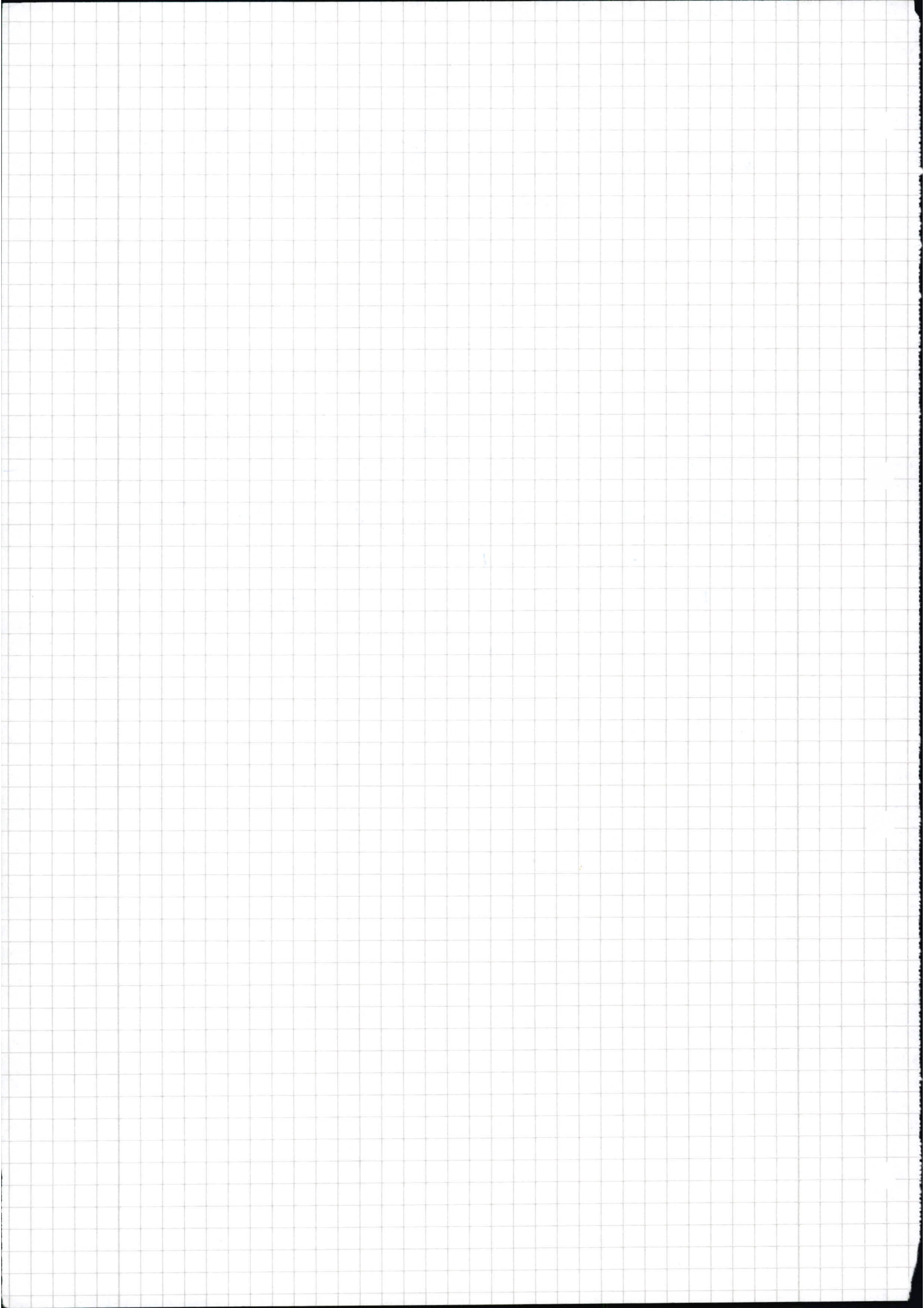
$$\Rightarrow A'(\vartheta) = m \cot \vartheta A(\vartheta) \Rightarrow \int \frac{dA}{A} = m \int \frac{\cos \vartheta}{\sin \vartheta} d\vartheta$$

$$\Rightarrow \log(A) = C + m \int \cot \vartheta d\vartheta = C + m \log(\sin \vartheta) \Rightarrow A(\vartheta) = (\sin \vartheta)^m \cdot e^C$$

plugged into * we get $m=l$.

$$\Rightarrow |l=m, m\rangle = (\sin \vartheta)^m \cdot e^{im\varphi}, \quad \hat{L}_- |l=m, m\rangle = \text{const.} \times |l=m, m-1\rangle$$

which is how we find all solutions.



Spin.

We have

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{S}_k; [\hat{S}^2, \hat{S}_j] = 0 \Rightarrow \hat{S}^2 |s, m\rangle = \hbar^2 s(s+1) |s, m\rangle, \\ \hat{S}_z |s, m\rangle = \hbar m |s, m\rangle$$

~~For example~~

We can write $\hat{S}_i$ as matrices instead of operators:

$$\hat{S}_i = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_i; \hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \Rightarrow s = \frac{1}{2}, m = \pm \frac{1}{2}.$$

We know the following properties:

$$\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j = \delta_{ij} \mathbb{1} + i \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} \hat{\sigma}_k, \vec{\sigma} = (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$$

$$e^{i\varphi \hat{A} \cdot \vec{\sigma}} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(i\varphi)^l}{l!} (\hat{A} \cdot \vec{\sigma})^l; (\vec{a} \cdot \vec{\sigma})(\vec{b} \cdot \vec{\sigma}) = \sum_j \delta_{jj} \mathbb{1} + \sum_k i \epsilon_{jkl} \sigma_k a_j b_l = (\vec{a} \cdot \vec{b}) \mathbb{1} + i(\vec{a} \times \vec{b}) \cdot \vec{\sigma}$$

From which follows

$$(\hat{A} \cdot \vec{\sigma})^l = \hat{A} \cdot \vec{\sigma} \cdot \mathbb{1} = \begin{cases} \mathbb{1}, & l \text{ even} \\ \hat{A} \cdot \vec{\sigma}, & l \text{ odd} \end{cases}$$

and we get:

$$e^{i\varphi \hat{A} \cdot \vec{\sigma}} = \mathbb{1} \cdot \cos \varphi + i(\hat{A} \cdot \vec{\sigma}) \sin \varphi$$

and

$$A = \hat{A} \cdot \vec{\sigma} = \begin{pmatrix} M_z & M_x - iM_y \\ M_x + iM_y & -M_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi e^{-i\varphi} \\ \sin \varphi e^{i\varphi} & -\cos \varphi \end{pmatrix} \cdot A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \rightarrow A \vec{v} = \lambda \vec{v}, \lambda = \pm 1$$

with eigenvalues $\lambda = \pm 1$ and eigenvectors $\vec{v}$ with:

$$(A - \lambda \mathbb{1}) \cdot \vec{v} = 0, \vec{v} = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} \Rightarrow (\cos \varphi - \lambda) v_1 + \sin \varphi e^{-i\varphi} v_2 = 0, \lambda = +1,$$

$$\Rightarrow (\cos \frac{\varphi}{2} - \sin^2 \frac{\varphi}{2} - \cos^2 \frac{\varphi}{2} - \sin^2 \frac{\varphi}{2}) v_1 + 2 \cos \frac{\varphi}{2} \sin \frac{\varphi}{2} e^{-i\varphi} v_2 = 0$$

$$\Rightarrow \sin \frac{\varphi}{2} v_1 - \cos \frac{\varphi}{2} e^{-i\varphi} v_2 = 0$$

$$\rightarrow \lambda = +1 \text{ for } \vec{v} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\varphi}{2} \\ e^{i\varphi} \sin \frac{\varphi}{2} \end{pmatrix} \equiv |\hat{A}, +\rangle; \lambda = -1 \text{ for } \vec{v} = \begin{pmatrix} \sin \frac{\varphi}{2} \\ -e^{i\varphi} \cos \frac{\varphi}{2} \end{pmatrix} \equiv |\hat{A}, -\rangle$$

special cases:

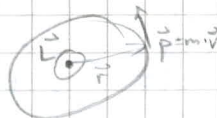
$$\hat{A} = \hat{z}: \hat{A} = \hat{\sigma}_z \rightarrow |\hat{z}, +\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; |\hat{z}, -\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix};$$

$$\hat{A} = \hat{x}: \hat{A} = \hat{\sigma}_x \rightarrow |\hat{x}, +\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}; |\hat{x}, -\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{A} = \hat{y}: \hat{A} = \hat{\sigma}_y \rightarrow |\hat{y}, +\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}; |\hat{y}, -\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$$

Angular Momentum:
We now consider

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}, \text{ mass } m, \text{ charge } q$$



the magnetic dipole moment is $|\vec{\mu}| = A \cdot I$

$$\vec{\mu} = \frac{1}{2} \oint d\vec{r} \vec{r} \times \vec{j}(\vec{r}) = \frac{1}{2} \vec{r} \times q \vec{v} = \frac{q}{m} \frac{1}{2} \vec{r} \times m \vec{v} = \frac{q}{2m} \vec{L}$$

for an electron we get $q = -e$

$$\mu_L = -\frac{e\hbar}{2m_e} \cdot \frac{\vec{L}}{\hbar}$$

With the definition of $\mu_B \equiv \frac{e\hbar}{2m_e} \sim 10^{-23} \text{ J/T}$ we get

$$\mu_L = -\mu_B \frac{\vec{L}}{\hbar} ; \mu_S = -2\mu_B \frac{\vec{S}}{\hbar}$$

electron electron

Problem 1.

Consider an electron in s-wave state $l=0, \vec{L} \rightarrow 0$.

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}_S + \vec{\mu}_L = \vec{\mu}_S$$

we get the Hamiltonian in an outer magnetic field:

$$\hat{H} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = 2\mu_B \frac{\vec{S}}{\hbar} \cdot \vec{B} = \frac{e}{m_e} \vec{S} \cdot \vec{B}$$

assume a static magnetic field $\vec{B} = B_0 \hat{m}$ and $\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$

$$\Rightarrow \hat{H} = \mu_B B_0 \hat{m} \cdot \vec{\sigma} \quad \leadsto \hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle$$

We know: $\hat{m} \cdot \vec{\sigma} |\hat{m}, \pm\rangle = \pm |\hat{m}, \pm\rangle$

$$\Rightarrow E_{\pm} = \pm \mu_B B_0 \quad \leadsto \hat{H} |\hat{m}, \pm\rangle = E_{\pm} |\hat{m}, \pm\rangle$$

Looking at time-dependency, we get:

$$|\psi(t=0)\rangle = \alpha_+ |\hat{m}, +\rangle + \alpha_- |\hat{m}, -\rangle ; |\psi(t)\rangle = e^{-i\frac{E_+}{\hbar}t} \alpha_+ |\hat{m}, +\rangle + e^{-i\frac{E_-}{\hbar}t} \alpha_- |\hat{m}, -\rangle$$

$$|\psi(t=0)\rangle = c_{\uparrow} |\hat{z}, +\rangle + c_{\downarrow} |\hat{z}, -\rangle = \begin{pmatrix} c_{\uparrow} \\ c_{\downarrow} \end{pmatrix}$$

$$\alpha_{\pm} = \langle \hat{m}, \pm | \psi(t=0) \rangle. \quad \alpha_+ = \cos \frac{\theta}{2} c_{\uparrow} + \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} c_{\downarrow}, \quad \alpha_- = \dots$$

in total, this yields

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{m=\pm} e^{-i\frac{E_m}{\hbar}t} \underbrace{|\hat{m}, m\rangle \langle \hat{m}, m|}_{2 \times 2 \text{-matrix}} \underbrace{|\psi(0)\rangle}_{2 \times 1 \text{-matrix}} =: U(t) |\psi(0)\rangle$$

with

$$U(t) = \sum_{m=\pm} e^{-i\frac{E_m}{\hbar}t} |\hat{m}, m\rangle \langle \hat{m}, m| = \exp\left(-i\frac{t}{\hbar} \hat{H}\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-it)^n}{n!} \hat{H}^n \cdot \frac{1}{\hbar^n}$$

$\hat{H} = \sum_{m=\pm} E_m |\hat{m}, m\rangle \langle \hat{m}, m|$

$$\Rightarrow U(t) = \exp\left(-i\frac{t}{\hbar} \mu_B B_0 \hat{m} \cdot \vec{\sigma}\right) = \cos\left(\frac{t \mu_B B_0}{\hbar}\right) 1 - i \sin\left(\frac{t \mu_B B_0}{\hbar}\right) \hat{m} \cdot \vec{\sigma}$$

RABI - PROBLEM

Now consider a time-dependent magnetic field:

$$\hat{H}(t) = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B} = \frac{e}{m_e} \vec{S} \cdot \vec{B}(t)$$

with

$$\vec{B}(t) = B_0 \hat{z} + B_1 (\cos \Omega t \hat{x} + \sin \Omega t \hat{y})$$

$$\text{and } \vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}, \quad \omega_0 \equiv \frac{e B_0}{m_e}, \quad \omega_1 \equiv \frac{e B_1}{m_e}$$

then the Hamiltonian is:

$$\hat{H} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1 e^{-i\Omega t} \\ \omega_1 e^{+i\Omega t} & -\omega_0 \end{pmatrix}$$

If $|\psi(t=0)\rangle = \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix}$, what is $|\psi(t)\rangle$? $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle$

$$\Rightarrow i\hbar \dot{c}_+(t) = \frac{\hbar \omega_0}{2} c_+(t) + \frac{\hbar \omega_1}{2} e^{-i\Omega t} c_-(t)$$

$$i\hbar \dot{c}_-(t) = \frac{\hbar \omega_1}{2} c_+(t) e^{+i\Omega t} - \frac{\hbar \omega_0}{2} c_-(t)$$

this can be rewritten as:

$$\begin{aligned} (i\hbar \partial_t + \frac{\hbar \omega_0}{2}) c_{\pm} &= \frac{\hbar \omega_1}{2} e^{\pm i\Omega t} c_{\mp} \quad | \cdot e^{\pm i\Omega t/2} \\ \Rightarrow e^{\pm i\Omega t/2} (i\hbar \partial_t + \frac{\hbar \omega_0}{2}) c_{\pm} &= \frac{\hbar \omega_1}{2} e^{\pm i\Omega t/2} c_{\mp} \\ \Rightarrow e^{\pm i\frac{\Omega}{2}t} (i\hbar \partial_t + \frac{\hbar \omega_0}{2}) e^{\mp i\frac{\Omega}{2}t} c_{\pm} &= \frac{\hbar \omega_1}{2} c_{\mp} \\ &= i\hbar \partial_t + i\hbar (\mp i\frac{\Omega}{2}) + \frac{\hbar \omega_0}{2} = i\hbar \partial_t + \frac{\hbar \tilde{\omega}_0}{2} \quad \text{with } \omega_0 \equiv \omega_0 - \Omega \\ \Rightarrow (i\hbar \partial_t + \frac{\hbar \tilde{\omega}_0}{2}) c_{\pm} &= \frac{\hbar \omega_1}{2} c_{\mp} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow i\hbar \partial_t \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \tilde{\omega}_0 & \omega_1 \\ \omega_1 & -\tilde{\omega}_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix}, \quad \tilde{\omega}_0 = \omega_0 - \Omega$$

this can be solved via eigenvalues & vectors.

Case of resonance ($\omega_0 = \Omega$)

For $B_1 = 0$, we got $E_{\pm} = \pm \frac{\hbar \omega_0}{2}$

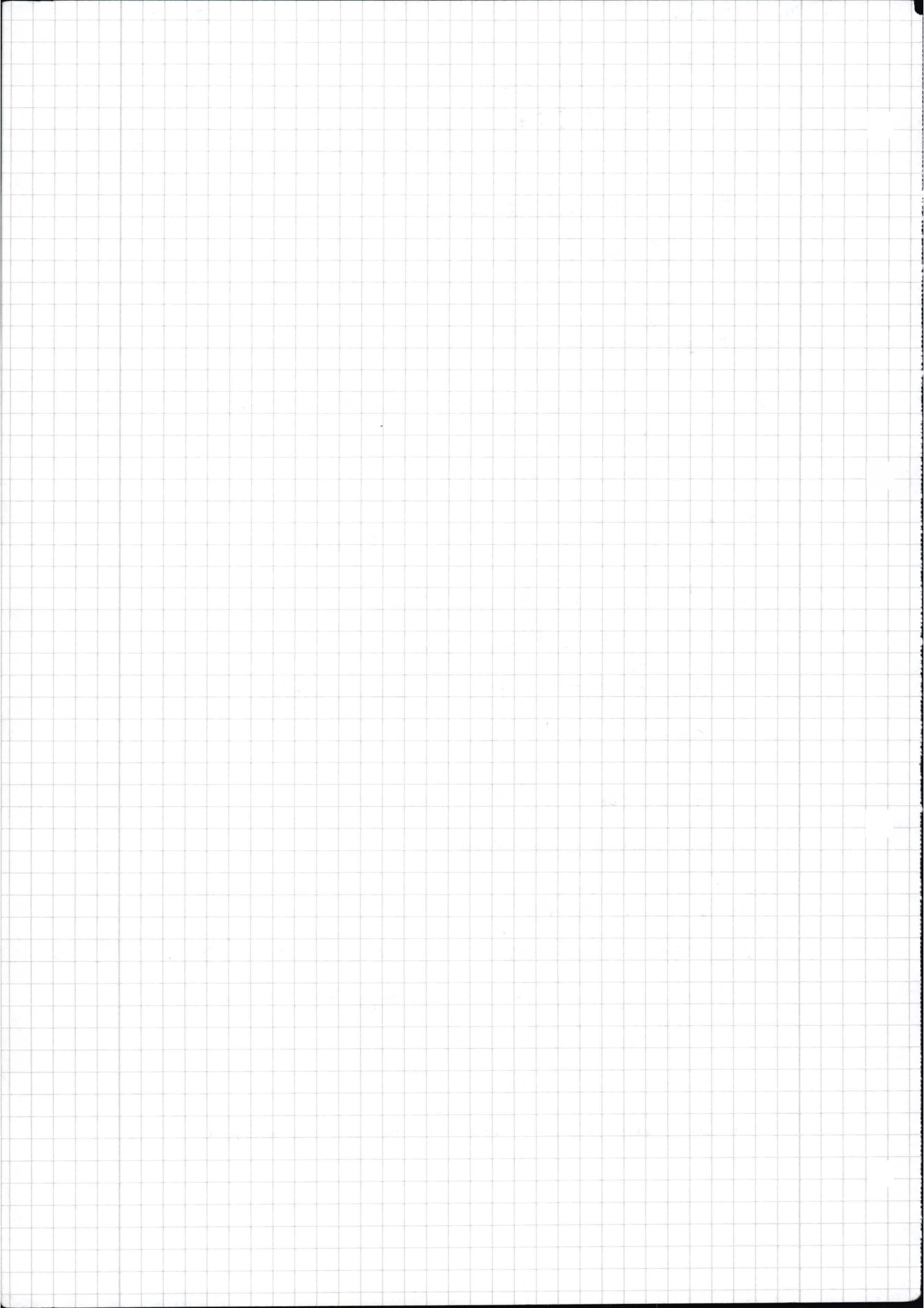
$$\text{Now, } \tilde{\omega}_0 = 0 \leadsto \hat{H} = \frac{\hbar \omega_1}{2} \sigma_x \Rightarrow U(t) = \exp(-\frac{it}{\hbar} \hat{H}) = \cos\left(\frac{\omega_1 t}{2}\right) 1 - i \sin\left(\frac{\omega_1 t}{2}\right) \sigma_x$$

With the starting values $c_+(t=0) = 1 = \alpha_+(t=0)$; $c_-(t=0) = 0 = \alpha_-(t=0)$, we get:

$$\begin{pmatrix} \alpha_+(t) \\ \alpha_-(t) \end{pmatrix} = U(t) \begin{pmatrix} \alpha_+(t=0) \\ \alpha_-(t=0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\omega_1 t}{2} \\ -i \sin \frac{\omega_1 t}{2} \end{pmatrix}$$

$$|\psi(t=0)\rangle = |\uparrow, \uparrow\rangle; \quad |\langle \uparrow, \downarrow | \psi(t) \rangle|^2 = \sin^2 \frac{\omega_1 t}{2}$$

So with a certain chance in resonance, the spin can be flipped.



Symmetry

General aspects of symmetry operators

Consider the symmetry operator

$$\hat{U}_g \Rightarrow \hat{U}_g |\psi\rangle = |\psi'\rangle \quad \text{changed state}$$

there are two classes of operators $\hat{U}_g$:

• discrete sym. op.: $\hat{T} |\psi(t)\rangle = |\psi(-t)\rangle$; $\hat{P} |\vec{x}\rangle = |-\vec{x}\rangle$;

$R_{60^\circ} |\vec{x}\rangle = |\vec{x} \text{ rotated by } 60^\circ\rangle$

• continuous sym. op.: $\hat{U}_g(\epsilon) |\psi\rangle = |\psi(\epsilon)\rangle$; $\hat{T}_\epsilon |x\rangle = |x+\epsilon\rangle$

$\hat{U}_g(\epsilon) \propto e^{-i\epsilon \hat{O}_g} \leftarrow \hat{O}_g$ generator of the given sym. operator.

Suppose we apply an operator:

$$\langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle \rightarrow \langle \tilde{\psi} | \hat{O} | \tilde{\psi} \rangle = \langle \psi | \hat{U}_g^\dagger \hat{O} \hat{U}_g | \psi \rangle \Leftrightarrow \hat{O} \rightarrow \hat{U}_g^\dagger \hat{O} \hat{U}_g$$

if the system is symmetric under some symmetry operation

$$\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \langle \tilde{\psi} | \hat{H} | \tilde{\psi} \rangle \Rightarrow \hat{H} = \hat{U}_g^\dagger \hat{H} \hat{U}_g \quad \text{usually } \hat{U}_g \hat{U}_g^\dagger = 1$$

this is equivalent to $\hat{U}_g \hat{H} = \hat{H} \hat{U}_g \Leftrightarrow [\hat{H}, \hat{U}_g] = 0$. The eigenstates of the ~~symmetry operator~~ Hamilton operator must be eigenstates of the symmetry operator.

For continuous symmetry operators

$$\hat{U}_g(\epsilon) \propto e^{-i\epsilon \hat{O}_g} \quad \hat{H} = \hat{U}_g^\dagger(\epsilon) \hat{H} \hat{U}_g(\epsilon) = e^{i\epsilon \hat{O}_g} \hat{H} e^{-i\epsilon \hat{O}_g}$$

(Hermitian)

for $\epsilon \ll 1$:

$$\hat{H} \approx (1 + i\epsilon \hat{O}_g) \hat{H} (1 - i\epsilon \hat{O}_g) = \hat{H} + i\epsilon [\hat{O}_g, \hat{H}] + \mathcal{O}(\epsilon^2)$$

the system is symmetric under continuous symmetry operation ~~if~~ if the generator $\hat{O}_g$ commutes with $\hat{H}$

Example 1. Translation operator

$$\hat{T}(\epsilon) |x\rangle := |x+\epsilon\rangle \Rightarrow \langle x | \hat{T}^\dagger(\epsilon) = \langle x+\epsilon| \Rightarrow \langle x | \hat{T}^\dagger(\epsilon) |\psi\rangle = \langle x+\epsilon | \psi \rangle = \psi(x+\epsilon)$$

Taylor: $\psi(x+\epsilon) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\epsilon^n}{n!} \frac{\partial^n \psi}{\partial x^n} \Big|_{x=x} = e^{\epsilon \frac{\partial}{\partial x}} \psi$

with completeness:

$$\psi(x+\epsilon) = \int dx' \langle x | \hat{T}^\dagger(\epsilon) | x' \rangle \langle x' | \psi \rangle = \int dx' \langle x | \hat{T}^\dagger(\epsilon) | x' \rangle \psi(x')$$

$$\Rightarrow \langle x | \hat{T}^\dagger(\epsilon) | x' \rangle = \delta(x-x') e^{\epsilon \frac{\partial}{\partial x}}$$

so we know $\hat{T}(\epsilon) = e^{\frac{i}{\hbar} \epsilon \hat{p}}$

Time translation.

$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} |\psi\rangle$ generator of time translation

Symmetry

Example 1. Translation

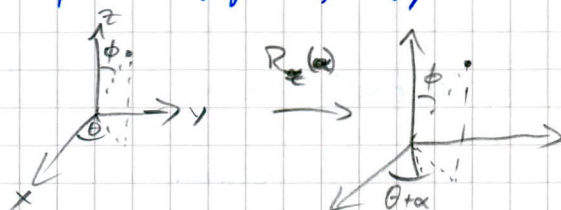
Consider

$$\hat{T}^\dagger(\epsilon) \hat{x} \hat{T}(\epsilon) = e^{i\epsilon \frac{\hat{p}}{\hbar}} \hat{x} e^{-i\epsilon \frac{\hat{p}}{\hbar}} = \hat{x} + i\epsilon \left[\frac{\hat{p}}{\hbar}, \hat{x} \right] = \hat{x} + \epsilon$$

$$\begin{aligned} \hat{T}^\dagger(\epsilon) \hat{x}^n \hat{T}(\epsilon) &= \hat{T}^\dagger(\epsilon) \hat{x} \hat{T}(\epsilon) \hat{T}^\dagger(\epsilon) \hat{x}^{n-1} \hat{T}(\epsilon) = \dots = (\hat{T}^\dagger(\epsilon) \hat{x} \hat{T}(\epsilon))^n = (\hat{x} + \epsilon)^n \\ &\approx \hat{T}^\dagger(\epsilon) f(\hat{x}) \hat{T}(\epsilon) = f(\hat{x} + \epsilon) \end{aligned}$$

in Taylor exp. of f .

Example 2. Rotational symmetry



$$(x, y, z) \mapsto (x \cos \alpha - y \sin \alpha, x \sin \alpha + y \cos \alpha, z)$$

$$\hat{R}_z(\alpha) |x, y, z\rangle = |x \cos \alpha - y \sin \alpha, x \sin \alpha + y \cos \alpha, z\rangle$$

$$\langle x, y, z | \hat{R}_z^\dagger(\alpha) | \psi \rangle = \langle x \cos \alpha - y \sin \alpha, x \sin \alpha + y \cos \alpha, z | \psi \rangle = \psi(x \cos \alpha - y \sin \alpha, x \sin \alpha + y \cos \alpha, z)$$

with $\alpha \ll 1$ we get:

$$\begin{aligned} \langle x, y, z | \hat{R}_z^\dagger(\alpha) | \psi \rangle &\approx \psi(x - y\alpha, x\alpha + y, z) = \psi(x, y, z) - \alpha y \frac{\partial \psi}{\partial x} + \alpha x \frac{\partial \psi}{\partial y} + O(\alpha^2) \\ &= \langle x, y, z | \psi \rangle - \alpha \langle x, y, z | \left(y \frac{i}{\hbar} \hat{p}_x - x \frac{i}{\hbar} \hat{p}_y \right) | \psi \rangle \end{aligned}$$

for small α :

$$\begin{aligned} \hat{R}_z^\dagger(\alpha) &\approx 1 - \frac{i}{\hbar} \alpha \left(y \hat{p}_x - x \hat{p}_y \right) = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \hat{L}_z} \\ \Rightarrow \hat{R}_z(\alpha) &\approx e^{\frac{i}{\hbar} \alpha \hat{L}_z} \end{aligned}$$

analogous we could find:

$$\hat{R}_x(\alpha) = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \hat{L}_x} ; \hat{R}_y(\alpha) = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \hat{L}_y} ; \hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$$

Review of angular momentum.

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}, \quad [\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{L}_k; \quad \hat{L}_{\pm} = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y, \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_{\pm}] = \pm \hbar \hat{L}_{\pm}$$

harmonic oscillator: $[\hat{H}, \hat{a}^{\dagger}] = \hbar \omega \hat{a}^{\dagger}, [\hat{H}, \hat{a}] = -\hbar \omega \hat{a}$

we can prove:

$$\hat{L}_+ |l, m\rangle \propto |l, m+1\rangle, \quad \hat{L}_- |l, m\rangle \propto |l, m-1\rangle$$

As $[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0$, $\hat{L}_z$ and $\hat{L}^2$ can have shared eigenstates:

$$|l, m\rangle; \quad \hat{L}^2 |l, m\rangle = l(l+1) \hbar^2 |l, m\rangle$$

define

$$\hat{L}_+ |l, m\rangle =: C_+(l, m) |l, m+1\rangle; \quad \hat{L}_- |l, m\rangle =: C_-(l, m) |l, m-1\rangle$$

$$\Rightarrow \langle l, m | \hat{L}^2 |l, m\rangle = m^2 \hbar^2 + \left\{ \frac{1}{2} \langle l, m | [\hat{L}_+, \hat{L}_-] + 2 \hat{L}_z |l, m\rangle \right\} = m^2 \hbar^2 + \left\{ m + |C_+(l, m)|^2 - m + |C_-(l, m)|^2 \right\} \hbar^2 = l(l+1) \hbar^2$$

$$\Rightarrow |C_+(l, m)|^2 = l(l+1) - m(m+1); \quad |C_-(l, m)|^2 = l(l+1) - m(m-1)$$

$$\Rightarrow m_{\max} = l; \quad m_{\min} = -l$$

Summary:

$$\hat{L}^2 |l, m\rangle = l(l+1) \hbar^2 |l, m\rangle; \quad \hat{L}_z |l, m\rangle = m \hbar |l, m\rangle; \quad \hat{L}_{\pm} = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y; \quad l = \left\{ \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots, 1, 2, \dots \right\}$$

$$\hat{L}_+ |l, m\rangle = \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} \hbar |l, m+1\rangle; \quad \hat{L}_- |l, m\rangle = \sqrt{l(l+1) - m(m-1)} \hbar |l, m-1\rangle; \quad -l \leq m \leq l$$

Addition of $\vec{L}$

Product of states.

consider ~~the~~ particles $|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes |\psi_3\rangle \dots$
with separable operators $\hat{O}_1 \otimes \hat{O}_2 \otimes \hat{O}_3 \dots$

$$\Rightarrow (\hat{O}_1 \otimes \hat{O}_2) (|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle) = (\hat{O}_1 |\psi_1\rangle) \otimes (\hat{O}_2 |\psi_2\rangle)$$

this can be interpreted as a kronecker-product:

$$|a\rangle \otimes |b\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} \\ a_2 \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} \\ \vdots \\ a_n \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} \end{pmatrix}; \quad \hat{A} \otimes \hat{B} = \begin{pmatrix} \hat{a}_{11} \hat{B} & \hat{a}_{12} \hat{B} & \dots & \hat{a}_{1n} \hat{B} \\ \hat{a}_{21} \hat{B} & \hat{a}_{22} \hat{B} & \dots & \hat{a}_{2n} \hat{B} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \hat{a}_{n1} \hat{B} & \hat{a}_{n2} \hat{B} & \dots & \hat{a}_{nn} \hat{B} \end{pmatrix}$$

$$(\hat{A} \otimes \hat{B}) (|a\rangle \otimes |b\rangle) = \begin{pmatrix} \hat{a}_{11} a_1 \hat{B} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} + \dots + \hat{a}_{1n} a_n \hat{B} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} \\ \vdots \\ \hat{a}_{n1} a_1 \hat{B} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} + \dots + \hat{a}_{nn} a_n \hat{B} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} \end{pmatrix}$$

Two angular momentums
consider

$$\hat{J} = \hat{L}_1 + \hat{L}_2 \stackrel{\text{formal}}{=} \hat{L}_1 \otimes 1_2 + 1_1 \otimes \hat{L}_2; \quad \hat{J} (|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle) = \hat{L}_1 |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle + |\psi_1\rangle \otimes \hat{L}_2 |\psi_2\rangle$$

$$\hat{J} (|l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle) = \begin{pmatrix} \hat{L}_1 |l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle \\ \vdots \\ |l_1, m_1\rangle \otimes \hat{L}_2 |l_2, m_2\rangle \end{pmatrix}$$

$\hat{J}$ behaves like $\hat{L}$ and now we are interested in the relations of

$$|j, m_j\rangle \leftarrow |l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle$$

we find

$$[\hat{J}^2, \hat{L}_z] = 0; \quad [\hat{J}_z, \hat{L}_{1z} \text{ or } \hat{L}_{2z}] = 0; \quad [\hat{J}^2, \hat{L}_{1z} \text{ or } \hat{L}_{2z}] \neq 0$$

so we should associate $|j, m_j\rangle \rightarrow |j, m_j; l_1, l_2\rangle$

Addition of $\vec{L}$
two angular momenta

The ansatz $|j_{\max}, m_j = j_{\max}\rangle = |l_1, m_1 = l_1\rangle \otimes |l_2, m_2 = l_2\rangle$ brings:

$$\hat{J}_+ |j_{\max}, j_{\max}\rangle = 0; \quad \hat{J}_z |j_{\max}, j_{\max}\rangle = j_{\max} |\dots\rangle = (l_1 + l_2) |\dots\rangle$$

$$\hat{J}_- |l_1 + l_2, l_1 + l_2\rangle = (\hat{L}_1 \otimes \hat{L}_2) |l_1, l_1\rangle \otimes |l_2, l_2\rangle$$

$$\Rightarrow \sqrt{(l_1 + l_2)(l_1 + l_2 - 1)} |l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 1\rangle \xrightarrow{\text{relation with Clebsch-Gordan.}} \\ = \sqrt{l_1(l_1 + 1) - l_1(l_1 - 1)} |l_1, l_1 - 1\rangle \otimes |l_2, l_2\rangle + \sqrt{l_2(l_2 + 1) - l_2(l_2 - 1)} |l_1, l_1\rangle \otimes |l_2, l_2 - 1\rangle$$

$$\leadsto \hat{J}_-^m |l_1 + l_2, l_1 + l_2\rangle = \sqrt{(l_1 + l_2 - m)(l_1 + l_2 + m + 1)} |l_1 + l_2, l_1 + l_2 - m\rangle$$

Spin.

Spin $\rightarrow$ new physical degree of freedom.

$$|\psi\rangle = \int dx |x\rangle \psi(x); |x\rangle \leadsto |x\rangle \otimes |s\rangle.$$

Spin = $1/2$ angular momentum

$$\text{As } [\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{S}_k:$$

$$\hat{S}^2 |s = 1/2, m\rangle = (1/2)(1/2 + 1)\hbar |s = 1/2, m\rangle.$$

$$|\uparrow\rangle_z = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; |\downarrow\rangle_z = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}; \quad \hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$|\psi\rangle = \int dx |x\rangle \langle x| \otimes (|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow|) |\psi\rangle = \int dx \sum_{\sigma} \psi_{\sigma}(x) |x\rangle \otimes |\sigma\rangle \\ = \int dx \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(x) \\ \psi_{\downarrow}(x) \end{pmatrix} |x\rangle.$$

Addition of spin:

$$\text{For } \vec{J} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2, \quad j_{\max} = 1, \quad j_{\min} = 0$$

$$\leadsto |1, 1\rangle = |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle, \quad |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle + |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle); \quad |1, -1\rangle = |\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle.$$

$$\leadsto |0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle)$$

~~Electrodynamics~~
Gauge symmetry

Classical Electrodynamics:

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}, \quad \vec{E} = -\vec{\nabla} \phi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$$

$\vec{B}$ (physically observable) $\vec{E}$ (physically observable)
 $\vec{A}$ (not physically observable) ϕ (not physically observable)

Gauge symmetry is a redundancy in describing $\vec{E}$ & $\vec{B}$

$$\vec{A}' = \vec{A} - \vec{\nabla} \chi, \quad \phi' = \phi + \frac{\partial \chi}{\partial t} \Rightarrow \vec{E}' = \vec{E}, \quad \vec{B}' = \vec{B}$$

any physical quantity must be invariant under ~~the~~ Gauge transformations $\Rightarrow$ Gauge symmetry.

The Schrödinger Equation ~~in electrostatics~~ ~~under a Gauge transformation~~ is:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \rightarrow \hat{H}_{A,\phi} = \frac{1}{2m} \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A}(\hat{x}) \right)^2 + V(\hat{x}) + e\phi$$

$$\hat{H}_{A,\phi} |\psi\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle$$

with the Gauge-Transformation $\vec{A} \rightarrow \vec{A} - \vec{\nabla} \chi, \quad \phi \rightarrow \phi + \frac{\partial \chi}{\partial t}$ we get:

$$\hat{H}_{A',\phi'} = \frac{1}{2m} \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A}' \right)^2 + V(\hat{x}) + e\phi'$$

what happens to the state? Consider

$$|\psi(t)\rangle \rightarrow |\psi'(t)\rangle = e^{-i\frac{e}{\hbar c} f(x,t)} |\psi(t)\rangle$$

then

$$\hat{p} |\psi'(t)\rangle = e^{-i\frac{e}{\hbar c} f(x,t)} \left(-\frac{e}{c} \vec{\nabla} f + \hat{p} \right) |\psi(t)\rangle$$

$$\hat{p}^2 |\psi'(t)\rangle = e^{-i\frac{e}{\hbar c} f(x,t)} \left(-\frac{e}{c} \vec{\nabla} f + \hat{p} \right)^2 |\psi(t)\rangle$$

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi'(t)\rangle = e^{-i\frac{e}{\hbar c} f(x,t)} \left(-i\frac{e}{\hbar c} \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t} \right) |\psi(t)\rangle$$

$$\hat{H}_{A',\phi'} |\psi'(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi'(t)\rangle$$

$$\Rightarrow e^{-i\frac{e}{\hbar c} f} \left[\frac{1}{2m} \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A}' - \frac{e}{c} \vec{\nabla} f \right)^2 + e\phi' \right] |\psi\rangle = i\hbar e^{-i\frac{e}{\hbar c} f} \left(-i\frac{e}{\hbar c} \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t} \right) |\psi\rangle$$

$$\stackrel{f=\chi}{\Rightarrow} \hat{H}_{A,\phi} |\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle, \quad \hat{H}_{A',\phi'} |\psi_{A',\phi'}\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_{A',\phi'}\rangle, \quad |\psi_{A',\phi'}\rangle = e^{-i\frac{e}{\hbar c} f} |\psi\rangle$$

so it is Gauge-invariant for a transformation in the wave function.

$$\hat{H}_{A,\phi} |\psi_{A,\phi}\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_{A,\phi}\rangle \Rightarrow \underbrace{e^{-i\frac{e}{\hbar c} \chi} \hat{H}_{A,\phi} e^{i\frac{e}{\hbar c} \chi}}_{\hat{H}_{A',\phi'}} \underbrace{e^{i\frac{e}{\hbar c} \chi} |\psi_{A,\phi}\rangle}_{|\psi_{A',\phi'}\rangle} = e^{-i\frac{e}{\hbar c} \chi} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{i\frac{e}{\hbar c} \chi} |\psi_{A,\phi}\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_{A',\phi'}\rangle$$

with

$$e^{-i\frac{e}{\hbar c} \chi} \hat{p} e^{i\frac{e}{\hbar c} \chi} = e^{-i\frac{e}{\hbar c} \chi} \left[e^{i\frac{e}{\hbar c} \chi} \left(\frac{\hbar}{i} \cdot \frac{1}{\hbar c} \vec{\nabla} \chi + \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \right) \right] = \frac{e}{c} \vec{\nabla} \chi + \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$$

which naturally yields the Gauge-transformations:

$$\vec{A} \rightarrow \vec{A}' = \vec{A} - \vec{\nabla} \chi; \quad \phi \rightarrow \phi' = \phi + \frac{\partial \chi}{\partial t}$$

AB effect

Suppose a magnetic field is applied perpendicular to the paper.

$$\vec{B} \odot \times \vec{x}$$

classically, the particle at $\vec{x}$ feels no Lorentz-force.

Quantum-mechanically, the particle cannot be stationary. Consider the Hamiltonian

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A})^2, \quad \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$$

$$\text{let } \hat{H}_0 = \frac{1}{2m} \hat{p}^2, \quad \hat{H}_0 |\psi_0\rangle = E |\psi_0\rangle.$$

$$\Rightarrow e^{-i\frac{e}{\hbar c} \vec{A} \cdot \vec{x}} \hat{H}_0 e^{i\frac{e}{\hbar c} \vec{A} \cdot \vec{x}} |\psi_0\rangle = e^{-i\frac{e}{\hbar c} \vec{A} \cdot \vec{x}} E |\psi_0\rangle$$

$$\Rightarrow e^{-i\frac{e}{\hbar c} \vec{A} \cdot \vec{x}} \hat{H}_0 e^{i\frac{e}{\hbar c} \vec{A} \cdot \vec{x}} = \frac{1}{2m} (\hat{p} + \frac{e}{c} \vec{\nabla} f) \Rightarrow \vec{A} = -\vec{\nabla} f \quad \vec{\nabla} \times \vec{\nabla} f = 0 \quad f = -\int \vec{dl} \cdot \vec{A} \Rightarrow |\psi\rangle = e^{+i\frac{e}{\hbar c} \int \vec{dl} \cdot \vec{A}} |\psi_0\rangle$$

it can be, for example $f(r, \theta) = \theta \Rightarrow \vec{\nabla} \times \vec{\nabla} f = \frac{2\pi}{r} \delta(r) \neq 0$

Density Matrix

Pure state

Suppose we have a wave function $|\psi\rangle = \sum_{\alpha} c_{\alpha} |\phi_{\alpha}\rangle, \quad \sum_{\alpha} |c_{\alpha}|^2 = 1$

then then

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle \langle \psi| = \sum_{\alpha, \beta} c_{\alpha} c_{\beta}^* |\phi_{\alpha}\rangle \langle \phi_{\beta}|$$

is the density matrix and

$$\text{Tr}[\hat{\rho}] = \sum_{\alpha} \langle \phi_{\alpha} | \psi \rangle \langle \psi | \phi_{\alpha} \rangle = \sum_{\alpha} |c_{\alpha}|^2 = 1; \quad \hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$$

$$\langle \hat{O} \rangle = \langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{O} | \phi_{\alpha} \rangle \langle \phi_{\alpha} | \psi \rangle = \sum_{\alpha} \langle \phi_{\alpha} | \psi \rangle \langle \psi | \hat{O} | \phi_{\alpha} \rangle = \sum_{\alpha} \langle \phi_{\alpha} | \hat{\rho} \hat{O} | \phi_{\alpha} \rangle = \text{Tr}[\hat{\rho} \hat{O}].$$

Mixed state

Let

$$\hat{\rho}_{\text{mix}} = \sum_i p_i \hat{\rho}_i, \quad \hat{\rho}_i = |\psi_i\rangle \langle \psi_i|, \quad \sum_i p_i = 1.$$

Here we can show

$$\langle \hat{O} \rangle = \sum_i p_i \langle \hat{O} \rangle_i = \sum_i p_i \text{Tr}[\hat{\rho}_i \hat{O}]; \quad \hat{\rho}_{\text{mix}}^2 \neq \hat{\rho}_{\text{mix}}$$

In the thermodynamic ensemble, the probability of observing a microscopic state with energy E is

$$P(E) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E(\Omega)}; \quad Z = \sum_{\{\Omega\}} e^{-\beta E(\Omega)}$$

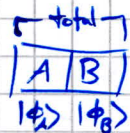
in the same way, here:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{H}}, \quad Z = \text{Tr}(\hat{\rho}); \quad \hat{\rho} = \frac{1}{Z} \sum_{\alpha} e^{-\beta E_{\alpha}} |\alpha\rangle \langle \alpha|$$

Density Matrix

Entanglement Entropy

This tells you how much two states are entangled.



$$\text{total} = A \cup B. \quad |\psi_{\text{tot}}\rangle = \sum_{\alpha, \beta} c_{\alpha\beta} |\phi_{A,\alpha}\rangle \otimes |\phi_{B,\beta}\rangle$$

then for the density matrix we get:

$$\hat{\rho}_{\text{tot}} = |\psi_{\text{tot}}\rangle \langle \psi_{\text{tot}}| = \sum_{\alpha, \alpha', \beta, \beta'} c_{\alpha\beta} c_{\alpha'\beta'}^* |\phi_{A,\alpha}\rangle \langle \phi_{A,\alpha'}| \otimes |\phi_{B,\beta}\rangle \langle \phi_{B,\beta'}|$$

$$\hat{\rho}_A = \text{Tr}_B(\hat{\rho}_{\text{tot}}) = \sum_{\beta} \langle \phi_{B,\beta} | \hat{\rho}_{\text{tot}} | \phi_{B,\beta} \rangle$$

$$\hat{\rho}_A = \sum_{\alpha, \alpha'} \left(\sum_{\beta} c_{\alpha\beta} c_{\alpha'\beta}^* \right) |\phi_{A,\alpha}\rangle \langle \phi_{A,\alpha'}|$$

the entanglement entropy is then

$$S_A = -\text{Tr}_A[\hat{\rho}_A \ln \hat{\rho}_A] = -\sum_{\lambda_A} \lambda_A \ln \lambda_A$$

where λ_A are the Eigenvalues of $\hat{\rho}_A$

Examples.

1) No entanglement. (spin)

$$|\psi_{\text{tot}}\rangle = |\uparrow_A\rangle \otimes |\uparrow_B\rangle$$

$$\hat{\rho}_{\text{tot}} = |\uparrow_A\rangle \langle \uparrow_A| \otimes |\uparrow_B\rangle \langle \uparrow_B|$$

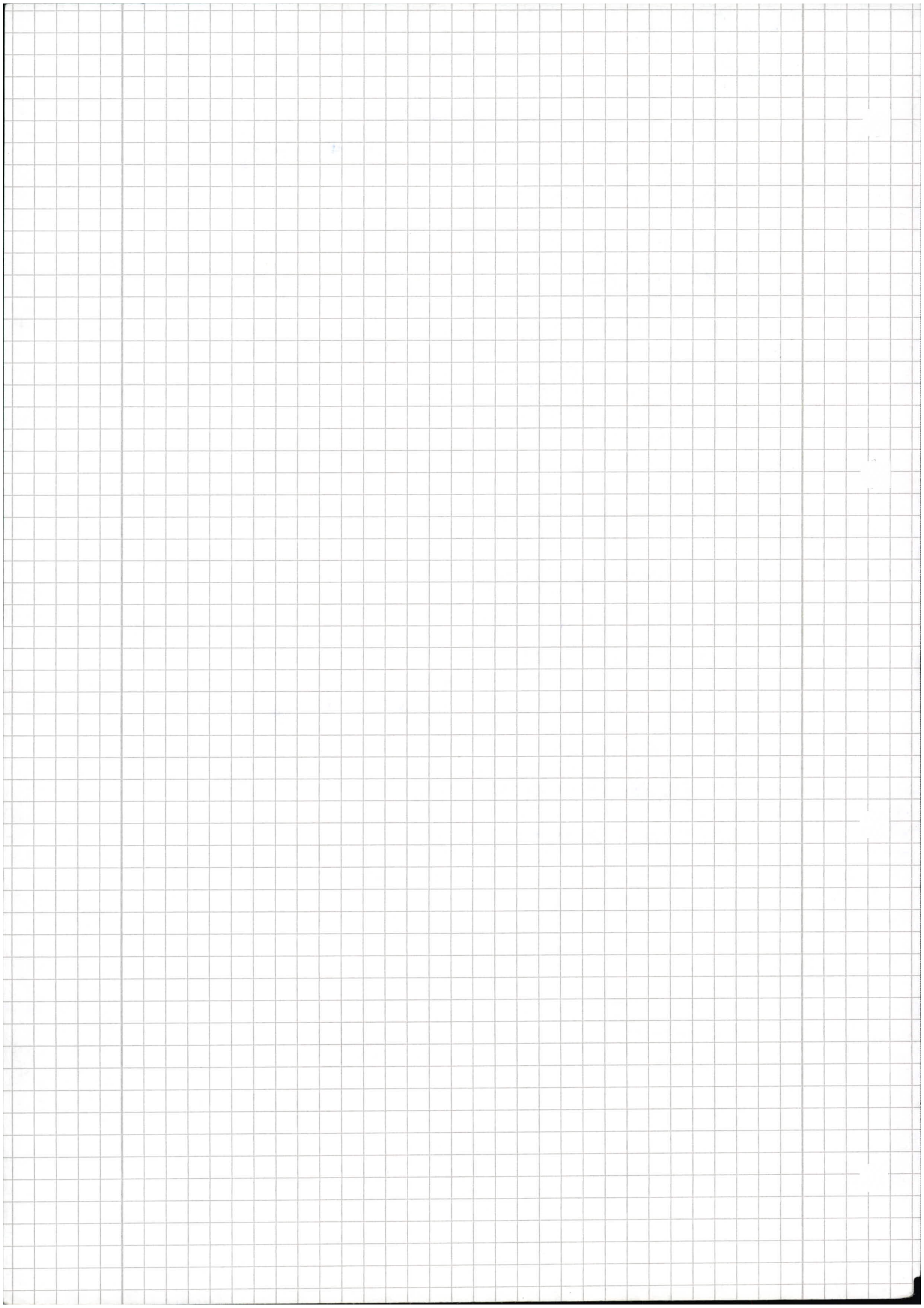
$$\hat{\rho}_A = \text{Tr}_B \hat{\rho}_{\text{tot}} = |\uparrow_A\rangle \langle \uparrow_A| \leadsto \text{Eigenvalue } 1 \rightarrow S_A = 0$$

2) Maximally entangled

$$|\psi_{\text{tot}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_A\rangle \otimes |\uparrow_B\rangle - |\downarrow_A\rangle \otimes |\uparrow_B\rangle)$$

$$\hat{\rho}_A = \frac{1}{2} (|\uparrow_A\rangle \langle \uparrow_A| + |\downarrow_A\rangle \langle \downarrow_A|) \quad \text{EV: } 1/2, 1/2$$

$$\Rightarrow S_A = \frac{1}{2} \ln(2) + \frac{1}{2} \ln(2) = \ln(2).$$



Pictures in QM (Schrödinger, Heisenberg, Interaction picture)

Schrödinger picture

$|\psi_S(t)\rangle$: time dependent state
 $\hat{O}_S$: time independent operator

$$i\hbar \frac{\partial |\psi_S(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\psi_S(t)\rangle$$

Heisenberg picture

$|\psi_H\rangle$: time independent
 $\hat{O}_H(t)$: time dependant

Physical operators should not depend on the picture:

$$\langle \hat{O}(t) \rangle = \langle \psi_S(t) | \hat{O}_S | \psi_S(t) \rangle = \langle \psi_H | \hat{O}_H(t) | \psi_H \rangle$$

Evolution operator:
 Consider

$$i\hbar \frac{\partial |\psi_S(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\psi_S(t)\rangle$$

then define the evolution operator

$$|\psi_S(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi_S(t_0)\rangle$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t, t_0)}{\partial t} = \hat{H} \hat{U}(t, t_0)$$

Explicit form of $\hat{U}(t, t_0)$

(i) if the Hamiltonian is time-independent:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t)}{\partial t} &= \hat{H} \hat{U}(t) \\ \Rightarrow i\hbar \int_{t_0}^t \frac{\partial \hat{U}(t')}{\partial t'} dt' &= \int_{t_0}^t \hat{H} \hat{U}(t') dt' \\ \Rightarrow i\hbar (\hat{U}(t) - \hat{U}(t_0)) &= \int_{t_0}^t \hat{H} \hat{U}(t') dt' \\ \Rightarrow \hat{U}(t) &= 1 - \frac{i}{\hbar} \hat{H} \int_{t_0}^t \hat{U}(t') dt' \\ &= 1 - \frac{i}{\hbar} \hat{H} \underbrace{\int_{t_0}^t dt'}_{t-t_0} + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \hat{H}^2 \underbrace{\int_0^t dt' \int_0^{t'} dt''}_{\frac{1}{2}(t-t_0)^2} + \dots \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{-i\hat{H}}{\hbar}\right)^n \cdot \frac{(t-t_0)^n}{n!} \\ \Rightarrow \hat{U}(t, t_0) &= e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} \end{aligned}$$

(ii) if the Hamiltonian is time-dependant:
 the problem here is

$$[\hat{H}(t_1), \hat{H}(t_2)] \neq 0 \text{ is possible}$$

here, again:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t, t_0)}{\partial t} = \hat{H}^{(t)} \hat{U}(t, t_0)$$

Pictures in QM

Evolution operator

Explicit form of $\hat{U}(t, t_0)$

(ii) time-dependant Hamiltonian

$$\begin{aligned}\hat{U}(t) &= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}(t') \hat{U}(t') = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}(t') \left(1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t'} dt'' \hat{H}(t'') \hat{U}(t'') \right) = \dots \\ &= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n \underbrace{\int_{t_0}^t dt' \hat{H}(t') \cdot \int_{t_0}^{t'} dt'' \hat{H}(t'') \cdot \dots \cdot \int_{t_0}^{t^{(n-1)}} dt^{(n)} \hat{H}(t^{(n)})}_{\hat{G}_n(t)}\end{aligned}$$

define the time-ordering operator:

$$\hat{T}(\hat{O}(t_1) \hat{O}(t_2) \hat{O}(t_3)) = \hat{O}(t_{i_1}) \hat{O}(t_{i_2}) \hat{O}(t_{i_3}), \quad t_{i_1} > t_{i_2} > t_{i_3}.$$

then

$$\frac{1}{n!} \hat{T} \left(\int_{t_0}^t dt_1 \hat{H}(t_1) \dots \int_{t_0}^t dt_n \hat{H}(t_n) \right) = \hat{G}_n(t)$$

if written as sums this has $n!$ possible orderings to divide by

$$\Rightarrow \hat{U}(t) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \hat{T} \left(\left(\frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}(t') \right)^n \right) = \hat{T} \left(e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}(t')} \right)$$

$$\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}, \quad \hat{U}(t_0, t_1) \hat{U}(t_1, t_2) = \hat{U}(t_0, t_2)$$

Now we know:

$$\hat{O}_H(t, t_0) = \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{O}_S \hat{U}(t, t_0) = e^{+\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} \hat{O}_S e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)}$$

Example with potential.

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x), \quad \hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}$$

then

$$\hat{x}_H(t) = \hat{U}^\dagger(t) \hat{x}_S \hat{U}(t), \quad \hat{p}_H(t) = \hat{U}^\dagger(t) \hat{p}_S \hat{U}(t),$$

$$\frac{d\hat{x}_H(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} \hat{U}^\dagger(t) [\hat{H}, \hat{x}_S] \hat{U}(t) = \frac{\hat{p}_H}{m}$$

$$\begin{aligned}\langle \psi_H | x_H(t) | \psi_H \rangle &= \langle \psi_S | \hat{U}^\dagger x_S \hat{U} | \psi_S \rangle \\ &\Rightarrow \langle \psi_H | = \hat{U}^\dagger | \psi_S \rangle\end{aligned}$$

Interaction picture

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$$

$$|\psi_I(t)\rangle = e^{+\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0(t-t_0)} |\psi_S(t, t_0)\rangle = e^{+\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0(t-t_0)} \hat{U}(t, t_0) |\psi_H(t_0)\rangle$$

$$\hat{O}_I(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0(t-t_0)} \hat{O}_H(t, t_0) e^{+\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0(t-t_0)} = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0(t-t_0)} \hat{U}(t, t_0) \hat{O}_S \hat{U}^\dagger(t, t_0) e^{+\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0(t-t_0)}$$

$$\begin{aligned}\Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_I(t)\rangle &= i\hbar e^{+\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0(t-t_0)} \left[\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 |\psi_S(t, t_0)\rangle + \frac{\partial}{\partial t} |\psi_S(t, t_0)\rangle \right] \\ &= e^{+\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0(t-t_0)} \hat{V} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0(t-t_0)} |\psi_I(t, t_0)\rangle = \tilde{V}(t, t_0) |\psi_I(t, t_0)\rangle\end{aligned}$$

$$|\psi_I(t, t_0)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi_I(t_0)\rangle, \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) = \tilde{V}(t, t_0) \cdot \hat{U}(t, t_0)$$

$$\Rightarrow \hat{U}(t, t_0) = \hat{T} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt \tilde{V}(t)}$$

Pictures in QM

Interaction picture

Example: Fermi's Golden Rule.

Probability of observing state $|f\rangle$ at $t = t_f$ when initial state is $|i\rangle$ at $t = t_i$.
 $|i\rangle$ & $|f\rangle$ are H_0 -eigenstates.

$$H = H_0 + \alpha \hat{V}, \quad (0 < \alpha \ll 1), \quad [H_0, \hat{V}] \neq 0$$

$$|\psi(t, t_i)\rangle = \hat{U}(t, t_i) |i\rangle, \quad P(f, t_f; i, t_i) = |\langle f | \psi(t_f, t_i) \rangle|^2$$

$$\hat{U}(t, t_i) = e^{-\frac{i}{\hbar}(\hat{H}_0 + \alpha \hat{V})(t - t_i)} \neq e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0(t - t_i)} e^{-\frac{i\alpha}{\hbar} \hat{V}(t - t_i)}$$

in the interaction picture we get:

$$\begin{aligned} P(f, t_f; i, t_i) &= |\langle f | \psi(t_f, t_i) \rangle|^2 = |\langle f | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0(t_f - t_i)} e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0(t_f - t_i)} \psi(t_f, t_i) \rangle|^2 \\ &= |\langle f | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0(t_f - t_i)} \psi_I(t_f, t_i) \rangle|^2 = |\langle f | \psi_I(t_f, t_i) \rangle|^2 \\ &= |\langle f | \psi_I(t_f, t_i) \rangle|^2 \end{aligned}$$

$$|\psi_I(t_f, t_i)\rangle = \hat{U}_I(t_f, t_i) |i\rangle = \hat{T} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} \alpha \tilde{V}(t') dt'} |i\rangle, \quad \tilde{V}(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0(t - t_i)} \hat{V} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0(t - t_i)}$$

$$\Rightarrow \approx \left(1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} \alpha \tilde{V}(t') dt'\right) |i\rangle$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow P(f, t_f; i, t_i) &\approx \left| \left(1 - \frac{i\alpha}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt' \langle f | \tilde{V}(t') | i \rangle\right) \right|^2, \quad \langle f | \tilde{V}(t) | i \rangle = \langle f | \hat{V} | i \rangle e^{\frac{i}{\hbar} (E_f - E_i)(t - t_i)} \\ &= \alpha^2 |\langle f | \hat{V} | i \rangle|^2 \cdot \left| \frac{e^{\frac{i}{\hbar} \Delta E t} - 1}{\Delta E} \right|^2 \\ &= \frac{4\alpha^2}{\hbar^2} |\langle f | \hat{V} | i \rangle|^2 \cdot \frac{\sin^2\left(\frac{\Delta E}{2} \frac{t_f - t_i}{\hbar}\right)}{\Delta E^2} \stackrel{\text{at large}}{\approx} \frac{2\pi\alpha^2}{\hbar^2} |\langle f | \hat{V} | i \rangle|^2 \delta(\Delta E) \end{aligned}$$

This gives Fermi's Golden Rule:

$$\Gamma = \frac{dP}{dt} = \frac{2\pi\alpha^2}{\hbar^2} |\langle f | \hat{V} | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i)$$

$$\hat{T}((a+b)^2) = \hat{T}(a^2 + 2ab + b^2) = \frac{a^2}{1!} + \frac{2ab}{1!} + \frac{b^2}{1!}$$

$$\hat{T}(a+b+c+d)^2 = a^2 + b^2 + c^2 + d^2 + 2ab + 2ac + 2ad + 2bc + 2bd + 2cd$$

$$\sum_{\vec{p}} = \sum_{p_x, p_y, p_z} = \frac{\Delta p_x \cdot \Delta p_y \cdot \Delta p_z}{\Delta p_x \cdot \Delta p_y \cdot \Delta p_z} \sum_{p_x, p_y, p_z} = \frac{1}{\Delta p_x \cdot \Delta p_y \cdot \Delta p_z} \underbrace{\sum_{p_x} \Delta p_x}_{\int dp_x} \underbrace{\sum_{p_y} \Delta p_y}_{\int dp_y} \underbrace{\sum_{p_z} \Delta p_z}_{\int dp_z}$$

$$\Omega(E) = \# \vec{z} < E = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int dp_x dp_y dp_z$$

$$\Sigma(E) = \frac{d\Omega(E)}{dE}$$

$$\Sigma(E) \cdot dE = \sum_{\lambda} \delta(E - E_{\lambda}) \cdot dE$$

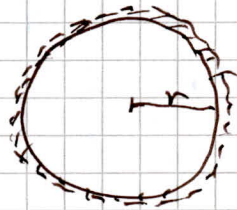
$$v(E) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p \delta(E - E_{\vec{p}})$$

$$v(E) dE = \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}$$

$$v(E) = \frac{\int d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \delta(E - E_{\vec{p}}) = v(E)$$

$$\lambda = \{ \vec{p}, s \}$$

$$\sum_{\lambda} = \sum_{\vec{p}} \left(\sum_{s=-s_{\max}}^{-s_{\min}} \dots \sum_{s=s_{\min}}^{s_{\max}} \right)$$



$$A = \frac{dA}{dr}$$

$$u \cdot dr = dA$$

Perturbation theory

- Non-degenerate case:

Let

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V}$$

and $\hat{H}_0 |\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(0)}\rangle$ be non-degenerate Eigenstates / -values.
then let

$$\hat{H} |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle; E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \dots; |\psi_n\rangle = C_n(\lambda) (|\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \dots)$$

(normalization constant)

Then

$$\begin{aligned} \hat{H} |\psi_n\rangle &= (\hat{H}_0 + \lambda \hat{V}) (|\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots) C_n(\lambda) \\ &= C_n(\lambda) [E_n^{(0)} |\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda (\hat{H}_0 |\psi_n^{(1)}\rangle + \hat{V} |\psi_n^{(0)}\rangle) + \lambda^2 (\hat{H}_0 |\psi_n^{(2)}\rangle + \hat{V} |\psi_n^{(1)}\rangle) + \dots] \\ &\stackrel{!}{=} C_n(\lambda) E_n |\psi_n\rangle = C_n(\lambda) [E_n^{(0)} |\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda (E_n^{(1)} |\psi_n^{(0)}\rangle + E_n^{(0)} |\psi_n^{(1)}\rangle) + \dots] \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \hat{H}_0 |\psi_n^{(1)}\rangle + \hat{V} |\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(1)} |\psi_n^{(0)}\rangle + E_n^{(0)} |\psi_n^{(1)}\rangle$$

this can yield

$$E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} | \hat{V} | \psi_n^{(0)} \rangle; E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{|\langle \psi_n^{(0)} | \hat{V} | \psi_k^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{k \neq n} \frac{\langle \psi_k^{(0)} | \hat{V} | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} |\psi_k^{(0)}\rangle; |\psi_n^{(2)}\rangle = \sum_{k \neq n} \sum_{l \neq n} \frac{\langle \psi_k^{(0)} | \hat{V} | \psi_l^{(0)} \rangle \langle \psi_l^{(0)} | \hat{V} | \psi_n^{(0)} \rangle}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})(E_k^{(0)} - E_l^{(0)})} |\psi_k^{(0)}\rangle$$

Physical meaning:

We see

$$[\hat{H}_0] = \begin{pmatrix} E_1^{(0)} & & 0 \\ & E_2^{(0)} & \\ 0 & & \ddots \end{pmatrix}; [\hat{V}] = \begin{pmatrix} \langle \psi_1^{(0)} | \hat{V} | \psi_1^{(0)} \rangle & \langle \psi_1^{(0)} | \hat{V} | \psi_2^{(0)} \rangle & \dots \\ \vdots & \ddots & \end{pmatrix}$$

and if is:

$\langle \psi_n^{(0)} | \hat{V} | \psi_n^{(0)} \rangle$: energy correction by $\hat{V}$ to $E_n^{(0)}$.

$\langle \psi_n^{(0)} | \hat{V} | \psi_m^{(0)} \rangle$: transition amplitude of state $|\psi_m^{(0)}\rangle$ into $|\psi_n^{(0)}\rangle$ by $\hat{V}$.

- degenerate case:

Now let

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V}$$

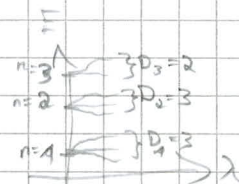
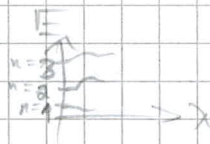
with

$$\hat{H}_0 |\psi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle, \alpha = 1, \dots, D_n$$

the formula without degeneracies will be ill-defined with degeneracies.

Assume the given degeneracies will be lifted in the first order of λ already, i.e.

$$\langle \psi_{n,\alpha}^{(0)} | \hat{V} | \psi_{n,\alpha}^{(0)} \rangle \neq \langle \psi_{n,\beta}^{(0)} | \hat{V} | \psi_{n,\beta}^{(0)} \rangle \text{ for } \alpha \neq \beta.$$



Perturbation theory

- degenerate case define

We can ~~define~~ $S\hat{V}$ as a matrix as follows:

$$[S\hat{V}] = \begin{pmatrix} V_{11,11} & 0 & 0 \\ 0 & V_{11,22} & 0 \\ 0 & 0 & V_{22,11} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & V_{22,22} \end{pmatrix}$$

then, with $\hat{H}_0 = \hat{H}_0 + \lambda S\hat{V}$, $\tilde{V} = \hat{V} - S\hat{V}$, $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V} = \hat{H}_0 + \lambda \tilde{V}$

$$\begin{cases} \tilde{E}_{n,\alpha}^{(0)} := E_n^{(0)} + \lambda V_{nn,\alpha\alpha} \\ |\tilde{\psi}_{n,\alpha}^{(0)}\rangle = |\psi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle \end{cases}$$

then

$$\begin{aligned} \tilde{E}_{n,\alpha} &= \tilde{E}_{n,\alpha}^{(0)} + \lambda \langle \tilde{\psi}_{n,\alpha}^{(0)} | \tilde{V} | \tilde{\psi}_{n,\alpha}^{(0)} \rangle + \sum_{(k,\beta) \neq (n,\alpha)} \frac{|\langle \psi_{n,\alpha}^{(0)} | \tilde{V} | \psi_{k,\beta}^{(0)} \rangle|^2}{|E_{n,\alpha}^{(0)} - E_{k,\beta}^{(0)}|} \\ &= E_n^{(0)} + \lambda \langle \psi_{n,\alpha}^{(0)} | \hat{V} | \psi_{n,\alpha}^{(0)} \rangle + \dots \end{aligned}$$