5. Formale Grundlagen der Quantenmechanik

Ortsraum & Impulsraum

Ortsraum $\boldsymbol{H}_R$: Raum aller differenzierbaren Funktionen $\psi(r): \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C}$ mit $\int d^3r \ |\psi(r)|^2 < \infty$

Es ist manchmal nützlich, noch allgemeinere Funktionen zuzulassen

Der Ortsraum als Vektorraum: $(\phi+\psi)(r) = \phi(r)+\psi(r)$ Funktionen werden punktweise addiert

$$(\lambda\phi)(r) = \lambda\,\phi(r)$$

Erinnerung:

Ein Vektoraum $\boldsymbol{V}$ ist ein Menge in der eine Addtion und eine skalare Multiplikation definiert sind.

Für $\phi, \psi \in \boldsymbol{V}, \lambda \in \mathbb{C}$: $\phi + \psi\ ,\ \lambda\phi \in \boldsymbol{V}$ mit Rechenregeln so wie für reelle Zahlen

$\boldsymbol{H}_R$ ist ein Vektorraum mit Skalarprodukt: $\langle\psi\,|\,\phi\rangle \equiv \int d^3r \ \ \psi^*(r)\,\phi(r)$

und somit ein Hilbert-Raum

Erinnerung:

Ein Skalarprodukt ist eine Abbildung $\langle\ |\ \rangle : \boldsymbol{V} \times \boldsymbol{V} \to \mathbb{C}$ mit den Eigenschaften:

$\alpha, \beta \in \boldsymbol{V}, \lambda \in \mathbb{C} \quad \Rightarrow \quad \langle\phi\,|\alpha + \lambda\beta\rangle = \langle\phi\,|\alpha\rangle + \lambda\,\langle\phi\,|\beta\rangle\ ,\ \ \langle\alpha\,|\beta\rangle = \langle\beta\,|\alpha\rangle^*$

$\alpha \neq 0 \quad \Rightarrow \quad \langle\alpha\,|\alpha\rangle > 0$

Exkurs: Allgemeine Hilbert-Räume

Wellenfunktionen enthalten die volle Information über ein physikalisches System. Man bezeichnet normierte Elemente $\psi(r) \in \boldsymbol{H}_R$, $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ auch als “quantenmechanische Zustände” bzw. kurz als “Zustände”

Komplexwertige skalare Wellenfunktionen sind nicht immer ausreichend, um die Zustände eines physikalischen Systems zu charakterisieren. Der quantenmechanische Zustandsraum besitzt aber im Allgemeinen die Struktur eines Hilbertraums. Deshalb ist es sinnvoll, allgemeine Hilberträume $\boldsymbol{H}$ zu betrachten.

Ein Hilbertraum $\boldsymbol{H}$ ist ein Vektorraum mit Skalarprodukt: $\langle\ |\ \rangle : \boldsymbol{H} \times \boldsymbol{H} \rightarrow \mathbb{C}$

$$\alpha, \beta \in \boldsymbol{H}, \lambda \in \mathbb{C} \quad \Rightarrow \quad \langle\phi\,|\alpha + \lambda\beta\rangle = \langle\phi\,|\alpha\rangle + \lambda\,\langle\phi\,|\beta\rangle\ , \quad \langle\alpha\,|\beta\rangle = \langle\beta\,|\alpha\rangle^*$$

$$\alpha \neq 0 \quad \Rightarrow \quad \langle\alpha\,|\alpha\rangle > 0$$

Zwei Zustände $\phi, \psi \in \boldsymbol{H}$ heißen orthogonal, falls $\langle\psi|\phi\rangle = 0$

David Hilbert
(1862 – 1943)

Fourier-Transformation, Übergang zur Variable $p = \hbar k$: $\psi(r) \longleftrightarrow \widehat{\psi}(p) = \hbar^{-3/2}\, FT[\psi](p/\hbar)$

$$\psi(r) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p \;\; \phi(p)\; e^{\,i \frac{p}{\hbar} r} \quad \longleftrightarrow \quad \widehat{\psi}(p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3r \;\; \psi(r)\; e^{-i \frac{p}{\hbar} r} = \hbar^{-3/2}\, FT[\psi](p/\hbar)$$

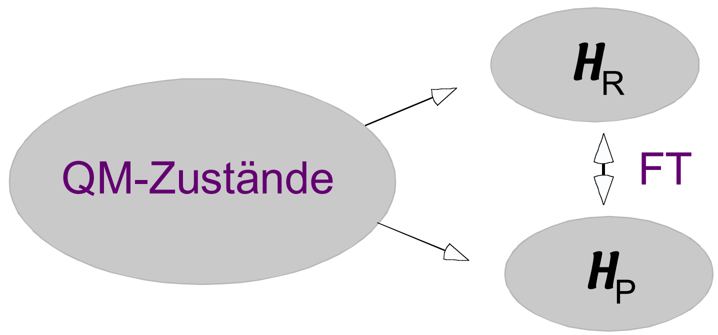
Impulsraum $\boldsymbol{H}_P$: Raum aller Impulsraumwellenfunktionen $\widehat{\psi}(p)$: $\mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$

$\boldsymbol{H}_P$ ist ebenfalls ein Hilbert-Raum

mit Scalarprodukt: $\langle \widehat{\psi}(p) \,|\, \widehat{\phi}(p) \rangle \equiv \int d^3p \;\; \widehat{\psi}^*(p)\, \widehat{\phi}(p)$

Die Fourier-Transformation ist ein Hilbertraum-Isomorphismus zwischen den Räumen $\boldsymbol{H}_R$ und $\boldsymbol{H}_P$, i.e., eine bijektive lineare Abbildung, die das Skalarprodukt erhält

Parseval-Gleichung $\rightarrow$ $\langle \psi(r) \,|\, \phi(r) \rangle = \langle \widehat{\psi}(p) \,|\, \widehat{\phi}(p) \rangle$



Operatoren im Orts und Impulsraum:

Neben der Addition bzw. skalaren Multiplikation von Wellenfunktionen sind zur Beschreibung physikalischer Vorgänge weiterer Operationen im Ortsraum bzw. Impulsraum nötig, z. B. die Differentiation

$$\nabla : \boldsymbol{H}_R \rightarrow \boldsymbol{H}_R \,, \quad \phi(r) \quad \rightarrow \quad \nabla\phi(r)$$

oder die Multiplikation mit einer Funktion f(r)

$$M_f : \boldsymbol{H}_R \rightarrow \boldsymbol{H}_R \,, \quad \phi(r) \quad \rightarrow \quad f(r)\,\phi(r)$$

Erwartungswerte physikalischer Größen “q” haben in $\boldsymbol{H}_R$ die allgemeine Form

$$\langle q \rangle_\psi \quad = \quad \int d^3r \;\; \psi^*(r)\, Q\psi(r) \quad = \quad \langle \psi \,|\, Q\psi \rangle \qquad \text{mit } \; Q : \boldsymbol{H}_R \rightarrow \boldsymbol{H}_R, \;\; \phi(r) \quad \rightarrow \quad Q\phi(r)$$

Die für die Quantentheorie relevanten Operationen Q haben die Eigenschaft der Linearität:

Für $\phi, \psi \in \boldsymbol{H}_R \,, \lambda \in \mathbb{C}$:

$$Q\,[\phi+\psi] \quad = \quad Q\,[\phi] \; + Q\,[\psi]$$

$$Q\,[\lambda\phi] \quad = \quad \lambda\, Q\,[\phi]$$

Dies führt zum Begriff des Operators . . .

Operatoren:

Eine lineare Abbildung $A: \boldsymbol{H} \to \boldsymbol{H},\ \phi \to A\,\phi$ heißt Operator

Linearität: $A\,(\lambda\,\phi + \psi) = \lambda\,A\,\phi + A\,\psi \quad \forall\ \phi, \psi \in \boldsymbol{H}, \lambda \in \mathbb{C}$

$$\left.\begin{array}{ll} \text{Skalare Multiplikation:} & (\lambda\,A)\,\phi \equiv \lambda\,A\,\phi \\ \text{Addition von Operatoren:} & (A + B)\,\phi \equiv A\,\phi + B\,\phi \\ \text{Produkte von Operatoren:} & (A * B)\,\phi \equiv A\,(B\,\phi) \end{array}\right\} \quad \forall\ \phi \in \boldsymbol{H}, \lambda \in \mathbb{C}$$

Funktionen von Operatoren: $A: \boldsymbol{H} \to \boldsymbol{H}$, $F: \mathbb{C} \to \mathbb{C}$ analytische Funktion, $F(q) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} F_n\,q^n$

$$F(A): \boldsymbol{H} \to \boldsymbol{H},\ F(A) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} F_n\,A^n$$

Kommutator von zwei Operatoren: $[A , B]\, \phi \equiv A\,(B\,\phi) - B\,(A\,\phi)$

Mit Operatoren kann man wie mit komplexen Zahlen rechnen, mit einer Ausnahme:

Operatoren kommutieren i. A. nicht: $[A , B] \neq 0$, diese Eigenschaft unterscheidet sie von gewöhnlichen komplexen Zahlen und spielt eine zentrale Rolle in der Quantentheorie.

BSP: R: $\boldsymbol{H}_R \to \boldsymbol{H}_R$, $\phi(r) \to R\phi(r) \equiv r\,\phi\,(r)$ R = Ortsoperator

P: $\boldsymbol{H}_R \to \boldsymbol{H}_R$, $\phi(r) \to P\phi(r) \equiv -i\hbar\nabla\phi(r)$ P = Impulsoperator

Kommutator: $[R_\nu , P_\mu] = i\hbar\, \delta_{\nu\mu}$

$$([R_\nu , P_\mu]\phi)(r) = (R_\nu(P_\mu\phi))(r) - (P_\mu(R_\nu\phi))(r) = -i\hbar\, r_\nu\, \partial_\mu\, \phi(r) + i\hbar\, \partial_\mu\, (r_\nu\, \phi(r))\,) = i\hbar\, \delta_{\nu\mu}\, \phi(r)$$

Adjungierte und selbstadjungierte Operatoren

Zwei Operatoren A, B heißen adjungiert, falls gilt: $\forall\ \phi, \psi \in \boldsymbol{H}:\ \langle\psi|A\phi\rangle = \langle B\psi|\phi\rangle$

In diesem Fall nennt man B den zu A adjungierten Operator und bezeichnet ihn mit A^+.

Für das Beispiel Ortsraum $\boldsymbol{H}_R$:
$$\int d^3r\ \psi^*(r)\ A\phi(r) = \int d^3r\ [\ A^+\psi(r)\ ]^*\ \phi(r)$$

Beispiel: $A = \nabla \Rightarrow A^+ = -\nabla$ (folgt mit partieller Integration)

Rechenregeln: $(A + \lambda B)^+ = A^+ + \lambda^* B^+ \qquad (A\,B)^+ = B^+A^+ \qquad (A^+)^+ = A$

$$\langle\psi|(A + \lambda B)\phi\rangle = \langle\psi|A\phi\rangle + \lambda\langle\psi|B\phi\rangle = \langle A^+\psi|\phi\rangle + \lambda\langle B^+\psi|\phi\rangle = \langle A^+\psi|\phi\rangle + \langle\lambda^*B^+\psi|\phi\rangle = \langle(A^+ + \lambda^* B^+)\psi|\phi\rangle$$

$$\langle\psi|\,A\,B\,\phi\rangle = \langle A^+\psi|\,B\,\phi\rangle = \langle B^+A^+\psi|\,\phi\rangle$$

$$\langle\psi|\,A^+\phi\rangle = \langle A^+\phi|\psi\rangle^* = \langle\phi|A\psi\rangle^* = \langle A\psi|\phi\rangle$$

Charles Hermite
(1822 – 1901)

Operatoren mit $A = A^+$ heißen selbstadjungiert (oder hermitesch).

BSP: $R\phi(r) \equiv r\,\phi(r)$, $P\phi(r) \equiv -i\hbar\nabla\phi(r)$ sind selbstadjungierte Operatoren auf $\boldsymbol{H}_R$

$$\langle\psi|P\phi\rangle = \int d^3r\, \psi^*(r)\,(-i\hbar\nabla)\,\phi(r) \underset{\text{partielle Integration}}{=} \int d^3r\, -(-i\hbar\nabla\,\psi^*(r))\,\phi(r) = \int d^3r\,(-i\hbar\nabla\,\psi(r))^*\,\phi(r) = \langle P\psi|\phi\rangle$$

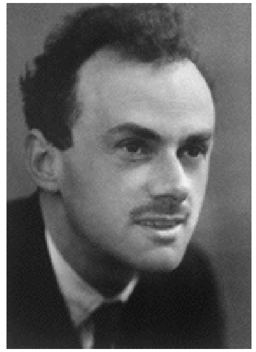
$$\langle\psi|R\phi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d^3r\, \psi^*(r)\, r\, \phi(r) = \langle R\psi|\phi\rangle$$

Ü **BSP:** Seien A, B selbstadjungiert: $A = A^+$, $B = B^+$

Folgende Operatoren sind selbstadjungiert: $i\,[A, B]$, $AB + BA$, ABA, $ABC + CBA$

$$F(A) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} F_n A^n \quad \text{mit reellen Koeffizienten } F_n \quad \Rightarrow \quad F(A) \text{ selbstadjungiert}$$

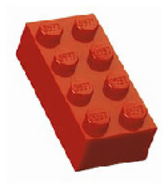
Dirac-Notation: “Bra” & “Ket” (Paul Dirac 1928)



Paul Adrien Maurice Dirac
(1902-1984)
Nobelpreis 1933

BSP Ortsraum: $\phi(x)$, $\psi(x)$ Wellenfunktionen aus $\boldsymbol{H}_R$, Q ein Operator auf $\boldsymbol{H}_R$

$$\phi(r) \longrightarrow |\phi\rangle \qquad \int_{-\infty}^{\infty} d^3r\, \psi^*(r)\, \phi(r) \longrightarrow \langle\psi|\phi\rangle \qquad \int_{-\infty}^{\infty} d^3r\, \psi^*(r)\, Q\, \phi(r) \longrightarrow \langle\psi|Q|\phi\rangle$$



Das Objekt $\langle\psi|$ kann man als Vorschrift betrachten die aus einem “Ket”-Vektor $|\phi\rangle$ die komplexe Zahl $\langle\psi|\phi\rangle$ macht: $|\phi\rangle \rightarrow \langle\psi|\phi\rangle$. Man bezeichnet $\langle\psi|$ als “Bra”-Vektor

Aus “Bra” $\langle\psi|$ und “Ket” $|\phi\rangle$ wird Bracket $\langle\psi|\phi\rangle$

Fazit:

Elemente eines Hilbertraums $\boldsymbol{H}$ werden wie folgt bezeichnet: $|\psi\rangle$ “Ket”-Vektoren

“Bra”-Vektoren sind lineare Funktionale auf $\boldsymbol{H}$: $\forall\ |\psi\rangle \in \boldsymbol{H} \quad \langle\psi| : \ \boldsymbol{H} \rightarrow \mathbb{C} \ , \ |\phi\rangle \rightarrow \langle\psi|\phi\rangle$

zu jedem Ket-Vektor $|\psi\rangle$ gibt es genau einen Bra-Vektor $\langle\psi|$ und umgekehrt (falls $\boldsymbol{H}$ separabel)

Projektoren:

$|\psi\rangle, |\phi\rangle \in \boldsymbol{H}$ Betrachte $P_\psi : \boldsymbol{H} \rightarrow \boldsymbol{H},\ \phi \rightarrow P_\psi |\phi\rangle \equiv |\psi\rangle\langle\psi|\phi\rangle$

Das legt folgende Identifizierung nahe: $P_\psi \equiv |\psi\rangle\langle\psi|$

$$P_\psi |\psi\rangle = |\psi\rangle$$

Ü

$$P_\psi = P_\psi P_\psi$$

$$\langle\psi|\phi\rangle = 0 \quad \Rightarrow P_\psi |\phi\rangle = 0$$

$$P_\psi = P_\psi^+$$

verallgemeinerte Projektoren: $A \equiv |\psi\rangle\langle\phi|$ mit $A|\chi\rangle \equiv |\psi\rangle\langle\phi|\chi\rangle$

$$A^+ = |\phi\rangle\langle\psi|$$

Ü

$$A^+A = |\phi\rangle\langle\phi|$$

$$A A^+ = |\psi\rangle\langle\psi|$$

Eigenwerte und Eigenzustände

Eigenwerte und Eigenzustände eines Operators: A: $\boldsymbol{H} \rightarrow \boldsymbol{H}$

Ein Zustand $|\phi\rangle \in \boldsymbol{H}$ heißt Eigenzustand des Operators A zum Eigenwert a, falls : $A\,|\phi\rangle = a\,|\phi\rangle$

Im Allgemeinen sind Eigenwerte komplex.

a. Eigenwerte eines selbstadjungierten Operators sind reell:

BEH: A: $\boldsymbol{H} \rightarrow \boldsymbol{H}$, $A = A^+$, $A\,|\phi\rangle = a\,|\phi\rangle \quad \Rightarrow \quad a$ reell

Beweis: $a\,\langle\phi|\phi\rangle = \langle\phi|A|\phi\rangle = \langle A\phi|\phi\rangle = \langle a\,\phi|\phi\rangle = a^*\,\langle\phi|\phi\rangle \quad \Rightarrow \quad a = a^*$

b. Eigenzustände eines selbstadjungierten Operators zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal:

BEH: $A = A^+,\; A\,|\phi\rangle = a_\phi\,|\phi\rangle,\; A\,|\psi\rangle = a_\psi\,|\psi\rangle,\; a_\phi \neq a_\psi \quad \Rightarrow \quad \langle\psi|\phi\rangle = 0$

Beweis: $(a_\phi - a_\psi)\,\langle\psi|\phi\rangle \underset{a.}{=} \langle\psi|a_\phi\phi\rangle - \langle a_\psi\psi|\phi\rangle = \langle\psi|A|\phi\rangle - \langle A\psi|\phi\rangle$

$= \langle\psi|A|\phi\rangle - \langle\psi|A|\phi\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \langle\psi|\phi\rangle = 0$

Orthonormale Basen:

$\boldsymbol{B} \equiv \{|n\rangle \in \boldsymbol{H} :\; n \in \boldsymbol{N}\}$ $\quad \boldsymbol{N}$ = Indexmenge: endlich, abzählbar unendlich, Index-Kontinuum

heißt Orthonormal-Basis (ONB) von $\boldsymbol{H}$ falls

a. $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$

b. $\forall\; |\psi\rangle \in \boldsymbol{H}\; \exists\; \psi_n \in \mathbb{C} :\; |\psi\rangle \equiv \sum_{n \in \boldsymbol{N}} \psi_n |n\rangle$

Es gilt dann: $\quad \psi_m \equiv \langle m|\,\psi\rangle$ bzw. $\quad |\psi\rangle = \sum_{n \in \boldsymbol{N}} \langle n|\,\psi\rangle\; |n\rangle = \sum_{n \in \boldsymbol{N}} |n\rangle\langle n|\psi\rangle = \left(\sum_{n \in \boldsymbol{N}} |n\rangle\langle n|\right) |\psi\rangle$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\mathbb{1} = \sum_{n \in \boldsymbol{N}} |n\rangle\langle n|}$$

Vollständigkeitskriterium

Basis-Darstellung eines Operators A: $\quad A_{mn} \equiv \langle m|\, A\, |n\rangle$ heißen Matrixelemente

$$|\psi\rangle = A\,|\phi\rangle \quad \Leftrightarrow \quad \psi_m = \sum_{n \in \boldsymbol{N}} A_{mn}\; \phi_n$$

Matrizen-Multiplikation

BEW:

$$|\psi\rangle = \sum_{m \in \boldsymbol{N}} \langle m|\psi\rangle\; |m\rangle = \sum_{m \in \boldsymbol{N}} \langle m|A|\phi\rangle\; |m\rangle = \sum_{m \in \boldsymbol{N}} \left(\sum_{n \in \boldsymbol{N}} \langle m|A|n\rangle\; \langle n|\phi\rangle \right) |m\rangle$$

Erwartungswert und Varianz:

Es sei $A: \boldsymbol{H} \to \boldsymbol{H}$ ein Operator und $|\psi\rangle \in \boldsymbol{H}$:

$\langle A\rangle_\psi \equiv \langle\psi|A|\psi\rangle$ heißt Erwartungswert von A im Zustand $|\psi\rangle$

Für selbstadjungierte Operatoren $A = A^+$ heißt

$\Delta_\psi A \equiv \sqrt{\langle (A - \langle A\rangle_\psi)^2 \rangle_\psi}$ Varianz (Unschärfe) von A im Zustand $|\psi\rangle$

Verallgemeinerungen der Begriffe Orts- bzw. Impulsschwerpunkt bzw. Breite

BEH: A selbstadjungiert $\Rightarrow$ a. $\langle\psi|A|\psi\rangle$ reell

b. $(\Delta_\psi A)^2 = \langle A^2\rangle_\psi - \langle A\rangle_\psi^{\,2} \geq 0$

BEW: a. $\langle\psi|A|\psi\rangle = \langle A\psi|\psi\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle^* \Rightarrow \langle\psi|A|\psi\rangle$ reell

b. $(\Delta_\psi A)^2 = \langle\psi|\,(A - \langle A\rangle_\psi)^2\,|\psi\rangle = \langle(A - \langle A\rangle_\psi)\,\psi|\,(A - \langle A\rangle_\psi)\,\psi\rangle \geq 0$

$$(\Delta_\psi A)^2 = \langle\psi|\,(A - \langle A\rangle_\psi)^2\,|\psi\rangle = \langle\psi|\,A^2 + \langle A\rangle_\psi^{\,2} - 2\langle A\rangle_\psi A\,|\psi\rangle$$

$$= \langle\psi|\,A^2|\psi\rangle + \langle A\rangle_\psi^{\,2}\langle\psi|\psi\rangle - 2\langle A\rangle_\psi\,\langle\psi|A\,|\psi\rangle$$

$$= \langle A^2\rangle_\psi - \langle A\rangle_\psi^{\,2}$$

Zusammenhang zwischen Erwartungswert, Varianz und Eigenwerten:

$\{\, |n\rangle : n \in \boldsymbol{N} \,\}$ Basis aus Eigenzuständen von A, i.e., $A\,|n\rangle = a_n\,|n\rangle$

$$|\psi\rangle = \sum_{n \in \boldsymbol{N}} |n\rangle\langle n|\psi\rangle \quad \text{mit} \quad \langle\psi|\psi\rangle = 1$$

$w_n \equiv |\langle\psi|n\rangle|^2$ = statistisches Gewicht von $|n\rangle$ im Zustand $|\psi\rangle$

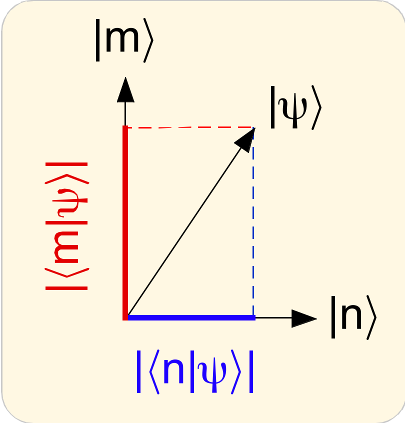
Bemerkung: ist A ein “physikalisch relevanter” Operator so bezeichnet man den index $n \in \boldsymbol{N}$ seiner Eigenbasis (Basis aus Eigenzuständen) als Quantenzahl

BEH:

(5.1) $$1 = \sum_{n \in \boldsymbol{N}} w_n$$ Pythagoras

(5.2) $$\langle A\rangle_\psi = \sum_{n \in \boldsymbol{N}} a_n\, w_n$$ $\langle A\rangle_\psi$ = Mittelwert der Eigenwerte bezüglich der normierten Verteilung w_n

(5.3) $$(\Delta_\psi A)^2 = \sum_{n \in \boldsymbol{N}} (a_n - \langle A\rangle_\psi)^2\, w_n$$



BEW: (5.1) $\sum_{n \in \boldsymbol{N}} w_n = \sum_{n \in \boldsymbol{N}} |\langle\psi|n\rangle|^2 = \sum_{n \in \boldsymbol{N}} \langle\psi|n\rangle\langle n|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle = 1$

(5.2) $\langle\psi|A|\psi\rangle = \sum_{n \in \boldsymbol{N}} \langle\psi|A|n\rangle\langle n|\psi\rangle = \sum_{n \in \boldsymbol{N}} a_n \langle\psi|n\rangle\langle n|\psi\rangle = \sum_{n \in \boldsymbol{N}} a_n w_n$

(5.3) Verwende (5.2) mit $B \equiv (A - \langle A\rangle_\psi)^2$

Beispiel Potentialkasten:

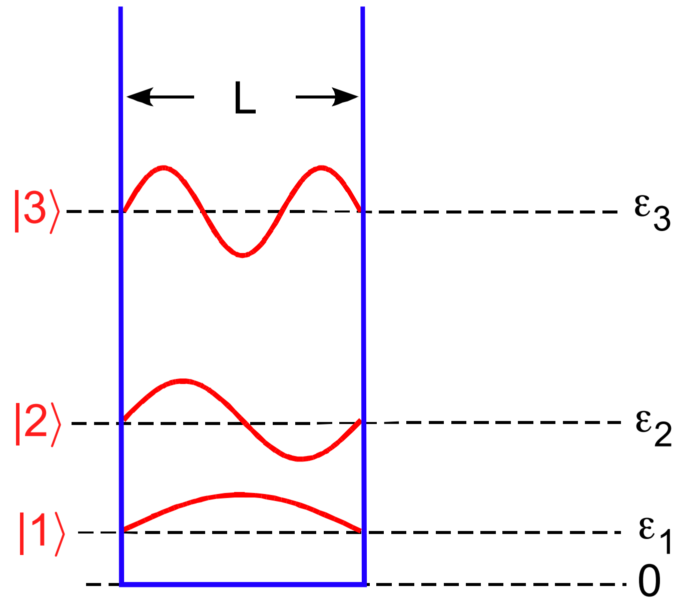
Hamilton-Operator $\quad H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + E_{pot}$

Eigenwerte von H $\quad \varepsilon_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}$

$k_n = n\frac{\pi}{L}$

Eigenbasis von H $\quad |n\rangle = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin(k_n x)$

Quantenzahl zu H $\quad n \in \{1,2,...\}$



Betrachte spezielle Wellenfunktion $\quad |\psi\rangle = \sin(\theta)\,|1\rangle + \cos(\theta)\,|2\rangle$

$$w_n \equiv |\langle\psi|n\rangle|^2 = \sin^2(\theta)\ \delta_{n1} + \cos^2(\theta)\ \delta_{n2}$$

$$\langle H\rangle_\psi = \sin^2(\theta)\,\varepsilon_1 + \cos^2(\theta)\ \varepsilon_2$$

Unschärfe-Relation für selbstadjungierte Operatoren:

Es seien $A\,,\,B : \boldsymbol{H} \to \boldsymbol{H}$ selbstadjungierte Operatoren auf $\boldsymbol{H}$ und $|\psi\rangle \in \boldsymbol{H}$:

BEH: $\quad C \;\equiv\; i\,[A\,,\,B]$ ist selbstadjungiert und es gilt $\;2\,\Delta_\psi A\;\Delta_\psi B \;\geq\; |\langle C\rangle_\psi|$

BEW:

a. $\quad C^+ \;=\; -i\,[A\,,\,B]^+ \;=\; -i\,(AB)^+ + i\,(BA)^+ \;=\; -i\,B^+A^+ + i\,A^+B^+ \;=\; -i\,BA + i\,AB \;=\; i\,[A\,,\,B] \;=\; C$

$\Rightarrow\;$ C selbstadjungiert und $\langle C\rangle_\psi$ reell

betrachte $\quad |\phi\rangle \;\equiv\; \left(A_1 \;-\; i\,\lambda_1 B_1\right)|\psi\rangle \quad$ mit

$$A_1 \;\equiv\; A - \langle A\rangle_\psi$$
$$B_1 \;\equiv\; B - \langle B\rangle_\psi$$
$$\lambda_1 \;\equiv\; \frac{\langle C\rangle_\psi}{|\langle C\rangle_\psi|}\,\lambda \;,\quad \lambda \in \mathbb{R}$$

b. $\quad \lambda_1$ = reell, A_1 und B_1 selbstadjungiert

c. $\quad [A_1, B_1] \;=\; [A - \langle A\rangle_\psi\,,\,B - \langle B\rangle_\psi] \;=\; (A - \langle A\rangle_\psi)(B - \langle B\rangle_\psi) \;-\; (B - \langle B\rangle_\psi)(A - \langle A\rangle_\psi) \;=\; [A, B]$

d. $\quad (\Delta_\psi A)^2 \;=\; \langle\psi\,|A_1{}^2|\psi\rangle\;,\quad (\Delta_\psi B)^2 \;=\; \langle\psi\,|B_1{}^2|\psi\rangle$

$$0 \leq \langle\phi|\phi\rangle = \langle(A_1 - i\lambda_1 B_1)\psi\,|\,(A_1 - i\lambda_1 B_1)\psi\rangle = \langle\psi\,|\,(A_1 - i\lambda_1 B_1)^+(A_1 - i\lambda_1 B_1)\,|\psi\rangle$$

$$\overset{\text{b.}}{=} \langle\psi\,|\,(A_1^+ + i\lambda_1 B_1^+)(A_1 - i\lambda_1 B_1)\,|\psi\rangle \overset{\text{b.}}{=} \langle\psi\,|\,(A_1 + i\lambda_1 B_1)(A_1 - i\lambda_1 B_1)\,|\psi\rangle$$

$$= \langle\psi\,|\,A_1^2 + \lambda_1^2 B_1^2 - i\lambda_1 [A_1, B_1]\,|\psi\rangle \overset{\text{c.}}{=} \langle\psi\,|\,A_1^2 + \lambda_1^2 B_1^2 - i\lambda_1 [A, B]\,|\psi\rangle$$

$$= \langle\psi\,|\,A_1^2 + \lambda_1^2 B_1^2 - \lambda_1 C\,|\psi\rangle = \langle\psi\,|A_1^2|\psi\rangle + \lambda_1^2 \langle\psi\,|B_1^2|\psi\rangle - \lambda_1 \langle\psi\,|C|\psi\rangle$$

$$\overset{\text{d.}}{=} (\Delta_\psi A)^2 + \lambda_1^2 (\Delta_\psi B)^2 - \lambda_1 \langle\psi\,|C|\psi\rangle = (\Delta_\psi A)^2 + \lambda^2 (\Delta_\psi B)^2 - \lambda\,|\langle C\rangle_\psi|$$

$$= (\Delta_\psi A - \lambda\,\Delta_\psi B)^2 + (\,2\Delta_\psi A\,\Delta_\psi B - |\langle C\rangle_\psi|\,)\,\lambda$$

Wähle $\lambda = \Delta_\psi A / \Delta_\psi B \geq 0 \Rightarrow 0 \leq 2\Delta_\psi A\,\Delta_\psi B - |\langle C\rangle_\psi|$

BSP: $[R_n, P_m] = i\hbar\,\delta_{nm} \Rightarrow \hbar\,\delta_{nm} \leq 2\,\Delta_\psi R_n\,\Delta_\psi P_m$

Definition der Observablen

Observable sind selbstadjungierte Operatoren A, für die eine Orthonormalbasis von Eigenzuständen existiert, i.e.

es gibt eine Basis $\{|a_n\rangle \in \boldsymbol{H}\}$ (Eigenbasis von A) mit $\langle a_n | a_m \rangle = \delta_{nm}$, sodass :

$$A\,|a_n\rangle = \alpha_n\,|a_n\rangle$$

$$\text{für alle } |\psi\rangle \in \boldsymbol{H}: \quad |\psi\rangle = \sum_n \langle a_n | \psi\rangle\,|a_n\rangle$$

Im Allgemeinen sind nicht alle Eigenwerte α_n verschieden:

In diesem Fall ist es sinnvoll den Index n durch einen Doppelindex k,i zu ersetzen

$$A\,|a_{ki}\rangle = \alpha_k\,|a_{ki}\rangle \quad \text{mit} \quad \alpha_k \neq \alpha_{k'}$$

$$\text{für alle } |\psi\rangle \in \boldsymbol{H}: \quad |\psi\rangle = \sum_{k,i} \langle a_{ki} | \psi\rangle\,|a_{ki}\rangle = \sum_{k,i} |a_{ki}\rangle\langle a_{ki} | \psi\rangle$$

$$\boxed{\mathbb{1} = \sum_{k,i} |a_{ki}\rangle\langle a_{ki}|}$$

Die Indizes der Eigenbasen werden als Quantenzahlen bezeichnet

In endlich dimensionalen Hilberträumen ist jeder selbstadjungierte Operator eine Observable (Symmetrische n-dimensionale Matrizen sind diagonalisierbar)

Basis-Darstellung eines Operators in der Eigenbasis A: $A_{nm} \equiv \langle a_n | A | a_m\rangle = \alpha_n\,\delta_{nm}$

Charakterisierung des Hilbertraums durch physikalische Größen

Jede Observable A besitzt eine Eigenbasis $A\,|a_{ki}\rangle = \alpha_k\,|a_{ki}\rangle$. Manche Eigenvektoren haben gleiche Eigenwerte, sodass die Eigenbasis nicht eindeutig mit Hilfe von A und seiner Eigenwerte beschrieben werden kann.

Frage: gibt es eine weitere Observable B, sodass für A und B eine gemeinsame ONB aus Eigenvektoren gefunden werden kann, sodass jeder Eigenvektor durch eine eindeutige Kombination aus Eigenwerten von A und B identifiziert werden kann?

Frage: welche Eigenschaften müssen zwei Obervable haben, damit eine gemeinsame Eigenbasis existiert? Antwort: A und B müssen kommutieren: $[A,B] = 0$

Eventuell müssen mehr als zwei kommutierende Observable herangezogen werden, um eine eindeutige Charakterisierung des Hilbertraums zu erreichen.

THEOREM:

Für zwei kommutierende Observablen A, B existiert eine Orthonormalbasis $\{|c_n\rangle \in \boldsymbol{H}\}$ aus gemeinsamen Eigenzuständen von A und B:

für alle $|\psi\rangle \in \boldsymbol{H}$: $\quad |\psi\rangle = \sum_n \langle c_n|\psi\rangle\, |c_n\rangle \,, \quad \langle c_n|c_m\rangle = \delta_{nm}$

$A\,|c_n\rangle = \alpha_n\, |c_n\rangle$ und $B\,|c_n\rangle = \beta_n\, |c_n\rangle$

BEW:

i) $|c\rangle$ Eigenvektor von A zum Eigenwert $\alpha \;\Rightarrow\;$ B $|c\rangle$ Eigenvektor von A zum Eigenwert α

$$A\,B\,|c\rangle = B\,A\,|c\rangle = B\,\alpha\,|c\rangle = \alpha\,B\,|c\rangle \qquad (*)$$

Es sei $\{|c_{n,\nu}\rangle \in \boldsymbol{H}\}$ Eigenbasis von A mit $A\,|c_{n,\nu}\rangle = \alpha_n\, |c_{n,\nu}\rangle$ mit $\alpha_n \neq \alpha_m$ für $n \neq m$

Alle Eigenvektoren von A zum gleichen Eigenwert α_n bilden Sub-Raum $\boldsymbol{H}_n$

Wegen (*) gilt für alle $|c_n\rangle \in \boldsymbol{H}_n$ dass $B\,|c_n\rangle \in \boldsymbol{H}_n$, i.e. $B: \boldsymbol{H}_n \rightarrow \boldsymbol{H}_n$

ii) Für $|c_n\rangle \in \boldsymbol{H}_n$ und $|c_m\rangle \in \boldsymbol{H}_m$ mit $n \neq m$ folgt: $\langle c_n|B|c_m\rangle = 0$

$$(\alpha_n - \alpha_m)\, \langle c_n|B|c_m\rangle = \langle \alpha_n c_n|B|c_m\rangle - \langle c_n|B|\alpha_m c_m\rangle = \langle c_n|AB|c_m\rangle - \langle c_n|BA|c_m\rangle = 0$$

α_n, α_m reell

$[A,B] = 0$

Matrixelemente von A:

$$\langle c_{n,\nu}|A|c_{m,\mu}\rangle \;=\; \begin{array}{c|c} & \begin{matrix} \boldsymbol{H}_1 & \boldsymbol{H}_2 & \boldsymbol{H}_3 \end{matrix} \\ \begin{matrix} \boldsymbol{H}_1 \\ \boldsymbol{H}_2 \\ \boldsymbol{H}_3 \end{matrix} & \begin{pmatrix} \alpha_1 E_1 & & \\ & \alpha_2 E_2 & \\ & & \alpha_3 E_3 \\ & & & \ddots \end{pmatrix} \end{array}$$

$E_n \equiv$ Einheitsmatrix in $\boldsymbol{H}_n$

Matrixelemente von B:

$$\langle c_{n,\nu}|B|c_{m,\mu}\rangle \;=\; \begin{array}{c|c} & \begin{matrix} \boldsymbol{H}_1 & \boldsymbol{H}_2 & \boldsymbol{H}_3 \end{matrix} \\ \begin{matrix} \boldsymbol{H}_1 \\ \boldsymbol{H}_2 \\ \boldsymbol{H}_3 \end{matrix} & \begin{pmatrix} \boxed{} & & \\ & \boxed{} & \\ & & \boxed{} \\ & & & \ddots \end{pmatrix} \end{array}$$

wegen i), ii)

Die Matrizen in den Sub-Räumen $\boldsymbol{H}_n$ sind hermitesch: $\langle c_{n,\nu}|B|c_{n,\nu'}\rangle = \langle c_{n,\nu'}|B|c_{n,\nu}\rangle^*$ $\xRightarrow{\text{lineare Algebra}}$

Durch eine Basis-Transformation innerhalb von $\boldsymbol{H}_n$ findet man neue Basisvektoren $\{|b_{n,\nu}\rangle \in \boldsymbol{H}_n\}$,

sodass $\langle b_{n,\nu}|B|b_{n,\nu'}\rangle$ diagonal, i.e. $\langle b_{n,\nu}|B|b_{n,\nu'}\rangle = \beta_{n,\nu}\ \delta_{\nu\nu'}$

Diese Basisvektoren sind gemeinsame Eigenvektoren von A und B

Schrödinger-Gleichung als Operator-Gleichung

$$P = -i\hbar\nabla$$
$$E_{kin} = P^2/2m$$
$$E_{pot} = V(R)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = H|\psi\rangle \;,\; H = E_{kin} + E_{pot} \qquad \text{(S1)}$$

E_{kin} , E_{pot} und H sind selbstadjungiert und haben somit reelle Eigenwerte. In der Regel gibt es eine othonormale Basis $\mathcal{ONB} \equiv \{|n\rangle \in \mathcal{H}\}$ aus Eigenvektoren von H mit reellen Eigenwerten $\mathcal{EV} \equiv \{\varepsilon_n \in \mathbb{R}\}$, (i.e., H ist Observable), sodass

$$H|n\rangle = \varepsilon_n |n\rangle \qquad \text{(S2)}$$

Es gilt: $|n\rangle\, e^{-i\frac{\varepsilon_n}{\hbar}t}$ ist Lösung von (S1)

Die allgemeinste Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung (S1) lautet $|\phi(t)\rangle = \sum_n |n\rangle \exp(-i\frac{\varepsilon_n}{\hbar}t)\, C_n$, wobei C_n beliebige komplexe Zahlen sind.

BEW: Für jede Lösung gilt $|\phi(t)\rangle = \sum_n |n\rangle\, C_n(t)$ mit komplexen Funktionen $C_n(t)$, denn $|n\rangle$ ist Basis.

Aus $H|\phi(t)\rangle = \sum_n |n\rangle\, \varepsilon_n C_n(t)$ und $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\phi(t)\rangle = \sum_n |n\rangle\, i\hbar\frac{\partial}{\partial t} C_n(t)$ folgt $\varepsilon_n C_n(t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} C_n(t)$

und somit $C_n(t) = C_n \exp(-i\frac{\varepsilon_n}{\hbar}t)$

Postulate der Quantenmechanik

Q1. Der Zustand eines physikalischen Systems zu einer festen Zeit t wird durch einen normierten Vektor $\psi \in \boldsymbol{H}$ eines Hilbertraums $\boldsymbol{H}$ beschrieben.

Q2. Jeder beobachtbaren physikalischen Größe ist eine Observable A: $\boldsymbol{H} \rightarrow \boldsymbol{H}$ zugeordnet.

Q3. Das Ergebnis der Messung einer physikalischen Größe ist ein Eigenwert der zugeordneten Observablen

Q4. Die Wahrscheinlichkeit im Zustand ψ den Eigenwert α einer Observablen A zu messen ist:

$$w(\alpha) = \sum_{\{a:\ a \text{ ist EV zu } \alpha\}} |\langle a|\,\psi\rangle|^2$$

Q5. Eine Messung des Eigenwerts α einer Observablen A im Zustand ψ überführt das System in den neuen (projizierten) Zustand:

$$\frac{P_\alpha \psi}{\sqrt{\langle P_\alpha \psi \mid P_\alpha \psi\rangle}} \quad \text{mit} \quad P_\alpha|\psi\rangle = \sum_{\{a:\ a \text{ ist EV zu } \alpha\}} |a\rangle\langle a|\psi\rangle$$

P_α = Projektor auf den Unterraum aller Eigenvektoren zum Eigenwert α

Q6. Die zeitliche Entwicklung eines Zustands $|\psi\rangle$ wird durch die Schrödinger Gleichung bestimmt:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = H\,|\psi\rangle\,, \quad H \equiv \text{Operator der Gesamt-Energie} \quad \text{(Hamilton-Operator)}$$

Folgerung

Betrachte eine Serie von unabhängigen Messungen α_i, i = 1,... einer Observablen A im Zustand ψ

BEH: Der mittlere Meßwert $\bar{\alpha}$ ist der Erwartungswert: $\langle\psi \mid A \mid \psi\rangle$

BEW:

$$\bar{\alpha} \overset{Q3}{=} \sum_{\{\text{Eigenwerte } \alpha\}} \alpha \; w(\alpha) \overset{Q4}{=} \sum_{\{\text{Eigenwerte } \alpha\}} \; \sum_{\{\text{a ist EV zu } \alpha\}} \alpha \; |\langle a|\psi\rangle|^2$$

$$= \sum_{\{\text{a ist EV}\}} \alpha \; |\langle a|\psi\rangle|^2 \qquad = \sum_{\{\text{a ist EV}\}} \alpha \; \langle\psi|a\rangle \, \langle a|\psi\rangle \qquad = \sum_{\{\text{a ist EV}\}} \langle A\psi|a\rangle\langle a|\psi\rangle$$

$$= \langle A\psi| \left(\sum_{\{\text{a ist EV}\}} |a\rangle\langle a| \right) |\psi\rangle \quad = \quad \langle A\psi|\psi\rangle \;=\; \langle\psi|A|\psi\rangle$$

Beispiel Ortsmessung:

Q3. → Das Ergebnis einer Ortsmessung ist ein Eigenwert des Ortsoperators R

Q4. → Die Wahrscheinlichkeit im Zustand ψ den Eigenwert r der Observablen R zu messen ist:

$$w(r) = \sum_{\{|r\rangle \text{ ist EV zu } r\}} |\langle r|\psi\rangle|^2 = |\langle r|\psi\rangle|^2 = \left| \int d^3r' \; \delta(r' - r)\psi(r') \right|^2 = |\psi(r)|^2$$

Korrespondenz zwischen klassischen Größen und Observablen:

Klassische physikalische Größen lassen sich als Funktion von Ort und Impuls schreiben: $A = A(r,p)$. Für Funktionen $A(r)$ bzw. $A(p)$ erhält man die korrespondierenden quantenmechanischen Größen indem man Orts und Impuls-Variable durch die Operatoren R und P ersetzt.

Da $[R_\nu, P_\mu] = i\hbar\, \delta_{\nu\mu} \neq 0$ ist diese Ersetzung für Funktionen $A(r,p)$ nicht eindeutig. In diesem Fall ist die Ersetzungsvorschrift durch eine Symmetrisierungsregel zu ergänzen:

BSP: $A(r, p) = F(r_x \cdot p_x)$

$R_x \cdot P_x$ ist kein selbstadjungierter Operator: $(R_x \cdot P_x)^+ = P_x^+ \cdot R_x^+ = P_x \cdot R_x \neq R_x \cdot P_x$

jedoch $\frac{1}{2}(R_x \cdot P_x + P_x \cdot R_x)$ ist selbstadjungiert.

Man ersetzt zunächst $r_x \cdot p_x \rightarrow \{r_x, p_x\} \equiv (r_x \cdot p_x + p_x \cdot r_x)/2$ und dann $r_x, p_x \rightarrow R_x, P_x$

Für komplexere Funktionen $A(r,p)$ ist die Zuordnung eines selbstadjungierten Operators nicht eindeutig.

BSP: $A(r, p) = F(r_x \cdot r_x \cdot p_x)$

Sowohl $R_x \cdot P_x \cdot R_x$ als auch $\frac{1}{2}(R_x \cdot R_x \cdot P_x + P_x \cdot R_x \cdot R_x)$ sind selbstadjungiert

Die Quantenmechanik kennt viele Observable, für die es kein klassisches Analogon gibt.

Störung eines beschränkten Operators:

!

Fragestellung: Wie verändern sich Eigenwerte eines selbstadjungierten Operators A unter dem Einfluß einer kleinen Störung λ S.

A, S seien beschränkte Operatoren auf $\boldsymbol{H}$, i.e., $\exists$ positive Konstanten c_A, c_S :

$$|\langle\phi|A|\psi\rangle|^2 < c_A \langle\phi|\phi\rangle\langle\psi|\psi\rangle, \ |\langle\phi|S|\psi\rangle|^2 < c_S \langle\phi|\phi\rangle\langle\psi|\psi\rangle \quad \text{für alle } \phi,\psi \in \boldsymbol{H}$$

$A\,|a\rangle = \alpha\,|a\rangle$, $|a\rangle$ normiert $\langle a|a\rangle = 1$

$B \equiv A + \lambda S$, λS bewirke nur eine kleine Störung von A : λ reell positiv, $\lambda << 1$

Gesucht: Eigenwert β von B, sodass:

$B\,|b\rangle = \beta\,|b\rangle$ mit $|b\rangle \approx |a\rangle + \varepsilon\,|a'\rangle$, $\langle a|a'\rangle = 0$, $\langle a'|a'\rangle = 1$, ε reell positiv, $\lambda << 1 \Rightarrow \varepsilon << 1$

$$\beta = \langle b|\,B\,|b\rangle = \langle a|\,B\,|a\rangle + \varepsilon\,\langle a|\,B\,|a'\rangle + \varepsilon\,\langle a'|\,B\,|a\rangle + \varepsilon^2\,\langle a'|\,B\,|a'\rangle$$

$$= \langle a|\,A\,|a\rangle + \varepsilon\,\cancel{\langle a|\,A\,|a'\rangle} + \varepsilon\,\cancel{\langle a'|\,A\,|a\rangle} + \varepsilon^2\,\langle a'|\,A\,|a'\rangle$$

verwende: $A=A^+$, $\langle a|a'\rangle = 0$, $A|a\rangle = \alpha\,|a\rangle$

$$+ \lambda\,\langle a|\,S\,|a\rangle + \lambda\,\varepsilon\langle a|\,S\,|a'\rangle + \lambda\,\varepsilon\,\langle a'|\,S\,|a\rangle + \lambda\,\varepsilon^2\,\langle a'|\,S\,|a'\rangle$$

$$= \alpha + \varepsilon^2\,\cancel{\langle a'|\,A\,|a'\rangle} + \lambda\,\langle a|\,S\,|a\rangle + \lambda\,\varepsilon\,\cancel{\langle a|\,S\,|a'\rangle} + \lambda\,\varepsilon\,\cancel{\langle a'|\,S\,|a\rangle} + \lambda\,\varepsilon^2\,\cancel{\langle a'|\,S\,|a'\rangle}$$

$$\approx \alpha + \lambda\,\langle a|\,S\,|a\rangle = \alpha + \langle a|\,\lambda S\,|a\rangle$$

verwende: $\varepsilon << 1$, $\lambda << 1$, $|\langle a'|\,A\,|a'\rangle|^2 < c_A$, $|\langle a|\,S\,|a'\rangle|^2 < c_S$

Eigenwerte und Eigenvektoren des Orts – und Impuls-Operators

Ortsraum $\boldsymbol{H}_R$:

$$R : \boldsymbol{H}_R \to \boldsymbol{H}_R\,, \quad R\,\psi(r) \;=\; r\,\psi(r)$$

$$P : \boldsymbol{H}_R \to \boldsymbol{H}_R\,, \quad P\,\psi(r) \;=\; -i\hbar\nabla_r\,\psi(r)$$

Impulsraum $\boldsymbol{H}_P$:

$$R : \boldsymbol{H}_P \to \boldsymbol{H}_P\,, \quad R\,\phi(p) \;=\; i\hbar\nabla_p\,\phi(p)$$

$$P : \boldsymbol{H}_P \to \boldsymbol{H}_P\,, \quad P\,\phi(p) \;=\; p\,\phi(p)$$

$-i\nabla_r$	r
$\updownarrow$ FT	$\updownarrow$
k	$i\nabla_k$

Wirkungsweise von P in $\boldsymbol{H}_P$:

$$\mathrm{FT}\,[\,P\psi(r)\,] \;=\; \mathrm{FT}\,[\,-i\hbar\nabla_r\,\psi(r)\,] \;=\; -i\hbar\,\mathrm{FT}\,[\,\nabla_r\,\psi(r)\,] \;=\; \hbar k\,\phi(k) \;=\; p\,\phi(p)$$

Wirkungsweise von R in $\boldsymbol{H}_P$:

$$\mathrm{FT}\,[\,R\psi(r)\,] \;=\; \mathrm{FT}\,[\,r\,\psi(r)\,] \;=\; i\,\nabla_k\,\mathrm{FT}\,[\,\psi(r)\,] \;=\; i\nabla_k\phi(k) \;=\; i\hbar\nabla_p\phi(p)$$

Es zeigt sich: R und P besitzen keine Eigenvektoren in $\boldsymbol{H}_R$ bzw. $\boldsymbol{H}_P$

jedoch in den größeren Räumen $\boldsymbol{H'}_R$ und $\boldsymbol{H'}_P$

$\boldsymbol{H'}_R \supset \boldsymbol{H}_R$, $\boldsymbol{H'}_R$ = Raum aller Funktionen $\mathbb{R}^3 \to \mathbb{C}$ (inkl. Dirac'scher Delta-Funktion)

$\boldsymbol{H'}_P \supset \boldsymbol{H}_P$, $\boldsymbol{H'}_P$ = Raum aller Funktionen $\mathbb{R}^3 \to \mathbb{C}$

Eigenvektoren von R und P in $\boldsymbol{H'}_R$:

$$|r_0\rangle \equiv \delta(r-r_0) \qquad R|r_0\rangle = R\,\delta(r-r_0) = r\,\delta(r-r_0) = r_0\,\delta(r-r_0) = r_0\,|r_0\rangle$$

$$|p_0\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,e^{i\frac{p_0}{\hbar}r} \qquad P|p_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,P\,e^{i\frac{p_0}{\hbar}r} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,p_0\,e^{i\frac{p_0}{\hbar}r} = p_0\,|p_0\rangle$$

$\Bigg\} \notin \boldsymbol{H}_R$

$\updownarrow$ FT

Eigenvektoren von R und P in $\boldsymbol{H'}_P$:

$$|r_0\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,e^{-i\frac{p}{\hbar}r_0} \qquad R|r_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,R\,e^{-i\frac{p}{\hbar}r_0} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,r_0\,e^{-i\frac{p}{\hbar}r_0} = r_0\,|r_0\rangle$$

$$|p_0\rangle \equiv \delta(p-p_0) \qquad P|p_0\rangle = P\,\delta(p-p_0) = p\,\delta(p-p_0) = p_0\,\delta(p-p_0) = p_0\,|p_0\rangle$$

$\Bigg\} \notin \boldsymbol{H}_P$

Resumé: R, P haben keine Eigenvektoren in $\boldsymbol{H}_R$ bzw. $\boldsymbol{H}_P$. Jedoch: $\boldsymbol{H}_R$ bzw. $\boldsymbol{H}_P$ sind in größere Räume eingebettet, in denen Eigenzustände für R und P existieren. Diese bilden eine Orthonormalbasis:

$$\langle r|r'\rangle = \delta(r - r'), \quad \int d^3r\ |r\rangle\langle r| = \mathbb{1}$$

$$\langle p|p'\rangle = \delta(p - p'), \quad \int d^3p\ |p\rangle\langle p| = \mathbb{1}$$

BEW:

$$\langle r|\psi(r')\rangle = \int d^3r'\,\delta(r'-r)\,\psi(r') = \psi(r) \Rightarrow \left(\int d^3r\,|r\rangle\langle r|\right)|\psi(r')\rangle = \int d^3r\,|r\rangle\,\psi(r) = \int d^3r\,\delta(r'-r)\,\psi(r) = |\psi(r')\rangle$$

$$\langle p|\psi(r)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int d^3r\ e^{-i\frac{p}{\hbar}r}\,\psi(r) = \phi(p) \Rightarrow \left(\int d^3r\,|p\rangle\langle p|\right)|\psi(r)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int d^3r\ e^{i\frac{p}{\hbar}r}\,\phi(p) = |\psi(r)\rangle$$

Ü BSP: Erwartungswerte und Varianz von R, P:

$$\langle r|\psi(r')\rangle = \int d^3r'\ \delta(r'-r)\ \psi(r') = \psi(r)$$

Betrachte Ortsraum $\boldsymbol{H}_R$: $R : \boldsymbol{H}_R \to \boldsymbol{H}_R\ ,\quad R\,|\psi(r)\rangle \;=\; r\ |\psi(r)\rangle$

$$\langle R\rangle \equiv \langle\psi(r)\,|\,R\,|\psi(r)\rangle = \int d^3r\ \psi^*(r)\ r\ \psi(r) = \underbrace{\int d^3r\ \ r\ |\psi(r)|^2}_{\langle r\rangle} = \int d^3r\ \ r\ \ \underbrace{|\langle r|\ \psi(r)\rangle|^2}_{w_r}$$

vergl. (5.2)

Eigenwert von R zum Eigenvektor $|r\rangle$

$$(\Delta R)^2 \equiv \langle\psi(r)\,|\,(R-\langle R\rangle)^2\,|\psi(r)\rangle = \int d^3r\ \psi^*(r)\ (r-\langle R\rangle)^2\ \psi(r) = \int d^3r\ (r-\langle r\rangle)^2\ |\psi(r)|^2 = (\Delta r)^2$$

Betrachte Impulsraum $\boldsymbol{H}_P$: $P : \boldsymbol{H}_P \to \boldsymbol{H}_P\ ,\quad P\,|\phi(p)\rangle \;=\; p\ |\phi(p)\rangle$

$$\langle P\rangle \equiv \langle\phi(p)\,|\,P\,|\phi(p)\rangle = \int d^3p\ \phi^*(p)\ p\ \phi(p) = \int d^3p\ \ p\ |\phi(p)|^2 = \langle p\rangle$$

$$(\Delta P)^2 \equiv \langle\phi(p)\,|\,(P-\langle P\rangle)^2\,|\phi(p)\rangle = \int d^3p\ \phi^*(p)\ (p-\langle P\rangle)^2\ \phi(p) = \int d^3p\ (p-\langle p\rangle)^2\ |\phi(p)|^2 = (\Delta p)^2$$

Ü Ehrenfest Theorem

A(t) ein Operator auf ***H*** und $i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = H |\psi\rangle$, $H \equiv$ Hamilton-Operator

$$\frac{d}{dt} \langle A(t)\rangle_\psi = \frac{1}{i\hbar} \langle\, [A(t), H\,]\, \rangle_\psi + \langle \frac{\partial}{\partial t} A(t)\rangle_\psi$$

Im Ortsraum sei $i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = H |\psi\rangle$ mit Hamilton-Operator $H \equiv P^2/2m + V(R)$

$$\Rightarrow \quad \begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle R\rangle_\psi &= \frac{1}{m} \langle\, P\, \rangle_\psi \\ \frac{d}{dt} \langle P\rangle_\psi &= \langle\, \nabla V(R)\, \rangle_\psi \end{aligned}$$

Falls $\langle\, \nabla V(R)\, \rangle_\psi = \nabla V(\, \langle R\rangle_\psi)$, bewegt sich $\langle R\rangle_\psi$ auf einer Newton'schen Bahn

Achtung, im Allgemeinen ist $\langle\, \nabla V(R)\, \rangle_\psi \neq \nabla V(\, \langle R\rangle_\psi)$

Betrachte ein extrem lokalisiertes Wellenpaket mit $|\psi(r)|^2 \approx \delta(r - \langle R\rangle_\psi)$

$$\langle\, \nabla V(R)\, \rangle_\psi = \int_{-\infty}^{\infty} dr\ \psi(r)^* \, \nabla V(r)\, \psi(r) \approx \nabla V(\, \langle R\rangle_\psi\,)$$

Mehrteilchen-Wellenfunktionen

BSP zwei Teilchen:

Gegeben seien zwei Einteilchen-Wellenfunktionen $\phi(r_1)$, $\psi(r_2) \in \boldsymbol{H}$, die zwei voneinander unabhängige Teilchen (1) und (2) beschreiben.

Die gemeinsame Zweiteilchen-Wellenfunktion ist das Produkt $\phi(r_1) \cdot \psi(r_2)$. In diesem Fall ist

$$| \phi(r_1) \cdot \psi(r_2)|^2 = |\phi(r_1)|^2 \, |\psi(r_2)|^2$$

i.e., man hat unkorrelierte Wahrscheinlichkeitsdichten. Position von Teilchen (1) hängt nicht von Position von Teilchen (2) ab und umgekehrt.

Gemäß Superpositionsprinzip sind alle Superpositionen von Produktwellenfunktionen zulässige Wellenfunktionen. Diese bilden den Produktraum:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{H} \otimes \boldsymbol{H} &\equiv \{ \text{ Alle Linear-Kombinationen von } \phi(r_1) \cdot \psi(r_2) \} \\ &= \{ \text{ Alle quadrat-integrablen Funktionen } \chi(r_1, r_2) \text{ der Variablen } r_1, r_2 \} \end{aligned}$$

Die allermeisten Mitglieder von $\boldsymbol{H} \otimes \boldsymbol{H}$ sind keine Produktzustände und werden als verschränkt bezeichnet.

BSP für verschränkten Zustand: $\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\phi(r_1) \cdot \psi(r_2) + \psi(r_1) \cdot \phi(r_2) \right)$

Produkt-Räume:

Seien $\boldsymbol{H}_A$ und $\boldsymbol{H}_B$ zwei Hilberträume, $|a\rangle \in \boldsymbol{H}_A$, $|b\rangle \in \boldsymbol{H}_B$:

Produkt-Zustände: $|a\rangle \otimes |b\rangle \equiv |a\rangle|b\rangle \equiv |a, b\rangle$

mit

$$\lambda\,|a\rangle \otimes |b\rangle \equiv (\lambda|a\rangle) \otimes |b\rangle \equiv |a\rangle \otimes (\lambda|b\rangle)$$

$$|a_1\rangle \otimes |b\rangle + |a_2\rangle \otimes |b\rangle \equiv (|a_1\rangle + |a_2\rangle) \otimes |b\rangle$$

$$|a\rangle \otimes |b_1\rangle + |a\rangle \otimes |b_2\rangle \equiv |a\rangle \otimes (|b_1\rangle + |b_2\rangle)$$

Skalarprodukt: $\Big\langle\, |a_1\rangle \otimes |b_1\rangle \,\Big|\, |a_2\rangle \otimes |b_2\rangle \,\Big\rangle \equiv \langle a_1|a_2\rangle\langle b_1|b_2\rangle$

Produkt-Raum: $\boldsymbol{H}_A \otimes \boldsymbol{H}_B \equiv$ { Alle Linear-Kombinationen von Produkten $|a\rangle \otimes |b\rangle$ }

Bemerkung: Die meisten Zustände in $\boldsymbol{H}_A \otimes \boldsymbol{H}_B$ sind keine Produkte

z. B. : $|\psi\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\,(\,|a_1\rangle \otimes |b_1\rangle + |a_2\rangle \otimes |b_2\rangle\,)$

Solche Zustände heißen verschränkt

Es seien $A : \boldsymbol{H}_A \rightarrow \boldsymbol{H}_A$, $B : \boldsymbol{H}_B \rightarrow \boldsymbol{H}_B$ Operatoren auf $\boldsymbol{H}_A$ bzw. $\boldsymbol{H}_B$:

Produkt-Operator: $A \otimes B : \boldsymbol{H}_A \otimes \boldsymbol{H}_B \rightarrow \boldsymbol{H}_A \otimes \boldsymbol{H}_B$

$$A \otimes B \; |a\rangle \otimes |b\rangle \;\equiv\; A\,|a\rangle \;\otimes\; B\,|b\rangle$$

$$A \otimes B \quad \sum_{n \in \boldsymbol{N}} c_n \; |a_n\rangle \otimes |b_n\rangle \;\equiv\; \sum_{n \in \boldsymbol{N}} c_n \;\; A|a_n\rangle \otimes B|b_n\rangle$$

Natürliche Erweiterung eines Operators $A : \boldsymbol{H}_A \rightarrow \boldsymbol{H}_A$: $\quad A \otimes 1_B \; |a\rangle \otimes |b\rangle \;\equiv\; A\,|a\rangle \;\otimes\; |b\rangle$

$1_B \equiv$ Einheitsoperator auf $\boldsymbol{H}_B$

6. Elementare Quantensysteme

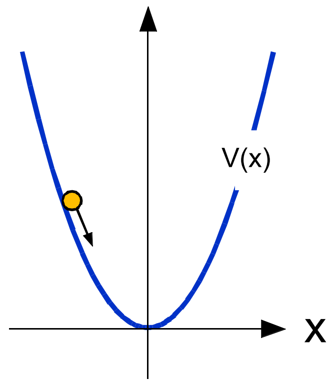
Eindimensionaler harmonischer Oszillator

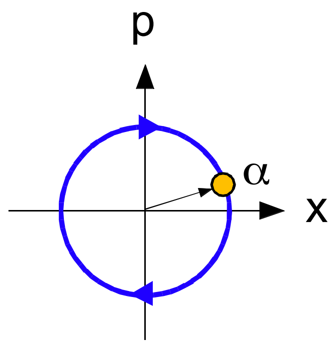
Klassischer Fall:

$$H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega^2 x^2 , \quad \omega = \text{Schwingungsfrequenz im Potential } V(x) = \frac{m}{2}\omega^2 x^2$$

$$x(t) = x_0 \sin(\omega t + \theta)$$

$$p(t) = m\,\omega\, x_0 \cos(\omega t + \theta)$$





Phasenraum-Darstellung

Definiere einheitenlose Größe:

$$\alpha \equiv \frac{1}{\sqrt{2}\,\xi}\, x + i\,\frac{\xi}{\sqrt{2}\,\hbar}\, p , \qquad \xi \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \text{ = Längeneinheit}$$

$$x = \frac{\xi}{\sqrt{2}}(\alpha^* + \alpha) \propto \mathrm{Re}(\alpha)$$

$$p = \frac{i\hbar}{\sqrt{2}\,\xi}(\alpha^* - \alpha) \propto \mathrm{Im}(\alpha)$$

$\Rightarrow$

$$H(x,p) = \hbar\omega\; \alpha^*\alpha$$

$$\alpha(t) = \alpha(0)\, e^{i\omega t}$$

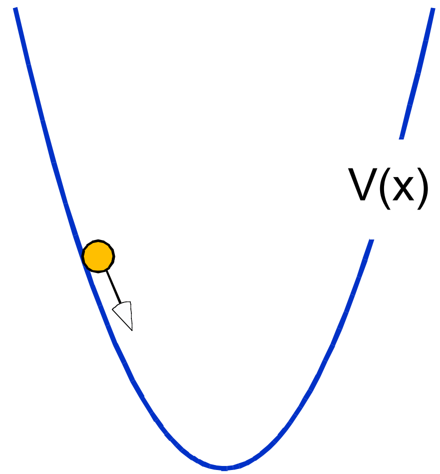
Eindimensionaler harmonischer Oszillator

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega^2 X^2 , \quad \omega = \text{Schwingungsfrequenz im Potential } V(x) = \frac{m}{2}\omega^2 x^2$$

Definiere einheitenlose Operatoren: $a \equiv \frac{1}{\sqrt{2}\,\xi} X + i \frac{\xi}{\sqrt{2}\,\hbar} P$, $\xi \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$

$$N \equiv a^+ a$$

Ü Eigenschaften von a bzw. N :



6.1) $a^+ \equiv \frac{1}{\sqrt{2}\,\xi} X - i \frac{\xi}{\sqrt{2}\,\hbar} P$ adjungierter Operator

6.2) $X = \frac{\xi}{\sqrt{2}} (a^+ + a)$ $\qquad P = \frac{i\hbar}{\sqrt{2}\,\xi} (a^+ - a)$

6.3) $[a, a^+] = 1$

6.4) $N^+ = N$

6.5) $H = \hbar\omega \left(N + \frac{1}{2}\right)$ es folgt, dass die Eigenvektoren von H und N identisch sind

6.6) $2N = \frac{1}{\xi^2} X^2 - \xi^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} - 1$

Verwende $X^+ = X$, $P^+ = P$, $[X,P] = i\hbar$, $P = -i\,\hbar \dfrac{\partial}{\partial x}$, $\xi^2 = \dfrac{\hbar}{m\omega}$

$$a \equiv \frac{1}{\sqrt{2}\,\xi} X + i \frac{\xi}{\sqrt{2}\,\hbar} P\,, \quad a^+ \equiv \frac{1}{\sqrt{2}\,\xi} X - i \frac{\xi}{\sqrt{2}\,\hbar} P$$

BEW zu 6.3):

$$[a, a^+] = [\,2^{-1/2}\xi^{-1} X, -i\, 2^{-1/2}\xi\,\hbar^{-1} P] + [\,i\, 2^{-1/2}\xi\,\hbar^{-1} P, 2^{-1/2}\xi^{-1} X]$$

$$= 2^{-1}\hbar^{-1}[\,X, -i\,P] + 2^{-1}\hbar^{-1}[\,i\,P, X] = -i\hbar^{-1}[\,X,P] = 1$$

BEW zu 6.6):

$$2N = 2\,a^+a = 2\,(2^{-1/2}\xi^{-1} X - i\,2^{-1/2}\xi\,\hbar^{-1} P)\,(2^{-1/2}\xi^{-1} X + i\,2^{-1/2}\xi\,\hbar^{-1} P)$$

$$= \xi^{-2} X^2 + \xi^2 \hbar^{-2} P^2 + i\,\hbar^{-1} X P - i\,\hbar^{-1} P X$$

$$= \xi^{-2} X^2 + \xi^2 \hbar^{-2} P^2 + i\,\hbar^{-1} [X, P] = \xi^{-2} X^2 + \xi^2 \hbar^{-2} P^2 - 1 = \frac{1}{\xi^2} X^2 - \xi^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} - 1$$

BEW zu 6.5): $2N + 1 \underset{(6.6)}{=} \xi^{-2} X^2 + \xi^2 \hbar^{-2} P^2$

$$\Rightarrow \quad 2\,\hbar\omega\,(N + 1/2) = m\,\omega^2 X^2 + m^{-1} P^2 = 2\,H$$

Struktur der Eigenwerte und Eigenzustände von N:

6.7) Sei ψ_0 Eigenvektor von N zum Eigenwert c_0 : $N\,\psi_0 = c_0\,\psi_0\,,\quad \langle\psi_0|\psi_0\rangle = 1$

dann folgt:

c_0 reell und $c_0 \geq 0$ und für n = 1,2,3,... $\quad \psi_n \equiv \dfrac{1}{(1+c_0)^{1/2}\cdots(n+c_0)^{1/2}}\,(a^+)^n\,\psi_0$

ist Eigenvektor zum Eigenwert $c_n \equiv n + c_0$ (Leiter äquidistanter Eigenzustände)

6.8) Für $\quad \psi_0(x) \equiv \dfrac{1}{\pi^{1/4}\,\xi^{1/2}}\exp\left(-\dfrac{1}{2}\left(\dfrac{x}{\xi}\right)^2\right)$ gilt: $\langle\psi_0|\psi_0\rangle = 1\,,\quad N\,\psi_0 = 0$

und somit ist ψ_0 ein Eigenvektor von N zum Eigenwert $c_0 = 0$. Es folgt: $\psi_n = (n!)^{-1/2}\,(a^+)^n\,\psi_0$ ist Eigenvektor zum Eigenwert $c_n = n$, n = 0,1,2,... .

BEW: 6.7) $c_0 = \langle\psi_0\,|\,N\,\psi_0\rangle = \langle a\,\psi_0\,|\,a\,\psi_0\rangle \geq 0$

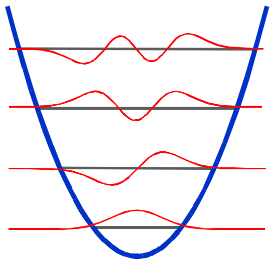
$$n = 1: \quad N\;a^+\psi_0 = a^+a\;a^+\psi_0 \underset{(6.3)}{=} a^+(1+N)\,\psi_0 = (1+c_0)\,a^+\psi_0$$

$$\langle a^+\psi_0|a^+\psi_0\rangle = \langle a\,a^+\psi_0|\psi_0\rangle \underset{(6.3)}{=} \langle(1+N)\,\psi_0|\psi_0\rangle = (1+c_0)$$

BEW: 6.8) $\quad 2N\,\psi_0 \underset{(6.6)}{=} \left(\dfrac{1}{\xi^2}\,X^2 - \xi^2\,\dfrac{\partial^2}{\partial x^2} - 1\right)\psi_0 = 0$

Eigenwerte und Eigenzustände von H: $\varepsilon\ \phi = H\ \phi$

6.9) $$H\,\psi_n \overset{(6.5),(6.7)}{=} \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)\psi_n$$



$$\psi_0(x) \equiv \frac{1}{\pi^{1/4}\,\xi^{1/2}}\exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{\xi}\right)^2\right)$$

$$\psi_n \overset{(6.7)}{\equiv} \frac{1}{\sqrt{n!}}\,(a^+)^n\,\psi_0 \overset{(6.1)}{=} \frac{1}{\sqrt{n!\,2^n}}\,H_n(x/\xi)\,\psi_0(x)$$

$H_n(z)$ = Hermite-Polynom n-ter Ordnung

$$H_n(z) \equiv \left(2z - \frac{\partial}{\partial z}\right)^n 1$$

Bedeutung von a^+ und a:

6.10) $a^+\,\psi_n = (n+1)^{1/2}\ \psi_{n+1}$ für $n \geq 0$

Erzeuger:
erzeugt ein Oszillator-Quant

$a\ \psi_n = n^{1/2}\ \psi_{n-1}$ für $n > 0$

$a\ \psi_0 = 0$

Vernichter:
vernichtet ein Oszillator-Quant

$N\ \psi_n = n\ \psi_n$ für $n \geq 0$

Zähl-Operator: zählt die
Anzahl angeregter Oszillator-Quanten

Harmonischer Oszillator auf einen Blick:

Eigenwerte: $\varepsilon_n = \hbar\omega\,(n + \frac{1}{2})\,,\quad n = 0,1,2,...$ Äquidistante Energieniveaus

Eigenzustände: $\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!\,2^n}}\,\frac{1}{\pi^{1/4}\,\xi^{1/2}}\,H_n(z)\,\exp(-z^2/2)\,,\quad z = x/\xi$

Grundzustand: $\psi_0(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}\,\xi^{1/2}}\,\exp(-z^2/2)\,,$

1/e - Radius der Aufenthalts-wahrscheinlichkeit: ξ

Stationäre Lösugen der zeitabhängigen Schrödinger Gleichung:

$$\psi_n(x,t) = \psi_n(x)\,\exp(-i\,\frac{\varepsilon_n}{\hbar}\,t)$$

Erzeuger & Vernichter: $a^+\,\psi_n = \sqrt{n+1}\,\psi_{n+1}\,,\quad a\,\psi_n = \sqrt{n}\,\psi_{n-1}$

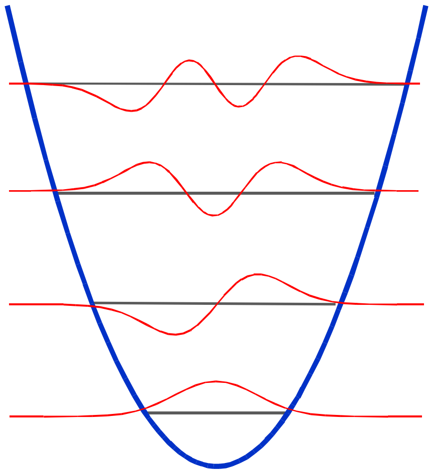
Allgemeine Lösung der zeitabhängigen Schrödunger Gleichung: $\psi(x,t) = \sum_n \chi_n\,\psi_n(x,t)$

$\varepsilon_3 = \frac{7}{2}\,\hbar\omega$

$\varepsilon_2 = \frac{5}{2}\,\hbar\omega$

$\varepsilon_1 = \frac{3}{2}\,\hbar\omega$

$\varepsilon_0 = \frac{1}{2}\,\hbar\omega$



$H_3(z) = 8\,z^3 - 12\,z$

$H_2(z) = 4\,z^2 - 2$

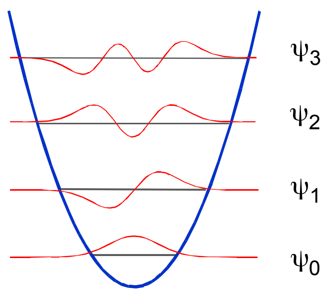
$H_1(z) = 2\,z$

$H_0(z) = 1$

Quasi-klassische Zustände:

Die Zustände scharfer Energie ψ_n sind über das gesamte Potential delokalisiert und haben wenig Ähnlichkeit mit den vertrauten Zuständen des klassischen Oszillators

Im Zustand ψ_n gilt:



$$\langle X \rangle_n = \langle \psi_n | X \psi_n \rangle = 0 \qquad \Delta_n X = \xi \sqrt{n + 1/2}$$

$$\langle P \rangle_n = \langle \psi_n | P \psi_n \rangle = 0 \qquad \Delta_n P = \frac{\hbar}{\xi} \sqrt{n + 1/2}$$

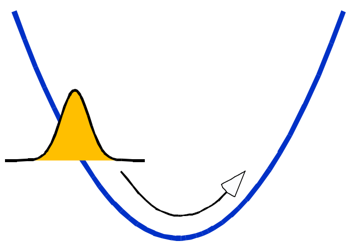
$$\Delta_n X \, \Delta_n P = (n + 1/2)\,\hbar$$

$\rightarrow$ nur für n = 0 minimales Unschärfe-Produkt

Frage: was sind die maximal klassischen Zustände, welche die Quantenmechanik zuläßt?

Von solchen quasi-klassischen Zuständen erwartet man

minimale Unschärfe: $\Delta X \, \Delta P = \hbar/2$



oszillierende Erwartungswerte: $\langle X \rangle \propto \cos(\omega t - \theta)$

$$\langle P \rangle = m \frac{\partial}{\partial t} \langle X \rangle$$

Definiere “quasi-klassische” Zustände: $\forall\ \alpha \in \mathbb{C}: \quad \phi_\alpha \equiv \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\, \psi_n$

6.11) Zeitentwicklung: $\phi_\alpha(t) = \exp\left(-\frac{|\alpha|^2 + i\omega t}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha\, e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}}\, \psi_n$

BEW: $\phi_\alpha(t) = \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\, \psi_n(t)$ mit $\psi_n(t) = \psi_n \exp\left(-i \frac{\varepsilon_n}{\hbar} t\right) = \psi_n\, e^{-in\omega t}\, e^{-i\omega t/2}$

6.12) $\phi_\alpha(t)$ ist Eigenzustand des Vernichtungsoperators a zum Eigenwert $\alpha(t) = \alpha\, e^{-i\omega t}$:

BEW: $a\, \phi_\alpha(t) = \exp\left(-\frac{|\alpha|^2 + i\omega t}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha(t)^n}{\sqrt{n!}}\, a\, \psi_n = \exp\left(-\frac{|\alpha|^2 + i\omega t}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha(t)^n}{\sqrt{n!}} \sqrt{n}\, \psi_{n-1}$

$$= \alpha(t)\ \exp\left(-\frac{|\alpha|^2 + i\omega t}{2}\right) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha(t)^{n-1}}{\sqrt{(n-1)!}}\, \psi_{n-1} = \alpha(t)\, \phi_\alpha(t)$$

6.13) Ü Die quasi-klassischen Zustände sind fast orthonormal: $|\langle \phi_\alpha | \phi_\beta \rangle|^2 = \exp(-|\alpha - \beta|^2)$

6.14) Wahrscheinlichkeit im Zustand $\phi_\alpha(t)$ genau n Oszillator-Quanten zu finden:

$$\langle\psi_m|\phi_\alpha(t)\rangle \underset{(6.11)}{=} \exp\left(-\frac{|\alpha|^2 + i\omega t}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha\, e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}} \langle\psi_m|\psi_n\rangle = \exp\left(-\frac{|\alpha|^2 + i\omega t}{2}\right) \frac{(\alpha\, e^{-i\omega t})^m}{\sqrt{m!}}$$

$$P_\alpha(n) \equiv |\langle\phi_\alpha(t)|\psi_n\rangle|^2 = \exp(-|\alpha|^2)\,\frac{|\alpha|^{2n}}{n!} \quad \rightarrow \quad \text{Poisson Verteilung}$$

6.15) Mittlere Anzahl von Oszillator-Quanten im Zustand $\phi_\alpha(t)$: $\langle N\rangle_\alpha = |\alpha|^2$

$$\langle N\rangle_\alpha = \langle\phi_\alpha(t)|\, N\, \phi_\alpha(t)\rangle = \langle\phi_\alpha(t)|\, a^+a\, \phi_\alpha(t)\rangle = \langle a\, \phi_\alpha(t)|\, a\, \phi_\alpha(t)\rangle \underset{(6.12)}{=} \langle\alpha(t)\, \phi_\alpha(t)|\, \alpha(t)\, \phi_\alpha(t)\rangle$$

$$= |\alpha|^2 \langle\phi_\alpha(t)|\, \phi_\alpha(t)\rangle = |\alpha|^2$$

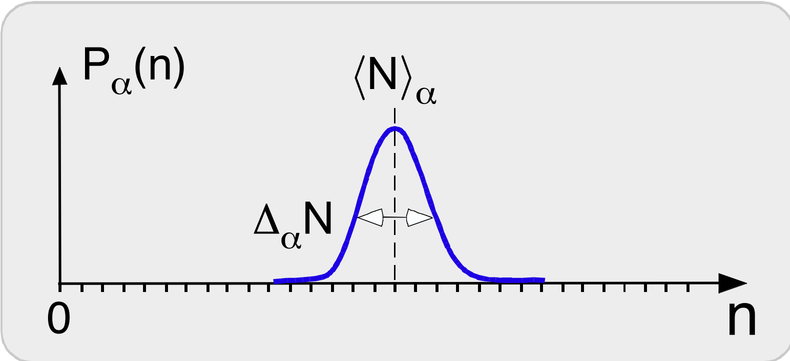
6.16) Unschärfe der Anzahl von Oszillator-Quanten im Zustand $\phi_\alpha(t)$: $\Delta_\alpha N = \sqrt{\langle N\rangle_\alpha}$

$$N^2 = a^+ a\, a^+ a \underset{(6.3)}{=} a^+ a + a^+ a^+ a\, a$$

$$\langle N^2\rangle_\alpha = \langle\phi_\alpha(t)|\, N^2\, \phi_\alpha(t)\rangle = \langle a\phi_\alpha(t)|\, a\, \phi_\alpha(t)\rangle + \langle a^2\phi_\alpha(t)|\, a^2\, \phi_\alpha(t)\rangle \underset{(6.12)}{=} |\alpha|^2 + |\alpha|^4$$

$$\langle N\rangle_\alpha^{\,2} \underset{(6.15)}{=} |\alpha|^4$$

$$\Delta_\alpha N = \sqrt{\langle N^2\rangle_\alpha - \langle N\rangle_\alpha^{\,2}} = |\alpha| \underset{(6.15)}{=} \sqrt{\langle N\rangle_\alpha}$$



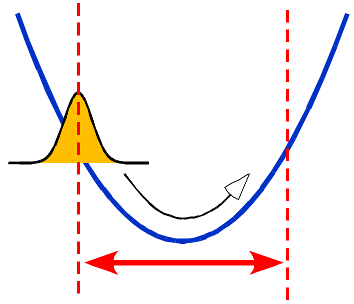
Erwartungswerte und Varianzen von X und P im Zustand $\phi_\alpha(t)$, $\alpha = |\alpha|\, e^{i\theta}$:

a. $\langle X\rangle_\alpha = \sqrt{2}\,\xi\,|\alpha|\,\cos(\omega t - \theta)$ Schwingung mit

Ü b. $\langle P\rangle_\alpha = m\,\frac{\partial}{\partial t}\langle X\rangle_\alpha$

c. $\Delta_\alpha X = \frac{\xi}{\sqrt{2}}$, $\Delta_\alpha P = \frac{\hbar}{\sqrt{2}\,\xi}$ hängt nicht von Amplitude α ab

d. $\Delta_\alpha X\, \Delta_\alpha P = \hbar/2 \quad \rightarrow$ minimales Unschärfe-Produkt



BEW:

a. $$\langle X\rangle_\alpha = \langle\phi_\alpha(t)|\,X\,\phi_\alpha(t)\rangle \underset{(6.2)}{=} \frac{\xi}{\sqrt{2}}\langle\phi_\alpha(t)|\,(a^+ + a)\,\phi_\alpha(t)\rangle = \frac{\xi}{\sqrt{2}}\Big(\langle a\,\phi_\alpha(t)|\,\phi_\alpha(t)\rangle + \langle\phi_\alpha(t)|\,a\,\phi_\alpha(t)\rangle\Big)$$

$$\underset{(6.12)}{=} \frac{\xi}{\sqrt{2}}\Big(\langle\alpha(t)\,\phi_\alpha(t)|\,\phi_\alpha(t)\rangle + \langle\phi_\alpha(t)|\,\alpha(t)\,\phi_\alpha(t)\rangle\Big) = \frac{\xi}{\sqrt{2}}\big(\alpha^*(t) + \alpha(t)\big) = \frac{\xi}{\sqrt{2}}\big(\alpha^* e^{i\omega t} + \alpha\, e^{-i\omega t}\big)$$

$$= \sqrt{2}\,\xi\,|\alpha|\,\cos(\omega t - \theta) \quad \text{mit} \quad \alpha = |\alpha| e^{i\theta}$$

$\alpha = |\alpha|\, e^{i\theta}$ beschreibt die maximale Amplitude $|\alpha|$ und Phasenlage θ der Oszillation.

$$\langle P\rangle_\alpha = \langle\phi_\alpha(t)|\,P\,\phi_\alpha(t)\rangle \underset{(6.2)}{=} i\hbar/(2^{1/2}\xi)\,\langle\phi_\alpha(t)|\,(a^+ - a)\,\phi_\alpha(t)\rangle \underset{(6.12)}{=} i\hbar/(2^{1/2}\xi)\,(\alpha^*(t) - \alpha(t))$$

$$= i\hbar/(2^{1/2}\xi)\,(\alpha^* e^{i\omega t} - \alpha\, e^{-i\omega t}) = -\,2^{1/2}\,\xi\, m\,\omega\,|\alpha|\,\sin(\omega t - \theta) = m\,\frac{\partial}{\partial t}\langle X\rangle_\alpha$$

c. $\langle X^2\rangle_\alpha \underset{(6.2)}{=} (\xi^2/2)\ \langle a^+a^+ + a\,a + a\,a^+ + a^+\,a\rangle_\alpha \underset{(6.3)}{=} (\xi^2/2)\ \langle\phi_\alpha(t)|\ a^+a^+ + a\,a + 2\,a^+a + 1\ |\ \phi_\alpha(t)\rangle$

$$\underset{(6.12)}{=} (\xi^2/2)\ (\alpha^*(t)^2 + \alpha(t)^2 + 2|\alpha|^2 + 1)$$

$$\langle X\rangle_\alpha^{\ 2} \underset{a.}{=} (\xi^2/2)\ (\alpha^*(t) + \alpha(t)\ )^2 = (\xi^2/2)\ (\alpha^*(t)^2 + \alpha(t)^2 + 2|\alpha|^2\ )$$

$$\Rightarrow \quad \Delta_\alpha X^2 = \langle X^2\rangle_\alpha - \langle X\rangle_\alpha^{\ 2} = (\xi^2/2)$$

$$\langle P^2\rangle_\alpha \underset{(6.2)}{=} (-\hbar^2/2\xi^2)\ \langle a^+a^+ + a\,a - a\,a^+ - a^+\,a\rangle_\alpha \underset{(6.3)}{=} -\hbar^2/(2\xi^2)\ \langle\phi_\alpha(t)|\ a^+a^+ + a\,a - 2\,a^+a - 1\ |\ \phi_\alpha(t)\rangle$$

$$\underset{(6.12)}{=} -\hbar^2/(2\xi^2)\ (\alpha^*(t)^2 + \alpha(t)^2 - 2|\alpha|^2 - 1) = -\hbar^2/(2\xi^2)\ (\alpha^*(t)^2 + \alpha(t)^2 - 2|\alpha|^2 - 1)$$

$$\langle P\rangle_\alpha^{\ 2} \underset{a.}{=} -\hbar^2/(2\xi^2)\ (\alpha^*(t) - \alpha(t))^2 = -\hbar^2/(2\xi^2)\ (\ \alpha^*(t)^2 + \alpha(t)^2 - 2|\alpha|^2)$$

$$\Rightarrow \quad \Delta_\alpha P^2 = \langle P^2\rangle_\alpha - \langle P\rangle_\alpha^{\ 2} = \hbar^2/(2\xi^2)$$

d. folgt mit c.

BSP: Monochromatisches Lichtfeld als harmonischer Oszillator

Ü P

Klassisches monochromatisches Lichtfeld: $E(r,t) = i \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\varepsilon_0}} \left[\hat{\varepsilon}(r)\, \alpha(t) - \hat{\varepsilon}(r)^*\, \alpha^*(t) \right]$

Amplitude: $\alpha(t) = \alpha(0)\, e^{-i\omega t}$ ist harmonischer Oszillator

$\hat{\varepsilon}(r)$ = räumliche Struktur bzw. Polarisation der Feldverteilung: $1 = \int \hat{\varepsilon}(r)\, \hat{\varepsilon}^*(r)\; d^3r$

(Bsp: ebene Welle $\hat{\varepsilon}_0\, e^{ikr}$ mit konstanter Polarisation)

Maxwell-Gleichung: $\frac{\partial}{\partial t} E(r,t) = c^2\, \nabla \times B(r,t)\,,\; \frac{\partial}{\partial t} B(r,t) = -\, \nabla \times E(r,t)\,,\; 0 = \nabla E(r,t) = \nabla B(r,t)$

$$\rightarrow \quad \left[\Delta + \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \right] \hat{\varepsilon}(r) = 0 \qquad \text{Helmholtz-Gleichung}$$

$$B(r,t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega\varepsilon_0}} \left[\nabla \times \hat{\varepsilon}(r)\, \alpha(t) + \nabla \times \hat{\varepsilon}(r)^*\, \alpha^*(t) \right]$$

Energie: $H = \frac{\varepsilon_0}{2} \int E(r,t)^2\; d^3r + \frac{1}{2\mu_0} \int B(r,t)^2\; d^3r = \hbar\omega\, \alpha(t)^*\, \alpha(t)$

Quantisierung: $H = \hbar\omega\ \alpha^* \alpha = \hbar\omega\ \frac{1}{2}\{\alpha^* \alpha + \alpha\, \alpha^*\}$

Ü P

$$\alpha \rightarrow a\,,\quad \alpha^* \rightarrow a^+\,,\quad [a, a^+] = 1$$

Hamilton-Operator: $\mathbf{H} = \hbar\omega\ (a^+a + \tfrac{1}{2})$

Zähl-Operator: $\mathbf{N} = a^+a$ zählt die in der Mode $\hat{\varepsilon}(r)$ vorhandenen Photonen

E-Feld-Operator: $\mathbf{E} = i\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\varepsilon_0}}\,[\,\hat{\varepsilon}(r)\, a - \hat{\varepsilon}^*(r)\, a^+\,]$

$$P = \frac{i\hbar}{\sqrt{2}\,\xi}(a^+ - a)$$

beim mechanischen Oszillator

Fock-Zustände (Eigenzustände von **H**):

Man bezeichnet den Grundzustand durch $|0\rangle$ (Vakuum) mit $\mathbf{N}\,|0\rangle = 0$ (enthält keine Photonen)

$$|n\rangle \equiv \frac{a^{+n}}{\sqrt{n!}}|0\rangle \quad \Rightarrow \quad a\,|n\rangle = n^{1/2}\,|n-1\rangle,\ a^+|n\rangle = (n+1)^{1/2}\,|n+1\rangle$$

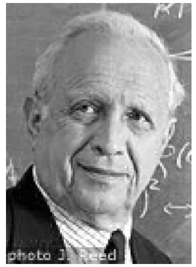
$$\langle n|m\rangle = \delta_{nm}\,,\quad \mathbf{N}\,|n\rangle = n\,|n\rangle$$

E-Feld-Operator: $\langle n|\mathbf{E}|n\rangle = 0$ $\rightarrow$ kein mittleres elektrisches Feld im Fock-Zustand

$$\Delta_n E^2 = \langle n|\mathbf{E}^2|n\rangle = \frac{\hbar\omega}{2\varepsilon_0}\,\hat{\varepsilon}(r)\,\hat{\varepsilon}^*(r)\ (2n+1) \neq 0$$ sogar für $n = 0$!

($\langle 0|E^2|0\rangle \neq 0$ $\rightarrow$ Vakuum-Fluktuationen)

Kohärente Zustände (Eigenzustände von a):



Roy Glauber (1962)
Nobelpreis 2005

$$\forall\ \alpha \in \mathbb{C}: \quad |\alpha\rangle \equiv \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\ |n\rangle$$

Mittleres elektrisches Feld: $\langle\alpha|\, E\, |\alpha\rangle = i \sqrt{\dfrac{\hbar\omega}{2\,\varepsilon_0}}\ \left[\ \hat{\varepsilon}(x)\,\alpha - \hat{\varepsilon}^*(x)\,\alpha^*\ \right]$

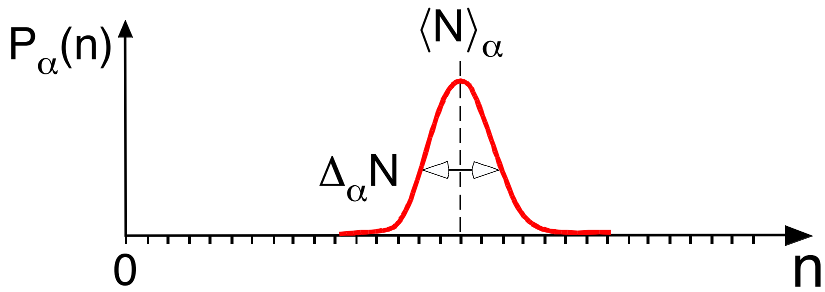
Varianz des elektrischen Felds: $\Delta_\alpha E \equiv \sqrt{\langle\alpha|\, E^2\, |\alpha\rangle - \langle\alpha|\, E\, |\alpha\rangle^2} = \sqrt{\dfrac{\hbar\omega}{2\,\varepsilon_0}}\ |\hat{\varepsilon}(x)|$

unabhängig von Feldamplitude α

Wahrscheinlichkeit im Zustand $|\alpha\rangle$ genau n Photonen zu finden:

$$P_\alpha(n) \equiv |\langle\alpha|n\rangle|^2 = \exp(-|\alpha|^2)\ \frac{|\alpha|^{2n}}{n!}$$

$\rightarrow$ Poisson Verteilung



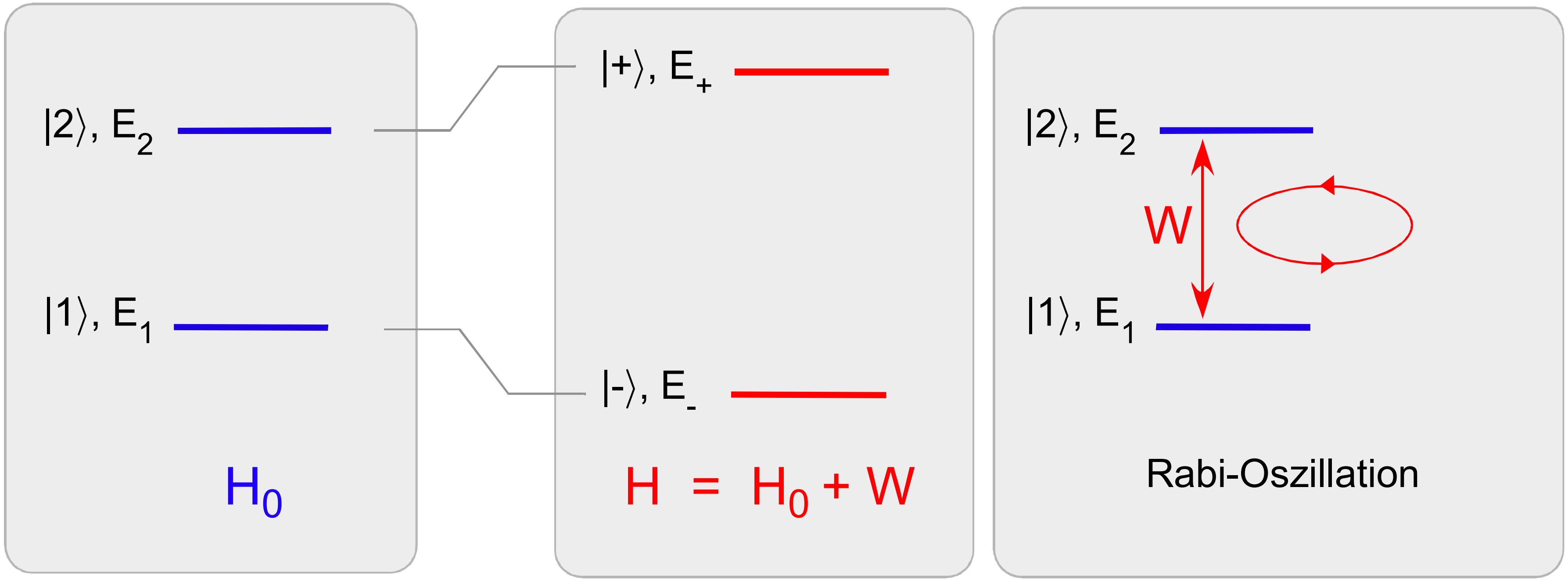
Mittlere Photonenzahl im Zustand $|\alpha\rangle$: $\langle N\rangle_\alpha = \langle\alpha|\, N\, |\alpha\rangle = |\alpha|^2$

Unschärfe der Photonenzahl im Zustand $|\alpha\rangle$: $\Delta_\alpha N^2 \equiv \langle N^2\rangle_\alpha - \langle N\rangle_\alpha^{\ 2} = |\alpha|^2$

$\Rightarrow \quad \Delta_\alpha N = \sqrt{\langle N\rangle_\alpha} = |\alpha| \qquad \rightarrow$ Quantenrauschen des Lasers (Schrotrauschen)

Das Zwei-Niveau-System: ein Paradigma der Quantenmechanik

BSP: Spektrallinien in Atomen und Molekülen, Spin-Resonanzen (Kern-Spin-Tomographie) etc.



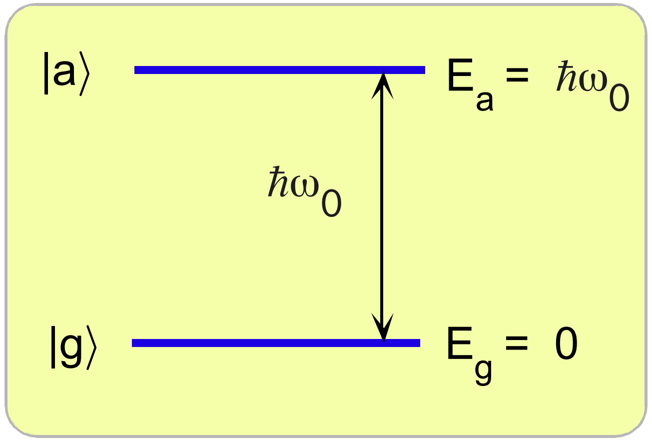
Im ungestörten System mit Hamilton-Operators H_0 seien $|1\rangle$ und $|2\rangle$ stationär mit scharfen Energien E_1 und E_2.

Im System H gibt es neue Eigenzustände $|+\rangle$, $|-\rangle$ mit modifizierten Energiewerten E_+ und E_- (Energieverschiebung).
Die Zustände $|1\rangle$ und $|2\rangle$ sind nicht mehr stationär.
Präpariert man das System zur Zeit t in $|1\rangle$ oder $|2\rangle$ so beginnt eine Rabi-Oszillation zwischen beiden Zuständen.

Zwei-Niveau-System: ein Model für stimulierte Emission und Absorption

Betrachtung eines Quantensystems mit zwei diskreten Energie-Niveaus $|g\rangle$ und $|a\rangle$:

Hamilton-Operator: $\mathbf{H}_A \equiv \hbar\omega_0 \, |a\rangle\langle a|$ (6.17)



$$\Rightarrow \quad \mathbf{H}_A |g\rangle = 0$$
$$\mathbf{H}_A |a\rangle = \hbar\omega_0 \, |a\rangle$$

Matrixelemente in Basis $\{|g\rangle, |a\rangle\}$: $\langle n| \mathbf{H}_A |m\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \hbar\omega_0 \end{pmatrix}$

Schrödinger Gleichung: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \mathbf{H}_A |\psi\rangle \quad \Rightarrow \quad |g(t)\rangle = |g\rangle$

$$|a(t)\rangle = |a\rangle \, e^{-i\omega_0 t}$$

Alle linearen Überlagerungen $A\,|g(t)\rangle + B\,|a(t)\rangle$ sind Lösungen

Zwei-Niveau-Atom mit Wechselwirkung

Dipolmoment: $\mathbf{d} = \mu\,|g\rangle\langle a| + \mu^*\,|a\rangle\langle g|$ mit $\mu \equiv \langle g|\,\mathbf{d}\,|a\rangle$

$$\Rightarrow \quad \langle g|\,\mathbf{d}\,|g\rangle = \langle a|\,\mathbf{d}\,|a\rangle = 0 \qquad \langle g|\,\mathbf{d}\,|a\rangle = \langle a|\,\mathbf{d}\,|g\rangle^* = \mu$$

Erwartungswert = 0 für {|g⟩, |a⟩}
kein permanentes Dipolmoment

Matrixelemente in Basis {|g⟩, |a⟩}: $\langle n|\,\mathbf{d}\,|m\rangle = \begin{pmatrix} 0 & \mu \\ \mu^* & 0 \end{pmatrix}$

Wechselwirkung: $\mathbf{W} = \mathbf{d}\;E(t)\,, \quad E(t) = E_0\,e^{-i\omega t} + E_0^*\,e^{i\omega t}$ elektrisches Feld

Matrixelemente in Basis {|g⟩, |a⟩}: $\langle n|\,\mathbf{W}\,|m\rangle = \begin{pmatrix} 0 & \mu\,E(t) \\ \mu^* E(t) & 0 \end{pmatrix}$

Schrödinger-Gleichung mit Wechselwirkung in Basis {|g⟩, |a⟩}: $|\psi\rangle = \gamma(t)\,|g\rangle + \alpha(t)\,|a\rangle$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = (\mathbf{H}_A + \mathbf{W})\,|\psi\rangle \quad \Leftrightarrow \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} \gamma \\ \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \mu\,E(t) \\ \mu^* E(t) & \hbar\omega_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma \\ \alpha \end{pmatrix}$$

Matrix ist zeitabhängig → Lösung einfacher in einer mitrotierenden Basis !

Transformation in eine mitrotierende Basis $\{|g\rangle, |a\rangle\} \rightarrow \{|g\rangle, |b\rangle \equiv |a\rangle\, e^{-i(\omega t + \theta)}\}$

$$|\dot{b}\rangle = -i\,\omega\,|b\rangle \qquad (*)$$

$$|\psi\rangle = \gamma(t)\,|g\rangle + \beta(t)\,|b\rangle\,, \quad \gamma(t) = \langle g|\psi\rangle,\; \beta(t) = \langle b|\psi\rangle \qquad (**)$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(\gamma(t)\,|g\rangle + \beta(t)\,|b\rangle\right) = i\hbar\left(\dot{\gamma}(t)\,|g\rangle + \dot{\beta}(t)\,|b\rangle\right) + i\hbar\,\beta(t)\,|\dot{b}\rangle$$

$$\underset{(*)}{=} i\hbar\left(\dot{\gamma}(t)\,|g\rangle + \dot{\beta}(t)\,|b\rangle\right) + \hbar\omega\,\beta(t)\,|b\rangle \qquad (***)$$

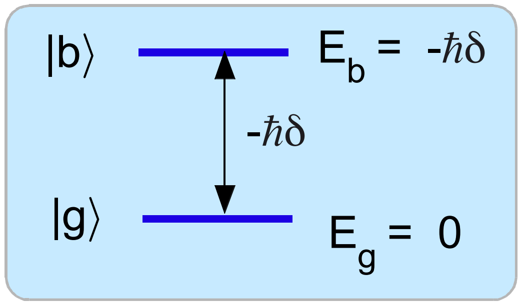
Schrödinger-Gleichung ohne Wechselwirkung in mitrotierender Basis $\boldsymbol{R} \equiv \{|g\rangle, |b\rangle\}$:

$$i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t}\right)_{\boldsymbol{R}}|\psi\rangle \equiv i\hbar\left(\dot{\gamma}(t)\,|g\rangle + \dot{\beta}(t)\,|b\rangle\right) \underset{(***)}{=} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle - \hbar\omega\,\beta(t)\,|b\rangle \underset{(**)}{=} \mathbf{H}_A|\psi\rangle - \hbar\omega\,|b\rangle\langle b|\psi\rangle$$

$$\underset{(6.17)}{=} \hbar\omega_0\,|a\rangle\langle a|\psi\rangle - \hbar\omega\,|b\rangle\langle b|\psi\rangle = \hbar\omega_0\,|b\rangle\langle b|\psi\rangle - \hbar\omega\,|b\rangle\langle b|\psi\rangle = \mathbf{H}_B\,|\psi\rangle\,,$$

$$\text{mit} \quad \mathbf{H}_B \equiv -\hbar\delta\,|b\rangle\langle b|\,, \quad \delta \equiv \omega - \omega_0$$

$$i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t}\right)_{\boldsymbol{R}}|\psi\rangle = \mathbf{H}_B\,|\psi\rangle \quad \Leftrightarrow \quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\gamma\\ \beta\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0 & 0\\ 0 & -\hbar\delta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\gamma\\ \beta\end{pmatrix}$$



Dipolmoment in Basis $\{|g\rangle, |b\rangle\}$:

verwende

$|b\rangle \equiv |a\rangle\, e^{-i(\omega t + \theta)}$

$\langle g|\, \mathbf{d}\, |g\rangle = \langle a|\, \mathbf{d}\, |a\rangle = 0, \; \langle g|\, \mathbf{d}\, |a\rangle = \mu$

$$\langle g|\, \mathbf{d}\, |g\rangle = 0 , \; \langle b|\, \mathbf{d}\, |b\rangle = \langle a|\, \mathbf{d}\, |a\rangle = 0$$

$$\langle g|\, \mathbf{d}\, |b\rangle = \langle g|\, \mathbf{d}\, |a\rangle\, e^{-i(\omega t + \theta)} = \mu\, e^{-i(\omega t + \theta)}$$

$$\langle b|\, \mathbf{d}\, |g\rangle = \langle g|\, \mathbf{d}\, |a\rangle^*\, e^{i(\omega t + \theta)} = \mu^*\, e^{i(\omega t + \theta)}$$

$$\text{Matrixelemente : } \langle n|\, \mathbf{d}\, |m\rangle = \begin{pmatrix} 0 & \mu\, e^{-i(\omega t + \theta)} \\ \mu^* e^{i(\omega t + \theta)} & 0 \end{pmatrix}$$

Wechselwirkung in Basis $\{|g\rangle, |b\rangle\}$:

$$\langle n|\, \mathbf{W}\, |m\rangle = \langle n|\, \mathbf{d}\, |m\rangle\, E(t) = \begin{pmatrix} 0 & \mu\, E(t)\, e^{-i(\omega t + \theta)} \\ \mu^* E(t)\, e^{i(\omega t + \theta)} & 0 \end{pmatrix}$$

Drehwellen-Näherung:

Schnell oszillierender Term wird vernachlässigt !

$$\mu^*\, E(t)\, e^{i(\omega t + \theta)} = \boxed{\mu^*\, E_0\, e^{i\theta}} + \boxed{\mu^*\, E_0^*\, e^{i(2\omega t + \theta)}} \approx \boxed{\mu^*\, E_0\, e^{i\theta}} \equiv \hbar\omega_R /2 \overset{!}{\geq} 0 \text{ reell}$$

(Wähle θ geeignet)

Rabi-Frequenz

(Stärke der Wechselwirkung)

$$\Rightarrow \quad \langle n|\, \mathbf{W}\, |m\rangle \approx \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \omega_R \\ \omega_R & 0 \end{pmatrix}$$

Lösung der Schrödinger-Gleichung in der Basis $\{|g\rangle, |b\rangle\}$:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_B + \mathbf{W}$$

$$|\psi\rangle = \gamma(t)\,|g\rangle + \beta(t)\,|b\rangle \qquad \langle n|\,\mathbf{H}\,|m\rangle = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & \omega_R \\ \omega_R & -2\delta \end{pmatrix}$$

$$|\phi\rangle = \gamma_0\,|g\rangle + \beta_0\,|b\rangle$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \mathbf{H}\,|\psi(t)\rangle \quad \Leftrightarrow \quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\gamma\\ \beta\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & \omega_R \\ \omega_R & -2\delta \end{pmatrix}\begin{pmatrix}\gamma\\ \beta\end{pmatrix}$$

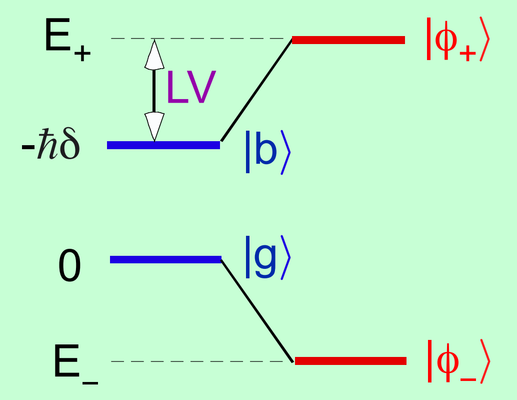
$$E\,|\phi\rangle = \mathbf{H}\,|\phi\rangle \quad \Leftrightarrow \quad E\begin{pmatrix}\gamma_0\\ \beta_0\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & \omega_R \\ \omega_R & -2\delta \end{pmatrix}\begin{pmatrix}\gamma_0\\ \beta_0\end{pmatrix}$$

Ü1 Eigenzustände und Eigenwerte: $\mathbf{H}\,|\phi_\pm\rangle = E_\pm\,|\phi_\pm\rangle$

$$E_\pm = \frac{-\hbar\delta}{2}\left(1 \pm \frac{\Omega}{\delta}\right), \qquad \Omega \equiv \sqrt{\delta^2 + \omega_R^2}$$

$$\begin{pmatrix}|\phi_+\rangle\\ |\phi_-\rangle\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sin(\xi) & \cos(\xi) \\ \cos(\xi) & \sin(\xi) \end{pmatrix}\begin{pmatrix}|g\rangle\\ |b\rangle\end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \xi \equiv \frac{1}{2}\arctan\left(\frac{\omega_R}{\delta}\right)$$

Skizze für negative Verstimmung δ



LV = Lichtverschiebung bzw. dynamische Stark-Verschiebung

Allgemeine Lösungen der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung (siehe Seite 5.27):

$$|\psi(t)\rangle \;=\; A_+\,|\phi_+\rangle \exp(-i\,\tfrac{E_+}{\hbar}\,t) \;+\; A_-\,|\phi_-\rangle \exp(-i\,\tfrac{E_-}{\hbar}\,t)$$

$A_\pm$ beliebige complexe Zahlen mit $|A_+|^2 + |A_-|^2 \;=\; 1$

Ü2 Spezielle Lösung $|\psi(t)\rangle \;=\; \gamma(t)\,|g\rangle \;+\; \beta(t)\,|b\rangle$ mit Anfangsbedingung $|\psi(0)\rangle \;=\; |g\rangle$

$$\begin{pmatrix}\gamma(t)\\ \beta(t)\end{pmatrix} = \frac{\exp(i\delta t/2)}{\Omega}\begin{pmatrix}-\,\Omega\cos(\Omega t/2) \;-\; i\,\delta\sin(\Omega t/2)\\ i\omega_R\sin(\Omega t/2)\end{pmatrix}, \qquad \Omega \equiv \sqrt{\delta^2 + \omega_R^{\,2}}$$

Besetzung von $|b\rangle$: $\quad |\beta(t)|^2 \;=\; \dfrac{\omega_R^{\,2}}{\delta^2 + \omega_R^{\,2}}\,\sin^2(\Omega t/2)$

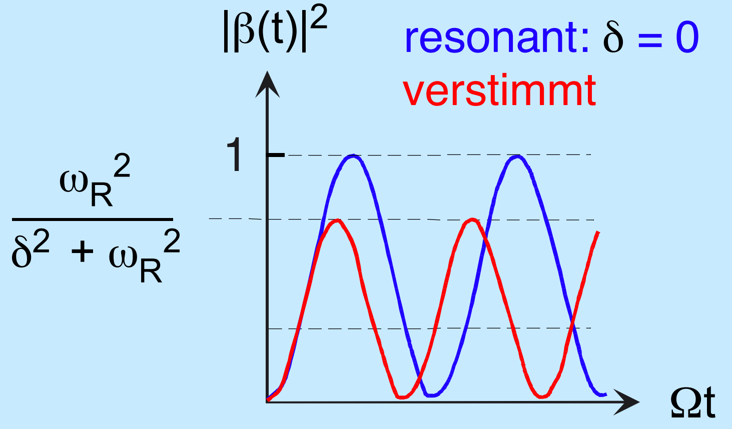
Besetzung von $|g\rangle$: $\quad |\gamma(t)|^2 \;=\; 1 \;-\; |\beta(t)|^2$

Das System oszilliert zwischen den Niveaus

$|g\rangle$ und $|b\rangle$ mit der verallgemeinerten Rabi-Frequenz Ω

→ stimulierte Absorption und Emission

Rabi-Oszillation:



Ü1 Bestimmung der Eigenvektoren und Eigenwerte

Das charakteristische Plynom für die Matrix $\begin{pmatrix} 0 & \omega_R \\ \omega_R & -2\delta \end{pmatrix}$ ist $x^2 + 2\delta\, x - \omega_R{}^2 = 0$ mit den Nullstellen $x = -\delta \pm \sqrt{\omega_R{}^2 + \delta^2} = -\delta\left(1 \pm \frac{\Omega}{\delta}\right)$

Die Eigenwerte von H sind somit $E_\pm = -\frac{\hbar\delta}{2}\left(1 \pm \frac{\Omega}{\delta}\right)$

Ansatz für Eigenvektoren $|\phi_+\rangle = -\sin(\theta)\,|g\rangle + \cos(\theta)\,|b\rangle$, $|\phi_-\rangle = \cos(\theta)\,|g\rangle + \sin(\theta)\,|b\rangle$ führt zu Eigenwertgleichungen

$$\begin{pmatrix} 0 & \omega_R \\ \omega_R & -2\delta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -\sin(\theta) \\ \cos(\theta) \end{pmatrix} = -\delta\left(1+\frac{\Omega}{\delta}\right)\begin{pmatrix} -\sin(\theta) \\ \cos(\theta) \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & \omega_R \\ \omega_R & -2\delta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \cos(\theta) \\ \sin(\theta) \end{pmatrix} = -\delta\left(1-\frac{\Omega}{\delta}\right)\begin{pmatrix} \cos(\theta) \\ \sin(\theta) \end{pmatrix}$$

und somit zu $\omega_R \cos(\theta) = \delta\left(1+\frac{\Omega}{\delta}\right)\sin(\theta)$ und weiter $\tan(\theta) = \frac{\omega_R}{\delta+\Omega}$

$$\tan(2\theta) = \frac{2\tan(\theta)}{1-\tan^2(\theta)} = \frac{2\frac{\omega_R}{\delta+\Omega}}{1-\left(\frac{\omega_R}{\delta+\Omega}\right)^2} = \frac{2\omega_R(\delta+\Omega)}{(\delta+\Omega)^2-\omega_R{}^2} = \frac{2\omega_R(\delta+\Omega)}{2\delta^2+2\delta\Omega} = \frac{\omega_R}{\delta}\,, \quad \frac{\omega_R}{\delta} = \frac{2\tan(\theta)}{1-\tan^2(\theta)} = \frac{2\sin(\theta)\cos(\theta)}{\cos^2(\theta)-\sin^2(\theta)}$$

Es folgt $$\left(\frac{\omega_R}{\Omega}\right)^2 = \frac{\left(\frac{\omega_R}{\delta}\right)^2}{1+\left(\frac{\omega_R}{\delta}\right)^2} = \frac{4\sin^2(\theta)\cos^2(\theta)}{\left(\sin^2(\theta)-\cos^2(\theta)\right)^2+4\sin^2(\theta)\cos^2(\theta)} = \frac{4\sin^2(\theta)\cos^2(\theta)}{\left(\sin^2(\theta)+\cos^2(\theta)\right)^2} = 4\sin^2(\theta)\cos^2(\theta)$$

$$\Rightarrow \frac{\omega_R}{\Omega} = 2\sin(\theta)\cos(\theta)\,,\ \frac{\delta}{\Omega} = \sin^2(\theta)-\cos^2(\theta)\,,\ \frac{\omega_R}{\delta} = \tan(2\theta)\,,\ \frac{\Omega+\delta}{2\Omega} = \cos^2(\theta)\,,\ \frac{\Omega-\delta}{2\Omega} = \sin^2(\theta),\ \frac{\omega_R}{\Omega+\delta} = \tan(\theta)$$

Ü2 Lösung der Schrödinger-Gleichung für Anfangsbedingung $|\psi(t=0)\rangle = |g\rangle$

Allgemeine Lösung lautet

$$|\psi(t)\rangle = |\phi_+\rangle A_+ e^{-i\frac{E_+}{\hbar}t} + |\phi_-\rangle A_- e^{-i\frac{E_-}{\hbar}t} = |g\rangle e^{i\frac{\delta}{2}t}\left[-\sin(\theta)\, A_+ e^{i\frac{\Omega}{2}t} + \cos(\theta) A_- e^{-i\frac{\Omega}{2}t}\right] + |b\rangle e^{i\frac{\delta}{2}t}\left[\cos(\theta)\, A_+ e^{i\frac{\Omega}{2}t} + \sin(\theta) A_- e^{-i\frac{\Omega}{2}t}\right]$$

Anfangsbedingung erfordert

$$|\psi(t{=}0)\rangle = |g\rangle \Rightarrow 0 = [\cos(\theta)\, A_+ + \sin(\theta) A_-] \Rightarrow A_+ = \sin(\theta),\ A_- = -\cos(\theta)$$

und somit

$$|\psi(t)\rangle = |g\rangle e^{i\frac{\delta}{2}t}\left[-\sin^2(\theta)\ e^{i\frac{\Omega}{2}t} - \cos^2(\theta)\ e^{-i\frac{\Omega}{2}t}\right] + |b\rangle e^{i\frac{\delta}{2}t} \sin(\theta)\cos(\theta)\left[e^{i\frac{\Omega}{2}t} - e^{-i\frac{\Omega}{2}t}\right]$$

$$= |g\rangle e^{i\frac{\delta}{2}t}\left[-\cos\left(\frac{\Omega}{2}t\right) - i\left(\sin^2(\theta) - \cos^2(\theta)\right)\ \sin\left(\frac{\Omega}{2}t\right)\right] + |b\rangle e^{i\frac{\delta}{2}t}\ 2\sin(\theta)\cos(\theta)\, i \sin\left(\frac{\Omega}{2}t\right)$$

$$= |g\rangle e^{i\frac{\delta}{2}t}\left[-\cos\left(\frac{\Omega}{2}t\right) - i\,\frac{\delta}{\Omega}\ \sin\left(\frac{\Omega}{2}t\right)\right] + |b\rangle e^{i\frac{\delta}{2}t}\ \frac{\omega_R}{\Omega}\ i \sin\left(\frac{\Omega}{2}t\right) \Rightarrow \boxed{\begin{pmatrix}\gamma(t)\\ \beta(t)\end{pmatrix} = \frac{\exp(i\delta t/2)}{\Omega}\begin{pmatrix}-\Omega\cos(\Omega t/2) - i\,\delta\sin(\Omega t/2)\\ i\omega_R \sin(\Omega t/2)\end{pmatrix}}$$

Es folgt

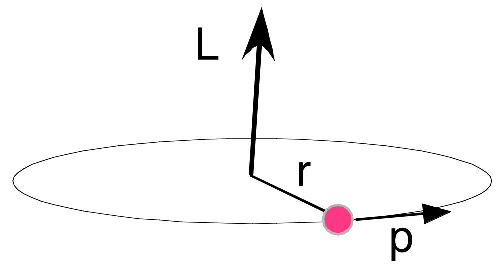
$$\boxed{|\langle g|\psi(t)\rangle|^2 = \cos^2\left(\frac{\Omega}{2}t\right) + \left(\frac{\delta}{\Omega}\right)^2 \sin^2\left(\frac{\Omega}{2}t\right),\quad |\langle b|\psi(t)\rangle|^2 = \left(\frac{\omega_R}{\Omega}\right)^2 \sin^2\left(\frac{\Omega}{2}t\right)}$$

7. Bahn-Drehimpuls

Bahn-Drehimpuls:

$$L_x = y\,p_z - z\,p_y$$
$$L_y = z\,p_x - x\,p_z$$
$$L_z = x\,p_y - y\,p_x$$

klassisch: $L = r \times p$



quantenmechanisch: $[R_\nu , P_\mu] = i\hbar\,\delta_{\nu\mu}$ i.e., verschiedene Komponenten von Orts– und Impuls-Operatoren vertauschen $\Rightarrow$ eindeutige Quantisierungsvorschrift

$r_\nu \rightarrow R_\nu\ ,\ p_\nu \rightarrow P_\nu \qquad \Rightarrow \qquad \mathbf{L} = R \times P$

Mit R_ν , P_μ sind auch L_μ selbstadjungiert:

$$L_x^+ = (Y\,P_z)^+ - (Z\,P_y)^+ = P_z^+Y^+ - P_y^+Z^+ = P_zY - P_yZ = Y\,P_z - Z\,P_y$$

Vertauschungsrelationen:

(I) $\quad [L_\nu , L_\mu] = i\hbar\,\varepsilon_{\nu\mu\kappa}\,L_\kappa \qquad$ (7.1a)

(II) $\quad [L^2 , L_\mu] = 0 \qquad$ (7.1b)

$$\varepsilon_{\nu\mu\kappa} \equiv \text{Levi-Civita Symbol} = \begin{cases} 0 & \text{falls } \nu\mu\kappa \text{ nicht alle verschieden} \\ 1 & \text{falls } \nu\mu\kappa \text{ gerade Permutation von xyz} \\ -1 & \text{falls } \nu\mu\kappa \text{ ungerade Permutation von xyz} \end{cases}$$

BEW (I):

$$[L_x, L_y] = [\overset{1}{Y P_z} - \overset{2}{Z P_y}, \overset{3}{Z P_x} - \overset{4}{X P_z}]$$

$$= [\underset{1}{Y P_z}, \underset{3}{Z P_x}] + [\underset{2}{Z P_y}, \underset{4}{X P_z}] - \cancel{[\underset{1}{Y P_z}, \underset{4}{X P_z}]} - \cancel{[\underset{2}{Z P_y}, \underset{3}{Z P_x}]}$$

$$= Y P_z Z P_x - Z P_x Y P_z + Z P_y X P_z - X P_z Z P_y$$

$$= Y P_z Z P_x - Y Z P_z P_x + X Z P_z P_y - X P_z Z P_y$$

$$= Y [P_z, Z] P_x + X [Z, P_z] P_y = -i\hbar Y P_x + i\hbar X P_y = i\hbar L_z$$

BEW (I) $\Rightarrow$ (II):

$$[L_y, L_x] = -i\hbar L_z$$

$$[L_y^2, L_x] = L_y^2 L_x - L_x L_y^2 = L_y L_x L_y - i\hbar L_y L_z - L_x L_y^2 = L_x L_y L_y - i\hbar (L_y L_z + L_z L_y) - L_x L_y^2$$

$$= - i\hbar (L_y L_z + L_z L_y)$$

$$[L_z, L_x] = i\hbar L_y$$

$$[L_z^2, L_x] = L_z^2 L_x - L_x L_z^2 = L_z L_x L_z + i\hbar L_z L_y - L_x L_z^2 = L_x L_z L_z + i\hbar (L_y L_z + L_z L_y) - L_x L_z^2$$

$$= i\hbar (L_y L_z + L_z L_y)$$

$$\Rightarrow \quad [L^2, L_x] = [L_x^2 + L_y^2 + L_z^2, L_x] = [L_y^2, L_x] + [L_z^2, L_x] = 0$$

Eigenwerte und Eigenzustände von Drehimpuls-Operatoren:

BEH:

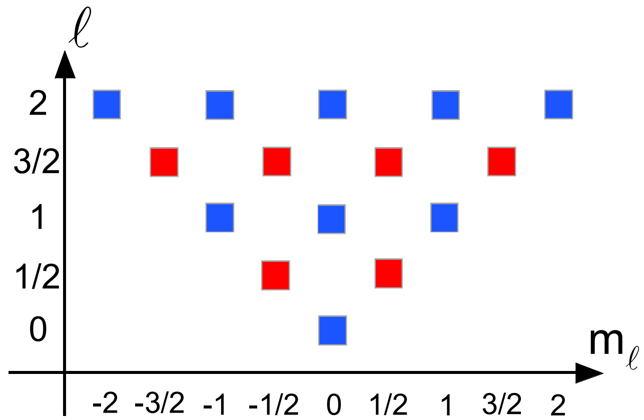
Für selbstadjungierte Operatoren L_ν, $\nu \in \{x,y,z\}$, die den Vetauschungsrelationen (I) genügen, gilt:

Mögliche Eigenwerte von L^2 sind $\hbar^2 \; \ell(\ell+1)$ mit $\ell = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2....$ ganzzahlig oder halbzahlig

Für jeden Wert ℓ gibt es $2\ell+1$ gemeinsame Eigenzustände $|\ell, m_\ell\rangle$ von L^2 und L_z

mit $m \in \{-\ell, -\ell+1, ..., \ell-1, \ell\}$, sodass

$$L^2 |\ell, m_\ell\rangle = \hbar^2 \; \ell(\ell+1) \, |\ell, m_\ell\rangle$$
$$L_z |\ell, m_\ell\rangle = \hbar \; m \, |\ell, m_\ell\rangle \qquad (7.2)$$



$\ell = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2....$ ganzzahlig oder halbzahlig

$m_\ell \in \{-\ell, -\ell+1, ..., \ell-1, \ell\}$

BEW: wird in der theoretischen QM durchgeführt (siehe z.B. Cohen-Tannoudji, Quantum Mechanics I, Wiley)

Die Existenz eines gemeinsamen Systems von Eigenzuständen für L^2, L_z folgt aus $[L^2, L_z] = 0$.

(Statt L^2, L_z kann man auch andere Paarungen L^2, L_μ betrachten)

Die Eigenvektoren und Eigenwerte lassen sich mit Hilfe geschickt gewählter Leiteroperatoren rekursiv konstruieren ähnlich wie beim harmonischen Oszillator.

Leiter-Operatoren: $L_\pm = L_x \pm i L_y \quad \Rightarrow$

Ü

(a) $L_+^+ = L_-$

(b) $[L_z, L_\pm] = \pm\hbar L_\pm$

(c) $L_- L_+ = L^2 - L_z^2 - \hbar L_z$

(d) $L_+ L_- = L^2 - L_z^2 + \hbar L_z$

(e) $[L^2, L_\pm] = 0$

(a) $L_+^+ = (L_x + i L_y)^+ = L_x^+ - i L_y^+ = L_x - i L_y = L_-$

(b) $[L_z, L_\pm] = L_z (L_x \pm i L_y) - (L_x \pm i L_y) L_z = L_z L_x \pm i L_z L_y - (L_x L_z \pm i L_y L_z)$

$$= L_z L_x - L_x L_z \pm i (L_z L_y - L_y L_z) \underset{(7.1a)}{=} i\hbar L_y \pm \hbar L_x = \pm\hbar (L_x \pm i L_y) = \pm\hbar L_\pm$$

(c) $L_- L_+ = (L_x - i L_y)(L_x + i L_y) = L_x^2 + L_y^2 + i (L_x L_y - L_y L_x) \underset{(7.1a)}{=} L^2 - L_z^2 - \hbar L_z$

(e) $[L^2, L_\pm] = [L^2, L_x] \pm i [L^2, L_y] \underset{(7.1b)}{=} 0$

(I) Falls $|\ell, m\rangle$ existiert mit $L^2 |\ell, m\rangle = \hbar^2 \ \ell(\ell+1) |\ell, m\rangle$, $L_z |\ell, m\rangle = \hbar\, m |\ell, m\rangle$, $0 \leq \ell$, folgt:

$$0 \leq \langle \ell, m|L_-L_+|\ell, m\rangle \overset{(c)}{=} \langle \ell, m|L^2 - L_z^2 - \hbar L_z |\ell, m\rangle = \hbar^2 (\ell\text{-}m)(\ell+1+m) = \hbar^2 [\ell(\ell+1) - m(m+1)]$$

$$0 \leq \langle \ell, m|L_+L_-|\ell, m\rangle \overset{(d)}{=} \langle \ell, m|L^2 - L_z^2 + \hbar L_z |\ell, m\rangle = \hbar^2 (\ell+m)(\ell+1-m) = \hbar^2 [\ell(\ell+1) - m(m-1)]$$

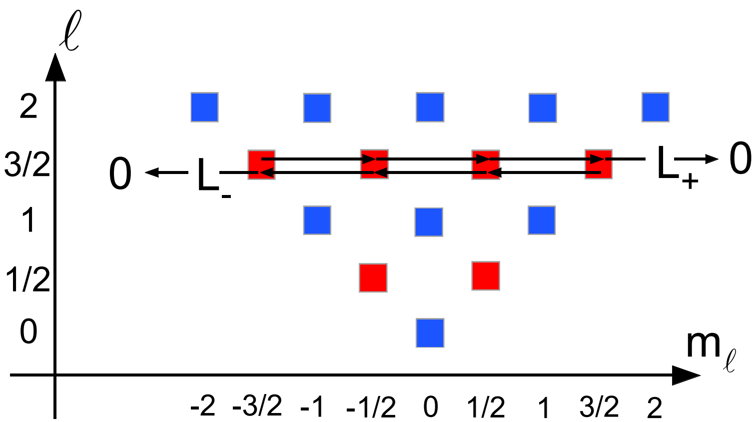
Es folgt $m(m\pm1) \leq \ell(\ell+1)$ und somit $-\ell \leq m \leq \ell$

(II) Falls $|\ell, m\rangle$ existiert mit $L^2 |\ell, m\rangle = \hbar^2 \ell(\ell+1) |\ell, m\rangle$, $L_z |\ell, m\rangle = \hbar\, m |\ell, m\rangle$ folgt:

$$L_z L_\pm |\ell, m\rangle \underset{(b)}{=} L_\pm L_z |\ell, m\rangle \pm \hbar L_\pm|\ell, m\rangle = \hbar (m\pm1) L_\pm|\ell, m\rangle$$

$$L^2 L_\pm |\ell, m\rangle \underset{(e)}{=} L_\pm L^2 |\ell, m\rangle = \hbar^2 \ell(\ell+1) L_\pm|\ell, m\rangle$$

Also ist für $\pm m < \ell$ der Zustand $|\ell, m\pm1\rangle \equiv L_\pm|\ell, m\rangle \ [\ell(\ell+1) - m(m\pm1)]^{-1/2}$ normierter Eigenvektor von L_z und L^2 zu den Eigenwerten $(m\pm1)\hbar$ bzw. $\hbar^2 \ell(\ell+1)$.



$$\langle \ell, \ell|L_-L_+|\ell, \ell\rangle \overset{(I)}{=} 0 \Rightarrow L_+|\ell, \ell\rangle = 0$$

$$\langle \ell, -\ell|L_+L_-|\ell, -\ell\rangle \overset{(I)}{=} 0 \Rightarrow L_-|\ell, -\ell\rangle = 0$$

Varianzen und Mittelwerte von L_x , L_y , L_z für die Eigenvektoren $|\ell, m\rangle$:

Es gilt: $\langle \ell, m \,|\, L_z \,|\ell, m\rangle = \hbar\, m$, $\Delta L_z^{\,2} = \langle \ell, m \,|\, L_z^{\,2} \,|\ell, m\rangle - \langle \ell, m \,|\, L_z \,|\ell, m\rangle^2 = \hbar^2 m^2 - \hbar^2 m^2 = 0$

BEH:

(1) $\langle \ell, m \,|\, L_x \,|\ell, m\rangle = \langle \ell, m \,|\, L_y \,|\ell, m\rangle = 0$

(2) $\Delta L_x = \Delta L_y = \dfrac{\hbar}{\sqrt{2}} \sqrt{(\,\ell(\ell+1) - m^2)}$

BEW:

(1) $i\hbar\, L_x = L_y L_z - L_z L_y \quad \Rightarrow$

$$i\hbar\, \langle \ell, m \,|\, L_x \,|\ell, m\rangle = \langle \ell, m \,|\, L_y L_z - L_z L_y \,|\ell, m\rangle = \langle \ell, m \,|\, L_y L_z \,|\ell, m\rangle - \langle \ell, m \,|\, L_z L_y \,|\ell, m\rangle$$

$$= \hbar\, m\, \langle \ell, m \,|\, L_y \,|\ell, m\rangle - \hbar\, m\, \langle \ell, m \,|\, L_y \,|\ell, m\rangle = 0$$

(2) $\Delta L_x^{\,2} + \Delta L_y^{\,2} \underset{(1)}{=} \langle \ell, m \,|\, L_x^{\,2} \,|\ell, m\rangle + \langle \ell, m \,|\, L_y^{\,2} \,|\ell, m\rangle = \langle \ell, m \,|\, L_x^{\,2} + L_y^{\,2} \,|\ell, m\rangle$

$$= \langle \ell, m \,|\, L^2 - L_z^{\,2} \,|\ell, m\rangle = \langle \ell, m \,|\, L^2 \,|\ell, m\rangle - \langle \ell, m \,|\, L_z^{\,2} \,|\ell, m\rangle = \hbar^2\, \ell(\ell+1) - \hbar^2\, m^2$$

Aus Symmetriegründen: $\Delta L_x^{\,2} = \Delta L_y^{\,2} \quad \Rightarrow \quad \Delta L_x^{\,2} = \Delta L_y^{\,2} = \dfrac{\hbar^2}{2}(\ell(\ell+1) - m^2\,)$

Quantisierung des Drehimpuls:

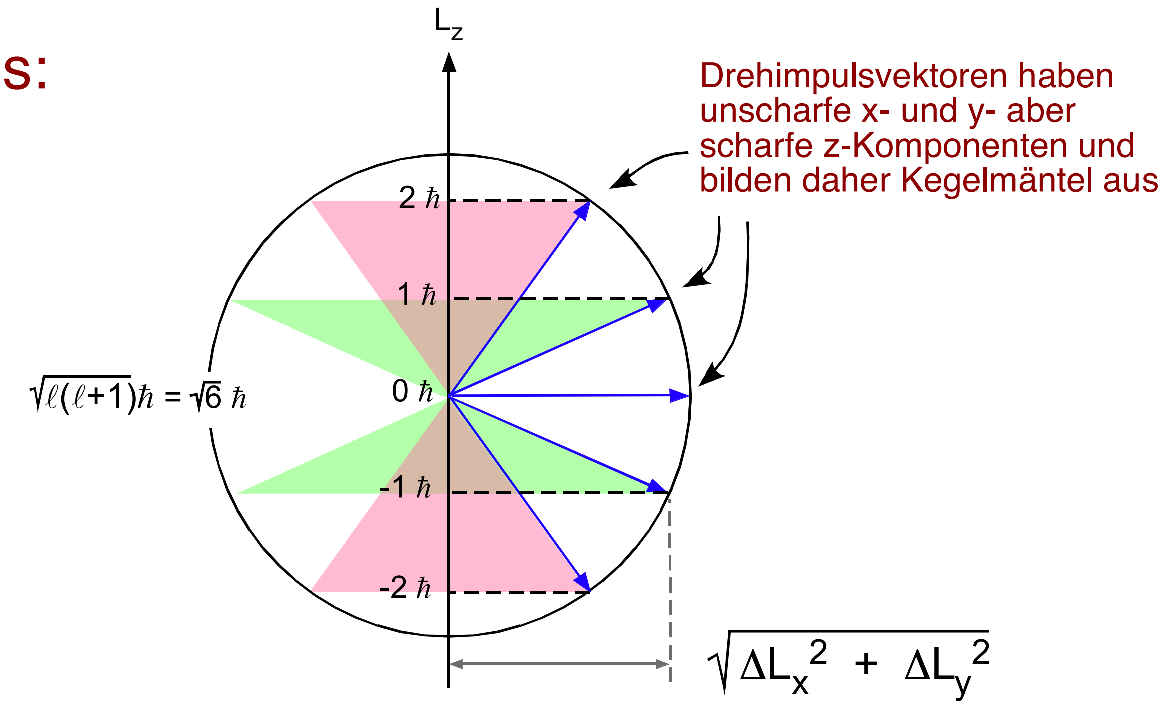
$$\ell = 2 : \quad L^2 |2, m\rangle = \hbar^2 \; 6 \, |2, m\rangle$$

$$L_z |2, m\rangle = \hbar \; m \, |2, m\rangle$$

$$m = -2, -1, 0, 1, 2$$

$$\Delta L_x = \Delta L_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \sqrt{6 - m^2}$$

$$\langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = 0$$



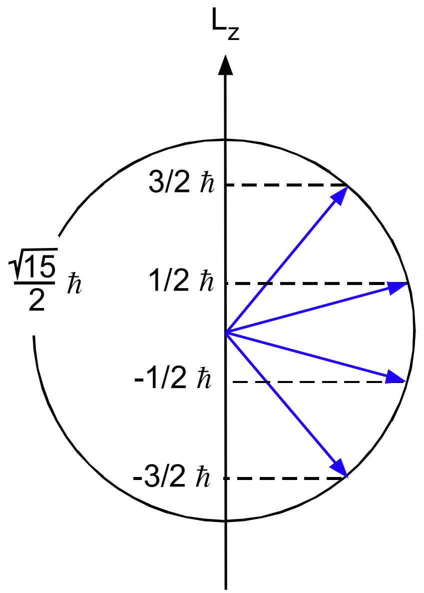
$$\ell = 3/2 : \quad L^2 |3/2, m\rangle = \hbar^2 \; 15/4 \; |3/2, m\rangle$$

$$L_z |3/2, m\rangle = \hbar \; m \, |3/2, m\rangle$$

$$m = -3/2, -1/2, 1/2, 3/2$$

$$\Delta L_x = \Delta L_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \sqrt{15/4 - m^2}$$

$$\langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = 0$$



Der Bahn-Drehimpuls in Polar-Koordinaten:

Kartesische Koordinaten:

$$L_x = Y P_z - Z P_y = \frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)$$

$$L_y = Z P_x - X P_z = \frac{\hbar}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

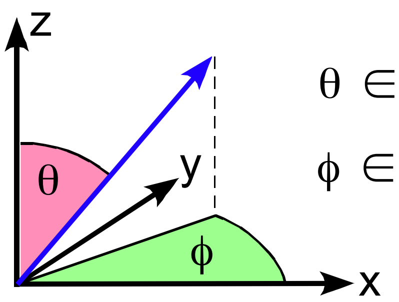
$$L_z = X P_y - Y P_x = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

Polar-Koordinaten:

$$x = r\sin(\theta)\cos(\phi)$$
$$y = r\sin(\theta)\sin(\phi)$$
$$z = r\cos(\theta)$$

Volumenelement:

$$d^3r = dx\,dy\,dz = r^2\,dr\;d\Omega$$
$$d\Omega = \sin(\theta)\,d\theta\,d\phi$$



$$\theta \in [0,\pi]$$
$$\phi \in [0,2\pi]$$

$L_{x,y,z}$ wirken nur auf Winkelvariablen θ, ϕ.

(i) $$L_x = Y P_z - Z P_y = i\hbar\left(\frac{\cos(\phi)}{\tan(\theta)}\frac{\partial}{\partial\phi} + \sin(\phi)\frac{\partial}{\partial\theta}\right)$$

$$L_y = Z P_x - X P_z = i\hbar\left(\frac{\sin(\phi)}{\tan(\theta)}\frac{\partial}{\partial\phi} - \cos(\phi)\frac{\partial}{\partial\theta}\right)$$

$$L_z = X P_y - Y P_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$$

Ü (ii) $$L^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{\tan(\theta)}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2(\theta)}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)$$

Ü (iii) $$\frac{P^2}{2m} = \frac{-\hbar^2}{2m}\Delta = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{L^2}{2m\,r^2}$$

BEW (i): $L_z = X P_y - Y P_x = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$

$$x = r\sin(\theta)\cos(\phi)$$
$$y = r\sin(\theta)\sin(\phi)$$
$$z = r\cos(\theta)$$

Wende Kettenregel an auf $f(x,y,z) = f(\,x(r,\theta,\phi)\,,\,y(r,\theta,\phi)\,,\,z(r,\theta,\phi)\,)$:

$$\frac{\partial}{\partial\phi} = \frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial\phi} + \frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial\phi} + \frac{\partial}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial\phi} = -r\sin(\theta)\sin(\phi)\frac{\partial}{\partial x} + r\sin(\theta)\cos(\phi)\frac{\partial}{\partial y}$$
$$= -y\frac{\partial}{\partial x} + x\frac{\partial}{\partial y}$$

$$\frac{\partial}{\partial\theta} = \frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial\theta} + \frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial\theta} + \frac{\partial}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial\theta} = r\cos(\theta)\cos(\phi)\frac{\partial}{\partial x} + r\cos(\theta)\sin(\phi)\frac{\partial}{\partial y} - r\sin(\theta)\frac{\partial}{\partial z}$$

$$\frac{\cos(\phi)}{\tan(\theta)}\frac{\partial}{\partial\phi} + \sin(\phi)\frac{\partial}{\partial\theta} = 0\cdot\frac{\partial}{\partial x} + r\cos(\theta)\,(\sin^2(\phi)+\cos^2(\phi))\frac{\partial}{\partial y} - r\sin(\theta)\sin(\phi)\frac{\partial}{\partial z}$$
$$= z\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial z}$$

$$\frac{\sin(\phi)}{\tan(\theta)}\frac{\partial}{\partial\phi} - \cos(\phi)\frac{\partial}{\partial\theta} = -r\cos(\theta)\,(\sin^2(\phi)+\cos^2(\phi))\frac{\partial}{\partial x} + 0\cdot\frac{\partial}{\partial y} + r\sin(\theta)\cos(\phi)\frac{\partial}{\partial z}$$
$$= -z\frac{\partial}{\partial x} + x\frac{\partial}{\partial z}$$

BEW (ii): Aus $\frac{1}{i\hbar}L_x = \frac{\cos(\phi)}{\tan(\theta)}\partial_\phi + \sin(\phi)\partial_\theta$, $\frac{1}{i\hbar}L_y = \frac{\sin(\phi)}{\tan(\theta)}\partial_\phi - \cos(\phi)\partial_\theta$, $\frac{1}{i\hbar}L_z = \partial_\phi$ folgt $\left(\partial_a = \frac{\partial}{\partial a}\right)$

$$-\frac{1}{\hbar^2}L_x^2 = \frac{\cos(\phi)}{\tan^2(\theta)}\partial_\phi\cos(\phi)\partial_\phi + \sin^2(\phi)\partial_\theta^2 + \frac{\cos(\phi)}{\tan(\theta)}\partial_\phi\sin(\phi)\partial_\theta + \sin(\phi)\cos(\phi)\,\partial_\theta\frac{1}{\tan(\theta)}\partial_\varphi$$

$$-\frac{1}{\hbar^2}L_y^2 = \frac{\sin(\phi)}{\tan^2(\theta)}\partial_\phi\sin(\phi)\partial_\varphi + \cos^2(\phi)\,\partial_\theta^2 - \frac{\sin(\phi)}{\tan(\theta)}\partial_\varphi\cos(\phi)\partial_\theta - \sin(\phi)\cos(\phi)\,\partial_\theta\frac{1}{\tan(\theta)}\partial_\phi$$

$$-\frac{1}{\hbar^2}L_z^2 = \partial_\varphi^2$$

$$\Rightarrow \quad -\frac{1}{\hbar^2}L_x^2 - \frac{1}{\hbar^2}L_y^2 - \frac{1}{\hbar^2}L_z^2 = \partial_\theta^2 + \frac{1}{\sin^2(\theta)}\partial_\phi^2 + \frac{1}{\tan(\theta)}\partial_\theta$$

BEW (iii): Aus der Definition der Drehimpulsoperatoren $L_x = \frac{\hbar}{i}\left(y\partial_z - z\partial_y\right), L_y = \frac{\hbar}{i}\left(z\partial_x - x\partial_z\right), L_x = \frac{\hbar}{i}\left(y\partial_x - y\partial_x\right)$

folgt $-\frac{1}{\hbar^2}L^2 = r^2\Delta - x^2\partial_x^2 - y^2\partial_y^2 - z^2\partial_z^2 - 2x\partial_x - 2y\partial_y - 2z\partial_z - 2xy\partial_x\partial_y - 2yz\partial_y\partial_z - 2xz\partial_x\partial_z$

und mit $r\partial_r = r\frac{\partial x}{\partial r}\partial_x + r\frac{\partial y}{\partial r}\partial_y + r\frac{\partial z}{\partial r}\partial_z = x\partial_x + y\partial_y + z\partial_z$ folgt

$$r\partial_r^2 r = r\partial_r + r\partial_r r\partial_r = x^2\partial_x^2 + y^2\partial_y^2 + z^2\partial_z^2 + 2x\partial_x + 2y\partial_y + 2z\partial_z + 2xy\partial_x\partial_y + 2yz\partial_y\partial_z + 2xz\partial_x\partial_z$$

Zusammen ergibt sich $-\frac{1}{\hbar^2}L^2 = r^2\Delta - r\partial_r^2 r$ und somit $\Delta = \frac{1}{r}\partial_r^2 r - \frac{1}{\hbar^2 r^2}L^2$

Eigenzustände des Bahn-Drehimpuls-Operators:

Es gilt:

$$L^2\,|\ell, m\rangle = \hbar^2\ \ell(\ell+1)\,|\ell, m\rangle$$

$$L_z\,|\ell, m\rangle = \hbar\ \ m\,|\ell, m\rangle$$

mit ganzzahligen Werten: $\ell = 0,1,...$

und $m \in \{ -\ell, -\ell+1, ..., \ell-1, \ell \}$

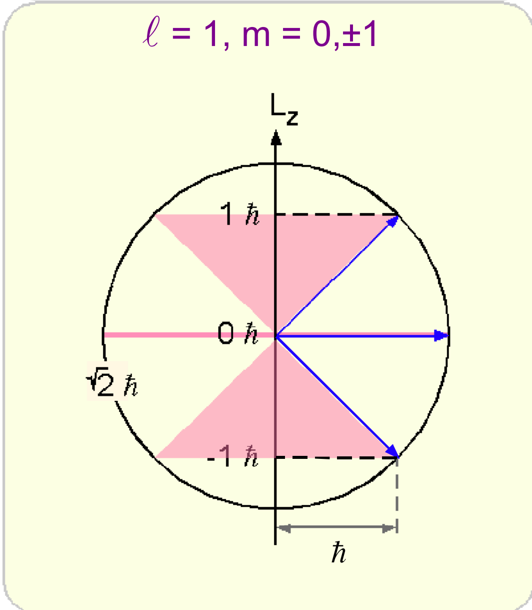
Kugelflächenfunktionen

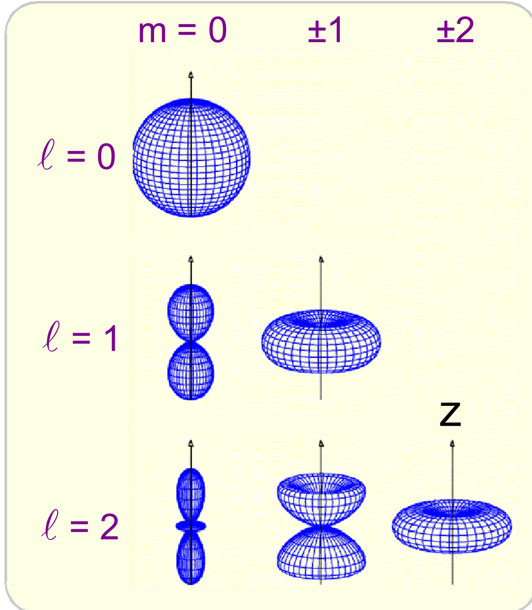
$$|\ell, m\rangle = Y_\ell^m(\theta,\phi) \equiv \frac{(-1)^{\ell+m}}{2^\ell\ \ell\,!}\sqrt{\frac{(2\ell+1)\,(\ell-m)!}{4\pi\quad(\ell+m)!}}\ e^{im\phi}\ \sin^m(\theta)\ \frac{d^{\ell+m}}{d(\cos(\theta))^{\ell+m}}\ \sin^{2\ell}(\theta)$$

$$Y_0^0(\theta,\phi) \equiv \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$$

$$Y_1^0(\theta,\phi) \equiv \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\ \cos(\theta)$$

$$Y_1^{\pm1}(\theta,\phi) \equiv \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\ \sin(\theta)\ e^{\pm i\phi}$$





$|Y_\ell^m(\theta,\phi)|^2$ ist rotationssymmetrisch um z-Achse

Polar-Diagramme von $|Y_\ell^m(\theta,\phi)|^2$

Schrödinger Gleichung im Zentralpotential:

$$H = \left(\frac{P^2}{2m} + V(\vec{R})\right) = \left(\frac{P^2}{2m} + V(|\vec{R}|)\right) = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{L^2}{2m\, r^2} + V(|\vec{R}|)$$

$$\left.\begin{array}{l} V = V(|\vec{R}|) \text{ hängt nur von Radial-Koordinate } r \text{ ab} \\ L_q,\ q \in \{x,y,z\},\ L^2 \text{ hängen nur von Winkelkoordinaten } \theta, \phi \text{ ab} \end{array}\right\} \Rightarrow [L^2, V] = [L_q, V] = 0$$

$\Rightarrow$ $H,\ L^2,\ L_z$ kommutieren $\Rightarrow$ Es gibt eine gemeinsame Eigenbasis

$$H\psi = E\psi,\ \psi(r,\theta,\phi) = R_\ell(r)\, Y_{\ell m}(\theta,\phi),\ L^2\, Y_{\ell m}(\theta,\phi) = \hbar^2 \ell(\ell+1)\ Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

$$\Rightarrow \left(\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{L^2}{2m\, r^2} + V(r)\right) R_\ell(r)\, Y_{\ell m}(\theta,\phi) = E\ R_\ell(r)\, Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

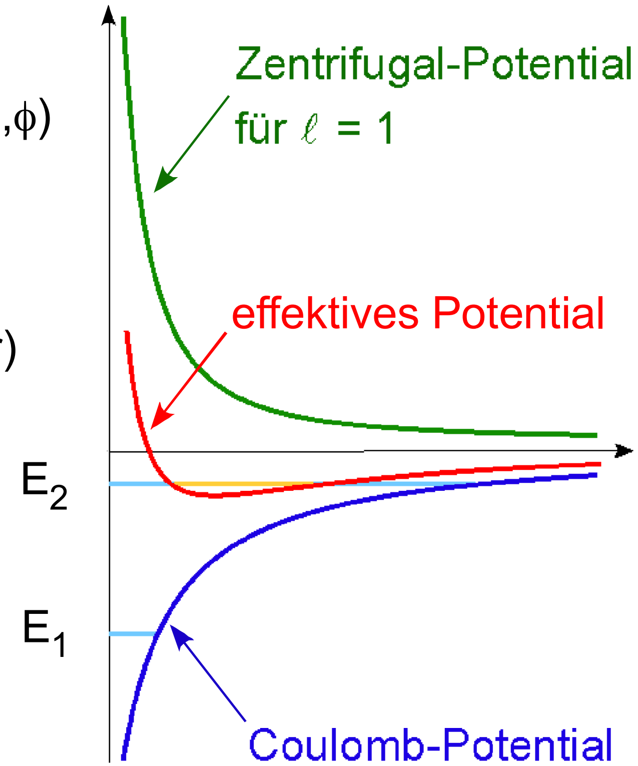
$\Rightarrow$ Radial-Gleichung: $\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m\, r^2} + V(r)\right) R_\ell(r) = E\ R_\ell(r)$

$$R_\ell(r) = u_\ell(r)/r \quad \Rightarrow \quad \left(\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \underbrace{\frac{\hbar^2\, \ell(\ell+1)}{2m\, r^2}}_{\text{Zentrifugal-Potential}} + V(r)\right) u_\ell(r) = E\ u_\ell(r) \qquad (7.3)$$

8. Das Wasserstoff-Atom

Schrödinger Gleichung im Coulomb-Potential:

$$V(r) = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\,\frac{Z e^2}{r} \qquad \psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi) = \frac{1}{r}\,u_{n\ell}(r)\;Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$



Lösung der Radialgleichung (7.3) im Coulomb-Potential:

$$\Big(\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2}}_{\text{Kinetische Energie}} + \underbrace{\frac{\hbar^2\,\ell(\ell+1)}{2m\,r^2}}_{\text{Zentrifugal-Potential}} - \underbrace{\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\,\frac{Z e^2}{r}}_{\text{Coulomb-Potential}}\Big)\,u_{n\ell}(r) = E_{n\ell}\;u_{n\ell}(r)$$

Gebundene Zustände:

$$E_{n\ell} = E_n = -\alpha^2\,\frac{mc^2}{2}\,Z^2\,\frac{1}{n^2} \qquad \alpha \equiv \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\,\hbar c}$$

$$n = 1,2,\ldots \qquad \ell = 0,1,\ldots,n-1 \qquad \approx 1/137$$

Feinstruktur-Konstante

$$R_{n\ell}(r) = u_{n\ell}(r)/r \equiv N_{n\ell}\;e^{-\rho_n/2}\,\rho_n^{\ell}\;L_{n+\ell,\,2\ell+1}(\rho_n)\,, \quad \rho_n \equiv (2Z\,r/na_0)\,, \quad a_0 \equiv$$ Bohr-Radius

$$L_{\nu,\mu}(\rho) \equiv (\partial/\partial\rho)^{\mu}\;e^{\rho}\,(\partial/\partial\rho)^{\nu}\,e^{-\rho}\,\rho^{\nu}$$ assoziierte Laguerre-Polynome

$$N_{n\ell} \equiv$$ Normierungskonstanten

BEW: Theorievorlesung, siehe z.B. Cohen-Tannoudji, Quantum Mechanics I, Wiley

Warum ist der Grundzustand stabil ? Warum gibt es keine Zustände mit $E < E_1$?

Unterhalb der Energie E_1 ist der Aufwand an kinetischer Energie für die Lokalisierung der Wellenfunktion größer als der Gewinn an potentieller Energie !
Die Lokalisierungsenergie ist eine fundamentale Konsequenz der Wellennatur der Materie

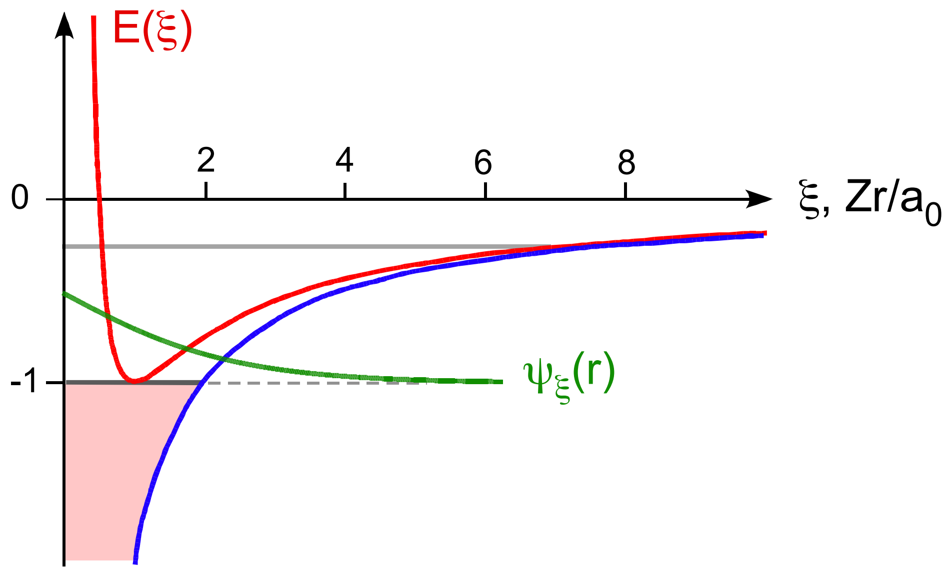
Betrachte normiertes Wellenpaket $\psi_\xi(r)$ mit Ortsbreite $\propto \xi$,
Berechne Erwartungswert der Gesamt-Energie in Abhängigkeit von ξ:

$$E(\xi) = \langle\psi_\xi|V(R)|\psi_\xi\rangle + \langle\psi_\xi|\frac{P^2}{2m}|\psi_\xi\rangle \geq E_1$$

$$E_1 = -\alpha^2 Z^2 \frac{mc^2}{2}$$

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar c}$$

$$a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}$$



V(r)/|E1| Coulomb-Potential

Quantitative Betrachtung

verwende: $\int_0^\infty dz\, z^n\, e^{-z} = n!$

Ü P

Betrachte normiertes Wellenpaket $\psi(r) = \pi^{-1/2}\,\xi^{-3/2}\,e^{-r/\xi}$ mit der Ortsbreite $\Delta R^2 = \langle\psi|R^2|\psi\rangle = 3\,\xi^2$

Potentielle Energie: $V(r) = -\dfrac{\hbar^2}{m}\dfrac{Z}{a_0 r} \;\Rightarrow\; \langle\psi|V(R)|\psi\rangle = -\dfrac{\hbar^2}{m}\dfrac{Z}{a_0\xi}$

Kinetische Energie: $\langle\psi|\,L^2\,|\psi\rangle = 0 \;\Rightarrow\; \langle\psi|\dfrac{P^2}{2m}|\psi\rangle = \langle\psi|\dfrac{-\hbar^2}{2m}\dfrac{1}{r}\dfrac{\partial^2}{\partial r^2} r\,|\psi\rangle = \dfrac{\hbar^2}{2m\xi^2}$

$$\frac{P^2}{2m} = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{L^2}{2m\,r^2}$$

Gesamt-Energie: $E(\xi) = \langle\psi|V(R)|\psi\rangle + \langle\psi|\dfrac{P^2}{2m}|\psi\rangle = \dfrac{\hbar^2}{2m}\left(\dfrac{1}{\xi^2} - \dfrac{2Z}{a_0\xi}\right)$

Lokales Minimum von $E(\xi)$: $0 = \dfrac{\partial E}{\partial\xi} \;\Rightarrow\; \xi = \dfrac{a_0}{Z}\,,\; E(\xi) = E_1$

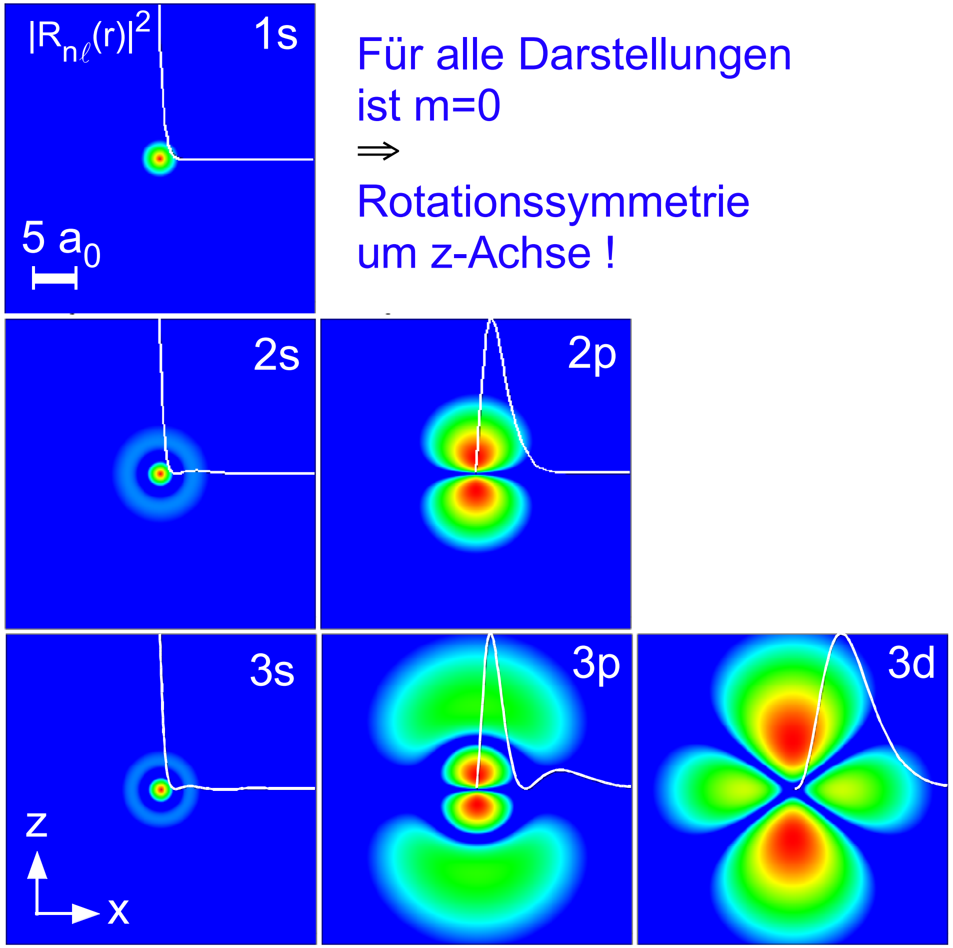
Wasserstoff- Wellenfunktionen $|\psi|^2$

$|\psi_{n\ell m}(x,0,z)|^2$

n = 1

n = 2

n = 3



s: $\ell = 0$ m = 0

p: $\ell = 1$ m = 0

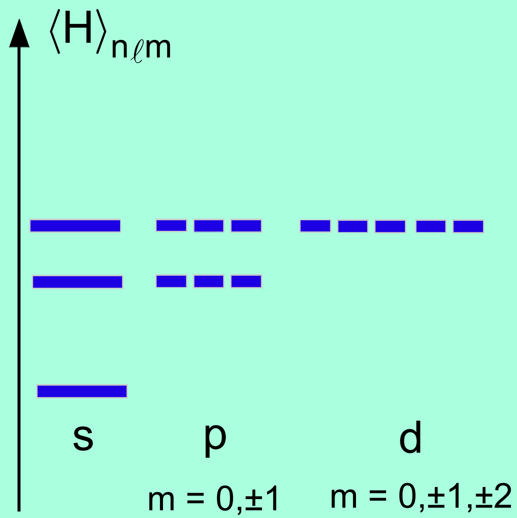
d: $\ell = 2$ m = 0

Für alle Darstellungen ist m=0
$\Rightarrow$
Rotationssymmetrie um z-Achse !

$$\langle H \rangle_{n\ell m} = -\frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2}\,\frac{m\,Z^2\,e^4}{2\hbar^2}\,\frac{1}{n^2}$$

$$\langle L^2 \rangle_{n\ell m} = \hbar^2\,\ell(\ell+1)$$

$$\langle L_z \rangle_{n\ell m} = m\,\hbar$$



Spektroskopie-Konvention:

s: sharp	p: principal	d: diffuse	f: fundamental	g,h,i,...
0	1	2	3	4,5,6,...

Strahlungsübergänge:

Bohr: Atome emittieren oder absorbieren beim Übergang zwischen zwei stationären Zuständen der Energiewerte E_m bzw. E_n Photonen der Frequenz $(E_m - E_n)/\hbar$

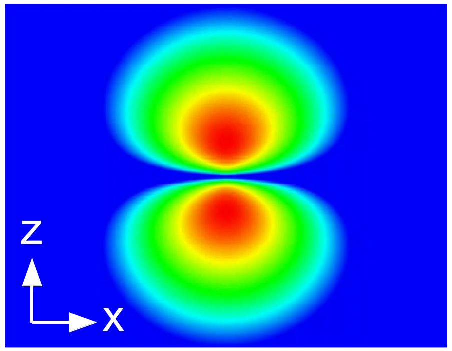
Klassische Physik: Absorption oder Emission von Strahlung erfordert das oszillierende Dipolmoment einer Antenne

Ladungsverteilung stationärer Zustände symmetrisch bzgl. Ursprung $\rightarrow$ keine Ladungstrennung

Stationäre Zustände haben kein Dipolmoment

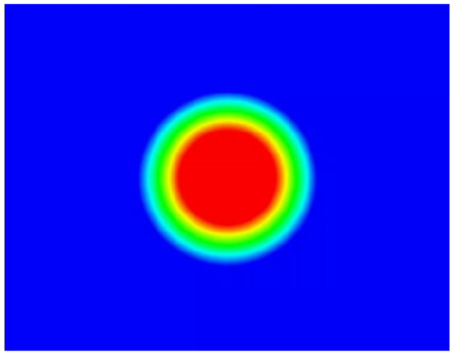
BSP:

$|\psi_{2,1,0}(x,0,z)|^2$



$|2p, m=0\rangle$

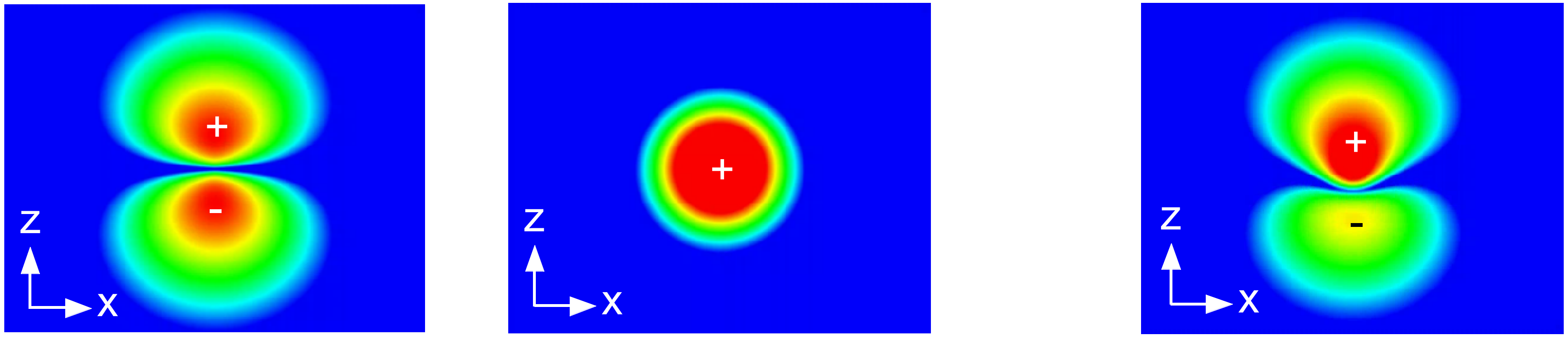
$|\psi_{1,0,0}(x,0,z)|^2$



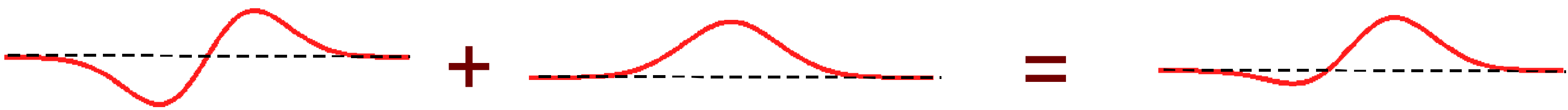
$|1s\rangle$

Jedoch Überlagerung zweier stationärer Zustände kann zu Dipolmoment führen

$|\psi_{2,1,0}(x,0,z)|^2$ $\quad$ $|\psi_{1,0,0}(x,0,z)|^2$ $\quad$ $|A\,\psi_{2,1,0}(x,0,z) + B\,\psi_{1,0,0}(x,0,z)|^2$



$|2p,m{=}0\rangle$ $\quad$ $|1s\rangle$ $\quad$ $A\,|2p,m{=}0\rangle \;+\; B\,|1s\rangle$



$\psi_{2,1,0}(0,0,z)$ $\quad$ $\psi_{1,0,0}(0,0,z)$ $\quad$ $A\,\psi_{2,1,0}(0,0,z) + B\,\psi_{1,0,0}(0,0,z)$

Frage: Welche Überlagerungen $|\psi\rangle$ zweier stationärer Zustände besitzen ein Dipolmoment, i.e., einen nicht verschwindenden Erwartungswert $\langle\psi|\vec{D}|\psi\rangle$ des Dipol-Operators $\vec{D} = e\,\vec{R}$?

$$|\langle\psi|\vec{D}|\psi\rangle| = e \int |\psi|^2\, \vec{r}\, d^3r$$

$\Rightarrow$ Strahlungsauswahlregeln für Dipolübergänge

Betrachte die Matrixelemente des Dipol-Operators:

Dipol-Operator: $\vec{D} = e\,\vec{R}$, $\vec{R}$ = Ortsoperator

$$\langle n,\ell,m|\,\vec{D}\,|n',\ell',m'\rangle = e \int r^2\,dr\,d\Omega\;\; R_{n\ell}(r)\,Y_{\ell m}(\theta,\phi)^*\;\;\vec{r}\;\;R_{n'\ell'}(r)\,Y_{\ell' m'}(\theta,\phi)$$

Verwende $d\Omega = \sin(\theta)\,d\theta\,d\phi$ und $\vec{r} = r\begin{pmatrix}\sin(\theta)\cos(\phi)\\ \sin(\theta)\sin(\phi)\\ \cos(\theta)\end{pmatrix}$

$$= e\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\sin(\theta)\,d\theta\,d\phi\;\;Y_{\ell m}(\theta,\phi)^*\;\;Y_{\ell' m'}(\theta,\phi)\begin{pmatrix}\sin(\theta)\cos(\phi)\\ \sin(\theta)\sin(\phi)\\ \cos(\theta)\end{pmatrix}\int_0^{\infty} dr\,r^2\;R_{n\ell}(r)\;r\;\;R_{n'\ell'}(r) \qquad (8.1)$$

Auswahlregeln: ϕ-Integration: $\Delta m \equiv m'-m = 0,\pm 1$ $\quad\Leftrightarrow\quad$ $\langle n,\ell,m|\,\vec{D}\,|n',\ell',m'\rangle \neq 0$ (8.2)

θ-Integration: $\Delta\ell \equiv \ell'-\ell = \pm 1$

insbesondere erwartungsgemäß: $\langle n,\ell,m|\,\vec{D}\,|n,\ell,m\rangle = 0$

$\rightarrow$ kein permanentes Dipolmoment für Eigenzustände des H-Atoms

Dipolmoment verschwindet für stationäre Zustände: $\langle n,\ell,m|\,\vec{D}\,|n,\ell,m\rangle = 0$, nicht aber für Überlagerungen $|\psi\rangle = A\ |n',\ell',m'\rangle + B\ |n,\ell,m\rangle$ zwischen Zuständen $|n',\ell',m'\rangle$, $|n,\ell,m\rangle$ für welche die Auswahlregeln gelten: $\Delta\ell = \pm 1$, $\Delta m = 0,\pm 1$

Betrachte Überlagerung von $|n',\ell',m'\rangle$, $|n,\ell,m\rangle$ zur Zeit t=0 :

$$|\psi\rangle = A\ |n',\ell',m'\rangle + B\ |n,\ell,m\rangle$$

Für spätere Zeiten t > 0 :

$$|\psi(t)\rangle = A \exp(-iE_{n'}\, t/\hbar)\ |n',\ell',m'\rangle + B \exp(-iE_n\, t/\hbar)\ |n,\ell,m\rangle$$

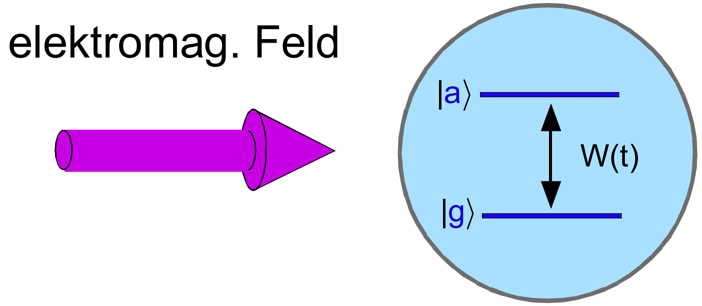
$$\begin{aligned}\langle\psi(t)|\,\vec{D}\,|\psi(t)\rangle = \ & A^*A\ \cancel{\langle n',\ell',m'|\,\vec{D}\,|n',\ell',m'\rangle} + B^*B\ \cancel{\langle n,\ell,m|\,\vec{D}\,|n,\ell,m\rangle} \\ & + A^*B\ \langle n',\ell',m'|\,\vec{D}\,|n,\ell,m\rangle\ \exp(\,i(E_{n'} - E_n)\,t/\hbar) \\ & + A\,B^*\ \langle n,\ell,m|\,\vec{D}\,|n',\ell',m'\rangle\ \exp(\,i(E_n - E_{n'})\,t/\hbar)\end{aligned} \qquad (8.3)$$

$\Rightarrow\quad \langle\psi(t)|\,\vec{D}\,|\psi(t)\rangle$ oszilliert mit der Übergangsfrequenz $(E_{n'} - E_n)/\hbar$

Der Zustand $|\psi(t)\rangle$ kann Photonen der Frequenz $(E_{n'} - E_n)/\hbar$ abstrahlen bzw. aufnehmen

Strahlungsübergänge:

$|a\rangle, |g\rangle$ Eigenzustände des atomaren Hamilton-Operators H_0



Gesamt Hamilton-Operator: $H = H_0 + W(t)$

$W = -\vec{D}\,\vec{E}(t)$

Operator des elektrischen Dipolmoments:

$\vec{D} = e\,\vec{R}$, $\vec{R}$ = Ortsoperator

- Fall 1: Atom im externen elektromag. Feld (z.B. in einem Laserstrahl)

  stimulierte Absorption bzw. Emission (periodische Dynamik der Besetzungen der Zustände $|g\rangle$, $|a\rangle$)

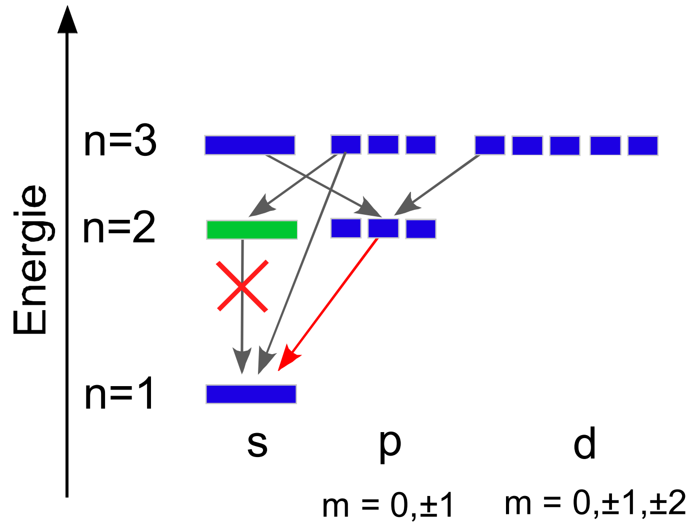
  Atom für $t = 0$ in $|g\rangle$ → externes Feld führt zu einer kleinen Beimischung von $|a\rangle$
  → elektrisches Dipolmoment bildet sich aus → Energieaufnahme aus dem Feld
  → Atom geht über in den Zustand $|a\rangle$ → externes Feld führt zu einer Beimischung von $|g\rangle$
  → elektrisches Dipolmoment bildet sich aus → Energieabgabe an das Feld
  → Atom geht über in den Zustand $|g\rangle$ → und so weiter ...

- Fall 2: Atom im elektromag. Feld des Vakuums: $\langle E\rangle = 0$, $\langle E^2\rangle \neq 0$

  spontane Emission falls Atom im angeregten Zustand $|a\rangle$

  Atom für $t = 0$ in $|a\rangle$ → Vakuumfluktuationen führen zu einer winzigen Beimischung von $|g\rangle$ → elektr. Dipolmoment bildet sich aus → Emission eines Photons → Atom geht über in den Zustand $|g\rangle$. Atom bleibt in $|g\rangle$, da Energieaufnahme aus dem Vakuumfeld nicht möglich. Emittiertes Photon kehrt nicht mehr zum Atom zurück.

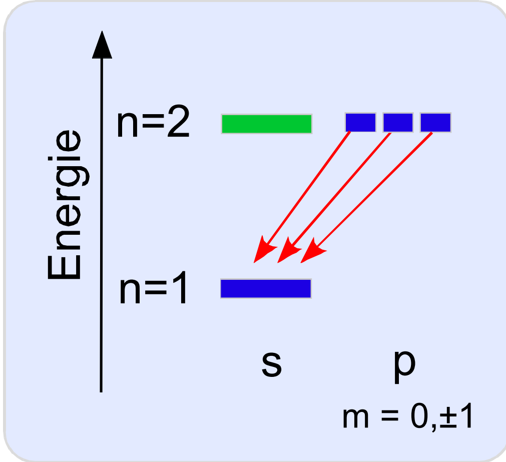
Dipolübergänge im Wasserstoff-Atom:



Das 2S-Niveau kann aufgrund der Auswahlregeln nicht über einen Dipolübergang zerfallen, obwohl es nicht den Grundzustand darstellt. Solche Niveaus nennt man metastabil.

Die natürliche Lebensdauer des 2p-Niveaus beträgt 1.06 ns, die des 2s-Niveaus etwa 0.14 sec.

BSP: Überlagerung von [2P, $m \in \{0,\pm1\}$] mit [1S]



Betrachte Überlagerung der Zustände $|2,1,m\rangle$ und $|1,0,0\rangle$:

zur Zeit t=0 : $|\psi_m\rangle = A\,|2,1,m\rangle + B\,|1,0,0\rangle$, wähle oBdA: A,B reell

Für spätere Zeiten t > 0 gilt gemäß Schrödinger-Gleichung :

$$|\psi_m(t)\rangle = A \exp(-iE_2\, t/\hbar)\;|2,1,m\rangle + B \exp(-iE_1\, t/\hbar)\;|1,0,0\rangle$$

Verwende: $\langle 2,1,m|\,\vec{D}\,|2,1,m\rangle = \langle 1,0,0|\,\vec{D}\,|1,0,0\rangle = 0$

$$\Rightarrow \quad \langle\psi_m(t)|\,\vec{D}\,|\psi_m(t)\rangle \overset{}{\underset{(8.3)}{=}} A\,B\,\langle 2,1,m|\,\vec{D}\,|1,0,0\rangle \exp(\,i(E_2 - E_1)\,t/\hbar) \;+\; \text{c.c.} \qquad (8.4)$$

Berechnung der Matrixelemente $\quad \langle 2,1,m|\,\vec{D}\,|1,0,0\rangle \overset{(8.1)}{=}$

$$= e \int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} d\theta\, d\phi\, \sin(\theta)\, \underbrace{Y_{0,0}(\theta,\phi)}_{\frac{1}{\sqrt{4\pi}}}\, Y_{1,m}(\theta,\phi)^* \begin{pmatrix} \sin(\theta)\cos(\phi) \\ \sin(\theta)\sin(\phi) \\ \cos(\theta) \end{pmatrix} \underbrace{\int_0^{\infty} dr\, r^2\, R_{2,1}(r)\;\, r\;\, R_{1,0}(r)}_{I_R}$$

$$\langle 2,1,m|\,\vec{D}\,|1,0,0\rangle \;=\; \frac{e}{\sqrt{4\pi}}\; l_R \int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} d\theta\, d\phi\, \sin(\theta)\;\; Y_{1,m}(\theta,\phi)^* \begin{pmatrix} \sin(\theta)\cos(\phi) \\ \sin(\theta)\sin(\phi) \\ \cos(\theta) \end{pmatrix} \qquad (8.5)$$

Einsetzen in (8.5)

$$m = 0:\quad Y_{1,0}\,(\theta,\phi) \;\equiv\; \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,\cos(\theta)$$

$$m = \pm 1:\quad Y_{1,\pm 1}(\theta,\phi) \;\equiv\; \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\;\sin(\theta)\;\; e^{\pm i\phi}$$

$\Rightarrow$

$$\langle 2,1,0|\,\vec{D}\,|1,0,0\rangle \;=\; \frac{1}{\sqrt{3}}\; e\, l_R \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad (8.6)$$

$$\langle 2,1,\pm 1|\,\vec{D}\,|1,0,0\rangle \;=\; \frac{1}{\sqrt{6}}\; e\, l_R \begin{pmatrix} \pm 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix} \qquad (8.7)$$

Erwartungswert des Dipolmoments:

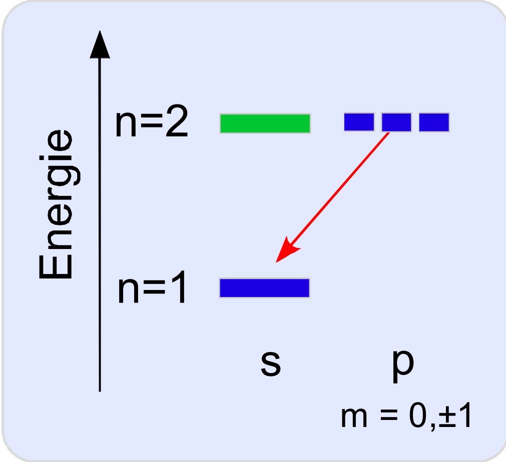
$$m = 0 \quad\Rightarrow\quad \langle \psi_0(t)|\,\vec{D}\,|\psi_0(t)\rangle \;\underset{(8.4,8.6)}{=}\; \frac{1}{\sqrt{3}}\; e\, l_R\, A\, B \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \cos(\omega t) \end{pmatrix} \qquad (8.8)$$

Dipolmoment schwingt parallel zur z-Achse

$$m = \pm 1 \quad\Rightarrow\quad \langle \psi_{\pm 1}(t)|\,\vec{D}\,|\psi_{\pm 1}(t)\rangle \;\underset{(8.4,8.7)}{=}\; \frac{1}{\sqrt{6}}\; e\, l_R\, A\, B \begin{pmatrix} \pm\cos(\omega t) \\ -\sin(\omega t) \\ 0 \end{pmatrix} \qquad (8.9)$$

Dipolmoment dreht sich in der xy-Ebene

Überlagerung von [2p, m=0] mit [1s] :



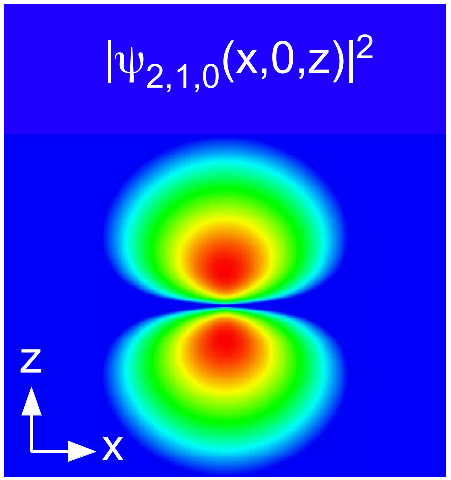
$$|\psi_0(t)\rangle = A \exp(-iE_2\, t/\hbar)\ |2,1,0\rangle + B \exp(-iE_1\, t/\hbar)\ |1,0,0\rangle$$

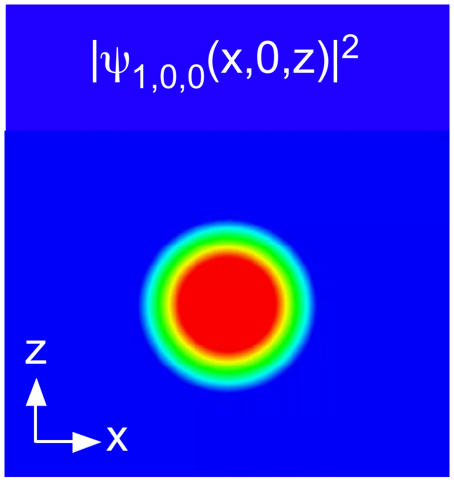
$$\langle\psi_0(t)|\ \vec{D}\ |\psi_0(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\, e\, I_R\, A\, B \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \cos(\omega t) \end{pmatrix}$$

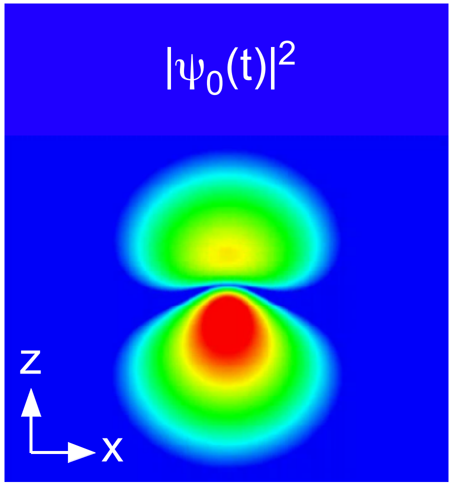
Dipolmoment oszilliert linear polarisiert längs z-Achse !
Emission von in rz-Ebene linear polarisiertem Licht (r = Beobachtungsrichtung)

Illustration der xz-Ebene:

$|2p, m=0\rangle$ + $|1s\rangle$ = $|\psi_0(t)\rangle$



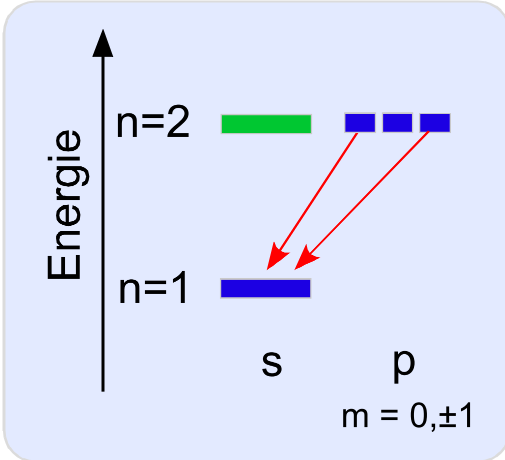




Überlagerung von [2p, m=±1]   mit   [1s] :

$$|\psi_{\pm 1}(t)\rangle \;=\; A\exp(-iE_2\, t/\hbar)\;\; |2,1,\pm 1\rangle \;+\; B\exp(-iE_1\, t/\hbar)\;\; |1,0,0\rangle$$

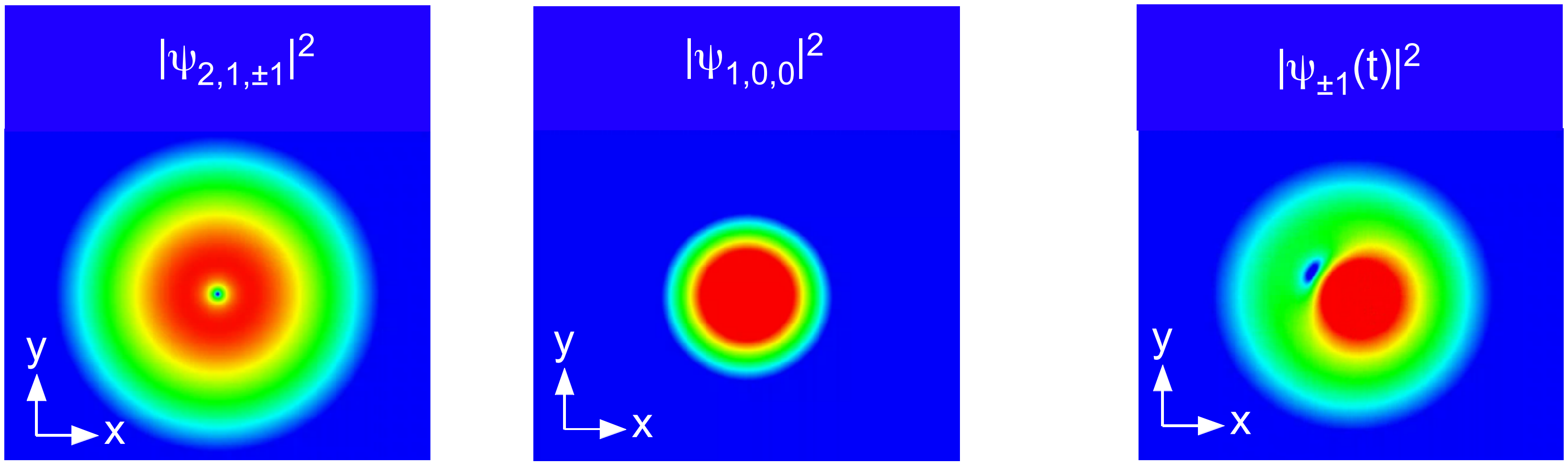
$$\langle\psi_{\pm 1}(t)|\,\vec{D}\,|\psi_{\pm 1}(t)\rangle \;=\; \frac{1}{\sqrt{6}}\, e\, I_R\, A\, B \begin{pmatrix} \pm\cos(\omega t) \\ -\sin(\omega t) \\ 0 \end{pmatrix}$$



Dipolmoment dreht sich im oder entgegen dem Uhrzeigersinn in der xy-Ebene !
Polarisationstyp des emittierten Lichts hängt von Beobachtungsrichtung ab

Illustration der xy-Ebene:

$|2p, m=\pm 1\rangle \quad + \quad |1s\rangle \quad = \quad |\psi_{\pm 1}(t)\rangle$



Schwerpunkts – und Relativ-Koordinaten

Betrachte zwei Teilchen der Massen m_1, m_2 mit Orts – und Impuls-Operatoren $R^{(1)}, P^{(1)}, R^{(2)}, P^{(2)}$

Vertauschungsrelationen: $[R^{(i)}_\nu , P^{(j)}_\mu] = i\hbar\, \delta_{\nu\mu}\, \delta_{ij}$, $\nu, \mu \in \{x,y,z\}$, $i , j \in \{1,2\}$

Neue Koordinaten: $R^{(s)}$ = Schwerpunkts-Koordinate, $R^{(r)}$ = Relativ-Koordinate

$$R^{(s)} = \frac{m_1 R^{(1)} + m_2 R^{(2)}}{m_1 + m_2} \qquad P^{(s)} = P^{(1)} + P^{(2)}$$

$$R^{(r)} = R^{(1)} - R^{(2)} \qquad P^{(r)} = \frac{m_2 P^{(1)} - m_1 P^{(2)}}{m_1 + m_2}$$

Es gelten folgende Beziehungen:

(i) $[R^{(i)}_\nu , P^{(j)}_\mu] = i\hbar\, \delta_{\nu\mu}\, \delta_{ij}$, $\nu, \mu \in \{x,y,z\}$, $i , j \in \{r,s\}$

(ii) $$P^{(1)} = \frac{m_1}{m_1 + m_2} P^{(s)} + P^{(r)} \qquad P^{(2)} = \frac{m_2}{m_1 + m_2} P^{(s)} - P^{(r)}$$

(iii) $$\frac{{P^{(1)}}^2}{2m_1} + \frac{{P^{(2)}}^2}{2m_2} = \frac{{P^{(s)}}^2}{2M} + \frac{{P^{(r)}}^2}{2\mu}$$

$M \equiv m_1 + m_2$ Gesamt-Masse

$\mu \equiv m_1 m_2 / M$ reduzierte Masse

Zwei-Körper-Problem (Massen m_1, m_2) :

$$H = \frac{P^{(1)2}}{2m_1} + \frac{P^{(2)2}}{2m_2} + V(R^{(1)} - R^{(2)})$$

Potential V hänge nur von Relativ-Koordinate ab

$$H = H^{(s)} + H^{(r)} \qquad H^{(s)} = \frac{P^{(s)2}}{2M} \qquad H^{(r)} = \frac{P^{(r)2}}{2\mu} + V(R^{(r)})$$

Es folgt $[H^{(s)}, H^{(r)}] = 0$ $\Rightarrow$ Es gibt eine gemeinsame Eigen-Basis $|\phi_\kappa\rangle$:

$$H^{(s)} |\phi_\kappa\rangle = E_\kappa^{(s)} |\phi_\kappa\rangle$$

$$H^{(r)} |\phi_\kappa\rangle = E_\kappa^{(r)} |\phi_\kappa\rangle$$

$$H |\phi_\kappa\rangle = (E_\kappa^{(s)} + E_\kappa^{(r)}) |\phi_\kappa\rangle$$

BSP: Wasserstoff-Atom = Proton + Elektron $\Rightarrow$ Betrachte Ein-Körper-Problem mit reduzierter Masse μ