$\Rightarrow B_{ij} = \sum_{nm} c_{in} A_{nm} c^*_{jm} \Leftrightarrow B = CAC^+$

(6.10) Satz

Schrödinger-Gleichung im Hilbertraum:

Hamilton-Operator eines abgeschlossenen QM-Systems ist hermitesch! $\Rightarrow \boxed{H = H^+}$

$\Leftrightarrow$ Erhaltung des Wahrscheinlichkeitsstroms.

$\Rightarrow$ Kontinuitätsgleichung.

$H|\psi\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle$

Betrachte stationäre Zustände: $|\psi\rangle = e^{-i\omega t}|\varphi\rangle \Rightarrow \boxed{(H-E)|\varphi\rangle = 0}$

1.) Basisdarstellung

$\{|n\rangle\}_{n=1,\dots,N}$ ist VONS, $\mathbb{1}_{\mathcal{H}} = \sum_n |n\rangle\langle n|$

$\mathbb{1}_{\mathcal{H}}(H-E)\mathbb{1}_{\mathcal{H}}|\varphi\rangle = 0$:

$\Rightarrow \sum_{n'} (H_{nn'} - E\,\delta_{nn'})\,c_n = 0$

$\Rightarrow$ Eigenwertproblem im $\mathbb{R}^N$

$\Rightarrow \det(H - E\mathbb{1}) =: D(E)$, Eigenwerte: $D(E_n) = 0$ mit $E_n = E_n^* \in \mathbb{R}$

$\hat{=}$ Nullstellen der Säkulargleichung

$|\varphi_n\rangle$ sind orthogonal, $\langle\varphi_n|\varphi_{n'}\rangle = \delta_{nn'}$

$H_{nn'} = \langle n|H|n'\rangle \Rightarrow$ Isomorphismus auf die symmetrischen $N\times N$-Matrizen

$|\varphi\rangle = \sum_n c_n|n\rangle$

2) $H = H_0 + \lambda V = H^+$, $\lambda = 0, 1, \dots$

Eigenwertproblem zu H_0 es sei bekannt:

$H_0 = H_0^+$: $H_0|n\rangle = E_n|n\rangle$

$\Rightarrow$ wähle $\{|n\rangle\}_{n=1,\dots}$ VONS, Basis, $(H-E)|\varphi\rangle = 0$

$\Leftrightarrow (H_0 - E)|\varphi\rangle + \lambda V|\varphi\rangle = 0$

$(H_0 - E)|\varphi\rangle = -\lambda V|\varphi\rangle$, $G_0 := (E - H_0)^{-1}$

$\hookrightarrow$ Resolvente, Green-Funktion

$\Rightarrow \underbrace{G_0(H_0 - E)\varphi}_{= -\mathbb{1}} = -\lambda G_0 V|\varphi\rangle$

$\Leftrightarrow -|\varphi\rangle = -\lambda G_0 V|\varphi\rangle$

$\Leftrightarrow |\varphi\rangle = \lambda G_0 V|\varphi\rangle$ (spezielle, inhomogene Lösung)

$\Leftrightarrow \boxed{|\varphi\rangle = a_n|n\rangle + \lambda G_0 V|\varphi\rangle}$, allgemeine Lösung: $\begin{cases} a \neq 0, & E = E_n \\ a = 0, & E \neq E_n \end{cases}$

02.06.10 Eigenschaften der Resolvente:

$G_0 = G_0(H_0) = \frac{1}{E-H} = \mathbb{1}_{\mathcal{H}} G_0 \mathbb{1}_{\mathcal{H}} = \sum_{n,m} |n\rangle\langle n| \underbrace{\frac{1}{E-H_0}}_{= \frac{1}{E}\sum_i \left(\frac{H_0}{E}\right)^i} |n\rangle\langle n|$

$g(x) := \frac{1}{E-x} = \frac{1}{E}\sum_n \left(\frac{x}{E}\right)^n$ für $E \neq x$, $E > x$

$\Rightarrow (g^{\pm})(x) = (E \pm i\eta - x)^{-1}$, also:

mit $\eta \to 0$: Verschiebung des Pols in die komplexe Ebene

$(H_0)^i|m\rangle = (E_m)^i|m\rangle \Rightarrow \boxed{G_0 = \sum_n |n\rangle \frac{1}{E-E_n}\langle n|}$

$H_0 = T = -\frac{\hbar}{2m}\nabla^2$

$\Rightarrow \varphi_n(\vec{r}) \to \varphi_k(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}}$

$G_0(\vec{r}, \vec{r}') = \int d^3k \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 (E \pm i\eta - E_k)^{-1} (\varphi_k(\vec{r})\varphi_k^*(\vec{r}')) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{e^{ik(\vec{r}-\vec{r}')}}{E \pm i\eta - E_k}$

$\left(E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right)$

$\Rightarrow$ Auswertung des Integrals mit dem Residuensatz!

Schrödinger-Gleichung: $|\psi\rangle = \alpha_n(E)|\varphi_n\rangle + \lambda G_0 V|\psi\rangle$, $\alpha_n(E) = \begin{cases} 1 & E = E_n \\ 0 & E \neq E_n \end{cases}$

Für die formale (algebraische) Lösung gilt: $|\psi\rangle = (1 - \lambda G_0 V)^{-1}|\varphi\rangle$ $(\alpha \equiv 1)$

(Auswertung mit $\frac{1}{1-x} = 1 + x + x^2 + \dots$)

Anwendung auf $|\psi\rangle$: $|\psi\rangle = |\varphi\rangle + \lambda G_0 V|\varphi\rangle + \lambda^2 (G_0 V G_0 V)|\varphi\rangle + \mathcal{O}(\lambda^3)$

mit: $G_0 V|\varphi_k\rangle = \sum_n |\varphi_n\rangle \frac{1}{E-E_n}\langle\varphi_n|V|\varphi_k\rangle$

($\hookrightarrow$ vgl. Störungstheorie, § 7...)

(6.11) Definition / Bemerkung

Projektoren:

Sei $\mathcal{H}$ ein Hilbertraum und $\{|n\rangle\}_{n\in\mathbb{N}}$ ein VONS, $\mathbb{1}_{\mathcal{H}} = \sum_{n\in\mathbb{N}} |n\rangle\langle n|$.

Man stelle sich die Frage nach den Eigenschaften eines Systems $P \subseteq \mathcal{H}$.

Als Projektor auf den Unterraum P wird definiert:

$P := \sum_{p=1}^{N_p \leq N} |p\rangle\langle p|$, $Q = \mathbb{1} - P = \sum_{q=N_p+1}^{N} |q\rangle\langle q|$

$\hookrightarrow$ Komplementärraum $Q = \mathcal{H}/P$

$\mathbb{1}_{\mathcal{H}} = P + Q$

Eigenschaften der Projektoren: $P^2 = \sum_{p \leq N_p, p' \leq N_p} |p\rangle \underbrace{\langle p|p'\rangle}_{\delta_{pp'}} \langle p'| = \sum_{p \leq N_p} |p\rangle\langle p| = P$

1.) $P^2 = P$ („definierende Eigenschaft eines Projektors")

2.) $P + Q = \mathbb{1}_{\mathcal{H}}$ („Q ist das orthogonale Komplement")

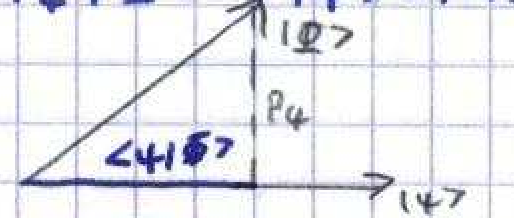
3.) $P \cdot Q = 0$ (denn: $\sum_{p \leq N_p} |p\rangle\langle p| \sum_{q \geq N_p+1} |q\rangle\langle q| = \sum_{p \leq N_p, q \geq N_p+1} |p\rangle \underbrace{\langle p|q\rangle}_{=0} \langle q| = 0$ (keine gemeinsamen Elemente)

alternativ: $P \cdot Q = P(\mathbb{1}_{\mathcal{H}} - P) = P - P^2 = P - P = 0$)

Projektor auf 1-D-Unterraum:

Unterraum zu einem Zustand $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$: $P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$, $Q_\psi = \mathbb{1} - P_\psi$

Sei $|\Phi\rangle \in \mathcal{H}$: Überlapp von $|\Phi\rangle$ und $|\psi\rangle \Rightarrow P_\psi|\Phi\rangle = |\psi\rangle\langle\psi|\Phi\rangle$



Komponenten von $|\Phi\rangle$ im Komplementärraum zu $|\psi\rangle$:

$Q_\psi|\Phi\rangle = (\mathbb{1} - P_\psi)|\Phi\rangle = |\Phi\rangle - |\psi\rangle\langle\psi|\Phi\rangle$

Darstellung für $|\Phi\rangle$: $|\Phi\rangle = (P_\psi + Q_\psi)|\Phi\rangle = P_\psi|\Phi\rangle + Q_\psi|\Phi\rangle$

$|\Phi_\parallel\rangle := P_\psi|\Phi\rangle$, $|\Phi_\perp\rangle := Q_\psi|\Phi\rangle \Rightarrow |\Phi\rangle = |\Phi_\parallel\rangle + |\Phi_\perp\rangle$

$\langle\Phi_\parallel|\Phi_\perp\rangle = \langle\Phi|P_\psi Q_\psi|\Phi\rangle = \langle\Phi|0|\Phi\rangle = 0 = 0$

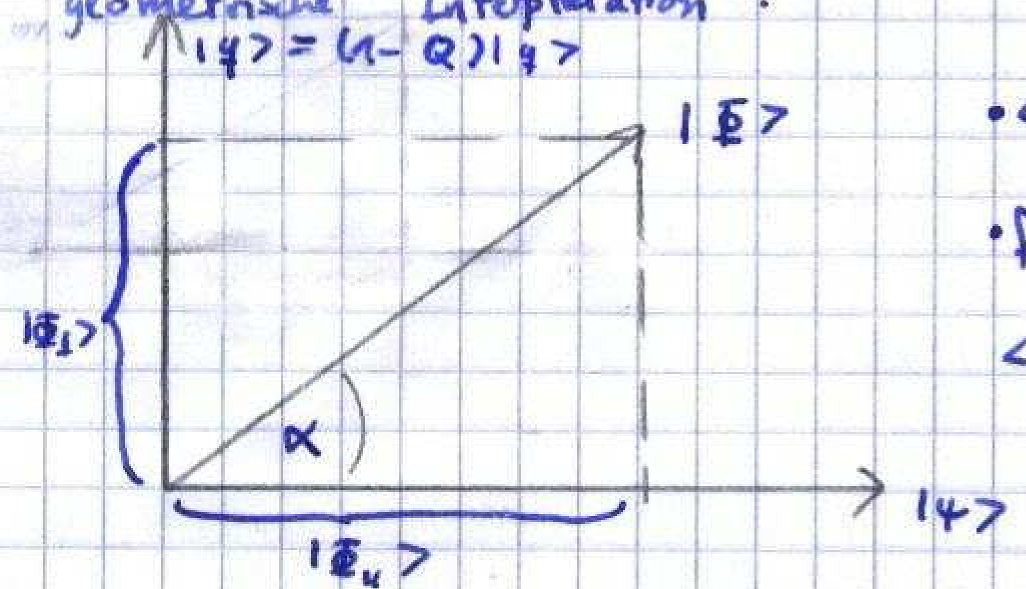
4.) $P^\dagger = P$ („hermitesch", auch: $Q^\dagger = Q$)

P hermitesch $\Rightarrow$ Eigenwerte $\pi \in \mathbb{R} \Rightarrow \exists!$ zwei Eigenwerte $\pi = \{{0 \atop 1}$

- $\pi = 1 \Rightarrow N_p$-fach entartet
- $\pi = 0 \Rightarrow N_Q = N - N_p$-fach entartet

Zerlegung $\hat{=}$ Projektion, $|\Phi\rangle = |\Phi_\parallel\rangle + |\Phi_\perp\rangle$, $\langle\Phi_\parallel|\Phi_\perp\rangle = 0$

geometrische Interpretation:



- $\langle\psi|\Phi\rangle = \sqrt{\langle\Phi|\Phi\rangle\langle\psi|\psi\rangle}\cos(\alpha)$
- für normierte Zustände also:

$\langle\psi|\Phi\rangle = \cos(\alpha)$

$P_\psi|\Phi_\parallel\rangle = |\Phi_\parallel\rangle$, $\pi = 1$: hier: nicht entartet (1-fach entartet)

$P_\psi|\Phi_\perp\rangle = \underbrace{P_\psi Q_\psi}_{=0}|\Phi\rangle = 0$, $\pi = 0$: $(N-1)$-fach entartet

Speziell:

$P_\psi|\psi\rangle = |\psi\rangle$ ist Eigenzustand zu $\pi = 1$.

$Q_\psi|\psi\rangle = 0$ ist Eigenzustand zu $\omega = 1 - \pi = 0$.

(6.12) **Bemerkung**

Messprozesse und Observablen

Frage: Was passiert mit einem QM-System, wenn man eine Messung vornimmt?

Sei $\mathcal{H}$ ein Hilbertraum, A ein Operator auf $\mathcal{H}$ und $\{|n\rangle\}_{n \in \mathbb{N}}$ eine Basis von $\mathcal{H}$

Wähle als Eigenfunktionen zu A $\{|n\rangle\} \mapsto \{|a_n\rangle\}$ mit:

$\nwarrow$ Isomorphismus

$A|a_n\rangle = \alpha_n|a_n\rangle$, VONS: $\langle a_n|a_{n'}\rangle = \delta_{nn'}$, $\mathbb{1}_{\mathcal{H}} = \sum_n |a_n\rangle\langle a_n|$

Sei $|\lambda\rangle \in \mathcal{H}$: Messung von A an $|\lambda\rangle$: $A|\lambda\rangle = |\lambda_A\rangle = A\,\mathbb{1}_{\mathcal{H}}|\lambda\rangle = \sum_n A|a_n\rangle\langle a_n|\lambda\rangle$

$$\Rightarrow \boxed{\begin{aligned} |\lambda_A\rangle &= \sum_n \alpha_n |a_n\rangle\langle a_n|\lambda\rangle \\ &\neq |\lambda\rangle = \mathbb{1}_{\mathcal{H}}|\lambda\rangle \\ &= \sum_n |a_n\rangle\langle a_n|\lambda\rangle \end{aligned}}$$

Erwartungswerte: $\langle\lambda|A|\lambda\rangle = \langle\lambda|\lambda_A\rangle$

Neue Interpretation:

Der Erwartungswert einer Observablen A ist ein Maß für die Änderung durch die Messung:

$$\boxed{\begin{aligned}&\langle\lambda|A|\lambda\rangle = \sum_n \alpha_n \underbrace{|\langle a_n|\lambda\rangle|^2}_{\text{Wahrscheinlichkeit, dass } |\lambda\rangle \text{ den Zustand } |a_n\rangle \text{ enthält } \hat{=}\, W_n} = \sum_n \alpha_n W_{n\lambda}\\ &\Rightarrow W_{n\lambda} = |\langle a_n|\lambda\rangle|^2, \quad 0 \leq W_{n\lambda} \leq 1\end{aligned}}$$

08.06.10 (6.13) Bemerkung / Beispiel / Satz

Schwankungen von QM-Messwerten:

Schwankungsquadrat: $(\Delta A)^2 := \langle\lambda|(A - \langle A\rangle \mathbb{1})^2|\lambda\rangle = \langle\lambda|A^2|\lambda\rangle - (\langle\lambda|A|\lambda\rangle)^2$

Mittelwert: $\langle A\rangle := \langle\lambda|A|\lambda\rangle$

Auswertung:

$A^2|\lambda\rangle = A|\lambda_A\rangle = A\sum_n \alpha_n |a_n\rangle\langle a_n|\lambda\rangle = \sum_n \alpha_n^2 |a_n\rangle\langle a_n|\lambda$

$(\langle\lambda|A|\lambda\rangle)^2 = \sum_{n,n'\in\mathbb{N}} \alpha_n \langle a_n|\lambda\rangle \alpha_{n'}^* \langle a_{n'}|\lambda\rangle^*$

$\Rightarrow (\Delta A)^2 = \sum_{n,n'\in\mathbb{N}} \langle a_n|\lambda\rangle\langle a_{n'}|\lambda\rangle^* (\alpha_n^2 \delta_{nn'} - \alpha\, \alpha_{n'}^*)$

A hermitesch $\Rightarrow \alpha_n = \alpha_n^* \in \mathbb{R} \Rightarrow (\Delta A)^2 \neq 0$ (im Allgemeinen!)

Schwankungsquadrat eines Operators A entspricht einem Maß für die Verteilung der Messwerte

Beispiele:

1.) $|\Phi\rangle$ sei stationärer Zustand, $|\Phi\rangle = e^{-i\omega t}|\varphi\rangle$

$(H-E)|\Phi\rangle = 0$ ist Eigenzustand zum Hamiltonoperator H.

$\Rightarrow (\Delta H)^2 = \langle\Phi|H^2|\Phi\rangle - \langle\Phi|H|\Phi\rangle^2 = E^2\langle\Phi|\Phi\rangle - E^2\langle\Phi|\Phi\rangle^2$

(mit $\langle\Phi|\Phi\rangle = 1$ (Normierung) folgt:) $\Rightarrow (\Delta H)^2 = E^2 - E^2 = 0$

allgemein gilt:

Satz:

> Die Schwankung verschwindet für Messungen an Eigenzuständen. Eigenzustände eines Operators haben scharfe Messwerte.

2) Wellenpakete

$\psi(\vec{r},t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} g(\vec{k}) e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega(k)t)}$, $\omega(k) = \frac{1}{\hbar}E(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$

kein stationärer Zustand $\Rightarrow \boxed{H\psi(\vec{r},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t)}$

Energieunschärfe:

$(\Delta H)_\psi = \langle\psi|H^2|\psi\rangle - \langle\psi|H|\psi\rangle^2 = \langle\psi|H^2 - \langle\psi|H|\psi\rangle^2|\psi\rangle$

$= \langle\psi|(i\hbar\frac{\partial}{\partial t})^2 - (i\hbar\langle\psi|\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle)^2|\psi\rangle$

betrachte nun den eindimensionalen Fall:

$\psi(x,t) = \int_{\mathbb{R}} \frac{dk}{2\pi} g(k) e^{i(kx-\omega t)}$

$\Rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \int_{\mathbb{R}} \frac{dk}{2\pi} g(k)\, \hbar\omega(k) e^{i(kx-\omega t)}$

$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \int_{\mathbb{R}} \frac{dk}{2\pi} g(k)(\hbar\omega(k))^2 e^{i(kx-\omega t)}$

$(\Delta H)_\psi = \hbar^2(\langle\omega^2\rangle - \langle\omega\rangle^2) \neq 0$

$\langle\omega\rangle^2 = \langle\psi|(i\frac{\partial}{\partial t})^2|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} \frac{dk}{2\pi} |g(k)|^2 \omega^2(k)$

(analog: $\langle\omega\rangle^n = \langle\psi|(i\frac{\partial}{\partial t})^2|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} \frac{dk}{2\pi} |g(k)|^2 \omega^n(k)$, $n = 0,1,2,\ldots$)

mit $|g(k)|^2 = 2\pi\,\delta(k-q)$ (Spezialfall):

$\psi(x,t) = e^{i(qx - \omega(q)t)}$: $\langle\omega^2\rangle = \left(\frac{\hbar q^2}{2m}\right)^2 = \langle\omega\rangle^2$

$(\langle\omega\rangle = \frac{1}{2m}\hbar q^2)$

$\Rightarrow (\Delta H)^2 = 0 \Rightarrow$ stationärer Zustand

(6.14) Beispiel

Beispiele für Projektoren

2-D-Hilbertraum $\mathcal{H}$, Operatoren A, B (auf $\mathcal{H}$)

Beispiel: $A := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, Eigenwerte: $(A - \alpha I_2)|a\rangle = 0$

Säkulargleichung: $D(\alpha) = \det(A - \alpha \mathbb{1}_2) = \det\left(\begin{pmatrix} -\alpha & 1 \\ 1 & -\alpha \end{pmatrix}\right) = \alpha^2 - 1$

$D(\alpha) = 0 \Leftrightarrow \alpha_\pm = \pm 1$

Eigenvektoren: $|a_\pm\rangle = A\binom{x}{y}$, $-\alpha x + y = 0 \Rightarrow \frac{y}{x} = \alpha$

$\left.\begin{aligned}|a_+\rangle &= \hat{A}\binom{1}{1}\\ |a_-\rangle &= \hat{A}\binom{-1}{1}\end{aligned}\right\}\ \hat{A} = \frac{1}{\sqrt{2}}$

VONS: $\langle\alpha_\pm|\alpha_\pm\rangle = 1$, $\langle\alpha_+|\alpha_-\rangle = 0 = \langle\alpha_-|\alpha_+\rangle$

Dualvektoren (aus $\mathcal{H}^*$): $\langle\alpha_+| = \frac{1}{\sqrt{2}}(1,1)$, $\langle\alpha_-| = \frac{1}{\sqrt{2}}(1,-1)$

$B := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$, $D(\beta) = \det(B - \beta\mathbb{1}_2) = (\beta - 1)(-1-\beta) = \beta^2 - 1$

$D(\beta) = 0 \Leftrightarrow \beta_\pm = \pm 1$

Eigenvektoren: $|\beta_+\rangle = (1,0)$, $|\beta_-\rangle = (0,1)$

VONS: $\langle\beta_\pm|\beta_\pm\rangle = 1$, $\langle\beta_+|\beta_-\rangle = 0 = \langle\beta_-|\beta_+\rangle$

$\Rightarrow$ A, B sind Observable auf $\mathcal{H}$, $\mathbb{1} = \sum_{n=\pm} |\alpha_n\rangle\langle\alpha_n| = \mathbb{1}_A$
$= \sum_{n=\pm} |\beta_n\rangle\langle\beta_n| = \mathbb{1}_B$

Messungen von B im Eigenzustand von A:

$$\left.\begin{aligned} B|\alpha_+\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix} \\ B|\alpha_-\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}\end{aligned}\right\} ?$$

$\Rightarrow$ Jeder 2-D-Vektor in $\mathcal{H}$ kann dargestellt werden als:

$|\mu\rangle = a|\alpha_+\rangle + b|\alpha_-\rangle = c|\beta_+\rangle + d|\beta_-\rangle$

$A|\mu\rangle = a|\alpha_+\rangle - b|\alpha_-\rangle$

$B|\mu\rangle = c|\beta_+\rangle - d|\beta_-\rangle$

das gilt auch für $|\alpha_\pm\rangle$ in der B-Darstellung:

$|\alpha_\pm\rangle = \mathbb{1}_B|\alpha_\pm\rangle = |\beta_+\rangle\langle\beta_+|\alpha_\pm\rangle + |\beta_-\rangle\langle\beta_-|\alpha_\pm\rangle$

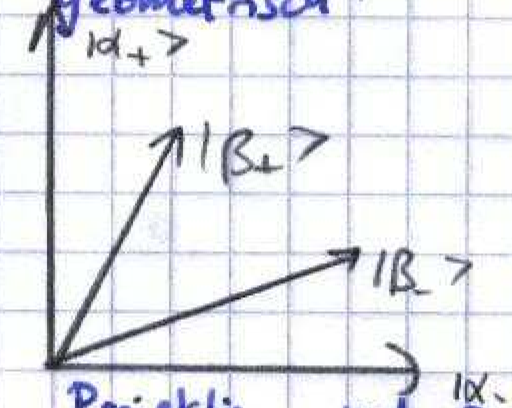
$|\alpha_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\beta_+\rangle + |\beta_-\rangle) \Rightarrow$ i.)

$|\alpha_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\beta_+\rangle - |\beta_-\rangle) \Rightarrow$ ii.)

i): $B|\alpha_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(B|\beta_+\rangle + B|\beta_-\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\beta_+\rangle - |\beta_-\rangle) = |\alpha_-\rangle$

ii.): $B|\alpha_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(B|\beta_+\rangle - B|\beta_-\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\beta_+\rangle + |\beta_-\rangle) = |\alpha_+\rangle$

geometrisch:



$|\mu_A\rangle = A|\mu\rangle$

$$\begin{aligned}\Rightarrow \langle\mu|A|\mu\rangle &= \langle\mu|\mu_A\rangle \\ &= |a|^2 - |b|^2 = 1 - 2|b|^2 \\ &= \cos^2(\vartheta) - \sin^2(\vartheta) = \cos(2\vartheta) \leq 1\end{aligned}$$

Projektion und Einheitsmatrizen:

$$\begin{aligned}\mathbb{1}_A &= |\alpha_+\rangle\langle\alpha_+| + |\alpha_-\rangle\langle\alpha_-| \\ &= \tfrac{1}{2}\left((1,1)\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} + (1,-1)\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}\right) \\ &= \tfrac{1}{2}\Big(\underbrace{\underbrace{\begin{pmatrix}1&1\\1&1\end{pmatrix}}_{P_+^{(A)}} + \underbrace{\begin{pmatrix}1&-1\\-1&1\end{pmatrix}}_{P_-^{(A)}}}_{\text{Projektoren}}\Big) = \tfrac{1}{2}\begin{pmatrix}2&0\\0&2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix} = \mathbb{1}_2\end{aligned}$$

$\Rightarrow \mathbb{1} = \mathbb{1}_A = P_+^{(A)} + P_-^{(A)}$

$\mathbb{1}_B = |\beta_+\rangle\langle\beta_+| + |\beta_-\rangle\langle\beta_-| = \left((1,0)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} + (0,1)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\right) = \underbrace{\begin{pmatrix}1&0\\0&0\end{pmatrix}}_{P_+^{(B)}} + \underbrace{\begin{pmatrix}0&0\\0&1\end{pmatrix}}_{P_-^{(B)}} = \mathbb{1}$

$$\begin{aligned}A &= |\alpha_+\rangle\alpha_+\langle\alpha_+| + |\alpha_-\rangle\alpha_-\langle\alpha_-| \\ &= P_+^{(A)}\alpha_+ + P_-^{(A)}\alpha_- \\ &= P_+^{(A)} - P_-^{(A)} \\ &= \begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix} \\ &= A\end{aligned}$$

(entsprechend für B)

(6.15) Satz

Kommutierende Operatoren und simultane Messbarkeit ← Observablen

Sei $\mathcal{H}$ ein Hilbertraum und seien A, B Operatoren auf $\mathcal{H}$.

Es gilt:

$$\left.\begin{aligned}A|n\rangle &= a_n|n\rangle \\ B|n\rangle &= b_n|n\rangle\end{aligned}\right\} \Rightarrow \{|n\rangle\}$$ ist gemeinsames System von Eigenfunktionen zu unterschiedlichen Eigenwerten (VONS auf $\mathcal{H}$)

Dann ist:

$$\left.\begin{aligned}A\cdot B|n\rangle &= A b_n|n\rangle = b_n A|n\rangle = b_n a_n|n\rangle \\ B\cdot A|n\rangle &= B a_n|n\rangle = a_n B|n\rangle = a_n b_n|n\rangle\end{aligned}\right\} \begin{aligned}&\Rightarrow (A\cdot B - BA)|n\rangle = 0 \\ &\Rightarrow [A,B]|n\rangle = 0 \quad \forall n \in \mathbb{N}\end{aligned}$$

Also: $[A,B]|n\rangle = 0 \Leftrightarrow [A,B] = 0 \Leftrightarrow AB = BA$

$\Rightarrow$ 1.) A und B haben scharfe Messwerte: $(\Delta A)^2_{|n\rangle} = 0 = (\Delta B)^2_{|n\rangle}$

2.) A und B sind simultan messbar

Für beliebige Zustände $|\psi\rangle$ gilt:

$AB|\psi\rangle = [A,B]|\psi\rangle + BA|\psi\rangle$

benutze: $(A+B)^2 - (A^2 + B^2 + 2AB) = A^2 + B^2 + AB + BA - A^2 - B^2 - 2AB$
$= -AB + BA = -[A,B]$

$|\psi\rangle = \mathbb{1}_{A/B}|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle = \sum_n c_{\psi n}|n\rangle$

$AB|\psi\rangle = \sum_n c_{\psi n} a_n b_n |n\rangle = \sum_n c_{\psi n} b_n a_n |n\rangle = BA|\psi\rangle$

$\rightarrow$ A und B sind simultan messbar. $\Leftrightarrow [A,B] = 0$.
$\Leftrightarrow$ A und B heißen kommensurabel („verträglich").

Beispiel: $A = T = \frac{\vec p^{\,2}}{2m}$, $B = \vec p$ sind kommensurabel.

$\rightarrow$ A und B sind nicht simultan messbar. $\Leftrightarrow [A,B] \neq 0$
$\Leftrightarrow$ A und B heißen inkommensurabel.

Beispiel: 1) $A = x$, $B = p_x$
2) $A = \vec r$, $B = \vec p$ $\Big\}$ $\Rightarrow [x, p_x] = i\hbar \neq 0$

aber: $[x_j, p_k] = i\hbar\, \delta_{jk}$

09.06.10 (6.16) Satz

Ehrenfest-Theorem:

Die zeitliche Entwicklung der QM-Mittelwerte folgt den klassischen Bewegungsgleichungen.

$\psi(\vec r, t)$, $H = T + U(\vec r) = H^+$

$H\psi(\vec r,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec r,t)$

$H\psi^*(\vec r,t) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi^*(\vec r,t)$

Es gelte $\lim_{r\to\infty}(\psi(\vec r,t)) = 0$: $\langle\psi|\psi\rangle = A^2 < \infty$
(existiert für alle $t \in \mathbb{R}$)
$\Rightarrow |\psi\rangle$ ist normierbar
$\Rightarrow |\psi\rangle =: A^2 = 1$

Mittelwerte:

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

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle\vec r\rangle &= \frac{\partial}{\partial t}\int d^3r\, \psi^*(\vec r,t)\,\vec r\,\psi(\vec r,t)\\ &= \int d^3r \left(\left(\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(\vec r,t)\right)\vec r\,\psi(\vec r,t) + \psi^*(\vec r,t)\,\vec r\,\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec r,t)\right)\\ &= \frac{1}{i\hbar}\int d^3r \left(-H\psi^*(\vec r,t)\,\vec r\,\psi(\vec r,t) + \psi^*(\vec r,t)\,\vec r\, H\psi(\vec r,t)\right) \qquad \psi \equiv \psi(\vec r,t)\\ &= \frac{1}{i\hbar}\int d^3r\, \frac{\hbar^2}{2m}\left((\vec\nabla^2\psi^*)\,\vec r\,\psi - \psi^*\,\vec r\,(\vec\nabla^2\psi)\right)\\ &= -\hbar\frac{1}{2mi}\int d^3r\, \vec r\,\vec\nabla\left(\psi^*\vec\nabla\psi - \psi\vec\nabla\psi^*\right)\\ &= \int d^3r\, \vec r\,\vec\nabla\,\vec j(\vec r,t)\end{aligned}$$

also:

Erwartungswert und Bewegungsgleichung für $\vec r$:

$\frac{d}{dt}\langle\vec r\rangle = \frac{\partial}{\partial t}\int d^3r\, \psi^*(\vec r,t)\,\vec r\,\psi(\vec r,t)$

- mit: $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = H\psi$
  $-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^* = H\psi^*$ $(H = H^+)$ folgt:

$\frac{d}{dt}\langle\vec r\rangle = -\int d^3r\, \vec r\,\vec\nabla\,\vec j(\vec r,t) = -\sum_i \vec e_i \int d^3r\, x_i\,\vec\nabla\,\vec j$

$\vec j = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\vec\nabla\psi - \psi\vec\nabla\psi^*\right)$

$x_i\,\vec\nabla\cdot\vec j = \vec\nabla(x_i\,\vec j) - \vec j\,\vec\nabla x_i$, $\quad \vec j\,\vec\nabla x_i = \sum_k j_k \frac{\partial}{\partial x_k}x_i = \sum_k j_k\,\delta_{ik} = j_i$

- nach Anwendung des Gauß'schen Satzes mit $\lim_{r\to\infty}(|\psi|) = 0$ bleibt also übrig: $\frac{d}{dt}\langle\vec r\rangle = \sum_i \vec e_i \int d^3r\, j_i(\vec r,t) = \int d^3r\, \vec j(\vec r,t)$
- betrachte: $\vec j = \frac{\hbar}{2mi}\Big(\psi^*\vec\nabla\psi - \underbrace{\vec\nabla(\psi\psi^*)}_{=\vec\nabla\rho(\vec r,t)} + \psi^*\vec\nabla\psi\Big)$

$$\begin{aligned}\int d^3r\, \vec\nabla\rho(\vec r,t) &= \sum_i \vec e_i \int d^3r\, \frac{\partial}{\partial x_i}\rho(\vec r,t)\\ &= \sum_i \vec e_i \int_{\mathbb{R}^3} dx_1\,dx_2\,dx_3\, \frac{\partial}{\partial x_i}\rho(\vec r,t)\\ &= \sum_i \vec e_i \int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}} dx_j\,dx_k\, \underbrace{\Big[\rho(x_i,x_j,x_k,t)\Big]_{x_i=-\infty}^{x_i=\infty}}_{=0}\end{aligned}$$

$\Rightarrow \frac{d}{dt}\langle\vec r\rangle = \frac{\hbar}{2mi}\int d^3r\, 2\psi^*\vec\nabla\psi = \frac{1}{m}\int d^3r\, \psi^*(-i\hbar\vec\nabla)\psi = \frac{1}{m}\langle\vec p\rangle = \langle\vec v\rangle$

also: $\boxed{\frac{d}{dt}\langle\vec r\rangle = \frac{1}{m}\langle\vec p\rangle}$, $H = T + U$

$\Rightarrow \frac{d^2}{dt^2}\langle\vec r\rangle = \frac{1}{m}\frac{d}{dt}\langle\vec p\rangle = \frac{1}{m}\langle -\vec\nabla U\rangle$

gilt $O = \vec r$, so: $[H, \vec r] = [T, \vec r] = -\frac{\hbar^2}{2m}[\vec\nabla^2, \vec r] = \vec p = -i\hbar\vec\nabla$

THEORIE DER QUANTENMECHANIK PART II

§7 QM-Systeme mit zwei Freiheitsgraden

(7.1) Bemerkung / Definition

2-D-Hilbertraum und Pauli-Matrizen:

Sei $\mathcal{H}$ zweidimensionaler Hilbertraum und die kanonische - gerade die kartesische Basis $|e_1\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$, $|e_2\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$, $\mathbb{1}_{\mathcal{H}} = \sum_{i=1}^{2} |e_i\rangle\langle e_i| = \sum_{i=1}^{2} P_i$, wobei $\langle e_i | e_j\rangle = \delta_{ij}$ (VONS) und P_i Projektoren, also $P_i = |e_i\rangle\langle e_i|$, somit $P_1 = \begin{pmatrix}1&0\\0&0\end{pmatrix}$, $P_2 = \begin{pmatrix}0&0\\0&1\end{pmatrix}$ (mit dem dyadischen Produkt $(1,0)\cdot\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$; dies entspricht einer Abbildung $\mathcal{H}^* \cdot \mathcal{H}$ in den Raum der 2x2-Matrizen). Allgemein, falls $\mathcal{H}$ n-dimensional ist, bildet das dyadische Produkt in den Raum der nxn-Matrizen ab.

2-D: $|\mu\rangle \in \mathcal{H}$, $|\mu\rangle = \mathbb{1}|\mu\rangle = c_1 |e_1\rangle + c_2 |e_2\rangle$, $c_i \in \mathbb{C}$

Operatoren:
$$A = \mathbb{1} A \mathbb{1} = \sum_{i,j=1,2} |e_i\rangle A_{ij} \langle e_j|$$
$$= \begin{pmatrix}1&0\\0&0\end{pmatrix} A_{11} + \begin{pmatrix}0&0\\0&1\end{pmatrix} A_{22} + \begin{pmatrix}0&1\\0&0\end{pmatrix} A_{12} + \begin{pmatrix}0&0\\1&0\end{pmatrix} A_{21}$$
$$= \begin{pmatrix}A_{11}&A_{12}\\A_{21}&A_{22}\end{pmatrix}$$

$$\langle e_i | A | e_j\rangle = A_{ij}$$
$$|e_1\rangle\langle e_2| = (1,0)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0&0\\1&0\end{pmatrix}, \quad |e_2\rangle\langle e_1| = \ldots = \begin{pmatrix}0&1\\0&0\end{pmatrix}$$

Pauli-Matrizen: $\sigma_x = \begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$, $\sigma_y = \begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}$, $\sigma_z = \begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$,
$\mathbb{1} = \begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$, für $i \in \{x, y, z\}$ gilt:

Es ist:
- $\sigma_i = \sigma_i^{*}$ $^{,,+"}$
- $\mathrm{Spur}(\sigma_i) = 0 = \sum_{j=1,2} (\sigma_i)_{jj}$
- $\sigma_i^2 = \begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$
- $\det(\sigma_i) = -1$
- $\sigma_x \sigma_y \sigma_z = i\mathbb{1}$
- $\vec{\sigma} := \sum_i \sigma_i \vec{e}_i$
- $\vec{\sigma}^2 = \sum_i \sigma_i^2 = 3\mathbb{1}$
- $\vec{\sigma}\vec{a}\,\vec{\sigma}\vec{b} = \vec{a}\vec{b} + i\vec{\sigma}(\vec{a}\times\vec{b})$
- $[\sigma_n, \sigma_m] = 2i\,\varepsilon_{nml}\,\sigma_l$
  (z. B.: $[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z$)

Eigenwerte: $\det(\sigma_i - \lambda\mathbb{1}) = 0$, $\lambda = \pm 1$
$$\sigma_z |e_1\rangle = |e_1\rangle$$
$$\sigma_z |e_2\rangle = -|e_2\rangle$$
$\Rightarrow$ Die kanonische Basis ist Eigenwertsystem zu σ_z.

Auf- und Absteigeoperatoren:
$$\left.\begin{array}{l}\sigma_+ := \frac{1}{2}(\sigma_x + i\sigma_y) = \begin{pmatrix}0&1\\0&0\end{pmatrix}\\ \sigma_- := \frac{1}{2}(\sigma_x - i\sigma_y) = \begin{pmatrix}0&0\\1&0\end{pmatrix}\end{array}\right\} \Leftrightarrow \left\{\begin{array}{l}\sigma_x = \sigma_+ + \sigma_-\\ \sigma_y = \frac{1}{2i}(\sigma_+ - \sigma_-)\end{array}\right.$$

- $\sigma_+ |e_1\rangle = \begin{pmatrix}0&1\\0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = 0$
- $\sigma_+ |e_2\rangle = \begin{pmatrix}0&1\\0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = |e_1\rangle$
- $\sigma_- |e_1\rangle = \begin{pmatrix}0&0\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = |e_2\rangle$
- $\sigma_- |e_2\rangle = \begin{pmatrix}0&0\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = 0$

$\frac{3}{4} \overset{!}{=} s(s+1) \Rightarrow \boxed{s = \frac{1}{2}}$

$\vec{S} = \frac{1}{2}\vec{\sigma}$
$\Rightarrow \vec{S}^2 = \frac{3}{4}\mathbb{1}$

(7.2) Definition

Spin-$\frac{1}{2}$-Systeme:

Beispiel: e^-, e^+, n, p

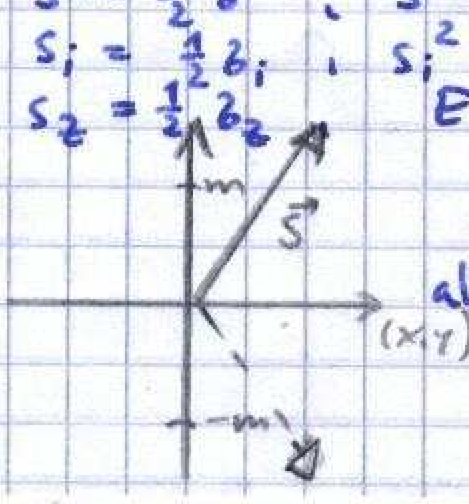
Spin-$\frac{1}{2}$: Es gibt zwei innere Freiheitsgrade.

! $\Rightarrow$ Spin: Entspricht dem quantenmechanischen Drehimpuls.

$\vec{S} := \frac{1}{2}\vec{\sigma}$, $\vec{S}^2 = \frac{1}{4}\vec{\sigma}^2 = \frac{3}{4}\mathbb{1} = (s)(s+1)\mathbb{1} \Rightarrow s = \frac{1}{2}$ „Spin-Quantenzahl"

$S_i = \frac{1}{2}\sigma_i$, $S_i^2 = \frac{1}{4}\sigma_i^2 = \frac{1}{4}\mathbb{1}$

$S_z = \frac{1}{2}\sigma_z$ Eigenvektoren / Eigenwerte: $S_z |e_i\rangle = \frac{1}{2}\sigma_z |e_i\rangle = \pm\frac{1}{2}|e_i\rangle$
$$S_z |e_1\rangle = \frac{1}{2}|e_1\rangle$$
$$S_z |e_2\rangle = -\frac{1}{2}|e_2\rangle$$



allgemein: $\sigma_z |e_i\rangle = m_i |e_i\rangle$, $m_i = \pm\frac{1}{2}$ „magnetische Quantenzahl"

Matrixrechnung!

$[S_x, S_z] \neq 0$, $[S_y, S_z] \neq 0$, $[S_x, S_y] \neq 0$ } Es können keine zwei Projektionen simultan gemessen werden

Aber:

$[\vec{\sigma}^2, \sigma_i] = 0 \quad (i = x, y, z)$

$\Rightarrow$ $\vec{\sigma}^2$ plus eine weitere Komponente σ_i können simultan gemessen werden.

Typisch: $\vec{\sigma}^2, \sigma_z$ bzw. $\vec{S}^2, S_z$

$\vec{S}^2 |s,m\rangle = s(s+1)\,|s,m\rangle, \; s = \frac{1}{2}$

$S_z|s,m\rangle = m\,|s,m\rangle \Rightarrow$ nicht entartet!

$\Rightarrow$ Jeder Operator hat seinen eigenen Satz von Quantenzahlen.

$\Rightarrow$ Gemeinsame Eigenfunktionen werden durch eine entsprechende Quantenzahl charakterisiert.

$\vec{S}^2 = s(s+1)\,\mathbb{1} \Rightarrow \vec{S}^2 |e_i\rangle = s(s+1)|e_i\rangle = \frac{3}{4}|e_i\rangle$

$\Rightarrow$ Eigenwert $s(s+1)$ ist zweifach entartet.

Messung:

$|e_1\rangle, |e_2\rangle, \; m = \pm\frac{1}{2}, \; s = \frac{1}{2}, \; |e_1\rangle = |s, m_1\rangle, \; m_1 = \frac{1}{2}$

$|e_2\rangle = |s, m_2\rangle, \; m_2 = -\frac{1}{2}$

$S_x S_z |s, m_1\rangle = \frac{1}{2} S_x |s, m_1\rangle$

$S_x = S_+ + i S_- \Rightarrow S_x S_z |s, m_1\rangle = \frac{1}{2}|s, m_2\rangle$

$S_z S_x |s, m_1\rangle = S_z |s\, m_2\rangle = -\frac{1}{2}|s, m_2\rangle$

$\Rightarrow S_z, S_x$ sind inkommensurabel

$\Rightarrow (S_x S_z - S_z S_x)|s, m_i\rangle = \quad |s, m_j\rangle$

$\Rightarrow [S_x, S_z] = 2i S_y$

15.06.10 (7.3) Bemerkung / Erinnerung / Definition

Messungen an $s = \frac{1}{2}$ - Systemen, Operatoren: $A \sim \vec{\sigma}$

allgemein gilt: $A = a_0 \mathbb{1}_2 + \sum_{i=1}^{3} a_i \sigma_i$

$\{\mathbb{1}, \vec{\sigma}\}$ ist Basis für die 2×2-Matrizen über $\mathbb{C}$

$\vec{S} = \frac{1}{2}\vec{\sigma}$, Leiteroperatoren: $S_\pm = \frac{1}{2}(S_x \pm i S_y)$, $S_x = S_+ + S_-$, $S_y = (S_+ - S_-)\frac{1}{i}$

Eigenzustand zu S_z: $|+\rangle = \binom{1}{0}$, $|-\rangle = \binom{0}{1}$

$\sigma_z |m\rangle = m|m\rangle$, $m = \pm 1$, $S_z = |m\rangle = \frac{m}{2}|m\rangle$, $\mu = \frac{m}{2}$

$S_z |\mu\rangle = \mu|\mu\rangle$

Frage: Sind Spin-Messungen kommensurabel?

- $S_x S_z |+\rangle = \frac{1}{2} S_x |+\rangle = \frac{1}{2}\frac{1}{2}(\sigma_+ - \sigma_-)|+\rangle = \frac{1}{4}|-\rangle$
- $S_z S_x |+\rangle = \frac{1}{2} S_z |-\rangle = -\frac{1}{4}|-\rangle$

$\Rightarrow$ Spin-Messungen nicht simultan messbar! $\Rightarrow [S_x, S_z] = -i S_y$

Aber: $[\sigma_x, \sigma_z]_+ = 0 = \{\sigma_x, \sigma_y\}$

$\rightarrow$ Definition:

$[A, B]_+ = AB + BA = \{A, B\}$: ANTI-KOMMUTATOR

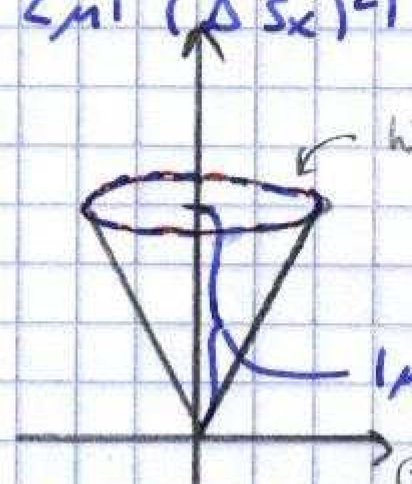
Schwankungsquadrate:

$(\Delta S_x)^2$ (bezüglich der Eigenzustände von S_z)

$\langle + | (\Delta S_x)^2 | + \rangle = \langle + | S_x^2 | + \rangle - (\underbrace{\langle + | S_x | + \rangle}_{=0})^2 = \frac{1}{4}\langle + | \mathbb{1} | + \rangle = \frac{1}{4}$

$\Rightarrow$ maximale Unschärfe

$\langle \mu | (\Delta S_x)^2 | \mu \rangle = \frac{1}{4} = \langle \mu | (\Delta S_y)^2 | \mu \rangle, \quad |\mu\rangle = |\pm\frac{1}{2}\rangle$



Spin und Ort/Impuls:

$|\psi\rangle = |\Phi\rangle, \; |\chi\rangle = \alpha|\frac{1}{2}\rangle + \beta|-\frac{1}{2}\rangle$

- $|\Phi\rangle \hat{=}$ Orts-/Impulswellenfunktion
- $|\chi\rangle \hat{=}$ Spin-Wellenfunktion

Hilbert-Raum $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\mathbb{R}^3} \oplus \mathcal{H}_s$

Wechselwirkungsfreies Teilchen, Ortsraum:

$\langle \vec r \mid \Phi \rangle = e^{i\vec k \vec r}$

$\langle \vec r \mid \psi \rangle = e^{i\vec k \vec r} \quad |\chi\rangle = e^{i\vec k \vec r} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$

Mit Spinabhängiger Wechselwirkung:

$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + W(\vec r, \vec \sigma) = \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} \\ h_{21} & h_{22} \end{pmatrix}, \ W = \sum w_i(\vec r)\, \sigma_i$

$\langle \vec r \mid \psi \rangle \mapsto \begin{pmatrix} \psi_1(\vec r) \\ \psi_2(\vec r) \end{pmatrix}$, zwei Komponenten, ortsabhängige Wellenfunktion:

$\Rightarrow \begin{pmatrix} h_{11}-E & h_{12} \\ h_{21} & h_{22}-E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1(\vec r) \\ \psi_2(\vec r) \end{pmatrix} = 0$

(7.4) Bemerkung

$s = \frac{1}{2}$ - Teilchen im Magnetfeld

$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\mathbb{R}^3} \otimes \mathcal{H}_s$

stationäre Zustände in $\mathcal{H}$ $|\psi\rangle$

$|\psi\rangle = \underbrace{\sum_\mu |\mu\rangle\langle\mu|}_{= \mathbb{1}_s} \psi\rangle = \sum_\mu |\mu\rangle\, \psi_\mu(\vec r) = \begin{pmatrix} \psi_+(\vec r) \\ \psi_-(\vec r) \end{pmatrix}$

Hamilton-Operator:

$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec\nabla^2 + V(\vec r) + W$

Wechselwirkung mit homogenem Magnetfeld:

$W = -\vec\mu \cdot \vec B(\vec r) = -\vec\mu\, \vec B_0 \ , \quad |\vec B_0| = \text{const.}$

$\vec\mu$: magnetisches Moment

s-$\frac{1}{2}$-Teilchen: $\vec\mu = g \frac{e}{2m} \vec s \ , \ e^- \ , \ g = 2{,}002319\ldots$

- ideal: $g = 2$
- real: $g = 2{,}002\ldots = 2\left(1 + \left(\frac{\alpha}{\pi}\right) + \mathcal{O}\left(\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^2\right)\right)$

zeitabhängige Zustände: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec r, t) = H \psi(\vec r, t)$

„projeziere" auf die Spin-Komponenten

$\Leftrightarrow \langle \mu | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \langle \mu | H |\psi\rangle$

benutze: $|\psi\rangle = \mathbb{1}_s |\psi\rangle = \sum_\mu |\mu\rangle\, |\psi_\mu\rangle$

$|\psi_\mu\rangle = \langle \mu | \psi \rangle$: Spinkomponenten-Wellenfunktion

$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \mu | \psi \rangle = \sum_{\mu'} \langle \mu | H | \mu' \rangle \langle \mu' | \psi \rangle$

$\langle \mu | H | \mu' \rangle = \delta_{\mu\mu'} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec r)\right) + \langle \mu | W | \mu' \rangle$

$H_0 := -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec r)$ spin-unabhängig

im Ortsraum:

$\Rightarrow \begin{cases} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_+(\vec r, t) = H_0\, \psi_+(\vec r, t) + W_{+-}\, \psi_-(\vec r, t) \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_-(\vec r, t) = H_0\, \psi_-(\vec r, t) + W_{-+}\, \psi_+(\vec r, t) \end{cases}$

$W_{\mu\mu'} = \langle \mu | W | \mu' \rangle$

Vereinfachung: $V(\vec r) = \text{const.} = 0 \ , \ \vec B(\vec r) = \vec B_0 = \text{const.}$

$\Rightarrow H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \ , \ W = -g \mu_0\, \vec S_0\, \vec B_0 \ , \ \mu_0 = \frac{e}{2m}$

Sei: $\vec B_0 = B\, \vec e_z$. Dann

$W = -g \mu_0 B_0 s_z \ , \ g = 2 \ , \ W = -\mu_0 B_0 \sigma_z$, wähle $\{|\mu\rangle\}$ als Eigenzustände zu s_z (kartesische Basis).

$t = 0$: $\psi(\vec r, 0) = \Phi(\vec r, 0)\, (\alpha_0 |+\rangle + \beta_0 |-\rangle)$

$t \neq 0$: $\psi(\vec r, t) = \Phi(\vec r, t)\, \underbrace{(\alpha(t)|+\rangle + \beta(t)|-\rangle)}_{= |\chi(t)\rangle}$

$\Rightarrow \Phi(\vec r, 0) = e^{i\vec k \vec r}$

$\Rightarrow \Phi(\vec r, t) = e^{i(\vec k \vec r - \omega(k) t)}$

$\psi(\vec r, t) = \Phi(\vec r, t)\, |\chi(t)\rangle = \Phi(\vec r, t) \begin{pmatrix} \alpha(t) \\ \beta(t) \end{pmatrix}$

Separationsgleichung:

$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec r, t) = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi\right) |\chi\rangle + \Phi\, i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\chi\rangle = |\chi\rangle H_0 \Phi + \Phi W |\chi\rangle$

$\Rightarrow \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi - H_0 \Phi\right) |\chi\rangle = -\Phi \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\chi\rangle - W |\chi\rangle\right)$

Die Lösung existiert genau dann, wenn gilt: „$\langle \chi |$"

$\frac{1}{\Phi}\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi - H_0 \Phi\right) = c = -\langle \chi | \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - W\right) |\chi\rangle$

c heißt Separationskonstante.

Berechne c aus einer der beiden Gleichungen:

$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi - H_0 \Phi = c \ , \ H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \ , \ \hbar\omega(k)\, \Phi - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Phi = c$

$\Leftrightarrow \underbrace{\left(\hbar\omega(k) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right)}_{= 0} \Phi = c$

$\Rightarrow c = 0$

Bewegungs- / Schrödingergleichung für Spin-Wellenfunktion:

$$(i\hbar \tfrac{\partial}{\partial t} - \omega)|\chi\rangle = 0, \quad \omega = -\mu_0 B_0 \sigma_z = -\mu_0 B_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$
$$\Leftrightarrow (i\hbar \tfrac{\partial}{\partial t} 1_2 - \omega) \begin{pmatrix} \alpha(t) \\ \beta(t) \end{pmatrix} = 0$$
$$\Leftrightarrow \begin{pmatrix} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \mu_0 B_0 & 0 \\ 0 & i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \mu_0 B_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha(t) \\ \beta(t) \end{pmatrix} = 0$$

Lösung:
$\alpha(t) = \alpha_0 e^{-i\omega_0 t}$, $\beta(t) = \beta_0 e^{i\omega_0 t}$, $\omega_0 = -\mu_0 \frac{B}{\hbar}$, Larmor-Frequenz

Zeitentwicklung:
$$M_x(t) = \langle\psi|\mu_x|\psi\rangle = 2\mu_0 \alpha_0 \beta_0 \cos(\omega_0 t) \langle\Phi|\Phi\rangle$$
$$M_y(t) = \langle\psi|\mu_y|\psi\rangle = 2\mu_0 \alpha_0 \beta_0 \sin(\omega_0 t) \langle\Phi|\Phi\rangle$$
$$M_z(t) = \langle\psi|\mu_z|\psi\rangle = 2\mu_0 (|\alpha_0|^2 - |\beta_0|^2) \langle\Phi|\Phi\rangle = \text{const.}$$

Präzession wie in klassischer Elektrodynamik:
$$\left.\begin{array}{l} \dot{M}_x = -\omega_0 M_x \\ \dot{M}_y = \omega_0 M_x \\ \dot{M}_z = 0 \end{array}\right\} \text{klassische Bewegungsgleichungen} \Leftrightarrow \text{Ehrenfeld-Theorem}$$

Stern-Gerlach-Experiment: $B \to B(\vec{r})$, $\vec{B} := B(\vec{r})\vec{e}_z$

Ehrentest: $\frac{d}{dt}\langle z\rangle_\pm = \frac{1}{m}\langle p\rangle_\pm$

$\langle A\rangle_\pm = \langle\psi_\pm|A|\psi_\pm\rangle$, $A = p_z \cdot z$

$\Rightarrow \delta_z = \langle z\rangle_+ - \langle z\rangle_- = \frac{1}{m}\mu_0 B_\perp L^2 \frac{1}{v^2_{\text{klassisch}}}$

Zum ersten Mal wurde die Richtungsquantelung von Drehimpulsen von Atomen beobachtet

16.06.10

§ 8 Näherungsverfahren

(8.1) Problemstellung

Behandlung von Problemen, deren Lösung nicht in analytischer Form möglich ist.

Häufig: $H = H_0 + V$, V: „kleine Störung"

- Lösungen zu H_0 sind bekannt.
- V wirkt als Störung. V ist „Störung" $\Leftrightarrow |\langle V\rangle| < |E_n - E_m|$ für benachbarte n, m.
- Zeitunabhängige, stationäre Zustände $(H_0 - E_n)|n\rangle$ seien bekannt.

Zwei Verfahren:

1) Zeitunabhängige Störungstheorie
- Rayleigh-Schrödinger-Theorie
- Brillouin-Wigner-Theorie

$\{\varphi_n, E_n\}_{n,\text{ ungestört}} \xrightarrow[\text{Potenzreihe}]{} \{\Phi_n, \mathcal{E}_n\}_{n,\text{ gestört}}$

$\Rightarrow$ systematische Approximation

2.) Ritz'sche Variationsverfahren
Abschätzung der exakten Eigenenergie (Grundzustand) mit optimaler Approximation für die Wellenfunktion.
$\Rightarrow$ nicht-störungstheoretisches Näherungsverfahren

(8.2) Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie

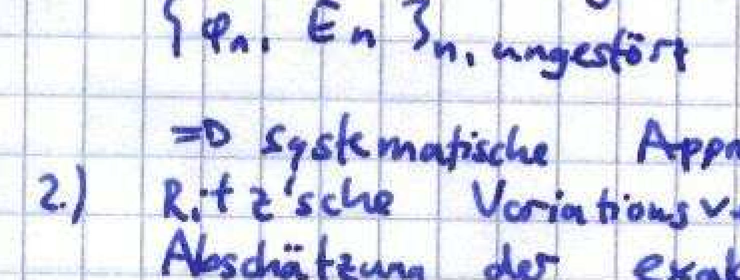
Hamilton-Operator: $H = H_0 + V$

- $(H_0 - E_n)|n\rangle = 0$ sei gegeben.
  $\{|n\rangle\}$ sei VONS von $\mathcal{H}$.
- V sei „kleine Störung": Sei $(H_0 + V - \mathcal{E}_n)|N\rangle = 0$ die exakte Lösung.
  $\Delta E = |E_n - \mathcal{E}_n| \gg |\langle n|V|n\rangle|$

Kontrollparameter λ: $0 \leq \lambda \leq 1$, $\underbrace{H = H_0 + \lambda V}$: „$H \to H(\lambda) = H_\lambda$", $H(0) = H_0$, $H(1) = H$

Ansatz für die gestörte Wellenfunktion:
$$|N\rangle = |n\rangle + \lambda|N^{(1)}\rangle + \lambda^2|N^{(2)}\rangle + \ldots + \lambda^k|N^{(k)}\rangle + \ldots$$

Bedingung: $\langle n|N\rangle = 1 = \langle n|n\rangle + \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k \langle n|N^{(k)}\rangle$
(mit $\langle n|n\rangle = 1 \Leftrightarrow \langle n|N^{(k)}\rangle = 0$ für alle $k \in \mathbb{N}$)



„Ziel": stückweise Sekantenbeschreibung } Idee

Ansatz für Energien:
$$\mathcal{E}_n = E_n + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \ldots + \lambda^k E_n^{(k)} + \ldots = E_n + \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k E_n^{(k)}$$

$\mathcal{E}_n^{(k)} = E_n + \sum_{i \leq k} \lambda^i E_n^{(i)}$ heißt Näherung zur Ordnung k, $E_n^{(k)}$ heißt die k-te Ordnung in der Störungsreihe.