

Moderne Physik für Informatiker

Alexander Shnirman

Institut für Theorie der Kondensierten Materie
Karlsruher Institut für Technologie

16. Juli 2012

Inhaltsverzeichnis

1	Analytische Mechanik	7
1.1	Mechanik eines Massenpunktes	7
1.1.1	Grundkonzepte	7
1.1.2	Newton-Bewegungsgleichungen	7
1.1.3	Konservative Kräfte	8
1.2	Mechanik mehrerer Massenpunkte	9
1.3	Lagrange-Formalismus	9
1.3.1	Lagrange-Funktion und Euler-Lagrange-Gleichung	9
1.3.2	Beispiel: das Pendel	11
1.3.3	Keine Zwangsbedingungen	12
1.4	Erhaltungssätze, das Noether-Theorem	13
1.4.1	Verallgemeinerter Impuls, zyklische Koordinaten	13
1.4.2	Das Noether-Theorem	13
1.4.3	Erweitertes Noether-Theorem	14
1.5	Das Hamilton-Prinzip	15
1.5.1	Funktionale	15
1.5.2	Wirkung	16
1.5.3	Das Hamilton-Prinzip	16
1.6	Hamilton-Formalismus	17
1.6.1	Hamilton-Bewegungsgleichungen, Hamilton-Funktion	17
1.6.2	Beispiele der Legendre-Transformation	19
1.6.3	Phasenraum	20
2	Relativistische Mechanik	23
2.1	Maxwell-Gleichungen	23
2.1.1	Elektromagnetische Wellen	24
2.2	Spezielle Relativitätstheorie	25
2.2.1	Michelson-Morley Experiment	26

2.2.2	Einstein Postulate	26
2.2.3	Lorentz Transformationen	26
2.2.4	Minkowski-Raum: Nur für mathematisch interessierten Studierenden	28
2.2.5	Minkowski-Raum: einfache Zusammenfassung	31
2.2.6	4-Vektoren in Elektrodynamik (nur zur Information)	32
2.3	Mechanik eines relativistischen Teilchens	32
2.3.1	Wirkung und Lagrange-Funktion	32
2.3.2	Energie und Impuls	33
2.3.3	4-Impuls	33
2.3.4	Relativistische Dynamik im Potentialfeld	34
2.3.5	Addition von Geschwindigkeiten	36
3	Quantenmechanik	37
3.1	Motivation	37
3.2	Zustände in Quantenmechanik	38
3.2.1	Hilbert-Raum	38
3.2.2	Einfachster Hilbertraum: Quantenbit oder Spin 1/2 oder Zwei-Niveau-System	39
3.2.3	Ein Teilchen in 1-D	39
3.3	Die Observable	40
3.3.1	Der Impuls-Operator	43
3.4	Schrödinger-Gleichung	44
3.4.1	Erhaltung der Wahrscheinlichkeit	44
3.4.2	3-D Teilchen	45
3.4.3	Stationäre Zustände	46
3.5	Impuls-Darstellung einer Wellenfunktion	46
3.5.1	Unschärfe-Relation	47
3.6	Wellenpakete	50
3.7	Streuzustände und gebundene Zustände	53
3.7.1	Randbedingungen	53
3.7.2	Streuzustände	54
3.7.3	Barriere	54
3.7.4	Gebundene Zustände	57
3.8	Harmonischer Oszillator	57
3.9	Drehimpuls	60
3.9.1	Sphärische Koordinaten	61
3.9.2	Leiteroperatoren	61

3.9.3	Der Operator L^2	62
3.10	Wasserstoffatom	63
3.11	Spin 1/2	64
3.12	Periodensystem der Elemente	66
3.12.1	Pauli-Prinzip	66
3.13	Spin 1/2, Dynamik	66
3.13.1	Magnetisches Moment	66
3.13.2	Gyromagnetisches Verhältnis	67
3.13.3	Spin-Präzession	68
3.14	Stern-Gerlach-Experiment, Quantenmessprozess	69
3.15	Quanteninformationsverarbeitung	69

Kapitel 1

Analytische Mechanik

Literatur:

- 1) T. Fließbach: “Lehrbuch zur Theoretischen Physik 1 – Mechanik”, (Springer)
- 2) W. Nolting: “Grundkurs Theoretische Physik 1+2”, (Springer)
- 3) H. Goldstein, C.P. Poole, J.L. Safko: “Klassische Mechanik” (Wiley-VCH)
- 4) L.D. Landau, E.M. Lifschitz: “Lehrbuch der Theoretischen Physik 1” (Mechanik)

1.1 Mechanik eines Massenpunktes

1.1.1 Grundkonzepte

Freiheitsgrade, Bahnkurve $\vec{r}(t)$, Geschwindigkeit $\mathbf{v}(t) = \frac{d}{dt} \mathbf{r}(t) = \dot{\mathbf{r}}(t)$, Beschleunigung $\mathbf{a}(t) = \frac{d}{dt} \mathbf{v}(t) = \ddot{\mathbf{r}}(t)$.

1.1.2 Newton-Bewegungsgleichungen

$$m\mathbf{a} = \mathbf{F} . \tag{1.1}$$

Diese Masse heisst träge Masse.

Beispiele: Schwerkraft, Lorentz-Kraft.

Beispiel einer Lösung: Stein im Gravitationsfeld.

1.1.3 Konservative Kräfte

Wir definieren von der Kraft geleistete Arbeit:

$$W[\mathbf{r}, \mathbf{r}_0] = \int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} \mathbf{F}[\mathbf{r}'] d\mathbf{r}' . \quad (1.2)$$

Dann gilt

$$dW = \mathbf{F} d\mathbf{r} . \quad (1.3)$$

Kinetische Energie:

$$T = \frac{m\mathbf{v}^2}{2} . \quad (1.4)$$

Die zeitliche Änderung der kinetischen Energie:

$$\frac{d}{dt} T = m\mathbf{v}\dot{\mathbf{v}} = \mathbf{v}\mathbf{F} . \quad (1.5)$$

Es gilt

$$dT = \mathbf{F}\mathbf{v}dt = \mathbf{F}d\mathbf{r} = dW . \quad (1.6)$$

D.h., die Arbeit wird in die kinetische Energie umgewandelt.

Spezialfall:

$$\mathbf{F} = -\vec{\nabla}V . \quad (1.7)$$

Hier $V(\mathbf{r})$ ist die potenzielle Energie. Dann gilt

$$\oint \mathbf{F}d\mathbf{r} = 0 . \quad (1.8)$$

D.h., die Arbeit $W[\mathbf{r}, \mathbf{r}_0]$ ist vom Integrationsweg unabhängig.

Wir definieren die totale Energie

$$E \equiv T + V . \quad (1.9)$$

$$\frac{d}{dt} E = \frac{d}{dt} T + \frac{d}{dt} V = \mathbf{v}\mathbf{F} + \left(\vec{\nabla}V \right) \dot{\mathbf{r}} = 0 . \quad (1.10)$$

Die Energie ist erhalten.

1.2 Mechanik mehrerer Massenpunkte

Wir betrachten den Spezialfall

$$V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_{i < j} V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) . \quad (1.11)$$

Diese Form ist motiviert durch die Tatsache, dass der Raum homogen und isotrop ist.

Die Bewegungsgleichungen lauten

$$m_i \ddot{\mathbf{r}}_i = \sum_{j \neq i} \mathbf{F}_{ij} , \quad (1.12)$$

wobei

$$\mathbf{F}_{ij} = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) . \quad (1.13)$$

Es ist einfach zu zeigen, dass $\mathbf{F}_{ij} = -\mathbf{F}_{ji}$ und $\mathbf{F}_{ij} \parallel \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$. Daraus folgt Erhaltung des Gesamtimpulses:

$$\mathbf{P} = \sum_i \mathbf{p}_i = \sum_i m_i \mathbf{v}_i , \quad (1.14)$$

und des gesamt Drehimpulses

$$\mathbf{L} = \sum_i \mathbf{r}_i \times \mathbf{p}_i . \quad (1.15)$$

1.3 Lagrange-Formalismus

1.3.1 Lagrange-Funktion und Euler-Lagrange-Gleichung

Durch die Zwangsbedingungen wird die Bewegung des Systems auf einer Oberfläche O im $3N$ -dimensionalen Raum beschränkt. Man führt die *generalisierten* Koordinaten $q_1, q_2, \dots, q_{3N-s}$ ein, die die Oberfläche O parametrisieren. D.h., die Oberfläche ist gegeben durch $\mathbf{R} = \mathbf{R}(q_1, q_2, \dots)$. D.h., dass das System $3N - s$ Freiheitsgrade hat. Damit sind die Zwangsbedingungen automatisch erfüllt. Wir wollen $3N - s$ Bewegungsgleichungen für q_j herleiten.

Die Bewegungsgleichungen im $3N$ -dimensionalen Raum lauten

$$\dot{\mathbf{P}} = \mathbf{K} + \mathbf{Z} . \quad (1.16)$$

Hier ist $\mathbf{P} \equiv \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N$ der $3N$ -dimensionaler Vektor der Impulse, \mathbf{K} ist der $3N$ -dimensionaler Vektor der Kräfte (N 3D Kraft-Vektoren) und \mathbf{Z} entspricht den N Zwangskräften. Wir projizieren die $3N$ -dimensionale Gleichung $\dot{\mathbf{P}} = \mathbf{K} + \mathbf{Z}$ auf $3N - s$ Tangentialvektoren $\partial\mathbf{R}/\partial q_j$. Das ergibt

$$\dot{\mathbf{P}} \cdot \frac{\partial\mathbf{R}}{\partial q_j} = \mathbf{K} \cdot \frac{\partial\mathbf{R}}{\partial q_j} = -\vec{\nabla}_R U \cdot \frac{\partial\mathbf{R}}{\partial q_j} . \quad (1.17)$$

oder

$$\sum_{i=1}^N m_i \ddot{\mathbf{r}}_i \cdot \frac{\partial\mathbf{r}_i}{\partial q_j} = -\frac{\partial U}{\partial q_j} . \quad (1.18)$$

Die Zwangskräfte tauchen nicht auf, weil sie senkrecht zur Oberfläche O sind. Wir betrachten hier die potentielle Energie U nur auf der Oberfläche O , so dass $U(\mathbf{R}, t) = U(\mathbf{R}(q_1, \dots, q_{3N-s}, t)) = U(q_1, \dots, q_{3N-s}, t) = U(\mathbf{q}, t)$.

Wir wollen beweisen, dass

$$\sum_{i=1}^N m_i \ddot{\mathbf{r}}_i \cdot \frac{\partial\mathbf{r}_i}{\partial q_j} = \frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_j} - \frac{\partial T}{\partial q_j} , \quad (1.19)$$

wobei

$$T = \sum_i \frac{m_i \dot{\mathbf{r}}_i^2}{2} \quad (1.20)$$

die kinetische Energie ist.

Wir haben $\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_i(q_1, \dots, q_{3N-s}, t) = \mathbf{r}_i(\mathbf{q}, t)$, wobei $\mathbf{q} \equiv (q_1, \dots, q_{3N-s})$. Es ist wichtig die totale (z.B. d/dt) und die partielle (z.B. $\partial/\partial t$ oder $\partial/\partial q_1$) Ableitungen zu unterscheiden. Wir erhalten

$$\frac{d}{dt} \mathbf{r}_i = \dot{\mathbf{r}}_i = \sum_j \frac{\partial\mathbf{r}_i}{\partial q_j} \dot{q}_j + \frac{\partial\mathbf{r}_i}{\partial t} . \quad (1.21)$$

Das heisst wir können jetzt $\dot{\mathbf{r}}_i$ als Funktion von \mathbf{q} , $\dot{\mathbf{q}}$ und t , , d.h. $\dot{\mathbf{r}}_i(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t)$, darstellen. Da $\dot{\mathbf{r}}_i$ eine lineare Funktion von $\dot{\mathbf{q}}$ ist erhalten wir

$$\frac{\partial\dot{\mathbf{r}}_i}{\partial\dot{q}_j} = \frac{\partial\mathbf{r}_i}{\partial q_j} . \quad (1.22)$$

Weiter

$$\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_j} = \sum_i m_i \dot{\mathbf{r}}_i \frac{\partial \dot{\mathbf{r}}_i}{\partial \dot{q}_j} = \sum_i m_i \dot{\mathbf{r}}_i \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_j}, \quad (1.23)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_j} &= \sum_i m_i \ddot{\mathbf{r}}_i \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_j} + \sum_i m_i \dot{\mathbf{r}}_i \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_j} \\ &= \sum_i m_i \ddot{\mathbf{r}}_i \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_j} + \sum_i m_i \dot{\mathbf{r}}_i \left(\sum_m \frac{\partial^2 \mathbf{r}_i}{\partial q_j \partial q_m} \dot{q}_m + \frac{\partial^2 \mathbf{r}_i}{\partial t \partial q_j} \right), \end{aligned} \quad (1.24)$$

$$\frac{\partial T}{\partial q_j} = \sum_i m_i \dot{\mathbf{r}}_i \frac{\partial \dot{\mathbf{r}}_i}{\partial q_j}. \quad (1.25)$$

Schließlich, mit (1.21) erhalten wir

$$\frac{\partial T}{\partial q_j} = \sum_i m_i \dot{\mathbf{r}}_i \left(\sum_m \frac{\partial^2 \mathbf{r}_i}{\partial q_j \partial q_m} \dot{q}_m + \frac{\partial^2 \mathbf{r}_i}{\partial t \partial q_j} \right), \quad (1.26)$$

und

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_j} - \frac{\partial T}{\partial q_j} = \sum_i m_i \ddot{\mathbf{r}}_i \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_j}. \quad (1.27)$$

Gl. (1.18) jetzt lautet

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_j} - \frac{\partial T}{\partial q_j} = - \frac{\partial U}{\partial q_j}, \quad (1.28)$$

oder

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} - \frac{\partial L}{\partial q_j} = 0, \quad (1.29)$$

wobei $L \equiv T - U$ (die potenzielle Energie U ist unabhängig von $\dot{\mathbf{q}}$). Die Funktion $L = L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t)$ heisst Lagrange-Funktion und die Gleichung (1.29) heisst Euler-Lagrange Bewegungsgleichung.

1.3.2 Beispiel: das Pendel

Wir benutzen die Parametrisierung durch die Kugel-Koordinaten:

$$\mathbf{r} = (l \sin \theta \cos \varphi, l \sin \theta \sin \varphi, l \cos \theta). \quad (1.30)$$

Die kinetische Energie lautet

$$T = \frac{m\dot{\mathbf{r}}^2}{2} = \frac{ml^2}{2} \left(\dot{\theta}^2 + \sin^2 \theta \dot{\varphi}^2 \right) . \quad (1.31)$$

Die potentielle Energie lautet

$$U = mgz = mgl \cos \theta . \quad (1.32)$$

Die 2 Euler-Lagrange-Gleichungen lauten

$$\begin{aligned} ml^2\ddot{\theta} - ml^2 \sin \theta \cos \theta \dot{\varphi}^2 - mgl \sin \theta &= 0 \\ ml^2 \sin^2 \theta \ddot{\varphi} + 2ml^2 \sin \theta \cos \theta \dot{\theta} \dot{\varphi} &= 0 . \end{aligned} \quad (1.33)$$

1.3.3 Keine Zwangsbedingungen

Wenn es keine Zwangsbedingungen gibt, sind die $3N$ Koordinaten \mathbf{R} auch gute generalisierte Koordinaten. Aus der Lagrange-Funktion

$$L = T - U = \sum_i \frac{m_i \dot{\mathbf{r}}_i^2}{2} - U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (1.34)$$

erhalten wir die Newton-Bewegungsgleichungen. Man kann immer noch die generalisierten Koordinaten einführen ($3N$) die das Problem vereinfachen.

Kepler-Problem

Die L.-F. lautet

$$L = \frac{m_1 \dot{\mathbf{r}}_1^2}{2} + \frac{m_2 \dot{\mathbf{r}}_2^2}{2} - U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) . \quad (1.35)$$

Die besser passenden Koordinaten sind $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$, und $\mathbf{R} = \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}$. Jetzt lautet die L.-F.

$$L = \frac{M \dot{\mathbf{R}}^2}{2} + \frac{\mu \dot{\mathbf{r}}^2}{2} - U(\mathbf{r}) , \quad (1.36)$$

wobei $\mu \equiv \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ die reduzierte Masse ist.

1.4 Erhaltungssätze, das Noether-Theorem

1.4.1 Verallgemeinerter Impuls, zyklische Koordinaten

Die verallgemeinerten Impulse sind wie folgt definiert:

$$p_j \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} . \quad (1.37)$$

Aus den Euler-Lagrange-Gleichungen folgt dann, dass wenn q_j eine *zyklische* Koordinate ist, d.h. L ist von q_j unabhängig, $\partial L / \partial q_j = 0$, ist der entsprechende Impuls p_j erhalten, $\dot{p}_j = 0$.

1.4.2 Das Noether-Theorem

Wenn es eine Schar der Bahnkurven existiert $\mathbf{q}(t, \alpha)$ (es gilt, z.B., $\mathbf{q}(t, \alpha = 0) = \mathbf{q}(t)$), sodass

$$L(\mathbf{q}(t, \alpha), \dot{\mathbf{q}}(t, \alpha), t) = L(\mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t), t) , \quad (1.38)$$

gilt

$$\frac{d}{d\alpha} L(\mathbf{q}(t, \alpha), \dot{\mathbf{q}}(t, \alpha), t) = 0 , \quad (1.39)$$

oder

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_j \left(\frac{\partial L}{\partial q_j} \frac{\partial q_j}{\partial \alpha} + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial \alpha} \right) \\ &= \sum_j \left(\left[\frac{\partial L}{\partial q_j} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} + \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \right] \frac{\partial q_j}{\partial \alpha} + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial \alpha} \right) \\ &= \sum_j \left(\left[\frac{\partial L}{\partial q_j} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \right] \frac{\partial q_j}{\partial \alpha} + \frac{d}{dt} \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \frac{\partial q_j}{\partial \alpha} \right] \right) \end{aligned} \quad (1.40)$$

Wir benutzen die Euler-Lagrange-Gleichungen und erhalten den Erhaltungssatz

$$\frac{d}{dt} \sum_j \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \frac{\partial q_j}{\partial \alpha} \right] = \frac{d}{dt} \sum_j \left[p_j \frac{\partial q_j}{\partial \alpha} \right] = 0 . \quad (1.41)$$

Beispiel: zyklische Koordinate

Wenn q_m zyklisch ist dann gilt $q_j(t, \alpha) = q_j(t) + \alpha \delta_{jm}$. Daraus folgt $\dot{p}_m = 0$.

Beispiel: Gesamtimpuls mehreren wechselwirkenden Teilchen

Die verallgemeinerten Koordinaten sind einfach \mathbf{r}_i (keine Zwangsbedingungen). Die potenzielle Energie ändert sich nicht unter Transformation $\mathbf{r}_i + \alpha \mathbf{n}$, wo \mathbf{n} einer beliebigen Richtung entspricht (Verschiebung aller Teilchen). Dann ist der Gesamtimpuls $\sum_i \mathbf{p}_i$ erhalten.

Beispiel: Drehimpuls

Die Symmetrie: eine Drehung um Achse \mathbf{n} um Winkel α . Wir erhalten

$$\frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial \alpha} = \mathbf{n} \times \mathbf{r}_i \quad (1.42)$$

Die erhaltene Größe sei

$$\sum_i \mathbf{p}_i \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial \alpha} = \sum_i \mathbf{p}_i (\mathbf{n} \times \mathbf{r}_i) = \mathbf{n} \cdot \left(\sum_i \mathbf{r}_i \times \mathbf{p}_i \right) = \mathbf{n} \cdot \mathbf{L} , \quad (1.43)$$

wobei \mathbf{L} der Drehimpuls ist.

1.4.3 Erweitertes Noether-Theorem

Die Lagrange-Funktion ist nicht invariant aber gilt

$$\frac{d}{d\alpha} L(\mathbf{q}(t, \alpha), \dot{\mathbf{q}}(t, \alpha), t)|_{\alpha=0} = \frac{d}{dt} f(\mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t), t) . \quad (1.44)$$

Dann die Größe

$$\sum_j \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \frac{\partial q_j}{\partial \alpha} - f \quad (1.45)$$

ist erhalten. Die wichtigste Anwendung: Zeitverschiebung $\mathbf{q}(t, \alpha) = \mathbf{q}(t + \alpha)$. Dann gilt

$$\frac{d}{d\alpha} L(\mathbf{q}(t, \alpha), \dot{\mathbf{q}}(t, \alpha), t)|_{\alpha=0} = \frac{d}{dt} \sum_j \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \frac{\partial q_j}{\partial \alpha} \right]_{\alpha=0} = \frac{d}{dt} \sum_j \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \dot{q}_j \right] . \quad (1.46)$$

Andererseits

$$\frac{d}{d\alpha} L(\mathbf{q}(t, \alpha), \dot{\mathbf{q}}(t, \alpha), t)|_{\alpha=0} = \frac{d}{dt} L - \frac{\partial}{\partial t} L . \quad (1.47)$$

Zusammen ergibt sich dann

$$\frac{d}{dt} \left[\sum_j \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \dot{q}_j - L \right] = \frac{\partial}{\partial t} L . \quad (1.48)$$

Wenn L zeitunabhängig ist (Zeitverschiebungsinvarianz) dann ist die Größe

$$E \equiv \sum_j \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \dot{q}_j - L \quad (1.49)$$

erhalten. Diese Größe nennt man Energie.

Sollte die Kinetische Energie eine quadratische Form bezüglich der generalisierten Geschwindigkeiten sein, d.h.,

$$T = \frac{1}{2} \sum_{nm} T_{nm}(\vec{q}) \dot{q}_n \dot{q}_m , \quad (1.50)$$

lautet dann die Energie

$$E = \sum_j \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \dot{q}_j - L = 2T - L = T + U . \quad (1.51)$$

Diese Situation erhalten wir wenn, z.B., die Zwangsbedingungen skleronom sind. Dann gilt

$$\dot{\mathbf{r}}_i = \sum_j \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_j} \dot{q}_j , \quad (1.52)$$

weil gilt $\frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial t} = 0$. Einsetzen von (1.50) in $T = \sum_i \frac{m_i \dot{\mathbf{r}}_i^2}{2}$ ergibt eine quadratische Form.

1.5 Das Hamilton-Prinzip

1.5.1 Funktionale

Beispiel: sei B ein Raum der Funktionen $f(x)$, $\mathfrak{R} \rightarrow \mathfrak{R}$. Es gibt verschiedene Räume (integrierbare, glatte, Funktionen). Eine Abbildung $F : B \rightarrow \mathfrak{R}$ heißt Funktional. Z.B.

$$\begin{aligned} F[f(x)] &= f(0) , \\ F[f(x)] &= \int_0^1 dx f^2(x) . \end{aligned} \quad (1.53)$$

Ein Funktional ist stetig im "Punkte" $f(x)$ wenn zu jedem $\epsilon > 0$ existiert $\delta > 0$, sodass

$$F[f(x) + h(x)] - F[f(x)] < \epsilon \quad (1.54)$$

für alle $h(x)$ für denen $\|h\| < \delta$. Für die Norm $\|\dots\|$ gibt es verschiedene Definitionen. Z.B. $\|h\| = \int dx h^2$.

Ein Funktional F ist differenzierbar wenn existiert ein lineares (in h) Funktional $F'_{f(x)}[h(x)]$, sodass

$$F[f(x) + h(x)] - F[f(x)] = F'_{f(x)}[h(x)] + O(\|h\|^2) . \quad (1.55)$$

Beispiel $F = \int_0^1 dx f^2(x)$, $F' = \int_0^1 dx 2f(x)h(x)$. Die Größe $\delta F \equiv F'_{f(x)}[h(x)]$ heißt "die erste Variation".

1.5.2 Wirkung

Gegeben sei eine Bahnkurve $q(t)$ mit Anfangszeit t_1 und Endzeit t_2 . Die Wirkung ist wie folgt definiert

$$S \equiv \int_{t_1}^{t_2} dt L(q(t), \dot{q}(t), t) . \quad (1.56)$$

1.5.3 Das Hamilton-Prinzip

Das Hamilton-Prinzip a.k.a. Prinzip der kleinsten Wirkung (präziser: Prinzip der extremalen Wirkung) besagt folgendes. Sei der Anfangspunkt $q(t_1)$ und der Endpunkt $q(t_2)$ der Bahnkurve sind gegeben. Dann bewegt sich das System entlang einer Bahnkurve $q(t)$ sodass die Wirkung minimal (extremal) ist.

Matematisch bedeutet das, dass die erste Variation der Wirkung für $\delta q(t)$ mit $\delta q(t_1) = \delta q(t_2) = 0$ verschwindet.

Wir erhalten

$$\begin{aligned}
 \delta S &= \int_{t_1}^{t_2} dt L(q(t) + \delta q(t), \dot{q}(t) + \delta \dot{q}(t), t) - \int_{t_1}^{t_2} dt L(q(t), \dot{q}(t), t) \\
 &= \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial L}{\partial q} \delta q + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta \dot{q} \right) dt = \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \delta q + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q \Big|_{t_1}^{t_2} \\
 &= \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \delta q . \tag{1.57}
 \end{aligned}$$

Wir wollen, dass die erste Variation verschwindet für beliebigen δq . Dann muss die Euler-Lagrange-Gleichung erfüllt werden.

Freiheit bezüglich der Wahl der Lagrange-Funktion

Man darf eine total Zeit-Ableitung zur Lagrange-Funktion addieren ohne die Bewegungsgleichungen zu ändern. Definieren wir die neue Lagrange-Funktion als

$$L'(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) = L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) + \frac{d}{dt} f(\vec{q}, t) . \tag{1.58}$$

Die neue Wirkung lautet

$$S' = \int_{t_1}^{t_2} dt L' = \int_{t_1}^{t_2} dt L + [f(\vec{q}(t_2), t_2) - f(\vec{q}(t_1), t_1)] . \tag{1.59}$$

Da $\delta \vec{q}(t_1) = \delta \vec{q}(t_2) = 0$, stellen wir fest, dass von $\delta S = 0$ folgt $\delta S' = 0$. Man kann auch explizit beweisen, dass die Euler-Lagrange-Gleichungen sich nicht ändern.

1.6 Hamilton-Formalismus

1.6.1 Hamilton-Bewegungsgleichungen, Hamilton-Funktion

Wir fangen mit den Euler-Lagrange-Gleichungen an:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} - \frac{\partial L}{\partial q_j} = 0 , \tag{1.60}$$

und der Definition des kanonischen Impulses

$$p_j \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} = p_j(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) . \quad (1.61)$$

Wir lösen die letzte Gleichung bezüglich $\dot{\vec{q}}$ auf (wir nehmen an, dass das möglich ist):

$$\dot{q}_j = \dot{q}_j(\vec{p}, \vec{q}, t) . \quad (1.62)$$

Wir bilden die Hamilton-Funktion mit Hilfe der Energie $E(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t)$:

$$H(\vec{p}, \vec{q}, t) \equiv E(\vec{q}, \dot{\vec{q}}(\vec{p}, \vec{q}, t), t) . \quad (1.63)$$

Explizit

$$H(\vec{p}, \vec{q}, t) = \sum_j p_j \dot{q}_j(\vec{p}, \vec{q}, t) - L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}(\vec{p}, \vec{q}, t), t) . \quad (1.64)$$

Mathematisch ist das die Legendre-Transformation von $L(\dot{q})$ zu $H(p)$. Wir wollen zeigen, dass die Euler-Lagrange-Gleichungen und die folgenden Hamilton-Gleichungen äquivalent sind:

$$\begin{aligned} \dot{q}_j &= \frac{\partial H}{\partial p_j} , \\ \dot{p}_j &= -\frac{\partial H}{\partial q_j} . \end{aligned} \quad (1.65)$$

Beweis

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial p_j} &= \dot{q}_j(\vec{p}, \vec{q}, t) + \sum_i p_i \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial p_j} - \frac{\partial L}{\partial p_j} \\ &= \dot{q}_j(\vec{p}, \vec{q}, t) + \sum_i p_i \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial p_j} - \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial p_j} \\ &= \dot{q}_j . \end{aligned} \quad (1.66)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial q_j} &= \sum_i p_i \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial q_j} - \frac{\partial L}{\partial q_j} - \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial q_j} \\ &= -\frac{\partial L}{\partial q_j} = -\dot{p}_j . \end{aligned} \quad (1.67)$$

Alternativer Beweis

Wir betrachten das Differential von L als Funktion von \vec{q} und $\dot{\vec{q}}$:

$$\begin{aligned}dL &= \sum_j \frac{\partial L}{\partial q_j} dq_j + \sum_j \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} d\dot{q}_j \\ &= \sum_j \dot{p}_j dq_j + \sum_j p_j d\dot{q}_j \\ &= \sum_j \dot{p}_j dq_j + d\left(\sum_j p_j \dot{q}_j\right) - \sum_j \dot{q}_j dp_j .\end{aligned}\quad (1.68)$$

Das ergibt

$$d\left(\sum_j p_j \dot{q}_j - L\right) = dH = \sum_j \dot{q}_j dp_j - \sum_j \dot{p}_j dq_j .\quad (1.69)$$

Daraus folgen die Hamilton-Gleichungen. Das ist ein Beispiel der Legendre-Transformation.

Energie-Erhaltung

$$\frac{dH}{dt} = \sum_j \frac{\partial H}{\partial p_j} \dot{p}_j + \sum_j \frac{\partial H}{\partial q_j} \dot{q}_j + \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial t} .\quad (1.70)$$

Energie ist erhalten wenn die Hamilton-Funktion nicht explizit von der Zeit abhängt.

1.6.2 Beispiele der Legendre-Transformation

Massenpunkt im externen Potential

$$L(q, \dot{q}) = \frac{m\dot{q}^2}{2} - U(q) \quad \rightarrow \quad H(q, p) = \frac{p^2}{2m} + U(q)\quad (1.71)$$

Harmonischer Oscillator: $U(q) = (1/2)m\omega^2 q^2$.

Bewegungsgleichung: $\ddot{q} + \omega^2 q = 0$.

Energie:

$$E = H(q, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2} .\quad (1.72)$$

$E = \text{const.}$ bedeutet Ellipse im Phasenraum.

3D-Pendel

$$L(\theta, \phi, \dot{\theta}, \dot{\phi}) = \frac{ml^2}{2} \left(\dot{\theta}^2 + \sin^2 \theta \dot{\phi}^2 \right) - mgl \cos \theta . \quad (1.73)$$

$$p_\theta = ml^2 \dot{\theta} \quad , \quad p_\phi = ml^2 \sin^2 \theta \dot{\phi} . \quad (1.74)$$

$$H(p_\theta, p_\phi, \theta, \phi) = \frac{1}{2ml^2} \left(p_\theta^2 + \frac{p_\phi^2}{\sin^2 \theta} \right) + mgl \cos \theta . \quad (1.75)$$

Allgemeine quadratische Form

$$L = \frac{1}{2} \sum_{nm} T_{nm}(\vec{q}) \dot{q}_n \dot{q}_m - U(\vec{q}) . \quad (1.76)$$

$$p_n = \sum_m T_{nm} \dot{q}_m \quad \rightarrow \quad \dot{q}_m = \sum_n (T^{-1})_{mn} p_n . \quad (1.77)$$

$$H = \frac{1}{2} \sum_{nm} (T^{-1})_{nm} p_n p_m + U(\vec{q}) . \quad (1.78)$$

Weitere Beispiele

1.6.3 Phasenraum

Der 2f-dimensionale Raum \vec{q}, \vec{p} . Dynamisches System:

$$\dot{x}_j = F_j(\vec{x}) . \quad (1.79)$$

In unserem Fall $\vec{x} = (\vec{q}, \vec{p})$, oder $x_j = q_j$ für $1 \leq j \leq f$ und $x_j = p_{j-f}$ für $f+1 \leq j \leq 2f$. In unserem Fall $F_j = \partial H / \partial x_{j+f}$ für $1 \leq j \leq f$ und $F_j = -\partial H / \partial x_{j-f}$ für $f+1 \leq j \leq 2f$.

Liouville-Theorem (Satz von Liouville)

Wir betrachten die Abbildung im Phasenraum $\vec{x} \equiv \vec{x}(t) \rightarrow \vec{g} \equiv \vec{x}(t+dt)$, wobei $g_j \equiv x_j(t+dt) \approx x_j + F_j(\vec{x})dt$. Wir betrachten ein Volumen-Element Ω_x , dessen Volumen lautet

$$\Gamma(t) = \int_{\Omega_x} d^{2f}x . \quad (1.80)$$

Zur Zeit $t + dt$ wird das Volumen-Element in das andere Volumen-Element Ω_g abgebildet.

$$\Gamma(t + dt) = \int_{\Omega_g} d^{2f}g = \int_{\Omega_x} d^{2f}x \left| \det \left(\frac{\partial g_i}{\partial x_j} \right) \right| \quad (1.81)$$

Wir erhalten

$$\det \left(\frac{\partial g_i}{\partial x_j} \right) = \det \left(\delta_{ij} + dt \frac{\partial F_i}{\partial x_j} \right) = 1 + dt \text{Tr} \left(\frac{\partial F_i}{\partial x_j} \right) + O(dt^2) . \quad (1.82)$$

In unserem fall

$$\text{Tr} \left(\frac{\partial F_i}{\partial x_j} \right) = \sum_{n=1}^f \frac{\partial^2 H}{\partial p_n \partial x_n} - \sum_{n=1}^f \frac{\partial^2 H}{\partial p_n \partial x_n} = 0. \quad (1.83)$$

Wir haben bewiesen, dass $d\Gamma/dt = 0$.

Periodisches, Chaotisches, Ergodisches Verhalten (nur zur Information)

Kapitel 2

Relativistische Mechanik

2.1 Maxwell-Gleichungen

Die Maxwell-Gleichungen beschreiben die Dynamik des elektrischen Feldes $\mathbf{E}(\vec{r}, t)$ und des magnetischen Feldes $\mathbf{B}(\vec{r}, t)$. Die M.-G. lauten

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathbf{E}} = \frac{\rho}{\epsilon_0} , \quad (2.1)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{\mathbf{E}} + \frac{\partial \vec{\mathbf{B}}}{\partial t} = 0 , \quad (2.2)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathbf{B}} = 0 , \quad (2.3)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{\mathbf{B}} - \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \vec{\mathbf{E}}}{\partial t} = \mu_0 \vec{j} . \quad (2.4)$$

Hier ist $\rho(\vec{r}, t)$ die Ladungsdichte und $\vec{j}(\vec{r}, t)$ ist die Stromdichte. ϵ_0 und μ_0 sind Naturkonstanten. Im stationärem (zeitunabhängigen) Regime ergeben die 1. und die 2. Gleichung die Elektrostatik, wobei die 3. und die 4. ergeben die Magnetostatik.

Die 2. und die 3. M.-Gl. sind automatisch erfüllt wenn man das Vektorpotential $\vec{\mathbf{A}}$ und das Skalarpotential φ einführt:

$$\vec{\mathbf{B}} = \vec{\nabla} \times \vec{\mathbf{A}} . \quad (2.5)$$

$$\vec{\mathbf{E}} = -\vec{\nabla}\varphi - \frac{\partial \vec{\mathbf{A}}}{\partial t} . \quad (2.6)$$

$\vec{\mathbf{A}}$ und φ sind nicht eindeutig definiert. Eine Eichtransformation $\vec{\mathbf{A}}' = \vec{\mathbf{A}} + \vec{\nabla}\Lambda$ und $\varphi' = \varphi - \partial\Lambda/\partial t$ ergibt die gleichen Felder \mathbf{E} und \mathbf{B} .

Die Potentiale $\vec{\mathbf{A}}$ und φ sind nützlich, weil die Lagrange-Funktion eines Teilchens mit Ladung q im äußeren E.-M.-Feld ergibt sich als

$$L(\vec{r}, \vec{v}, t) = \frac{m\vec{v}^2}{2} + q\vec{v}\vec{\mathbf{A}}(\vec{r}, t) - q\varphi(\vec{r}, t) . \quad (2.7)$$

Übung: Euler-Lagrange-Gleichungen und Hamilton-Funktion, Lorentz-Kraft.

2.1.1 Elektromagnetische Wellen

Wir betrachten Vakuum mit $\rho = 0$ und $\vec{j} = 0$. Dann gilt

$$\vec{\nabla} \times \vec{\mathbf{B}} = \epsilon_0\mu_0 \frac{\partial \vec{\mathbf{E}}}{\partial t} , \quad (2.8)$$

und

$$\vec{\nabla} \times \vec{\mathbf{E}} = -\frac{\partial \vec{\mathbf{B}}}{\partial t} . \quad (2.9)$$

Wir erhalten

$$\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{\mathbf{E}}) = -\vec{\nabla} \times \frac{\partial \vec{\mathbf{B}}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial t} (\vec{\nabla} \times \vec{\mathbf{B}}) = -\epsilon_0\mu_0 \frac{\partial^2 \vec{\mathbf{E}}}{\partial t^2} . \quad (2.10)$$

Mit

$$\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{\mathbf{E}}) = \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathbf{E}}) - (\vec{\nabla})^2 \vec{\mathbf{E}} \quad (2.11)$$

und

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathbf{E}} = 0 \quad (2.12)$$

erhalten wir

$$(\vec{\nabla})^2 \vec{\mathbf{E}} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{\mathbf{E}}}{\partial t^2} , \quad (2.13)$$

wo $c = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0\mu_0}}$. Das ist die Wellengleichung. Die Lösungen sind

$$\vec{\mathbf{E}} = \vec{\mathbf{E}}_k e^{i\vec{k}\vec{r} - \omega t} , \quad (2.14)$$

wobei $\omega = c|\vec{k}|$. Aus $\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathbf{E}}$ folgt $\vec{\mathbf{E}}_k \perp \vec{k}$. Das bedeutet, dass jedem Wellenvektor \vec{k} zwei möglichen transversalen Polarisationen von $\vec{\mathbf{E}}_k$ entsprechen. Es gibt keine longitudinale Wellen. Aus $\vec{\nabla} \times \vec{\mathbf{E}} = -\frac{\partial \vec{\mathbf{B}}}{\partial t}$ folgt

$$\vec{\mathbf{B}} = \vec{\mathbf{B}}_k e^{i\vec{k}\vec{r} - \omega t} , \quad (2.15)$$

wobei $\vec{\mathbf{B}}_k = \frac{1}{\omega} \vec{k} \times \vec{\mathbf{E}}_k$. D.h., auch das Magnetfeld ist dem Wellenvektor \vec{k} senkrecht ausgerichtet.

2.2 Spezielle Relativitätstheorie

Die Gesetze der Newton-Mechanik sind Galilei invariant. D.h., die Bewegungsgleichungen bleiben unverändert unter der Transformation vom Bezugssystem $K(x, t)$ zum Bezugssystem $K'(x', t')$:

$$t' = t \quad , \quad x' = x - vt \quad . \quad (2.16)$$

Z.B. die Bewegungsgleichungen im Bezugssystem K

$$m_i \ddot{x}_i = - \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_{j \neq i} V(x_i - x_j) \quad . \quad (2.17)$$

lauten im neuen Bezugssystem K'

$$m_i \ddot{x}'_i = - \frac{\partial}{\partial x'_i} \sum_{j \neq i} V(x'_i - x'_j) \quad . \quad (2.18)$$

Die Wellengleichung ist aber nicht Galilei-invariant. Wenn gilt

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] f(x, t) = 0 \quad , \quad (2.19)$$

dann mit

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x'} \frac{\partial x'}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial t'} \frac{\partial t'}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x'} \quad , \quad (2.20)$$

und

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x'} \frac{\partial x'}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t'} \frac{\partial t'}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t'} - v \frac{\partial}{\partial x'} \quad . \quad (2.21)$$

erhalten wir

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial x'^2} - \frac{1}{c^2} \left(\frac{\partial}{\partial t'} - v \frac{\partial}{\partial x'} \right)^2 \right] f(x', t') = 0 \quad . \quad (2.22)$$

Wir beobachten, dass die Wellengleichung sieht im Bezugssystem K' anders aus, als im Bezugssystem K . Der einfache Grund: wellen breiten in einer Substanz aus. Z.B., die Schallwellen in der Luft. Im Bezugssystem K' breiten die Wellen links mit der Geschwindigkeit $c + v$ und rechts $c - v$ aus.

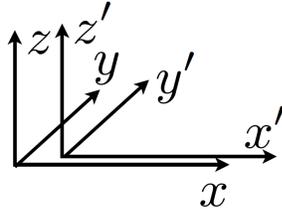


Abbildung 2.1: Zwei Bezugssysteme K und K'

2.2.1 Michelson-Morley Experiment

2.2.2 Einstein Postulate

1. Natur-Gesetze sind identisch in allen inertialen Bezugssystemen (Relativität)
2. Lichtgeschwindigkeit ist gleich in allen inertialen Bezugssystemen (kein Äther) und unabhängig von der Geschwindigkeit der Quelle

2.2.3 Lorentz Transformationen

Einfache Herleitung

Wir definieren den Abstand zwischen zwei Ereignissen (ct_1, \vec{r}_1) und (ct_2, \vec{r}_2) :

$$s^2 \equiv c^2(t_1 - t_2)^2 - |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^2 . \quad (2.23)$$

Aus dem zweiten Postulat von Einstein folgt, dass wenn im Bezugssystem K gilt $s^2 = 0$ gilt $s'^2 = 0$ auch im Bezugssystem K' (Fig. 2.1). Wir verallgemeinern das zur Förderung, dass der Abstand unverändert bleibt unter dem Wechsel des Bezugsystems. Der Einfachheit halber Verschieben wir ein Ereignis zum Ursprung der beiden Bezugssysteme: $t_2 = t'_2 = 0$, $\vec{r}_2 = \vec{r}'_2 = 0$. Dann gilt (mit $(ct_1, \vec{r}_1) \rightarrow (ct, \vec{r})$ und $(ct'_1, \vec{r}'_1) \rightarrow (ct', \vec{r}')$)

$$s^2 = (ct)^2 - |\vec{r}|^2 = s'^2 = (ct')^2 - |\vec{r}'|^2 . \quad (2.24)$$

Wenn die relative Bewegung zwischen K und K' in x -Richtung ist, ist es natürlich anzunehmen, dass die Koordinaten y und z nicht betroffen sind,

d.h., $y = y', z = z'$. Dann gilt

$$(ct)^2 - x^2 = (ct')^2 - x'^2 . \quad (2.25)$$

Einfache Algebra ergibt

$$\begin{pmatrix} ct' \\ x' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cosh \gamma & -\sinh \gamma \\ -\sinh \gamma & \cosh \gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} ct \\ x \end{pmatrix} \quad (2.26)$$

wobei gilt

$$\tanh \gamma = \frac{v}{c} . \quad (2.27)$$

Das ergibt

$$x' = \frac{x - vt}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad \text{und} \quad t' = \frac{t - \frac{vx}{c^2}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} . \quad (2.28)$$

Die invertierten Transformationen lauten

$$x = \frac{x' + vt'}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad \text{und} \quad t = \frac{t' + \frac{vx'}{c^2}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} . \quad (2.29)$$

Zeit-Dilatation Wir betrachten eine in K' ruhende Uhr im System K . Die in K' ruhende Uhr geht von K aus betrachtet langsamer:

$$\left. \frac{\partial t}{\partial t'} \right|_{x'} = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} . \quad (2.30)$$

Längenkontraktion (Lorentz-Kontraktion) Ein Maßstab, der in K' ruht und in der Richtung der Relativ-Bewegung ausgedehnt ist, erscheint also in K verkürzt. Dagegen bleiben die Entfernungen senkrecht zur Bewegungsrichtung unverändert.

$$\left. \frac{\partial x'}{\partial x} \right|_t = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} . \quad (2.31)$$

$$\Delta x = \left. \frac{\partial x}{\partial x'} \right|_t \Delta x' = \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \Delta x' . \quad (2.32)$$

2.2.4 Minkowski-Raum: Nur für mathematisch interessierten Studierenden

Mathematische Grundlagen. Wir erinnern an das Konzept des Vektorraums V . Basis-Vektoren: e_μ mit $\mu = 1, \dots, N$. Vektor: $\vec{x} = \sum_\mu x^\mu e_\mu$. Abkommen: $\sum_\mu x^\mu e_\mu \equiv x^\mu e_\mu$. Die Koordinaten x^μ nennt man die *kontravarianten* Koordinaten des Vektors \vec{x} .

Wir betrachten eine Basis-Wechsel

$$e_\nu = e'_\mu \Lambda^\mu{}_\nu . \quad (2.33)$$

Hier drücken wir die alten Basis-Vektoren durch die neuen aus. Der Index ν ist "verschoben" um zu zeigen, dass das der zweite Index der Matrix Λ ist. Die entsprechende Koordinaten-Transformation lautet

$$x'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu . \quad (2.34)$$

Die inverse Transformationen lauten

$$e'_\nu = e_\mu \bar{\Lambda}^\mu{}_\nu \quad \text{und} \quad x^\mu = \bar{\Lambda}^\mu{}_\nu x'^\nu , \quad (2.35)$$

wobei gilt

$$\bar{\Lambda}^\mu{}_\nu \Lambda^\nu{}_\eta = \delta^\mu{}_\eta . \quad (2.36)$$

D.h., $\bar{\Lambda} = \Lambda^{-1}$.

Skalarprodukt definiert man durch eine bi-lineare Form:

$$\langle \vec{x} | \vec{y} \rangle = g_{\mu\nu} x^\mu y^\nu , \quad (2.37)$$

wobei $g_{\mu\nu} \equiv \langle e_\mu | e_\nu \rangle$ eine symmetrische Matrix ist. Diese Matrix ist *metrische* Matrix genannt. Üblicherweise fordert man, dass die Matrix $g_{\mu\nu}$ eine positiv definite Matrix ist. Wir werden es nicht fordern. Unter Basis-Wechsel transformiert sich die metrische Matrix wie folgt

$$g_{\mu\nu} = \langle e_\mu | e_\nu \rangle = \langle e'_\alpha | e'_\beta \rangle \Lambda^\alpha{}_\mu \Lambda^\beta{}_\nu = g'_{\alpha\beta} \Lambda^\alpha{}_\mu \Lambda^\beta{}_\nu . \quad (2.38)$$

In der Matrixform lautet das $g = \Lambda^T g' \Lambda$.

Der duale Vektor-Raum V^* - der Raum der linearen Formen auf V . Basis-Vektoren $e^\mu \in V^*$ sind definiert durch (können gewählt werden als) $e^\mu(e_\nu) = \delta^\mu{}_\nu$. Hier $e^\mu(e_\nu)$ bedeutet die Form e^μ ausgewertet auf Vektor e_ν . Allgemeine Elemente des dualen Vektor-Raums: $\tilde{y} = y_\mu e^\mu$. Die Beziehung (Isomorphismus)

zwischen V und V^* wird durch den Skalarprodukt definiert. Man sagt, dass die Form $\tilde{y} = y_\mu e^\mu$ dem Vektor $\vec{y} = y^\mu e_\mu$ entspricht wenn für beliebige \vec{x} gilt

$$\tilde{y}(\vec{x}) = \langle \vec{y} | \vec{x} \rangle = g_{\mu\nu} y^\mu x^\nu . \quad (2.39)$$

Wir erhalten

$$\langle \vec{y} | \vec{x} \rangle = \tilde{y}(\vec{x}) = y_\mu x^\nu e^\mu(e_\nu) = y_\nu x^\nu . \quad (2.40)$$

Wir sehen, dass gilt

$$y_\nu = g_{\nu\mu} y^\mu . \quad (2.41)$$

Die Koordinaten y_ν nennt man die *kovarianten* Koordinaten des Vektors \vec{y} . In der Umgangssprache sagt man, dass die metrische Matrix $g_{\nu\mu}$ den Index heruntersetzt. Die inverse Relation lautet

$$y^\mu = \bar{g}^{\mu\nu} y_\nu , \quad (2.42)$$

wobei $\bar{g} = g^{-1}$, d.h., $\bar{g}^{\mu\alpha} g_{\alpha\nu} = \delta^\mu_\nu$. Häufig wird $\bar{g}^{\mu\nu}$ einfach $g^{\mu\nu}$ genannt. Die Matrix $g^{\mu\nu}$ kann einen Index hochsetzen.

Basis-Wechsel im dualen Vektor-Raum.

$$e^\mu = e'^\nu B_\nu{}^\mu \quad \text{und} \quad e'^\mu = e^\nu \bar{B}_\nu{}^\mu , \quad (2.43)$$

wobei $\bar{B} = B^{-1}$. Entsprechend

$$x'_\nu = B_\nu{}^\mu x_\mu \quad \text{und} \quad x_\nu = \bar{B}_\mu{}^\nu x'_\mu . \quad (2.44)$$

Die Beziehung zum Basis-Wechsel im Raum V ergibt sich durch

$$\delta^\mu_\nu = e^\mu(e'_\nu) = e'^{\alpha}(e'_\beta) B_\alpha{}^\mu \Lambda^\beta_\nu = B_\alpha{}^\mu \Lambda^\alpha_\nu . \quad (2.45)$$

Das bedeutet, dass $B = \bar{\Lambda}^T$ oder $B_\mu{}^\nu = \bar{\Lambda}^\nu{}_\mu$.

Differentialoperatoren

$$\partial_\nu \equiv \frac{\partial}{\partial x^\nu} \quad (2.46)$$

Wir wollen uns überzeugen, dass ∂_ν als *kovariante* Größe unter Basis-Wechsel sich verhält:

$$\partial'_\nu = \frac{\partial}{\partial x'^\nu} = \frac{\partial x^\mu}{\partial x'^\nu} \frac{\partial}{\partial x^\mu} = \bar{\Lambda}^\mu{}_\nu \frac{\partial}{\partial x^\mu} = B_\nu{}^\mu \partial_\mu . \quad (2.47)$$

Lorentz Transformationen und Wellen-Gleichungen Die Wellen-Gleichung kann wie folgt dargestellt werden

$$\partial^\mu \partial_\mu f = g^{\mu\nu} \partial_\mu \partial_\nu f = 0, \quad (2.48)$$

wobei $\mu = 0, 1, 2, 3$ und

$$\partial_0 \equiv \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \quad \text{und} \quad \partial_i = \frac{\partial}{\partial r_i} \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.49)$$

Hier die metrische Matrix lautet

$$g_{\mu\nu} = g^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.50)$$

Lorentz-Transformationen sind die Basis-Wechsel-Transformationen die die metrische Matrix erhalten bleiben lassen. Dann bleibt die Wellengleichung invariant und die Lichtgeschwindigkeit ist in jedem Inertialsystem gleich. D.h.,

$$g = \Lambda^T g' \Lambda \quad \text{und} \quad g' = g. \quad (2.51)$$

Z.B, wenn nur t und x sind betroffen wir erhalten

$$\Lambda = \begin{pmatrix} A & B & 0 & 0 \\ C & D & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.52)$$

Dann aus (2.51) folgt

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & C & 0 & 0 \\ B & D & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B & 0 & 0 \\ C & D & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.53)$$

und wir erhalten $A = D = \coth \gamma$ und $B = C = -\sinh \gamma$.

2.2.5 Minkowski-Raum: einfache Zusammenfassung

Die Ereignisse sind 4-Vektoren mit den kontravarianten Koordinaten: $x^\mu = (ct, \vec{r})$, $\mu = [0, 1, 2, 3]$, oder $x^0 = ct$, $x^1 = x$, $x^2 = y$, $x^3 = z$. Die kovarianten Koordinaten des selben Vektors sind definiert als $x_\mu = \sum_\nu g_{\mu\nu} x^\nu \equiv g_{\mu\nu} x^\nu = (ct, -\vec{r})$. Also $x_0 = ct$, $x_1 = -x$, $x_2 = -y$, $x_3 = -z$. Hier die metrische Matrix ist definiert durch

$$g_{\mu\nu} = g^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.54)$$

Der Abstand ist dann gegeben durch

$$s^2 = x_\mu x^\mu = x_0 x^0 + x_1 x^1 + x_2 x^2 + x_3 x^3 = g_{\mu\nu} x^\mu x^\nu. \quad (2.55)$$

Gleichzeitig gilt

$$s^2 = x_\mu x^\mu = g_{\mu\nu} x^\mu x^\nu = x^0 x^0 - x^1 x^1 - x^2 x^2 - x^3 x^3. \quad (2.56)$$

Analog definieren wir den 4-Vektor (kovarianten Komponenten)

$$\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu} = \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) = \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \vec{\nabla} \right). \quad (2.57)$$

und

$$\partial^\mu = \frac{\partial}{\partial x_\mu} = \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, -\frac{\partial}{\partial x}, -\frac{\partial}{\partial y}, -\frac{\partial}{\partial z} \right) = \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, -\vec{\nabla} \right). \quad (2.58)$$

Offensichtlich gilt

$$\partial^\mu = g^{\mu\nu} \partial_\nu. \quad (2.59)$$

Die Wellengleichung lautet

$$\partial^\mu \partial_\mu f = g^{\mu\nu} \partial_\mu \partial_\nu f = 0. \quad (2.60)$$

Die Lorentz-Transformationen sind solche lineare Koordinaten-Transformationen $x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu$, die die Wellengleichung unverändert (invariant) bleiben lassen. D.h., die Matrix g bleibt invariant $g = \Lambda^T g \Lambda$.

2.2.6 4-Vektoren in Elektrodynamik (nur zur Information)

Die gesamte Elektrodynamik lässt sich durch 4-Vektoren sehr schön umzuformulieren. Die wichtigsten 4-Vektoren sind 4-Stromdichte, d.h., Ladungsdichte und Stromdichte

$$j^\mu = (c\rho, \vec{j}) \quad (2.61)$$

und 4-Potential, d.h. Skalar- und Vektor-Potential

$$A^\mu = \left(\frac{\varphi}{c}, \vec{A} \right) . \quad (2.62)$$

Die Kontinuitätsgleichung (Erhaltung der Ladung) lautet dann einfach

$$\partial_\mu j^\mu = 0 . \quad (2.63)$$

Die Maxwell-Gleichungen (in der so genannten Lorentz-Eichung $\partial_\mu A^\mu = 0$) lauten

$$\partial_\nu \partial^\nu A^\mu = \mu_0 j^\mu . \quad (2.64)$$

2.3 Mechanik eines relativistischen Teilchens

Einstein erkannte, dass die Konstanz der Lichtgeschwindigkeit und die Lorentz-Invarianz nicht auf die Elektrodynamik beschränkt ist, sondern allgemeine Gültigkeit in der Physik hat.

2.3.1 Wirkung und Lagrange-Funktion

Wir betrachten ein freies relativistisches Teilchen und postulieren die Wirkung

$$S = -mc \int_a^b ds = -mc^2 \int_a^b d\tau . \quad (2.65)$$

Wobei

$$ds \equiv \sqrt{dx^\mu dx_\mu} . \quad (2.66)$$

Hier $d\tau = ds/c$ ist die Eigenzeit, d.h., die Zeit im Bezugssystem wo das Teilchen ruht. Wir haben

$$x^\mu(t) \equiv (ct, \vec{r}(t)) \quad \rightarrow \quad \vec{v}(t) \equiv \frac{d\vec{r}}{dt} , \quad (2.67)$$

$$cd\tau \equiv ds = \sqrt{dx^\mu dx_\mu} = \sqrt{(cdt)^2 - (\vec{v}dt)^2}, \quad (2.68)$$

$$d\tau = dt \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}. \quad (2.69)$$

Für die Lagrange-Funktion erhalten wir

$$S = \int_a^b L dt \quad \rightarrow \quad L = -mc^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}. \quad (2.70)$$

2.3.2 Energie und Impuls

Der kanonische Impuls lautet

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial v_i} = \frac{mv_i}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (2.71)$$

oder

$$\vec{p} = \frac{m\vec{v}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}. \quad (2.72)$$

Für die Energie erhalten wir

$$E = \vec{p}\vec{v} - L = \frac{mv^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} + mc^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}. \quad (2.73)$$

Für kleine Geschwindigkeiten ergibt das

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \approx mc^2 + \frac{1}{2}mv^2. \quad (2.74)$$

Wie erhalten die berühmte Ruheenergie mc^2 und die nichtrelativistische kinetische Energie $mv^2/2$.

2.3.3 4-Impuls

Wir definieren den 4-Vektor

$$p^\mu = \left(\frac{E}{c}, \vec{p} \right) = \frac{m(c, \vec{v})}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = mu^\mu, \quad (2.75)$$

wobei der 4-Vektor u^μ die "Weltgeschwindigkeit" heisst:

$$u^\mu \equiv \frac{dx^\mu}{d\tau} = \frac{dx^\mu}{dt} \frac{dt}{d\tau} = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{(\vec{v})^2}{c^2}}} (c, \vec{v}) . \quad (2.76)$$

Wir erhalten

$$p^\mu p_\mu = \frac{E^2}{c^2} - p^2 = m^2 c^2 . \quad (2.77)$$

Oder

$$E^2 = m^2 c^4 + c^2 p^2 . \quad (2.78)$$

Für Teilchen mit $m = 0$, z.B., Photonen, ergibt das

$$E = cp . \quad (2.79)$$

2.3.4 Relativistische Dynamik im Potentialfeld

Wir führen die potentielle Energie $U(\vec{r}, t)$ ein. Die ist, natürlich, nicht Lorentz-Invariant. Die Lagrange-Funktion jetzt lautet

$$L = -mc^2 \sqrt{1 - \frac{(\dot{\vec{r}})^2}{c^2}} - U(\vec{r}, t) . \quad (2.80)$$

Der Impuls lautet wie früher

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}_i} = \frac{m \dot{r}_i}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} . \quad (2.81)$$

Energie:

$$E = \vec{p}\vec{v} - L = \frac{mv^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} + mc^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} + U(\vec{r}, t) = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} + U(\vec{r}, t) . \quad (2.82)$$

Die Bewegungsgleichungen lauten genau wie in der nichtrelativistischen Mechanik

$$\frac{dp_i}{dt} = \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{r}_i} = \frac{\partial L}{\partial r_i} = -\frac{\partial U}{\partial r_i} = K_i , \quad (2.83)$$

aber

$$\frac{dp_i}{dt} = \frac{d}{dt} \frac{m \dot{r}_i}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = \frac{m \ddot{r}_i}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} + \frac{m \dot{r}_i (\vec{v} \cdot \dot{\vec{v}})}{c^2 (1 - \frac{v^2}{c^2})^{3/2}} . \quad (2.84)$$

Energie-Erhaltung

$$\frac{d}{dt}E = \dot{\vec{p}}\vec{v} + \vec{p}\dot{\vec{v}} - \frac{d}{dt}L = \dot{\vec{p}}\vec{v} + \vec{p}\dot{\vec{v}} - \frac{\partial L}{\partial \vec{r}}\dot{\vec{r}} - \frac{\partial L}{\partial \vec{v}}\dot{\vec{v}} - \frac{\partial L}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t} = \frac{\partial U}{\partial t}. \quad (2.85)$$

$$\frac{d}{dt}E_{\text{kin}} = \frac{d}{dt}(E - U) = \frac{\partial U}{\partial t} - \frac{d}{dt}U = \frac{\partial U}{\partial t} - \frac{\partial U}{\partial t} - \frac{\partial U}{\partial \vec{r}}\vec{v} = -\frac{\partial U}{\partial \vec{r}}\vec{v} = \vec{K}\vec{v}. \quad (2.86)$$

Die Größe $\vec{K}\vec{v}$ ist die Leistung. Hier

$$E_{\text{kin}} = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}. \quad (2.87)$$

d.h., E_{kin} enthält die Ruheenergie. Zusammenfassend:

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{K} \quad \text{und} \quad \frac{d}{dt}E_{\text{kin}} = \vec{K}\vec{v}. \quad (2.88)$$

Für 4-Impuls p^μ erhalten wir

$$p^\mu = \left(\frac{E_{\text{kin}}}{c}, \vec{p} \right) = \frac{m(c, \vec{v})}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = mu^\mu. \quad (2.89)$$

$$m \frac{du^\mu}{d\tau} = \frac{dp^\mu}{d\tau} = \frac{dp^\mu}{dt} \frac{dt}{d\tau} = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \frac{d}{dt} \left(\frac{E_{\text{kin}}}{c}, \vec{p} \right) = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \left(\frac{\vec{K}\vec{v}}{c}, \vec{K} \right) \equiv K^\mu, \quad (2.90)$$

wobei die Eigenzeit ist gegeben durch

$$d\tau = dt \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}. \quad (2.91)$$

Die 4-Kraft kann wie folgt dargestellt werden

$$K^\mu = \frac{1}{c} \left(\vec{K}\vec{u}, u^0 \vec{K} \right), \quad (2.92)$$

wobei $u^\mu = (u^0, \vec{u})$.

Bewegung im konstanten Kraftfeld

$$\vec{K} = (K, 0, 0), \quad \vec{v} = (v, 0, 0), \quad v(t=0) = 0, \quad \vec{r}(t=0) = 0, \quad (2.93)$$

$$\frac{d}{dt} \frac{mv}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = K. \quad (2.94)$$

$$\frac{v}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = at, \quad a = \frac{K}{m}. \quad (2.95)$$

$$v = \frac{at}{\sqrt{1 + \frac{a^2 t^2}{c^2}}}. \quad (2.96)$$

$$x(t) = \int_0^t dt' \frac{at'}{\sqrt{1 + \frac{a^2 t'^2}{c^2}}} = \frac{c^2}{a} \left(\sqrt{1 + \frac{a^2 t^2}{c^2}} - 1 \right). \quad (2.97)$$

2.3.5 Addition von Geschwindigkeiten

Wir führen 2 Lorentz-Transformationen nacheinander aus

$$\begin{pmatrix} \cosh \gamma & -\sinh \gamma \\ -\sinh \gamma & \cosh \gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cosh \gamma_1 & -\sinh \gamma_1 \\ -\sinh \gamma_1 & \cosh \gamma_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cosh \gamma_2 & -\sinh \gamma_2 \\ -\sinh \gamma_2 & \cosh \gamma_2 \end{pmatrix}, \quad (2.98)$$

wobei gilt

$$\tanh \gamma = \frac{V}{c}, \quad \tanh \gamma_1 = \frac{v_1}{c}, \quad \tanh \gamma_2 = \frac{v_2}{c}. \quad (2.99)$$

Das ergibt $\gamma = \gamma_1 + \gamma_2$ und

$$V = \frac{v_1 + v_2}{1 + \frac{v_1 v_2}{c^2}}. \quad (2.100)$$

Kapitel 3

Quantenmechanik

Literatur:

Griffiths, David J. (2004). Introduction to Quantum Mechanics (2nd ed.). Prentice Hall.

Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, Franck Laloë: Quantenmechanik. 2. Auflage. De Gruyter, Berlin 1999

Franz Schwabl: Quantenmechanik Eine Einführung. 6. Auflage, Springer, Berlin, Heidelberg, New York 2002

3.1 Motivation

Quantenmechanik wurde um 1925 von mehreren Wissenschaftlern entwickelt. U.a., W. Heisenberg, E. Schrödinger, M. Born, P. Jordan, W. Pauli, P. Dirac, J. von Neumann

Alte Quantentheorien:

1) 1900 - Strahlungsgesetz von Max Planck. Planck konnte das Strahlungsspektrum der schwarzen Körper nur mit Hilfe der Hypothese erklären, dass die Energie der elektro-magnetischen Wellen gequantelt ist. Das Energie-Quantum lautet $E = h\nu = \hbar\omega$. Hier $\hbar \equiv h/(2\pi) \approx 1.054 \times 10^{-34}$ J s.

2) 1905 - Photoeffekt, A. Einstein. Bei Bestrahlung mit kurzwelligem Licht werden aus der Oberfläche eines Metalls Elektronen herausgelöst. Die kinetische Energie eines Elektrons hängt von der Frequenz des Lichtes aber nicht von der Intensität ab. $E_{\text{kin}} = \hbar\omega - W$, wobei W die Austrittsarbeit ist.

3) Atommodell von Niels Bohr, 1913. Elektronen befinden sich in diskreten stationären Zuständen mit Energien E_n . Übergänge zwischen den Zuständen

durch Ausstrahlung $E_n - E_m = \hbar\omega$.

4) de Broglie (1923) $p = \hbar k$. Z.B., für Photonen aus $E = \hbar\omega = cp$ und $\omega = ck$ folgt $p = \hbar k$. Wellen der Materie. Interferenz.

3.2 Zustände in Quantenmechanik

3.2.1 Hilbert-Raum

In der klassischen Mechanik der Zustand des Systems ist ein Punkt im Phasenraum. Z.B., für ein Teilchen kennen wir den Zustand wenn wir den Ortsvektor \vec{r} und den Impuls \vec{p} kennen. In der Quantenmechanik liegen die Zustände im Hilbertraum (nach David Hilbert genannt).

Definition: Hilbertraum ist ein (vollständiger) Vektorraum mit Skalarprodukt. (Skalarprodukt definiert die Norm eines Vektors und folglich Konvergenz. Die Vollständigkeit bedeutet, dass jede Cauchy-Folge konvergiert (zu einem Element des Raums).)

Skalarprodukt: In der Quantenmechanik werden (ausschließlich) komplexe Hilberträume benutzt (Vektorraum über \mathbb{C}). Der Skalarprodukt in einem komplexen Hilbertraum hat die folgenden Eigenschaften: Skalarprodukt ist linear bezüglich des zweiten und *semilinear* bezüglich des ersten Arguments:

$$\begin{aligned}\langle g | \alpha u + \beta v \rangle &= \alpha \langle g | u \rangle + \beta \langle g | v \rangle \\ \langle \alpha u + \beta v | g \rangle &= \alpha^* \langle u | g \rangle + \beta^* \langle v | g \rangle ,\end{aligned}\tag{3.1}$$

wobei u, v, g die Vektoren des Hilbertraums sind und $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$. Motiviert durch Skalarprodukt-Bezeichnung $\langle u | v \rangle$ definiert man die *ket*-Vektoren $|v\rangle$ und die *bra*-Vektoren $\langle u|$.

Superposition-Prinzip: Wenn $|u\rangle$ und $|v\rangle$ zwei physikalischen Zustände sind, ist auch $|g\rangle = \alpha |u\rangle + \beta |v\rangle$ ein physikalischer Zustand.

Basis: Mit Hilfe von Basisvektoren $|n\rangle$ können alle Vektoren des Hilbertraums zerlegt werden:

$$|u\rangle = \sum_n c_n |n\rangle .\tag{3.2}$$

Weiteres es ist sehr bequem eine orthonormierte Basis zu wählen, d.h., $\langle m|n\rangle = \delta_{m,n}$. Es ist auch nicht schlecht wenn die Vektoren $|n\rangle$ eine klare physikalische Bedeutung haben. Z.B., verschiedene Positionen eines Teilchens.

Normierung, Wahrscheinlichkeiten, globale Phase: Alle physikalischen Zustände sind normiert, d.h., $\langle u|u\rangle = 1$. Mit der Zerlegung (3.2) bedeutet das

$$\langle u|u\rangle = \sum_{n,m} c_m^* c_n \langle m|n\rangle = \sum_n |c_n|^2 = 1 . \quad (3.3)$$

Das ergibt die Interpretation der Normierung: $|c_n|^2$ sind die Wahrscheinlichkeiten das System im Zustand $|n\rangle$ zu finden. Normierung bedeutet, dass Summe aller Wahrscheinlichkeiten ist 1. Darüber hinaus der Zustand ist unverändert durch Multiplikation mit einer Phase. D.h., der Vektor $e^{i\gamma}|u\rangle$ stellt den gleichen physikalischen Zustand wie $|u\rangle$ dar.

3.2.2 Einfachster Hilbertraum: Quantenbit oder Spin 1/2 oder Zwei-Niveau-System

Die Basis besteht nur aus zwei Zuständen: $|0\rangle = |\uparrow\rangle$ und $|1\rangle = |\downarrow\rangle$. Ein beliebiger Zustand kann wie folgt zerlegt werden:

$$|u\rangle = \alpha |\uparrow\rangle + \beta |\downarrow\rangle , \quad (3.4)$$

wobei $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Da die globale Phase unwichtig ist können wir einen beliebigen Zustand durch zwei reelle Parameter (Winkeln) parametrisieren:

$$\alpha = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) , \quad \beta = e^{i\varphi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) , \quad (3.5)$$

wobei $\theta \in [0, \pi]$ und $\varphi \in [0, 2\pi]$.

Also klassisch kann ein Bit nur zwei Zustände haben, d.h., 0 und 1. Quantenmechanisch haben wir ein Kontinuum der Zustände parametrisiert durch θ und φ . Jedoch, es gibt nur zwei linear-unabhängige Basiszustände, $|0\rangle$ und $|1\rangle$. D.h., der Hilbertraum ist zweidimensional.

3.2.3 Ein Teilchen in 1-D

Analog zum Quantenbit betrachten wir jetzt die, zunächst diskrete, Menge der Positionen eines Teilchens x_n . Zu diesen Positionen ordnen wir eine

orthonormale Basis zu: $|x_n\rangle$, d.h., $\langle x_m | x_n \rangle = \delta_{mn}$. Ein beliebiger Zustand lautet:

$$|\psi\rangle = \sum_n \psi(x_n) |x_n\rangle . \quad (3.6)$$

Das Skalarprodukt zwischen den zwei Zuständen $|\psi\rangle$ und $|\phi\rangle$ lautet

$$\langle \phi | \psi \rangle = \sum_n \phi^*(x_n) \psi(x_n) . \quad (3.7)$$

Die Normierung-Bedingung lautet

$$\langle \psi | \psi \rangle = \sum_n \psi^*(x_n) \psi(x_n) = \sum_n |\psi(x_n)|^2 = 1 . \quad (3.8)$$

Wir verallgemeinern jetzt für den Fall wo x_n zu einer kontinuierliche Koordinate x wird. Dann wird der Zustand $|\psi\rangle$ durch die *Wellenfunktion* dargestellt, d.h., $\psi(x_n) \rightarrow \psi(x)$. Die Normierung-Bedingung lautet jetzt

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int dx |\psi(x)|^2 = 1 . \quad (3.9)$$

Das Skalarprodukt lautet

$$\langle \phi | \psi \rangle = \int dx \phi^*(x) \psi(x) . \quad (3.10)$$

Dieser Hilbertraum heißt L^2 - der Raum von Quadrat-Integrierbaren Funktionen.

Die Interpretation : $|\psi(x)|^2$ ist die Wahrscheinlichkeitsdichte für das Teilchen im Ort x zu sein.

3.3 Die Observable

In der klassischen Physik die Observable, d.h., die messbaren Größen sind, z.B., der Ort \vec{r} , der Impuls \vec{p} , die Energie $E = H(\vec{r}, \vec{p})$ u.s.w. In der Quantenmechanik die Observable sind (Hermitische) lineare Operatoren.

Beispiel: Ortsoperator: Wir definieren den Operator \hat{x} sodass, $|\phi\rangle = \hat{x}|\psi\rangle$ bedeutet $\phi(x) = x\psi(x)$. Im diskreten Fall bedeutet das

$$|\psi\rangle = \sum_n \psi(x_n) |x_n\rangle , \quad (3.11)$$

$$\hat{x}|\psi\rangle = \sum_n x_n \psi(x_n) |x_n\rangle . \quad (3.12)$$

Wenn der Zustand $|\psi\rangle$ normiert ist, ist der Vektor $\hat{x}|\psi\rangle$ nicht unbedingt normiert. Untersuchen wir das Matrixelement

$$\langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle = \int dx x |\psi(x)|^2 . \quad (3.13)$$

Es ist klar, dass $\langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle$ der Erwartungswert von x ist, weil $|\psi(x)|^2$ die Wahrscheinlichkeitsdichte ist das Teilchen im Ort x zu finden.

Matrix-Elemente: Operator A wirkend auf Zustand $|u\rangle$ ergibt den Zustand $|v\rangle$:

$$|v\rangle = A|u\rangle . \quad (3.14)$$

Jeder Zustand lässt eine Zerlegung in der Basis $|n\rangle$ zu:

$$|u\rangle = \sum_n u_n |n\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n|u\rangle . \quad (3.15)$$

Beweis: $\langle n|u\rangle = \langle n|\sum_m u_m |m\rangle = \sum_m u_m \langle n|m\rangle = \sum_m u_m \delta_{n,m} = u_n$. Daraus folgt auch die Vollständigkeit-Relation $\sum_n |n\rangle \langle n| = \hat{1}$ (Einheitsoperator). Dann gilt

$$|v\rangle = A|u\rangle = A \sum_m |m\rangle \langle m|u\rangle , \quad (3.16)$$

und

$$\langle n|v\rangle = \langle n|A|u\rangle = \sum_m \langle n|A|m\rangle \langle m|u\rangle , \quad (3.17)$$

oder

$$v_n = \sum_m A_{nm} u_m , \quad (3.18)$$

wobei $A_{nm} \equiv \langle n|A|m\rangle$ sind die Matrixelemente des Operators A . Also jeder Operator ist definiert durch seine Matrix A_{nm} in der Basis $|n\rangle$.

Hermitisch konjugierter Operator: Der zu A Hermitisch konjugierte Operator A^\dagger ist definiert durch die Relation die für beliebige Zustände $|\psi\rangle$ und $|\phi\rangle$ gelten muss:

$$\langle A^\dagger \phi | \psi \rangle \equiv \langle \phi | A \psi \rangle . \quad (3.19)$$

Für die Matrixelemente bedeutet das

$$\langle m | A | n \rangle = \langle m | A n \rangle = \langle A^\dagger m | n \rangle = \langle n | A^\dagger m \rangle^* = \langle n | A^\dagger | m \rangle^* . \quad (3.20)$$

Wir erhalten also $(A^\dagger)_{mn} = (A_{mn})^*$. D.h., Hermitische Konjugation ist äquivalent der Transposition zusammen mit der komplexen Konjugation.

Selbstkonjugierte (Hermitische) Operatoren Ein Operator heißt Hermitisch (nach Charles Hermite) wenn gilt $A^\dagger = A$. Für die Matrixelemente bedeutet das

$$A_{mn} = A_{nm}^* . \quad (3.21)$$

Zum Beispiel der Ortsoperator ist Hermitisch. Beweis:

$$\langle \phi | \hat{x} \psi \rangle = \int dx \phi^*(x) (x \psi(x)) , \quad (3.22)$$

und

$$\langle \hat{x} \phi | \psi \rangle = \int dx (x \phi(x))^* \psi(x) . \quad (3.23)$$

Da x reell ist gilt $\langle \phi | \hat{x} \psi \rangle = \langle \hat{x} \phi | \psi \rangle$. Noch ein Beispiel: der Operator $\hat{k} = -i\partial/\partial x$. Wir erhalten

$$\langle \phi | \hat{k} \psi \rangle = \int dx \phi^*(x) \left(-i \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} \right) , \quad (3.24)$$

und

$$\langle \hat{k} \phi | \psi \rangle = \int dx \left(-i \frac{\partial \phi(x)}{\partial x} \right)^* \psi(x) . \quad (3.25)$$

Wir benutzen sie partielle Integration

$$\begin{aligned} \int dx \left(-i \frac{\partial \phi(x)}{\partial x} \right)^* \psi(x) &= \int dx i \left(\frac{\partial \phi^*(x)}{\partial x} \right) \psi(x) \\ &= i \phi^*(x) \psi(x) \Big|_{-\infty}^{+\infty} + \int dx \phi^*(x) \left(-i \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} \right) . \end{aligned} \quad (3.26)$$

Der erste Term verschwindet, da die Funktionen $\phi(x)$ und $\psi(x)$ integrierbar sein müssen (gehören dem L^2), d.h., sie müssen auf $x \rightarrow \pm\infty$ verschwinden.

Also wir haben bewiesen, dass $\langle \phi | \hat{k} \psi \rangle = \langle \hat{k} \phi | \psi \rangle$.

Eigenzustände Eigenzustand $|v\rangle$ eines Operators \hat{A} ist definiert durch

$$\hat{A}|v\rangle = a|v\rangle, \quad (3.27)$$

wobei $a \in \mathbb{C}$ der Eigenwert ist. Aus der linearen Algebra ist bekannt, dass die reellen symmetrischen Matrizen eine vollständige Basis von Eigenvektoren besitzen. Genauso die Hermiteschen Operatoren besitzen eine vollständige Basis von Eigenvektoren. Das wird hier nicht bewiesen. Die Eigenwerte der Hermiteschen Operatoren sind reell. Beweis:

$$\langle v|A|v\rangle = \langle v|Av\rangle = \langle v|av\rangle = a. \quad (3.28)$$

Andererseits, da $A^\dagger = A$ gilt

$$\langle v|A|v\rangle = \langle Av|v\rangle = \langle av|v\rangle = a^*. \quad (3.29)$$

Also $a = a^*$. Zwei Eigenvektoren eines Hermiteschen Operators mit unterschiedlichen Eigenwerten sind orthogonal. Beweis: wir haben $A|n\rangle = a_n|n\rangle$, und $A|m\rangle = a_m|m\rangle$, und $a_n \neq a_m$.

$$\langle n|A|m\rangle = \langle n|Am\rangle = a_m \langle n|m\rangle. \quad (3.30)$$

Andererseits

$$\langle n|A|m\rangle = \langle An|m\rangle = a_n \langle n|m\rangle. \quad (3.31)$$

Da $a_n \neq a_m$, erhalten wir $\langle n|m\rangle = 0$.

3.3.1 Der Impuls-Operator

Der Impuls-Operator lautet

$$\hat{p} \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \quad (3.32)$$

Motivation: für eine ebene Welle $\psi(x) = e^{ikx}$ (das ist nicht integrierbar!) gilt

$$\hat{p}\psi(x) = \hbar k\psi(x), \quad (3.33)$$

und nach de Broglie gilt $p = \hbar k$. Als wir schon gezeigt haben, ist der Operator \hat{p} Hermitisch.

3.4 Schrödinger-Gleichung

In der Quantenmechanik entwickeln sich die Zustände in der Zeit gemäß der Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle , \quad (3.34)$$

wobei \hat{H} der Hamilton-Operator (a.k.a. Hamilton) ist. Für ein Teilchen in 1-D lautet der Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(\hat{x}) . \quad (3.35)$$

Die Schrödinger-Gleichung dann lautet

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x,t) . \quad (3.36)$$

3.4.1 Erhaltung der Wahrscheinlichkeit

Wir wollen zeigen, dass die Norm des Zustandes konstant bleibt. D.h., wenn zur $t = 0$ gilt

$$\int dx |\psi(x,t)|^2 = 1 , \quad (3.37)$$

dann gilt das auch für alle späteren Zeiten $t > 0$. Wir erhalten

$$\frac{\partial}{\partial t} \int dx |\psi(x,t)|^2 = \int dx \left\{ \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi \right\} . \quad (3.38)$$

Aus der Schrödinger-Gleichung folgt

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V\psi \right] \quad (3.39)$$

und

$$\frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} + V\psi^* \right] . \quad (3.40)$$

(Die potentielle Energie $V(x)$ ist natürlich reell). Dann erhalten wir

$$\int dx \left\{ \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi \right\} = \frac{i\hbar}{2m} \int dx \left\{ \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} \psi \right\} = 0 . \quad (3.41)$$

Die letzte Gleichung ergibt sich durch gedoppelte partielle Integration. Jetzt untersuchen wir die zeitliche Ableitung der Wahrscheinlichkeitsdichte:

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 = \frac{i\hbar}{2m} \left\{ \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} \psi \right\} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{i\hbar}{2m} \left\{ \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi \right\} \right] . \quad (3.42)$$

Wir führen ein die Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho \equiv |\psi|^2$ und die Wahrscheinlichkeitsstromdichte $j \equiv \frac{\hbar}{2mi} \left\{ \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi \right\}$. Dann die Gleichung (3.42) ist die Kontinuitätsgleichung:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0 . \quad (3.43)$$

3.4.2 3-D Teilchen

Die Verallgemeinerung von 1-D auf 3-D ist ganz direkt. Es gibt drei Koordinaten $\vec{r} = (r_1, r_2, r_3)$ und drei Impulse $\vec{p} = (p_1, p_2, p_3)$, wobei

$$p_i \equiv i\hbar \frac{\partial}{\partial r_i} . \quad (3.44)$$

Der Hamilton-Operator lautet

$$\hat{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) . \quad (3.45)$$

Die Schrödinger-Gleichung lautet

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}) \psi(\vec{r}, t) , \quad (3.46)$$

wobei

$$\vec{\nabla} \equiv \left(\frac{\partial}{\partial r_1}, \frac{\partial}{\partial r_2}, \frac{\partial}{\partial r_3} \right) . \quad (3.47)$$

Die Kontinuitätsgleichung lautet

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0 , \quad (3.48)$$

wobei

$$\vec{j} \equiv \frac{\hbar}{2mi} \left\{ \psi^* \left(\vec{\nabla} \psi \right) - \left(\vec{\nabla} \psi^* \right) \psi \right\} . \quad (3.49)$$

3.4.3 Stationäre Zustände

Eine besondere Rolle in der Quantenmechanik wird von Eigenzuständen des Hamilton-Operators gespielt. Der Hamilton entspricht der Observable Energie und muss Hermitisch sein. Es existiert eine vollständige Basis des Hilbertraums die aus allen Eigenvektoren von H besteht.

$$H |n\rangle = E_n |n\rangle . \quad (3.50)$$

Die reellen Eigenwerte E_n heißen Eigenenergien. Die Zeitentwicklung von einem Eigenzustand ist sehr einfach. Der Zustand

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right) |n\rangle \quad (3.51)$$

stellt eine Lösung der Schrödinger-Gleichung dar. Beweis:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle &= \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right) E_n |n\rangle \\ &= \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right) H |n\rangle = H |\psi(t)\rangle . \end{aligned} \quad (3.52)$$

Also der Zustand ist stationär, da die globale Phase $\exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right)$ den physikalischen Zustand nicht ändert.

3.5 Impuls-Darstellung einer Wellenfunktion

Wir betrachten die Fourier-Transformation einer Wellenfunktion $\psi(x)$.

$$\psi(x) = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \tilde{g}(p) e^{ipx/\hbar} \quad (3.53)$$

oder mit $p = \hbar k$

$$\psi(x) = \int \frac{dk}{2\pi} g(k) e^{ikx} , \quad (3.54)$$

wobei $g(k) = \tilde{g}(\hbar k)$. Die inverse Fourier-Transformation lautet

$$g(k) = \int dx \psi(x) e^{-ikx} . \quad (3.55)$$

Normierung ergibt:

$$\int dx |\psi(x)|^2 = \int \frac{dk}{2\pi} |g(k)|^2 . \quad (3.56)$$

Untersuchen wir den Erwartungswert von \hat{p} (oder $\hat{k} = \hat{p}/\hbar = -i\partial_x$).

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{p} | \psi \rangle &= \int dx \psi(x)^* (-i\hbar\partial_x) \psi(x) \\ &= \int dx \int \frac{dk_1}{2\pi} g^*(k_1) e^{-ik_1x} (-i\hbar\partial_x) \int \frac{dk_2}{2\pi} g(k_2) e^{ik_2x} \\ &= \int dx \int \frac{dk_1}{2\pi} \frac{dk_2}{2\pi} g^*(k_1) g(k_2) \hbar k_2 e^{i(k_2-k_1)x} \\ &= \int \frac{dk}{2\pi} |g(k)|^2 \hbar k = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} |\tilde{g}(p)|^2 p . \end{aligned} \quad (3.57)$$

Hier haben wir die Delta-Funktion benutzt die der folgenden Relation genügt:

$$\int dx e^{iqx} = 2\pi\delta(q) . \quad (3.58)$$

Also, man kann $g(p)$ (genauer $\tilde{g}(p)$) als Wellenfunktion in p -Darstellung betrachten.

Delta-Funktion Delta-Funktion ist der Limes einer sehr scharfen Glocke deren Integral eins ist. Die Haupteigenschaften:

$$\int dq \delta(q) = 1 . \quad (3.59)$$

Für eine stetige Funktion $f(q)$ (Probe-Funktion) gilt

$$\int dq \delta(q - q_0) f(q) = f(q_0) . \quad (3.60)$$

3.5.1 Unschärfe-Relation

Gauss-Verteilung Wir untersuchen eine besondere Wellenfunktion

$$\psi(x) = \mathcal{N} e^{ik_0x} e^{-(x-x_0)^2/4b^2} . \quad (3.61)$$

Die Normierung-Konstante \mathcal{N} bestimmt man aus der Normierung-Bedingung

$$\int dx |\psi(x)|^2 = 1 . \quad (3.62)$$

Das ergibt

$$\mathcal{N}^2 \int dx e^{-(x-x_0)^2/2b^2} = \mathcal{N}^2 \sqrt{2\pi b^2} = 1 . \quad (3.63)$$

Also es gilt

$$\mathcal{N} = (2\pi b^2)^{-1/4} . \quad (3.64)$$

Für den Erwartungswert $\langle x \rangle = \langle \psi | x | \psi \rangle$ erhalten wir

$$\langle x \rangle = \langle \psi | x | \psi \rangle = \mathcal{N}^2 \int dx x e^{-(x-x_0)^2/2b^2} = \mathcal{N}^2 \int dy (y+x_0) e^{-y^2/2b^2} . \quad (3.65)$$

Der erster Term verschwindet wegen Symmetrie, wobei der zweite ergibt einfach $\langle \psi | x | \psi \rangle = x_0$. Jetzt untersuchen wir die Variation

$$(\Delta x)^2 \equiv \langle [x - \langle x \rangle]^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 . \quad (3.66)$$

Wir erhalten

$$(\Delta x)^2 = \mathcal{N}^2 \int dx (x - x_0)^2 e^{-(x-x_0)^2/2b^2} = \mathcal{N}^2 \int dy y^2 e^{-y^2/2b^2} = b^2 . \quad (3.67)$$

Also b ist die Breite der Verteilung. Wie sieht dieser Zustand in der p -Darstellung aus? Wir erhalten

$$\begin{aligned} g(k) &= \int dx \psi(x) e^{-ikx} = \mathcal{N} \int dx e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4b^2}} e^{-i(k-k_0)x} \\ &= \mathcal{N} e^{-i(k-k_0)x_0} \int dx e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4b^2}} e^{-i(k-k_0)(x-x_0)} \\ &= \mathcal{N} e^{-i(k-k_0)x_0} \int dy e^{-\frac{y^2}{4b^2}} e^{-i(k-k_0)y} \\ &= \mathcal{N} e^{-i(k-k_0)x_0} e^{-b^2(k-k_0)^2} \int dy e^{-\frac{(y+2i(k-k_0)b^2)^2}{4b^2}} \\ &= \mathcal{N} e^{-i(k-k_0)x_0} e^{-b^2(k-k_0)^2} \int dz e^{-\frac{z^2}{4b^2}} \\ &= \mathcal{N} e^{-i(k-k_0)x_0} e^{-b^2(k-k_0)^2} 2b\sqrt{\pi} \\ &= \mathcal{N}_k e^{-i(k-k_0)x_0} e^{-b^2(k-k_0)^2} , \end{aligned} \quad (3.68)$$

wobei die neue Normierung-Konstante lautet $\mathcal{N}_k = (8\pi b^2)^{1/4}$. Wir sehen, dass die Wellenfunktion in der p -Darstellung ist wieder eine Gaußglocke. Wir haben schon die Erfahrung gesammelt mit den Gauß-Verteilungen. Wir schreiben um wie

$$g(k) = \mathcal{N}_k e^{-i(k-k_0)x_0} e^{-\frac{(k-k_0)^2}{4c^2}}, \quad (3.69)$$

wobei $c^2 = 1/(4b^2)$. Das ergibt

$$\langle p \rangle = \hbar \langle k \rangle = \hbar k_0 \quad (3.70)$$

und

$$(\Delta p)^2 = \hbar^2 (\Delta k)^2 = \hbar^2 c^2 = \frac{\hbar^2}{4b^2}. \quad (3.71)$$

Wir haben jetzt ein sehr wichtiges Ergebnis erhalten: für die Gauß-Wellenfunktion gilt

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}. \quad (3.72)$$

Algebraischer Beweis Wir betrachten zwei Hermitische Operatoren A und B und den Zustand $|\psi\rangle$. Die Erwartungswerte von A und B im Zustand $|\psi\rangle$ sind gegeben als

$$\bar{A} = \langle \psi | A | \psi \rangle \quad , \quad \bar{B} = \langle \psi | B | \psi \rangle . \quad (3.73)$$

Wir definieren

$$|a\rangle = (A - \bar{A}) |\psi\rangle \quad (3.74)$$

und

$$|b\rangle = (B - \bar{B}) |\psi\rangle . \quad (3.75)$$

Dann gilt

$$\langle a | a \rangle = \langle \psi | (A - \bar{A})^2 | \psi \rangle = \sigma_A^2 \quad (3.76)$$

und

$$\langle b | b \rangle = \langle \psi | (B - \bar{B})^2 | \psi \rangle = \sigma_B^2 . \quad (3.77)$$

Wir benutzen die bekannte Ungleichung von Schwarz

$$\langle a | a \rangle \langle b | b \rangle \geq | \langle a | b \rangle |^2 . \quad (3.78)$$

Das Skalarprodukt $z = \langle a|b \rangle$ ist eine komplexe Zahl. Dann gilt

$$\begin{aligned} |z|^2 &= (\operatorname{Re}(z))^2 + (\operatorname{Im}(z))^2 \geq (\operatorname{Im}(z))^2 \\ &= \left(\frac{z - z^*}{2i} \right)^2 . \end{aligned} \quad (3.79)$$

Also

$$\langle a|a \rangle \langle b|b \rangle \geq \left(\frac{\langle a|b \rangle - \langle b|a \rangle}{2i} \right)^2 , \quad (3.80)$$

oder

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \langle \psi | \frac{AB - BA}{2i} | \psi \rangle^2 \quad (3.81)$$

Für $A = \hat{x}$ und $B = \hat{p}$ erhalten wir

$$(\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})|\psi\rangle = x \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi - \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) x\psi = i\hbar\psi . \quad (3.82)$$

Also

$$[x, p] = xp - px = i\hbar . \quad (3.83)$$

Schließlich

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2} . \quad (3.84)$$

3.6 Wellenpakete

Wir betrachten ein freies Teilchen, das zur $t = 0$ im Zustand

$$\psi(x) = \int \frac{dk}{2\pi} g(k) e^{ikx} \quad (3.85)$$

vorbereitet wurde. Der Hamilton-Operator des Teilchens lautet

$$H = \frac{p^2}{2m} . \quad (3.86)$$

Zu einer späteren Zeit $t > 0$ ergibt sich, dann, der Zustand

$$\psi(x, t) = \int \frac{dk}{2\pi} g(k) e^{ikx} e^{-i\omega(k)t} , \quad (3.87)$$

wobei

$$\hbar\omega(k) = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} . \quad (3.88)$$

Hier kann man die ebene Welle e^{ikx} als (nicht normierter) Eigenzustand des Hamilton-Operators betrachten mit der Eigenenergie

$$E_k = \hbar\omega(k) . \quad (3.89)$$

Gruppengeschwindigkeit Wir nehmen an, dass $g(k)$ um k_0 konzentriert ist. Diese Situation heißt Wellenpaket, da wir ein Paket von ebenen Wellen haben. Dann gilt (für relevante k)

$$\omega(k) \approx \omega(k_0) + \left. \frac{\partial\omega(k)}{\partial k} \right|_{k_0} (k - k_0) + \dots \quad (3.90)$$

und

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &\approx \int \frac{dk}{2\pi} g(k) \exp \left\{ ik_0 x + i(k - k_0)x - i\omega(k_0)t - i \left. \frac{\partial\omega(k)}{\partial k} \right|_{k_0} (k - k_0)t \right\} \\ &= e^{ik_0 x - i\omega(k_0)t} \int \frac{dk}{2\pi} g(k) \exp \left\{ i(k - k_0) \left(x - \left. \frac{\partial\omega(k)}{\partial k} \right|_{k_0} t \right) \right\} . \end{aligned} \quad (3.91)$$

Wir sehen, dass das Wellenpaket sich mit der Geschwindigkeit

$$v_g \equiv \left. \frac{\partial\omega(k)}{\partial k} \right|_{k_0} \quad (3.92)$$

bewegt. Diese Geschwindigkeit heißt die Gruppengeschwindigkeit.

Dispersion Betrachten wir den nächsten Glied in der Entwicklung

$$\begin{aligned} \omega(k) &\approx \omega(k_0) + \left. \frac{\partial\omega(k)}{\partial k} \right|_{k_0} (k - k_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2\omega(k)}{\partial k^2} \right|_{k_0} (k - k_0)^2 + \dots \\ &= \omega(k_0) + v_g(k - k_0) + a(k - k_0)^2 + \dots \end{aligned} \quad (3.93)$$

Was ist die Rolle der Größe a ? Um das zu verstehen betrachten wir das Gauß'sche Beispiel

$$g(k) = \mathcal{N}_k e^{-b^2(k-k_0)^2} . \quad (3.94)$$

Das ergibt

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &\approx \mathcal{N}_k e^{ik_0 x - i\omega(k_0)t} \int \frac{dk}{2\pi} e^{-b^2(k-k_0)^2} e^{i(k-k_0)(x-v_g t)} e^{ia(k-k_0)^2 t} \\ &= \mathcal{N}_k e^{ik_0 x - i\omega(k_0)t} \int \frac{dk}{2\pi} e^{-(b^2 - iat)(k-k_0)^2} e^{i(k-k_0)\tilde{x}(t)},\end{aligned}\quad (3.95)$$

wobei $\tilde{x}(t) \equiv x - v_g t$. Wir "vollständigen das Quadrat" mit $q \equiv k - k_0$:

$$-(b^2 - iat)q^2 + iq\tilde{x} = -(b^2 - iat) \left(q - \frac{i\tilde{x}}{2(b^2 - iat)} \right)^2 - \frac{\tilde{x}^2}{4(b^2 - iat)}. \quad (3.96)$$

Mit

$$z \equiv q - \frac{i\tilde{x}(t)}{2(b^2 - iat)} \quad (3.97)$$

ergibt sich

$$\psi(x, t) \approx \left[\mathcal{N}_k e^{ik_0 x - i\omega(k_0)t} \int \frac{dz}{2\pi} e^{-(b^2 - iat)z^2} \right] e^{-\frac{\tilde{x}^2}{4(b^2 - iat)}}. \quad (3.98)$$

Wir erhalten wieder eine Gauß-Glocke mit

$$|\psi(x, t)|^2 \propto \left| e^{-\frac{\tilde{x}^2}{4(b^2 - iat)}} \right|^2 = e^{-\frac{\tilde{x}^2}{2\left(\frac{b^4 + a^2 t^2}{b^2}\right)}}. \quad (3.99)$$

Also die neue Varianz ist gegeben durch

$$(\Delta x)^2 = b^2 + \frac{a^2 t^2}{b^2}, \quad (3.100)$$

wobei die Impuls-Varianz bleibt unverändert

$$(\Delta p)^2 = \frac{\hbar^2}{4b^2}. \quad (3.101)$$

Wir erhalten

$$(\Delta x)^2 (\Delta p)^2 = \frac{\hbar}{4} \left(1 + \frac{a^2 t^2}{b^4} \right). \quad (3.102)$$

Wir beobachten, dass das Wellenpaket zerfließt. Das heißt Dispersion. Für die Dispersion ist die Größe $a = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \omega(k)}{\partial k^2}$ verantwortlich. Das Licht im Vakuum mit $\omega = ck$ hat keine Dispersion.

3.7 Streuzustände und gebundene Zustände

Wir betrachten jetzt Teilchen in externem Potential $V(\vec{r})$. in 1-D ist der Hamilton-Operator gegeben durch

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (3.103)$$

und die Schrödinger-Gleichung lautet

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x, t) . \quad (3.104)$$

Wir suchen nach den stationären Zuständen, sodass

$$\psi(x, t) = \psi(x) e^{-\frac{Et}{\hbar}} . \quad (3.105)$$

Dann muss gelten

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) . \quad (3.106)$$

oder

$$H |\psi\rangle = E |\psi\rangle , \quad (3.107)$$

Die einfachste Situation tritt dann auf, wenn das Potential stückweise konstant ist. D.h. $V(x) = V_1$ für $x_1 \leq x < x_2$, $V(x) = V_2$ für $x_2 \leq x < x_3$ usw. Dann, in jedem Intervall muss die folgende Gleichung gelöst werden

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = (E - V_n)\psi(x) . \quad (3.108)$$

Die Lösungen sind offensichtlich wieder die ebenen Wellen e^{ikx} mit

$$k = \pm \sqrt{\frac{2m(E - V_n)}{\hbar^2}} . \quad (3.109)$$

Für $E > V_n$ ergeben sich zwei reelle Wellenvektoren k (Wellennummer). Sonst, für $E < V_n$, sind die Wellenvektoren k rein imaginär.

3.7.1 Randbedingungen

Wir brauchen Randbedingungen für jeden Punkt x_n wo das Potential springt. Die Randbedingungen sind einfach: $\psi(x)$ und $\partial\psi(x)/\partial x$ müssen stetig sein. Das folgt aus der Tatsache, dass die Schrödinger-Gleichung der zweiten Ordnung in der x -Ableitung ist. Wenn $\partial\psi(x)/\partial x$ stetig ist, dann darf $\partial^2\psi(x)/\partial x^2$ höchstens einen Sprung haben. Das ist genau was gebraucht wird in den Grenzpunkten zwischen den Intervallen.

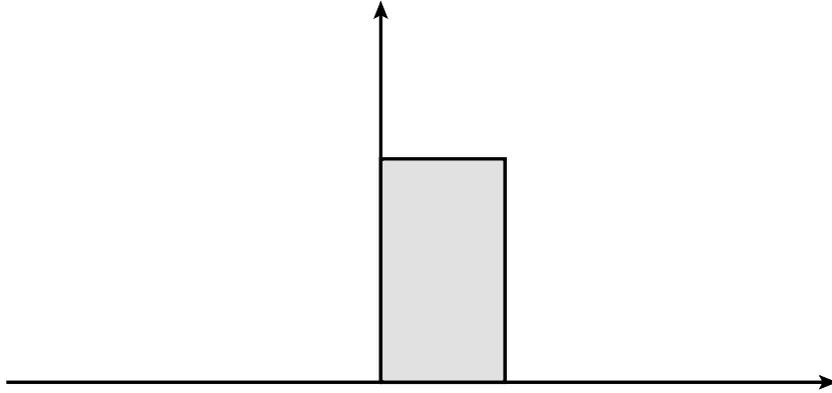


Abbildung 3.1: Barriere

3.7.2 Streuzustände

In diesem Fall ergeben sich ebene Wellen für $x \rightarrow \infty$ und/oder $x \rightarrow -\infty$. Solche Zustände sind nicht normierbar. Wir brauchen eine alternative Interpretation. Hier hilft uns die Strom-Dichte

$$j \equiv \frac{\hbar}{2mi} \left\{ \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi \right\} . \quad (3.110)$$

Für die ebene Welle mit Amplitude eins $\psi = e^{ikx}$ bekommen wir

$$j = \frac{\hbar k}{m} = v_g . \quad (3.111)$$

Man redet dann von einem Fluss von Teilchen mit Dichte $\rho = |\psi|^2 = 1$ und Stromdichte $j = \rho v_g = v_g$. Die Frage ist dann welchen Anteil des Flusses wird nach vorne oder zurück gestreut.

3.7.3 Barriere

Ein gutes Beispiel ist die Streuung auf einer rechteckigen Barriere (Fig. 3.1). Die potentielle Energie lautet $V(x) = 0$ für $x < 0$ (Bereich I) und $x > a$ (Bereich III), und $V(x) = V_0$ für $0 \leq x \leq a$ (Bereich II). Wir suchen nach Lösungen mit $E > 0$. Dann der Wellenvektor in Bereichen I und III ist gegeben durch

$$k_1 = k_3 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} . \quad (3.112)$$

Wir nehmen hier die positive Wurzel. Die negative Wurzel wird dann explizit berücksichtigt. Im Bereich II gilt

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} . \quad (3.113)$$

Für $E > V_0$ ist k_2 reell. Für $0 < E < V_0$ ist k_2 rein imaginär. Wir suchen nach einer Lösung die im Bereich I wie folgt aussieht

$$\psi_I(x) = e^{ik_1x} + r e^{-ik_1x} , \quad (3.114)$$

wobei r der Reflexion-Koeffizient ist. So eine Lösung entspricht der Situation wo eine ebene Welle der Amplitude eins von der linken Seite auf die Barriere geschickt wird. Die reflektierte Welle hat, dann, die Amplitude r . Im Bereich *III* erwarten wir

$$\psi_{III}(x) = t e^{ik_3(x-a)} . \quad (3.115)$$

Das entspricht dem Teil der Welle der transmittiert wurde. Letztendlich im Bereich II gilt

$$\psi_{II}(x) = A e^{ik_2x} + B e^{-ik_2x} . \quad (3.116)$$

Unseres Ziel ist r und t zu Bestimmen. Die Randbedingungen ergeben folgendes. Aus $\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$ folgt

$$1 + r = A + B . \quad (3.117)$$

Aus $\psi'_I(0) = \psi'_{II}(0)$ folgt

$$k_1(1 - r) = k_2(A - B) . \quad (3.118)$$

Aus $\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a)$ folgt

$$A e^{ik_2a} + B e^{-ik_2a} = t . \quad (3.119)$$

Aus $\psi'_{II}(a) = \psi'_{III}(a)$ folgt

$$k_2(A e^{ik_2a} - B e^{-ik_2a}) = k_3 t = k_1 t . \quad (3.120)$$

Aus den ersten zwei Randbedingungen (3.117,3.118) erhalten wir

$$A \left(1 + \frac{k_2}{k_1} \right) + B \left(1 - \frac{k_2}{k_1} \right) = 2 . \quad (3.121)$$

Aus den letzten zwei Randbedingungen (3.119,3.120) erhalten wir

$$A = \frac{te^{-ik_2a}}{2} \left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) \quad , \quad B = \frac{te^{ik_2a}}{2} \left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) \quad , \quad (3.122)$$

und

$$B = A e^{2ik_2a} \frac{k_2 - k_1}{k_2 + k_1} \quad . \quad (3.123)$$

Dann, aus (3.121) und (3.123) erhalten wir

$$A \left(1 + \frac{k_2}{k_1}\right) + A e^{2ik_2a} \frac{k_2 - k_1}{k_2 + k_1} \left(1 - \frac{k_2}{k_1}\right) = 2 \quad . \quad (3.124)$$

$$A(k_1 + k_2) - A e^{2ik_2a} \frac{(k_1 - k_2)^2}{k_1 + k_2} = 2k_1 \quad . \quad (3.125)$$

$$A(k_1 + k_2)^2 - A e^{2ik_2a} (k_1 - k_2)^2 = 2k_1(k_1 + k_2) \quad . \quad (3.126)$$

$$A = \frac{2k_1(k_1 + k_2)}{(k_1 + k_2)^2 - e^{2ik_2a} (k_1 - k_2)^2} \quad . \quad (3.127)$$

$$t = 2A e^{ik_2a} \frac{k_2}{(k_1 + k_2)} = \frac{4k_1k_2e^{ik_2a}}{(k_1 + k_2)^2 - e^{2ik_2a} (k_1 - k_2)^2} \quad . \quad (3.128)$$

$$t = \frac{2k_1k_2}{2k_1k_2 \cos(k_2a) - i(k_1^2 + k_2^2) \sin(k_2a)} \quad . \quad (3.129)$$

Für $E > V_0$ (k_2 reell) ergibt sich

$$|t|^2 = \frac{4k_1^2k_2^2}{4k_1^2k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2(k_2a)} = \frac{4E(E - V_0)}{4E(E - V_0) + V_0^2 \sin^2(k_2a)} \quad . \quad (3.130)$$

Für $E < V_0$ ($k_2 = i\kappa$) ergibt sich

$$|t|^2 = \frac{4k_1^2\kappa^2}{4k_1^2\kappa^2 + (k_1^2 + \kappa^2)^2 \sinh^2(\kappa a)} = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \sinh^2(\kappa a)} \quad . \quad (3.131)$$

Tief im Tunnel-Regime $E < V_0$, wenn gilt $\kappa a \gg 1$ (d.h. die Breite der Barriere ist groß genug), ergibt sich die exponentiell kleine Tunnel-Wahrscheinlichkeit

$$|t^2| \approx \frac{E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2\kappa a} \quad , \quad (3.132)$$

wobei

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad . \quad (3.133)$$

3.7.4 Gebundene Zustände

Übung

3.8 Harmonischer Oszillator

Der Hamilton-Operator lautet

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} . \quad (3.134)$$

Wir suchen nach Eigenzustände. Probieren wir zunächst die Gauß-Funktion

$$\psi(x) = N e^{-\frac{x^2}{4b^2}} , \quad (3.135)$$

wobei $N = (2\pi b^2)^{-1/4}$ und b noch zu bestimmen ist. Es ergibt sich

$$\begin{aligned} H\psi &= -\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + \frac{m\omega^2 x^2}{2}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dx} \left(-\frac{x}{2b^2}\psi \right) + \frac{m\omega^2 x^2}{2}\psi \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{2b^2}\psi - \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{x}{2b^2} \right]^2 \psi + \frac{m\omega^2 x^2}{2}\psi . \end{aligned} \quad (3.136)$$

Wenn die zwei letzten Terme verschwinden, erhalten wir einen Eigenzustand. Also

$$\frac{\hbar^2}{4mb^4} = m\omega^2 \quad \rightarrow \quad b^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} \quad (3.137)$$

und die Eigenenergie lautet

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{2b^2} = \frac{\hbar\omega}{2} . \quad (3.138)$$

Wir werden später zeigen, dass das der Grundzustand ist, d.h., der Zustand mit niedrigster Eigenenergie. In diesem Zustand $\langle x \rangle = 0$ und $(\Delta x)^2 = b^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}$. Wir nennen diesen Zustand $|0\rangle$. Also

$$|0\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \exp \left\{ -\frac{m\omega x^2}{2\hbar} \right\} , \quad (3.139)$$

$$H|0\rangle = \frac{\hbar\omega}{2} |0\rangle . \quad (3.140)$$

Algebraische Lösung Wir definieren

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x + \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}} p \quad (3.141)$$

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x - \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}} p \quad (3.142)$$

Wir berechnen

$$aa^\dagger = \frac{m\omega}{2\hbar} x^2 + \frac{1}{2\hbar m\omega} p^2 + \frac{i}{2\hbar} (px - xp) , \quad (3.143)$$

und

$$a^\dagger a = \frac{m\omega}{2\hbar} x^2 + \frac{1}{2\hbar m\omega} p^2 - \frac{i}{2\hbar} (px - xp) . \quad (3.144)$$

Also, wir erhalten

$$H = \frac{1}{2} \hbar\omega (a^\dagger a + aa^\dagger) , \quad (3.145)$$

und

$$aa^\dagger - a^\dagger a = \frac{i}{\hbar} (px - xp) = 1 . \quad (3.146)$$

Schließlich gilt

$$H = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) . \quad (3.147)$$

Wir nennen den Operator $N \equiv a^\dagger a$. Aus (3.140) folgt $N|0\rangle = 0$. Wir erhalten

$$[N, a^\dagger] = a^\dagger aa^\dagger - a^\dagger a^\dagger a = a^\dagger , \quad (3.148)$$

und

$$[N, a] = a^\dagger aa - aa^\dagger a = -a . \quad (3.149)$$

Operator N ist ein Hermitescher Operator und soll eine vollständige Basis der Eigenzustände haben. Wir fangen an mit dem Zustand $a^\dagger|0\rangle$. Wir erhalten

$$Na^\dagger|0\rangle = (a^\dagger + a^\dagger N)|0\rangle = a^\dagger|0\rangle . \quad (3.150)$$

Also, $a^\dagger|0\rangle$ ist ein Eigenzustand des Operators N mit dem Eigenwert 1. Seine Norm erhalten wir aus

$$\langle a^\dagger 0 | a^\dagger 0 \rangle = \langle 0 | aa^\dagger | 0 \rangle = \langle 0 | (1 + N) | 0 \rangle = 1 . \quad (3.151)$$

Wir nennen

$$|1\rangle = a^\dagger |0\rangle . \quad (3.152)$$

Für den Zustand gilt

$$N |1\rangle = |1\rangle \quad , \quad H |1\rangle = \frac{3\hbar\omega}{2} |1\rangle . \quad (3.153)$$

Analog untersuchen wir den Zustand $a^\dagger |1\rangle$. Wir erhalten

$$N a^\dagger |1\rangle = (a^\dagger + a^\dagger N) |1\rangle = 2 a^\dagger |1\rangle . \quad (3.154)$$

Wir normieren

$$\langle a^\dagger 1 | a^\dagger 1 \rangle = \langle 1 | a a^\dagger | 1 \rangle = \langle 1 | (1 + N) | 1 \rangle = 2 . \quad (3.155)$$

Also der normierte Zustand lautet

$$|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} a^\dagger |1\rangle \quad \text{oder} \quad a^\dagger |1\rangle = \sqrt{2} |2\rangle . \quad (3.156)$$

Es ist klar, dass es sich eine Reihe der Zustände $|n\rangle$ ergibt, sodass $N |n\rangle = n |n\rangle$. Durch das Normieren bekommen wir

$$\langle a^\dagger n | a^\dagger n \rangle = \langle n | a a^\dagger | n \rangle = \langle n | (1 + N) | n \rangle = n + 1 . \quad (3.157)$$

Also

$$a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle . \quad (3.158)$$

Den Zustand $|n\rangle$ erhält man aus dem Zustand $|0\rangle$ durch

$$|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle . \quad (3.159)$$

Als Nächstes untersuchen wir den Zustand $a |n\rangle$. Wir erhalten

$$a |n\rangle = \frac{a a^\dagger}{\sqrt{n}} |n-1\rangle = \frac{(N+1)}{\sqrt{n}} |n-1\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle . \quad (3.160)$$

Insbesondere $a |0\rangle = 0$.

Den Operator a^\dagger nennt man "Erzeugungsoperator" und den Operator a wird als "Vernichtungsoperator" genannt (alternativ Aufsteige- und Absteigeoperatoren oder Leiteroperatoren).

Wir haben also gezeigt, dass es eine Leiter der stationären Zustände $|n\rangle$ gibt, sodass

$$\hat{N} |n\rangle = n |n\rangle , \quad (3.161)$$

und

$$\hat{H} |n\rangle = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle . \quad (3.162)$$

Das ist eine vollständige Basis im Hilbertraum (L_2) (ohne Beweis).

3.9 Drehimpuls

Wir betrachten jetzt Teilchen in 3-D. Insbesondere werden wir uns interessieren für quantenmechanische Zustände im zentralsymmetrischen Potential (wie im Kepler-Problem), d.h., $V(\vec{r}) = V(|\vec{r}|)$. In der klassischen Mechanik eine wichtige Rolle wurde vom Drehimpuls gespielt. Das war (neben Energie) einer der Erhaltungsgrößen. Wir untersuchen nun den Drehimpuls in der Quantenmechanik.

Der Drehimpuls-Operator lautet

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} . \quad (3.163)$$

Komponentenweise gilt

$$L_x = yp_z - zp_y = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) . \quad (3.164)$$

$$L_y = zp_x - xp_z = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) . \quad (3.165)$$

$$L_z = xp_y - yp_x = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) . \quad (3.166)$$

Wir benutzen $[r_\alpha, p_\beta] = i\hbar\delta_{\alpha,\beta}$ sowie $[r_\alpha, r_\beta] = 0$ und $[p_\alpha, p_\beta] = 0$. Hier $(r_1, r_2, r_3) = (x, y, z)$ und $(p_1, p_2, p_3) = (p_x, p_y, p_z)$. Wir untersuchen den Kommutator

$$\begin{aligned} [L_x, L_y] &= [(yp_z - zp_y), (zp_x - xp_z)] = [yp_z, zp_x] + [zp_y, xp_z] \\ &= -i\hbar yp_x + i\hbar xp_y = i\hbar L_z . \end{aligned} \quad (3.167)$$

Analog

$$[L_y, L_z] = i\hbar L_x \quad \text{und} \quad [L_z, L_x] = i\hbar L_y . \quad (3.168)$$

3.9.1 Sphärische Koordinaten

In sphärischen Koordinaten haben wir $x = r \cos \theta \cos \phi$, $y = r \cos \theta \sin \phi$, $z = r \sin \theta$ und

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial \phi} &= \frac{\partial x}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial z} \\ &= -r \cos \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial x} + r \cos \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial y} \\ &= x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} = -\frac{L_z}{i\hbar} .\end{aligned}\tag{3.169}$$

Also

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} .\tag{3.170}$$

Es gilt auch (ohne Beweis)

$$L_x = i\hbar \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) ,\tag{3.171}$$

$$L_y = i\hbar \left(-\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) ,\tag{3.172}$$

Wir sehen, dass die r -Abhängigkeit der Wellenfunktion hier keine Rolle spielt, d.h., die Eigenfunktionen der \vec{L} Operatoren haben die Struktur

$$\psi(\vec{r}) = R(r)W(\theta, \phi) .\tag{3.173}$$

Die Eigenfunktionen des L_z -Operators sind einfach zu finden

$$L_z e^{im\phi} = \hbar m e^{im\phi} .\tag{3.174}$$

Es ist klar, dass m ganzzahlig ist $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Sonst wäre die Wellenfunktion nicht eindeutig. Wir nennen diese Zustände vorläufig $|m\rangle$.

3.9.2 Leiteroperatoren

Die sogenannten Leiter-Operatoren

$$L_{\pm} \equiv L_x \pm iL_y\tag{3.175}$$

spielen hier eine wichtige Rolle. Wir erhalten

$$[L_x, L_{\pm}] = [L_z, L_x \pm iL_y] = i\hbar L_y \pm \hbar L_x = \pm \hbar L_{\pm} . \quad (3.176)$$

Das ergibt

$$L_z L_+ |m\rangle = (L_+ L_z + \hbar L_+) |m\rangle = \hbar(m+1) L_+ |m\rangle . \quad (3.177)$$

Also der Zustand $L_+ |m\rangle = c |m+1\rangle$, wobei die Konstante c noch zu bestimmen ist.

3.9.3 Der Operator L^2

Wir definieren den Operator

$$L^2 = \vec{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 . \quad (3.178)$$

Man kann zeigen

$$[L^2, L_x] = [L^2, L_y] = [L^2, L_z] = 0 . \quad (3.179)$$

Eigenzustände von kommutierenden Operatoren Betrachten wir zwei Hermitesche Operatoren A und B die miteinander vertauschen $[A, B] = 0$. Dann haben die beiden einen gemeinsamen Satz von Eigenzustände. **Beweis:** Betrachten wir den Zustand $|a\rangle$, sodass $A|a\rangle = a|a\rangle$. Dann gilt

$$AB|a\rangle = BA|a\rangle = Ba|a\rangle = aB|a\rangle . \quad (3.180)$$

Also, $B|a\rangle$ ist auch ein Eigenzustand von A mit dem selben Eigenwert a . Falls $|a\rangle$ nicht entartet ist (der einzelne Zustand mit dem Eigenwert a), dann gilt $B|a\rangle \propto |a\rangle$, d.h., $|a\rangle$ ist Eigenzustand von B . Falls es eine Entartung gibt, d.h., $A|a_n\rangle = a|a_n\rangle$ ($n = 1, 2, \dots, N$), dann liegt $B|a_n\rangle$ im gleichen Subraum, d.h., $B|a_n\rangle = \sum_m |a_m\rangle \langle a_m| B|a_n\rangle$. Die Matrix $\langle a_m| B|a_n\rangle$ ist Hermitisch und lässt sich diagonalisieren. Das ergibt N Eigenzustände von B die alle gleichzeitig Eigenzustände von A mit dem Eigenwert a sind. Nun kann man die Eigenzustände mit zwei Quantenzahlen charakterisieren, und zwar a und b , $A|a, b\rangle = a|a, b\rangle$ und $B|a, b\rangle = b|a, b\rangle$. Wenn danach noch die Entartung gibt, d.h., es gibt mehrere Zustände die die gleichen a und b haben, muss man noch einen Operator C finden der mit A und B vertauscht. So geht's bis man den vollständigen Satz von kommutierenden Operatoren hat, so, dass es keine Entartung mehr gibt.

L^2 und L_z als vollständiger Satz kommutierender Operatoren Als vollständiger Satz der kommutierenden Operatoren wählen wir L^2 und L_z . Die Zustände werden $|l, m\rangle$ genannt. Es gilt (ohne Beweis)

$$L^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle . \quad (3.181)$$

$$L_z |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle . \quad (3.182)$$

Die Quantenzahl l ist positiv und ganzzahlig. Die Quantenzahl m kann die folgenden Werte annehmen

$$m = -l, -l+1, -l+2, \dots, l-2, l-1, l . \quad (3.183)$$

Die Eigenfunktionen sind die sogenannten Kugelfunktionen $Y_{l,m}(\theta, \phi)$.

3.10 Wasserstoffatom

Im Wasserstoffatom gibt es ein Proton mit Ladung $+e$ und ein Elektron mit Ladung $-e$. Wie im Kepler-Problem gehen wir erst in das Schwerpunkt-Bezugssystem über. Dann mit der relativen Koordinate $\vec{r} = \vec{r}_e - \vec{r}_p$ lautet der Hamilton-Operator

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{\nabla}_r)^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\vec{r}|} , \quad (3.184)$$

wobei

$$m = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \approx m_e \quad (3.185)$$

die reduzierte Masse ist. In Kugelkoordinaten erhält man

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\vec{r}|} . \quad (3.186)$$

Mit dem Ansatz

$$\psi = R(r) Y_{l,m}(\theta, \phi) \quad (3.187)$$

ergibt sich aus der Schrödinger-Gleichung $H\psi = E\psi$ die folgende Gleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\vec{r}|} \right] R(r) = ER(r) . \quad (3.188)$$

Es ergeben sich die Eigenzustände mit Eigenenergien

$$E_n = -\frac{E_{\text{Ry}}}{n^2} , \quad (3.189)$$

$n = 1, 2, 3, \dots$, wobei

$$E_{\text{Ry}} = \frac{1}{2} \frac{me^4}{(4\pi\epsilon)^2\hbar^2} \approx 13,6\text{eV} \quad (3.190)$$

die Rydberg Energie ist.

Für jede Quantenzahl n gibt es n^2 Zustände. Die erlaubte Werte von l für gegebenes n sind $l = 0, 1, \dots, n-1$. Für jedes l gibt es $2l+1$ Werte von m . Das Gesamtspektrum ist gegeben durch

$$|n, l, m\rangle . \quad (3.191)$$

Der vollständige Satz der kommutierenden Operatoren ist H, L^2, L_z .

3.11 Spin 1/2

Drehimpuls, Zusammenfassung Die Algebra der Drehimpuls-Operatoren ist gegeben durch

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z \quad , \quad [L_y, L_z] = i\hbar L_x \quad , \quad [L_z, L_x] = i\hbar L_y . \quad (3.192)$$

Die Eigenzustände $|l, m\rangle$ erfüllen die folgenden Relationen

$$L^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle . \quad (3.193)$$

$$L_z |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle . \quad (3.194)$$

Die Leiteroperatoren $L_{\pm} = L_x \pm iL_y$ wirken wie folgt (ohne Beweis)

$$L_+ |l, m\rangle = \hbar\sqrt{(l-m)(l+m+1)} |l, m+1\rangle \quad (3.195)$$

$$L_- |l, m\rangle = \hbar\sqrt{(l+m)(l-m+1)} |l, m-1\rangle \quad (3.196)$$

Wir beobachten, dass $L_+ |l, m=l\rangle = 0$ sowie $L_- |l, m=-l\rangle = 0$. Das ergibt die Einschränkung $m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$.

Spin Für den Bahn-Drehimpuls gilt $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$, die Eigenfunktionen sind die Kugelfunktionen $|l, m\rangle = Y_{l,m}(\theta, \phi)$. Die Eigenfunktionen von $L_z = -i\hbar\partial/\partial\phi$ sind proportional zu $e^{im\phi}$ und wir sehen, dass $m \in \mathbb{Z}$.

Jedoch, alle algebraischen Relationen könnte man auch mit halbzahligen m und l erfüllen. Z.B., mit $l = 1/2$ hätte $m = -1/2, 1/2$. Genauso mit $l = 3/2$ hätte man $m = -3/2, -1/2, 1/2, 3/2$. Solche Wellenfunktionen existieren aber nicht in der Form $\psi(\vec{r})$. Man braucht einen anderen Hilbert-Raum (oder andere Darstellung). Den Drehimpuls, der kein Bahn-Drehimpuls ist nennt man Spin. Um vom Bahn-Drehimpuls unterscheiden zu können bezeichnet man den Spin-Operator \vec{S} statt \vec{L} . Die Quantenzahl l nennt man jetzt s . Die Quantenzahl darf halbzahlige oder ganzzahlige Werte annehmen: $s = 1/2, 1, 3/2, 2, 5/2, 3, \dots$

Für $s = 1/2$ ist der Hilbert-Raum besonders einfach. Die Basis besteht nur aus zwei Zuständen: $|s = 1/2, m = 1/2\rangle = |\uparrow\rangle$ und $|s = 1/2, m = -1/2\rangle = |\downarrow\rangle$. Man stellt diese zwei Zustände als Objekte (Spinoren) mit zwei Komponenten dar: $|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ and $|\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ Die beiden Zustände sind Eigenzustände des Operators

$$S_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} . \quad (3.197)$$

Wir erhalten

$$S_z |\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle \quad \text{und} \quad S_z |\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle . \quad (3.198)$$

Der gesamt Spin-Operator lautet

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} , \quad (3.199)$$

wobei die Pauli-Matrizen sind gegeben durch

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.200)$$

Man kann sich überzeugen, dass alle Vertausch-Relationen erfüllt sind. Für die Leiter-Operatoren erhalten wir

$$S_+ = S_x + iS_y = \frac{\hbar}{2} \left(\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \right) = \hbar\sigma_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} , \quad (3.201)$$

und

$$S_- = S_x - iS_y = \frac{\hbar}{2} \left(\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \right) = \hbar \sigma_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} . \quad (3.202)$$

Ein beliebiger Zustand kann wie folgt zerlegt werden:

$$|u\rangle = \alpha |\uparrow\rangle + \beta |\downarrow\rangle , \quad (3.203)$$

wobei $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Da die globale Phase unwichtig ist können wir einen beliebigen Zustand durch zwei reelle Parameter (Winkeln) parametrisieren:

$$\alpha = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) , \quad \beta = e^{i\varphi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) , \quad (3.204)$$

wobei $\theta \in [0, \pi]$ und $\varphi \in [0, 2\pi]$. Wir erhalten $\langle\psi|\sigma_z|\psi\rangle = \cos^2\frac{\theta}{2} - \sin^2\frac{\theta}{2} = \cos\theta$. Auch $\langle\psi|\sigma_x|\psi\rangle = \sin\theta\cos\varphi$ und $\langle\psi|\sigma_y|\psi\rangle = \sin\theta\sin\varphi$. Wir beobachten, dass $\langle\vec{\sigma}\rangle$ in Richtung θ, φ zeigt.

Postulat: Ein Elektron hat Spin $1/2$. Der Hilbertraum ist ein direktes Produkt $L_2 \otimes (\text{Spin} - 1/2)$. Die Wellenfunktionen haben zwei Komponenten: $\psi_\uparrow(\vec{r})$ und ψ_\downarrow oder in der Spinor-Form

$$|\psi, \sigma\rangle = \begin{pmatrix} \psi_\uparrow(\vec{r}) \\ \psi_\downarrow(\vec{r}) \end{pmatrix} . \quad (3.205)$$

3.12 Periodensystem der Elemente

3.12.1 Pauli-Prinzip

Elektronen sind Fermionen. Jeder Zustand kann nur von einem einzelnen (oder von keinem) Fermion besetzt sein.

3.13 Spin 1/2, Dynamik

3.13.1 Magnetisches Moment

Eine drehende Ladung entspricht einer Strom-Schleife und, deswegen, einem magnetischen Moment. Das magnetische Moment einer Stromschleife ist ein

Vektor senkrecht der Schleife mit der Amplitude

$$\mu = I \cdot A , \quad (3.206)$$

wobei I ist der Strom und A - die Fläche der Schleife. Für eine kreisartige Schleife mit einem Elektron mit Geschwindigkeit v und Radius r erhalten wir: $I = qv/(2\pi r)$ und $A = \pi r^2$. Das ergibt

$$\mu = \frac{qvr}{2} . \quad (3.207)$$

In der Vektor-Form gilt

$$\vec{\mu} = \frac{q}{2} (\vec{r} \times \vec{v}) = \frac{q}{2m} (\vec{r} \times \vec{p}) = \frac{q}{2m} \vec{L} . \quad (3.208)$$

Die Energie eines magnetischen Momentes im Magnetfeld lautet

$$H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} . \quad (3.209)$$

3.13.2 Gyromagnetisches Verhältnis

Das Elektron hat den gesamt Drehimpuls

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} . \quad (3.210)$$

Das Elektron hat die Ladung $q = -e$. Das mit dem Bahn-Drehimpuls verknüpfte magnetische Moment lautet

$$\vec{\mu}_L = -\frac{e}{2m} \vec{L} = -\frac{\mu_B}{\hbar} \vec{L} . \quad (3.211)$$

Hier $\mu_B \equiv \frac{\hbar e}{2m}$ ist das sogenannte Bohr-Magneton. Der Spin ist auch ein Drehimpuls. Jedoch, für den Spin gilt

$$\vec{\mu}_S = -\frac{g\mu_B}{\hbar} \vec{S} , \quad (3.212)$$

wobei $g = 2$ ist das sogenannte gyromagnetisches Verhältnis. Das gesamt magnetische Moment eines Elektrons lautet

$$\vec{\mu} = -\frac{\mu_B}{\hbar} (\vec{L} + 2\vec{S}) . \quad (3.213)$$

Die Tatsache, dass für den Spin $g = 2 \neq 1$ bedeutet, dass es zu naive ist den Spin als Drehung des Elektrons sich vorzustellen.

3.13.3 Spin-Präzession

Der Hamilton-Operator eines Spins im Magnetfeld lautet

$$H = -\vec{\mu}_S \cdot \vec{B} = \frac{g\mu_B}{\hbar} \vec{S} \cdot \vec{B} = \frac{g\mu_B}{2} \vec{B} \cdot \vec{\sigma}. \quad (3.214)$$

Wir können immer die Richtung von \vec{B} als \vec{z} wählen. Dann erhalten wir

$$H = \frac{g\mu_B B}{2} \sigma_z = \frac{\hbar\omega_B}{2} \sigma_z, \quad (3.215)$$

wobei

$$\omega_B = \frac{g\mu_B B}{\hbar}. \quad (3.216)$$

Die Eigenzustände und Eigenenergien des Hamilton-Operators lauten

$$H |\uparrow\rangle = \frac{\hbar\omega_B}{2} \sigma_z |\uparrow\rangle = \frac{\hbar\omega_B}{2} |\uparrow\rangle, \quad (3.217)$$

und

$$H |\downarrow\rangle = \frac{\hbar\omega_B}{2} \sigma_z |\downarrow\rangle = -\frac{\hbar\omega_B}{2} |\downarrow\rangle, \quad (3.218)$$

Für den Anfangszustand

$$|u(t=0)\rangle = \alpha |\uparrow\rangle + \beta |\downarrow\rangle \quad (3.219)$$

mit

$$\alpha = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right), \quad \beta = e^{i\varphi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (3.220)$$

erhalten wir

$$|u(t)\rangle = \alpha e^{-\frac{\omega_B t}{2}} |\uparrow\rangle + \beta e^{\frac{\omega_B t}{2}} |\downarrow\rangle. \quad (3.221)$$

Das ergibt

$$\begin{aligned} |u(t)\rangle &= e^{-\frac{\omega_B t}{2}} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |\uparrow\rangle + e^{\frac{\omega_B t}{2}} e^{i\varphi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |\downarrow\rangle \\ &= e^{-\frac{\omega_B t}{2}} \left[\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |\uparrow\rangle + e^{i(\varphi + \omega_B t)} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |\downarrow\rangle \right]. \end{aligned} \quad (3.222)$$

Da die Gesamtphase unwichtig ist ist der neue Zustand durch die zwei Winkeln

$$\theta(t) = \theta, \quad \phi(t) = \phi + \omega_B t \quad (3.223)$$

gegeben. Wir erhalten Präzession des Spins um die z -Achse (die Richtung des Magnetfeldes).

3.14 Stern-Gerlach-Experiment, Quantenmessprozess

3.15 Quanteninformationsverarbeitung