Darstellungen

- Def. U ist eine Darstellung von $SO(3)$ auf dem Vektorraum $\mathcal{H}$, falls

$$U: SO(3) \to \mathcal{L}(\mathcal{H}) = \{\text{lin. Abb. } \mathcal{H} \to \mathcal{H}\}$$
$$R \mapsto U(R)$$

ein Homomorphismus ist

$$U(R_1)\,U(R_2) = U(R_1 R_2) \quad , \quad U(\mathbb{1}) = \mathbb{1} .$$

Ist $\mathcal{H}$ ein Hilbertraum und $U(R)^{-1} = U(R)^*$, so heisst U unitär.

- Jede Darstellung von $SO(3)$ induziert eine von $so(3)$ durch

$$U(\Omega) = \frac{d}{dt} U(R(t))\Big|_{t=0} \qquad (\Omega, R(t) \text{ wie vorh}$$

$$\to \qquad U([\Omega_1, \Omega_2]) = [U(\Omega_1), U(\Omega_2)] \qquad \langle *$$

Dabei ist $U(R)$ durch $U(\Omega)$ bestimmt:

$$U(e^{\Omega t}) = e^{U(\Omega)t}$$

(Nicht jede Darstellung von $so(3)$ muss aus einer von $SO(3)$ stammen!)

* Falls U unitär, so $U(\Omega)^* = -U(\Omega)$

- $U(R)$ unitär $\rightarrow$ $U(\Omega)^* = -U(\Omega)$

Selbstadjungiert sind

$M(\vec{\omega}) := i\,U(\Omega(\vec{\omega}))$, insb. für $\vec{\omega} = \vec{e}_i$:

$$M_i = i\,U(\Omega_i)$$

$\rightarrow$ $[M_1, M_2] = i M_3$ & zykl.

- Eine Darstellung heisst <u>irreduzibel</u> falls $\{0\}$, $\mathcal{H}$ die einzigen invarianten Teilräume sind.

- Jede (endlich dim.) Darstellung zerfällt in eine direkte Summe irreduzibler.

- <u>Heute</u>: Klassifiziere alle iDs der $so(3)$ (damit sind auch die der $SO(3)$ erfasst).

$SO(3)$ und $so(3)$

- $so(3)$ besteht aus "infinitesimalen Drehungen"

$$\Omega = \frac{d}{dt} R(t)\Big|_{t=0}$$

wobei $R(t) \in SO(3)$ diff.bar mit $R(0) = 1$
Bsp: $R(t)$ 1-param. Gruppe. Dann $R(t) = e^{\Omega t}$.

- $so(3)$ ist (reelle) Lie-Algebra: reeller Vektorraum mit dem antisymm. Produkt

$$[\Omega_1, \Omega_2] = \Omega_1 \Omega_2 - \Omega_2 \Omega_1 \quad ;$$

zudem

$$R \Omega R^{-1} \in so(3) \qquad (\Omega \in so(3), R \in SO(3))$$

- $\Omega \in so(3)$ ist von der Form $\Omega = \Omega(\vec{\omega})$:

$$\Omega(\vec{\omega}) \vec{x} = \vec{\omega} \wedge \vec{x} \qquad \text{für ein } \vec{\omega} \in \mathbb{R}^3$$

$\rightarrow \quad [\Omega(\vec{\omega}_1), \Omega(\vec{\omega}_2)] = \Omega(\vec{\omega}_1 \wedge \vec{\omega}_2)$

bzw. mit $\Omega_i := \Omega(\vec{e}_i)$

$$[\Omega_1, \Omega_2] = \Omega_3 \quad \& \text{ zykl.}$$

Drehung $R \in SO(3)$, $\vec{x} \mapsto R\vec{x}$ $(\vec{x} \in \mathbb{R}^3)$

Zustand $\psi \in \mathcal{H}$ eines q.m. Systems transformiert dabei gemäss

$$\psi \longmapsto U(R)\psi,$$

wobei $U(R)$ eine <u>Darstellung</u> von $SO(3)$ ist:

$$U: SO(3) \to \{\text{lin. Abb. } \mathcal{H} \to \mathcal{H}\}$$
$$R \mapsto U(R)$$

$$U(R_1)U(R_2) = U(R_1 R_2), \quad U(\mathbb{1}) = 1,$$

die <u>unitär</u> ist: $U(R)^{-1} = U(R)^*$.

Bemerkung: Zustand in der QM ist eine Äquivalenzklasse von Vektoren

$$[\psi] = \{ e^{i\alpha}\psi \mid \psi \in \mathcal{H}, \|\psi\| = 1, \alpha \in \mathbb{R} \}$$

$\rightarrow$ Darstellung der $SO(3)$ auf $\mathcal{H}$ muss bloss eine <u>projektive</u> sein : $U(R)$ nur bis auf Phase definiert.

<u>Def.</u> Eine (unitäre) Darstellung U der Lie-Algebra $so(3)$ in $\mathcal{H}$ ist eine Abbildung

$$U : so(3) \longrightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}) = \{\text{lin. Abb. } \mathcal{H} \to \mathcal{H}\}$$
$$\Omega \longmapsto U(\Omega)$$

mit

$$U(\alpha_1 \Omega_1 + \alpha_2 \Omega_2) = \alpha_1 U(\Omega_1) + \alpha_2 U(\Omega_2)$$
$$(\alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{R})$$

$$U([\Omega_1, \Omega_2]) = [U(\Omega_1), U(\Omega_2)]$$

$$U(\Omega)^* = -U(\Omega).$$

Beachte: Def. setzt <u>nicht</u> voraus, dass U durch eine Darstellung der $SO(3)$ induziert wird,

$$U(\Omega) = \frac{d}{dt} U(R(t)) \Big|_{t=0}$$

für $\Omega = dR(t)/dt \,|_{t=0}$, $R(0) = \mathbb{1}$.

Jede Darstellung der $SO(3)$ induziert eine der $so(3)$ mittels

$$U(\Omega) = \frac{d}{dt} U(R(t))\Big|_{t=0}$$

falls $\Omega = \frac{dR(t)}{dt}\Big|_{t=0}$, $(R(0) = 1)$. Dabei ist $U(R)$ durch $U(\Omega)$ bestimmt:

$$U(e^{\Omega t}) = e^{U(\Omega) t}$$

Aber: Nicht jede Darstellung der $so(3)$ wird so induziert. Unter den Irreduziblen

$$D_j, \qquad (j = 0, \tfrac{1}{2}, 1, \tfrac{3}{2}, \dots)$$

nur jene mit j <u>ganzzahlig</u>.

SU(2) und su(2)

- $SU(2) = \{ V$ kompl. 2x2 Matrix $\mid V^* V = 1, \det V = 1 \}$
  mit Lie-Algebra (infinitesimale Elemente)
  $su(2) = \{ A$ kompl. 2x2 Matrix $\mid A^* + A = 0, \, \mathrm{sp}\, A = 0 \}$
  $$[A_1, A_2] = A_1 A_2 - A_2 A_1$$

Zudem

$$V A V^* \in su(2) \quad , \quad (A \in su(2), \, V \in SU(2))$$

- $A \in su(2)$ ist von der Form $A = A(\vec{a})$
  $$A(\vec{a}) = \frac{-i}{2} \begin{pmatrix} a_3 & a_1 - i a_2 \\ a_1 + i a_2 & -a_3 \end{pmatrix} = \frac{-i}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{a}$$
  mit $\vec{a} = (a_1, a_2, a_3) \in \mathbb{R}^3$.
  $$\rightarrow \quad [A(\vec{a}), A(\vec{b})] = A(\vec{a} \wedge \vec{b})$$
  bzw. mit $A_i = A(\vec{e}_i)$
  $$[A_1, A_2] = A_3 \quad \& \text{ zykl.}$$

$\rightarrow$ su(2) und so(3) sind isomorph über

$$su(2) \rightarrow so(3) \quad , \quad A(\vec{\omega}) \mapsto \Omega(\vec{\omega})$$

Die iDs der su(2) sind die D_j's $(j = 0, \frac{1}{2}, 1, \ldots)$

• Jede Ds von $SU(2)$ induziert eine von $su(2)$ durch

$$U(A) = \frac{d}{dt} U(V(t))\Big|_{t=0} ,$$

falls $A = \frac{d}{dt} V(t)\Big|_{t=0}$, $(V(0) = 1)$. Dabei ist $U(V)$ durch $U(A)$ bestimmt:

$$U(e^{At}) = e^{U(A)t}$$

• Bsp: fundamentale Ds der $SU(2)$: $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$, $U(V) = V$, bzw. $U(A) = A$. Entspricht $\mathcal{D}_{1/2}$.

• <u>Satz</u> Jeder Ds $\mathcal{D}_j$ $(j = 0, \frac{1}{2}, 1, \ldots)$ der $su(2)$ entspricht eine, U_j, der $SU(2)$. Dabei gilt

$$U_j(-V) = (-1)^{2j} U_j(V).$$

$$A \in su(2) \iff A = A(\vec{a}) = -\frac{i}{2}\sum_{j=1}^{3} \sigma_j a_j \equiv -\frac{i}{2}\vec{\sigma}\cdot\vec{a} \qquad (\vec{a} \in \mathbb{R}^3)$$

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_1 \sigma_2 = i\sigma_3 \quad \& \text{ zykl.}$$

Lie-Algebra <u>Isomorphismus</u>

$$SU(2) \to SO(3)$$

$$A(\vec{a}) \mapsto \Omega(\vec{a}), \qquad \Omega(\vec{a})\vec{x} = \vec{a} \wedge \vec{x}$$

insb. $A_j := A(\vec{e}_j) = -\frac{i}{2}\sigma_j \mapsto \Omega_j := \Omega(\vec{e}_j)$

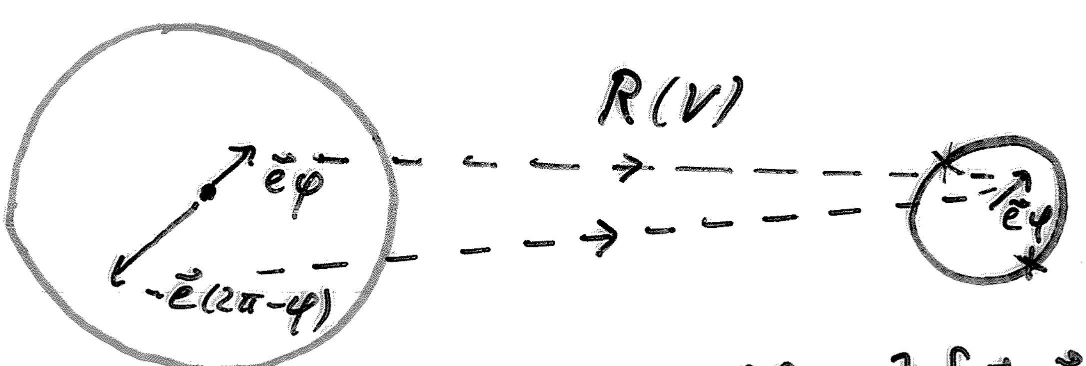
Gruppen <u>Homomorphismus</u>

$$SU(2) \to SO(3)$$

$$V \mapsto R, \qquad V A(\vec{a}) V^* = A(R\vec{a})$$

$$\text{Kern} = \{\pm 1\}, \qquad R(-V) = R(V)$$

$$SO(3) \cong SU(2)/\{\pm \mathbb{1}\}$$



$$SU(2) \cong \{\vec{x} = \vec{e}\varphi \mid |\varphi| \leq 2\pi\}$$
mit Rand ≡ 1 Punkt

$$SO(3) \cong \{\vec{x} = \vec{e}\varphi \mid |\varphi| \leq \pi\}$$
mit identifizierten Diametralpunkten

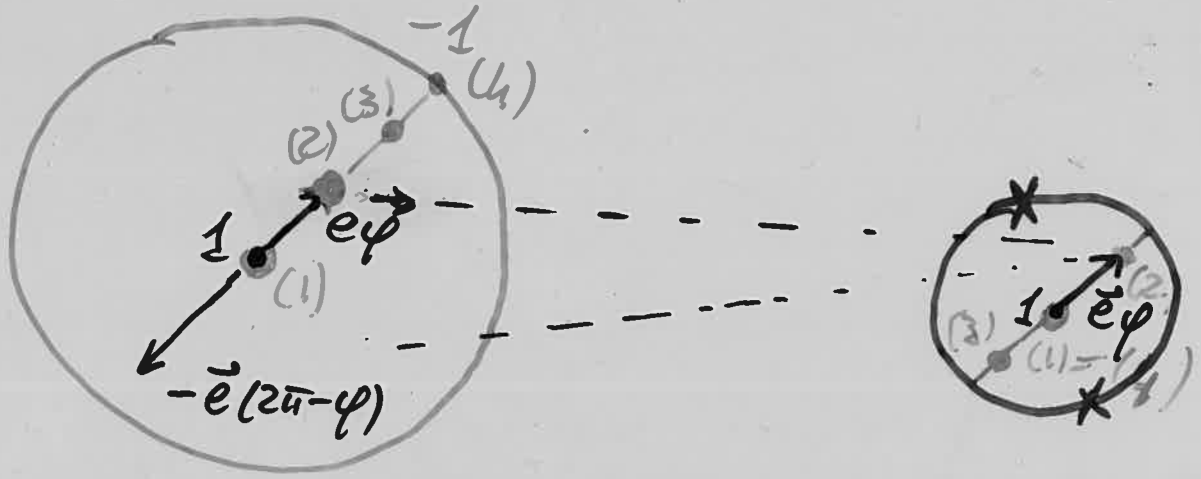
[Die fundamentale Darstellung der]
so(3) als Darstellung der su(2)

$$R : su(2) \longrightarrow so(3)$$
$$A(\vec{a}) \longmapsto \Omega(\vec{a})$$

$$\left(A(\vec{a}) = \frac{-i}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{a} \quad , \quad \Omega(\vec{a}) \vec{x} = \vec{a} \wedge \vec{x} \right)$$

Äquivalent: $A \longmapsto \Omega$ bestimmt durch

$$[A, A(\vec{b})] = A(\Omega \vec{b}) \quad , \quad (\vec{b} \in \mathbb{R}^3)$$



$SU(2) \cong \{\vec{x} = \vec{e}\varphi \,|\, 0 \le \varphi \le 2\pi\}$

mit Rand $\equiv$ 1 Punkt

$$V = 1\cos\frac{\varphi}{2} - i(\vec{\sigma}\cdot\vec{e})\sin\frac{\varphi}{2}$$

$$= V(\vec{e},\varphi)$$

$$= -V(-\vec{e}, 2\pi-\varphi)$$

$SU(2)$ ist einfach zusammenhängend

$SO(3) \cong \{\vec{x} = \vec{e}\varphi \,|\, 0 \le \varphi \le \pi\}$

mit identifizierten Diametralpunkten

$$R = R(\vec{e},\varphi)$$

$$= R(-\vec{e}, 2\pi-\varphi)$$

$SO(3)$ ist nicht einfach zusammenhängend

(ist zweifach zusammenhängend)

Zusammengesetzte Systeme:

Tensorprodukt

Klassisch: Systeme 1,2 mit Zuständen/ Zustandsräumen $z_i \in \mathcal{S}_i$, $(i=1,2)$.
Zusammengesetztes System

$$(z_1, z_2) \in \mathcal{S}_1 \times \mathcal{S}_2 \qquad \text{(kart. Prod.)}$$

Quantenmechanisch: Aus $\mathcal{H}_1$, $\mathcal{H}_2$ wird nicht $\mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2 = \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2$, sondern das Tensorprodukt

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$$

"Praktische" Definition: $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ ist ein Hilbertraum

- mit Abbildung

$$\mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2 \longrightarrow \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$$
$$(\psi_1, \psi_2) \longmapsto \psi_1 \otimes \psi_2$$

Bilinear: linear in ψ_1 und in ψ_2

→ Nebst "typischen Tensoren" $\psi_1 \otimes \psi_2$ enthält $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ auch Superpositionen

$$\psi_1 \otimes \psi_2 + \varphi_1 \otimes \varphi_2$$

- Skalarprodukt

$$(\psi_1 \otimes \psi_2, \varphi_1 \otimes \varphi_2) := (\psi_1, \varphi_1)(\psi_2, \varphi_2)$$

und (Anti-) Linearität.

Tensorprodukt von Operatoren A_i auf $\mathcal{H}_i$:

$$A_1 \otimes A_2 \quad \text{auf} \quad \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 ,$$

definiert durch

$$(A_1 \otimes A_2)(\psi_1 \otimes \psi_2) = A_1\psi_1 \otimes A_2\psi_2$$

und Linearität.

<u>Satz</u> Die endlich dimensionalen iDs, $\mathcal{D}_j$, der $SO(3)$ sind parametrisiert durch

$$j = 0, \tfrac{1}{2}, 1, \tfrac{3}{2}, \ldots$$

Es gilt

$$\dim \mathcal{D}_j = 2j+1$$

$$\vec{M}^2 \psi = j(j+1)\psi \qquad (\psi \in \mathcal{D}_j)$$

<u>Bemerkung</u> Von $SO(3)$ stammen nur die Ds mit j <u>ganzzahlig</u>

Clebsch-Gordon Reihe:

$$\mathcal{D}_{j_1} \otimes \mathcal{D}_{j_2} = \mathcal{D}_{j_1+j_2} \oplus \mathcal{D}_{j_1+j_2-1} \oplus \cdots \oplus \mathcal{D}_{|j_1-j_2|}$$

Irreduzible Darstellung $\mathcal{D}_j$:

Ausgezeichnete Basis* (orthonormiert)

$$\{|j,m\rangle\}_{m=-j}^{j}$$

mit

$$\vec{M}^2 |j,m\rangle = j(j+1) |j,m\rangle$$

$$M_3 |j,m\rangle = m |j,m\rangle$$

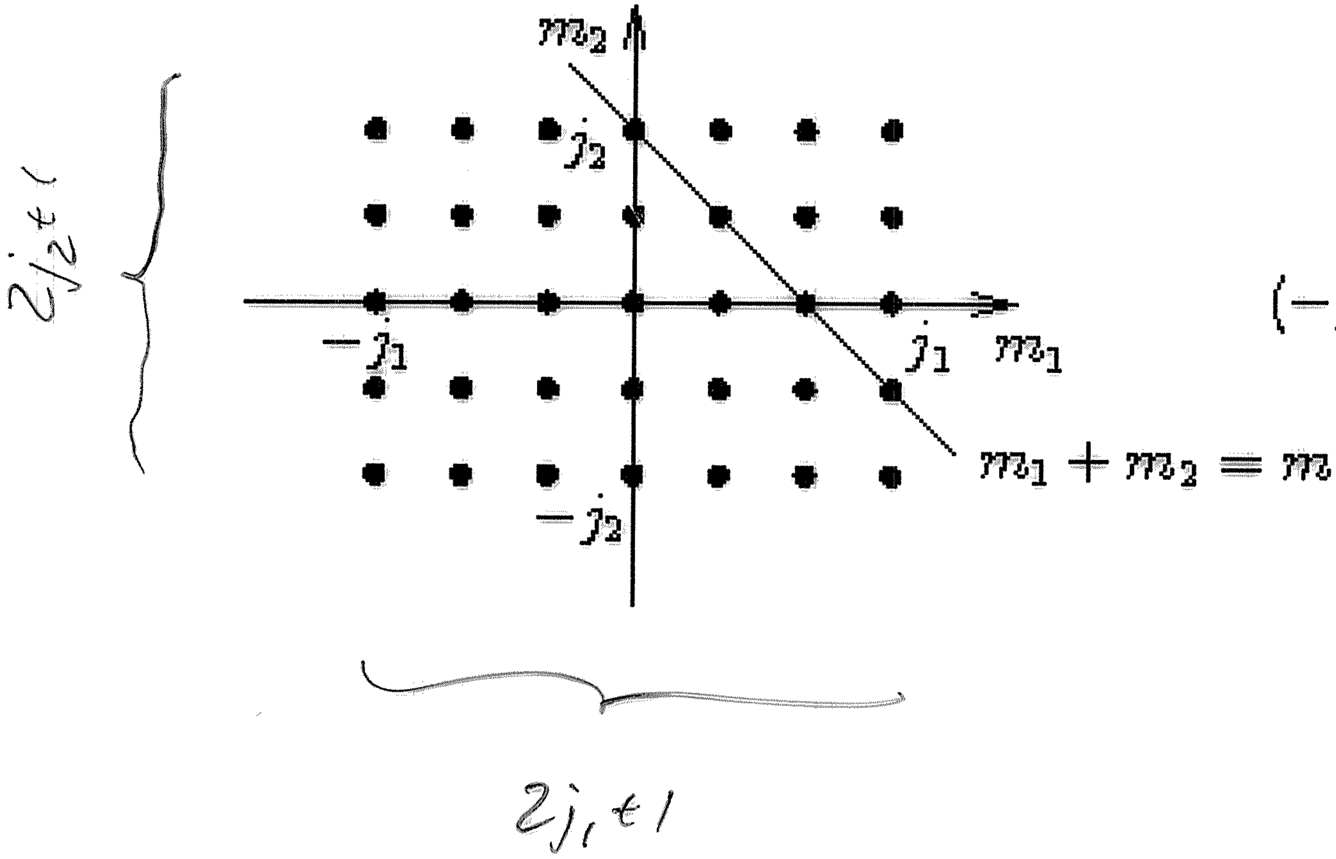
$$M_\pm |j,m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)} \, |j,m\pm 1\rangle$$

für $M_\pm = M_1 \pm i M_2$

Basis eindeutig bis auf Phase von $|j,j\rangle$.

* Normalbasis

$$\dim \mathcal{D}_j = 2j+1$$



$(-j_i \leq m_i \leq j_i,\ i = 1, 2)$

$(j_1 > j_2)$

Spin: Freiheitsgrad mit $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$
und (fundamentale) Darstellung
$U(V) = V$ der $SU(2) \ni V$
($\rightarrow$ Darst. ist $\mathcal{D}_{1/2}$)

Drehimpuls (Spin) $\vec{S} = \hbar \vec{M}$
mit $\vec{M}\cdot\vec{e}$ Erzeugende der Drehungen um Achse $\vec{e}$:

$$\vec{M}\cdot\vec{e} = i\, A(\vec{e}) = \frac{1}{2}\vec{\sigma}\cdot\vec{e}$$

(aufgrund des Isomorphismus $so(3) \rightarrow su(2)$,
$\Omega(\vec{e}) \longrightarrow A(\vec{e})$)

$$\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) \quad \text{Pauli-Matrizen}$$

$$M_3 = \frac{\sigma_3}{2} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},\ M_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},\ M_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Normalbasis $|j=\frac{1}{2}, m\rangle$ ($m = \pm 1/2$) ist Standardbasis für $\mathbb{C}^2$:

$$|\vec{e}_3\rangle = |\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},\quad |-\vec{e}_3\rangle = |\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Bahn und Spin

Hilbertraum eines Elektrons

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^2$$

$$\underset{\text{Bahn}}{\uparrow} \qquad \qquad \underset{\text{Spin}}{\uparrow}$$

mit Darstellung

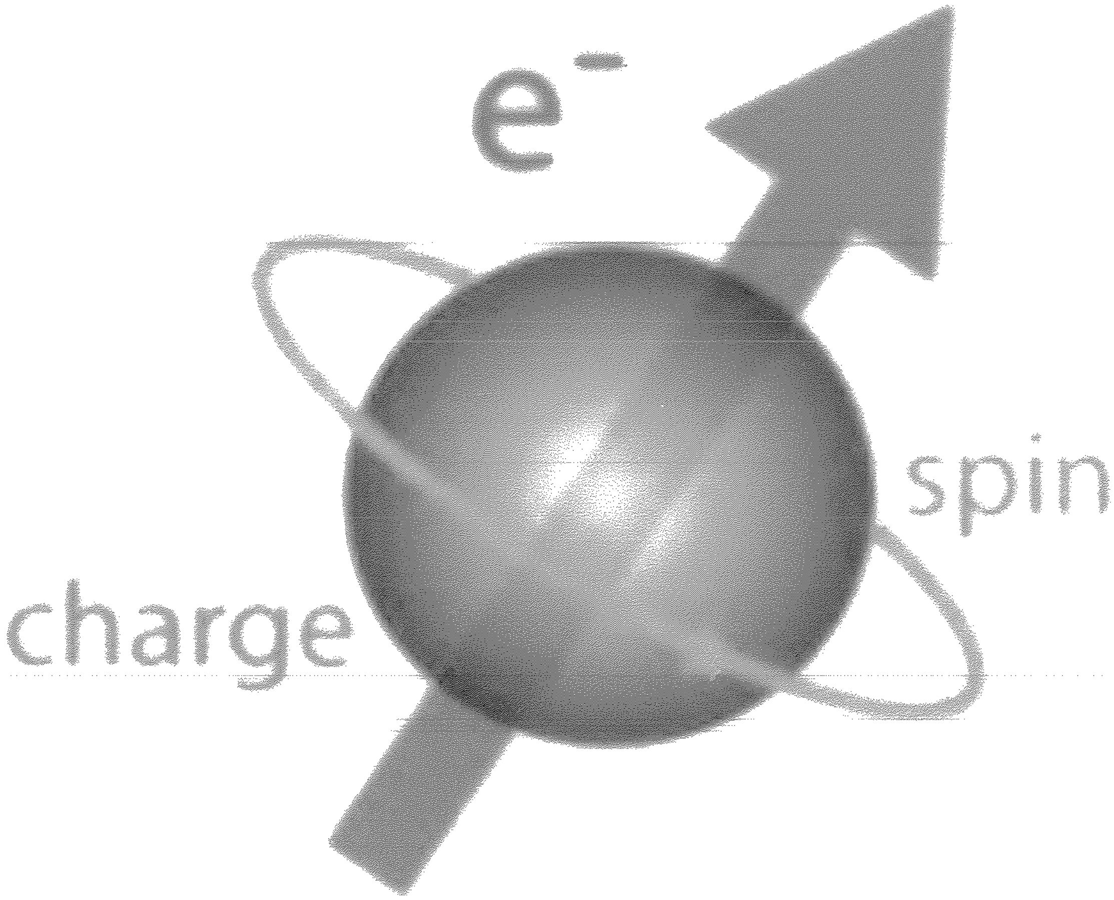
$$U(V) = U(R(V)) \otimes V$$

$$\left((U(R)\psi)(\vec{x}) = \psi(R^{-1}\vec{x}) \;,\; \psi \in L^2(\mathbb{R}^3) \right)$$

Gesamtdrehimpuls

$$\vec{J} = \vec{L} \otimes 1 + 1 \otimes \vec{S}$$

$$\underset{\text{Bahndrehimpuls}}{\uparrow} \qquad \qquad \underset{\text{Spindrehimpuls}}{\uparrow}$$


e⁻
spin
charge

Beispiel: Spin $\frac{1}{2}$:

Vollständig gemischter Zustand

$$P = \frac{1}{2}\,|\vec{e}_3\rangle\langle\vec{e}_3| + \frac{1}{2}\,|-\vec{e}_3\rangle\langle-\vec{e}_3| = \frac{1}{2}\,\mathbb{1}$$

ist <u>verschieden</u> von jedem reinen Zustand $|\psi\rangle$.

Denn: Messung des Spins in Rtg $\vec{e}$

- In P:

$+\frac{\hbar}{2}$ mit W'keit $\frac{1}{2}\,|\langle\vec{e}\,|\vec{e}_3\rangle|^2 + \frac{1}{2}\,|\langle\vec{e}\,|-\vec{e}_3\rangle|^2 = \frac{1}{2}$

$-\frac{\hbar}{2}$ " $= \frac{1}{2}$

<u>unabhängig</u> von $\vec{e}$

- In $|\psi\rangle$

$+\frac{\hbar}{2}$ mit W'keit $|\langle\vec{e}\,|\psi\rangle|^2$

$-\frac{\hbar}{2}$ " $|\langle-\vec{e}\,|\psi\rangle|^2$

<u>abhängig</u> von $\vec{e}$

Gemischter Zustand

$$P = \sum_k w_k |\varphi_k\rangle\langle\varphi_k|$$

- Präparation von P: Präpariere $|\varphi_k\rangle$ mit W'keit w_k

- Erwartungswerte von A im Zustand P

$$\langle A\rangle_P = \sum_k w_k \langle\varphi_k|A|\varphi_k\rangle$$

$$= \mathrm{tr}(PA)$$

Insbesondere: ja/nein-Observable (Ereignis) ($A = A^2$): Whkeit des Eintretens

$$W = \mathrm{tr}(PA).$$

- Dynamik: $|\varphi_k\rangle \mapsto |\varphi_k(t)\rangle$ mit

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

$$\to \quad i\hbar\frac{d}{dt}P = \sum_k w_k \left(H|\varphi_k\rangle\langle\varphi_k| - |\varphi_k\rangle\langle\varphi_k|H\right)$$

$$= [H, P]$$ (Liouville-von Neumann)

Allgemeines QM – System

- (Reine) Zustände

$$|\psi\rangle \quad \longleftrightarrow \quad P = |\psi\rangle\langle\psi|$$

(bis auf Phase) Projektor, Dim = 1

Dem klassischen Begriff der statistischen Mischung entsprechend

- Gemischte Zustände

Dichtematrizen, d.h. Operatoren P mit

$$P = P^*, \quad P \geq 0, \quad \operatorname{tr} P = 1$$

Spektraldarstellung:

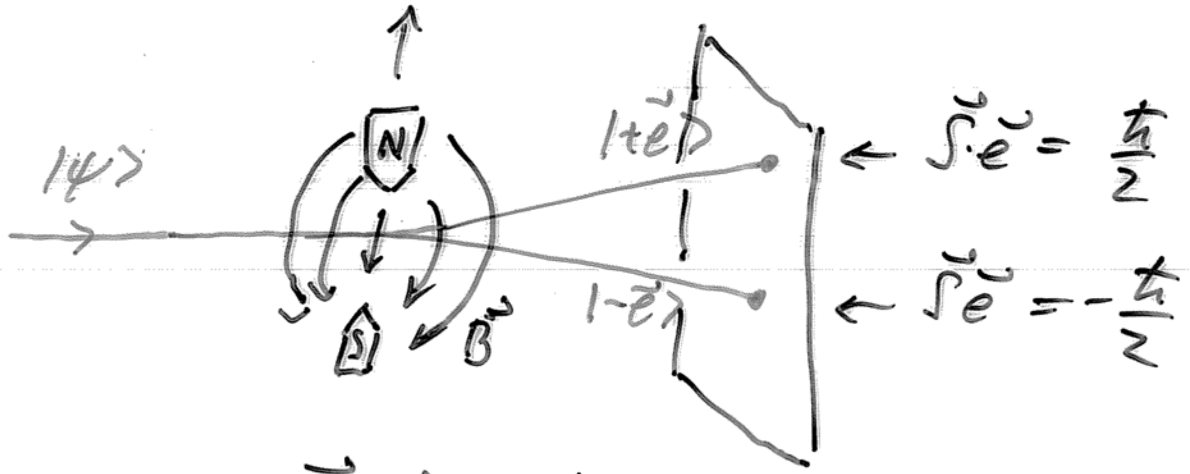
$$P = \sum_k w_k\, |\varphi_k\rangle\langle\varphi_k|$$

mit $w_k \geq 0$, $\sum_k w_k = 1$

→ Interpretation:
P ist die (inkohärente) Mischung der reinen Zustände $|\varphi_k\rangle$ mit W'keiten w_k.

Spin $\frac{1}{2}$ - Teilchen, Spinkomponente in Rtg $\vec{e}$

- gemessen mit Stern-Gerlach-Analysator (Achse $\vec{e}$)



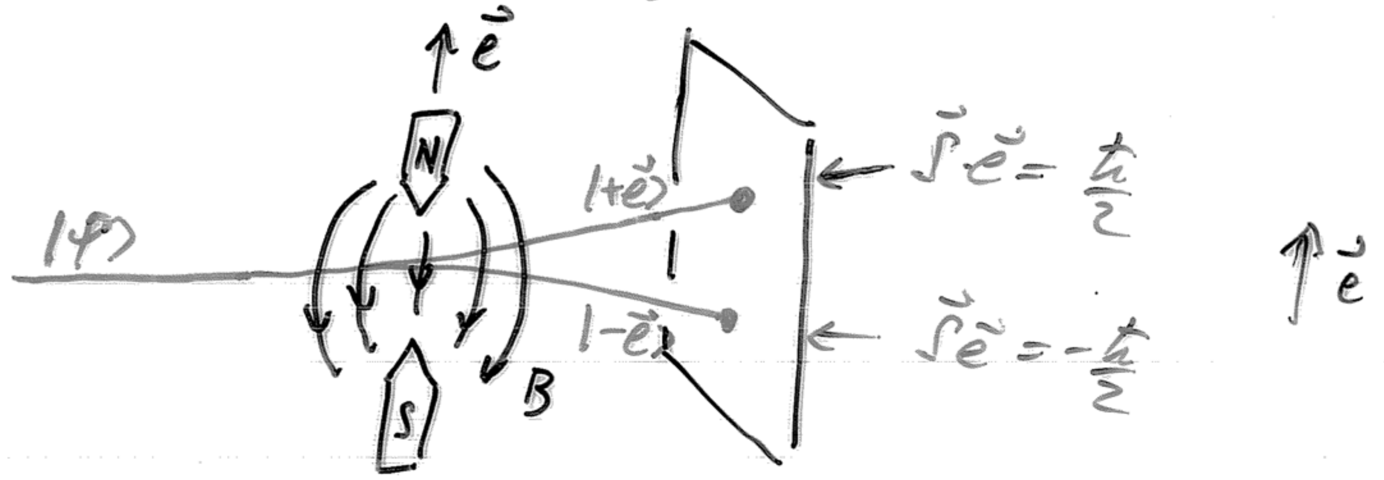
- Operator: $\vec{S}\cdot\vec{e} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}\cdot\vec{e}$
  (Eigenwerte $\pm\hbar/2$, Eigenvektoren $|\pm\vec{e}\rangle$)
  $$(\vec{\sigma}\cdot\vec{e})|\pm\vec{e}\rangle = (\pm 1)|\pm\vec{e}\rangle$$
- entsprechende Ereignisse: Projektoren
  $$P_\pm = |\pm\vec{e}\rangle\langle\pm\vec{e}|$$
- Teilchen im Zustand $|\psi\rangle$: Messergebnis mit W'keit
  $$w_\pm = \langle\psi|P_\pm|\psi\rangle = |\langle\pm\vec{e}|\psi\rangle|^2 \qquad (*)$$

Jedes Paar $\{|+\vec{e}\rangle, |-\vec{e}\rangle\}$ bildet o.n. Basis für $\mathbb{C}^2$,

$$|\vec{e}\,'\rangle = c_+|+\vec{e}\rangle + c_-|-\vec{e}\rangle \quad , c_\pm = \langle\pm\vec{e}|\vec{e}\,'\rangle$$

(kohärente Superposition)

Stern-Gerlach Anordnung



liefert eine Messung des Spins in Richtung $\vec e$

$$\vec S \cdot \vec e = \frac{\hbar}{2} \vec\sigma \cdot \vec e$$

QM-Observable $\vec\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Eigenvektoren $|\pm\vec e\rangle$ von $\vec\sigma\cdot\vec e$: Zustände, in denen der Messwert $(\pm\hbar/2)$ mit Sicherheit angenommen wird.

Bsp: • $\vec e = \vec e_3$: $\quad |\vec e_3\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |-\vec e_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

• $\vec e = \vec e_1$: $\quad |\vec e_1\rangle = \frac{1}{\sqrt2}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |-\vec e_1\rangle = \frac{1}{\sqrt2}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$.

$$|\vec e_1\rangle = \frac{1}{\sqrt2}(|\vec e_3\rangle + |-\vec e_3\rangle), \quad |-\vec e_1\rangle = \frac{1}{\sqrt2}(|\vec e_3\rangle - |-\vec e_3\rangle)$$

sind <u>kohärente Superpositionen</u> von $|\vec e_3\rangle, |-\vec e_3\rangle$.

- Bahn koppelt an $\vec{B}$-Feld:

$$H_{1B} = \mu_B \vec{B} \cdot \vec{L} \qquad (\hbar = 1)$$

- Spin koppelt an $\vec{B}$-Feld

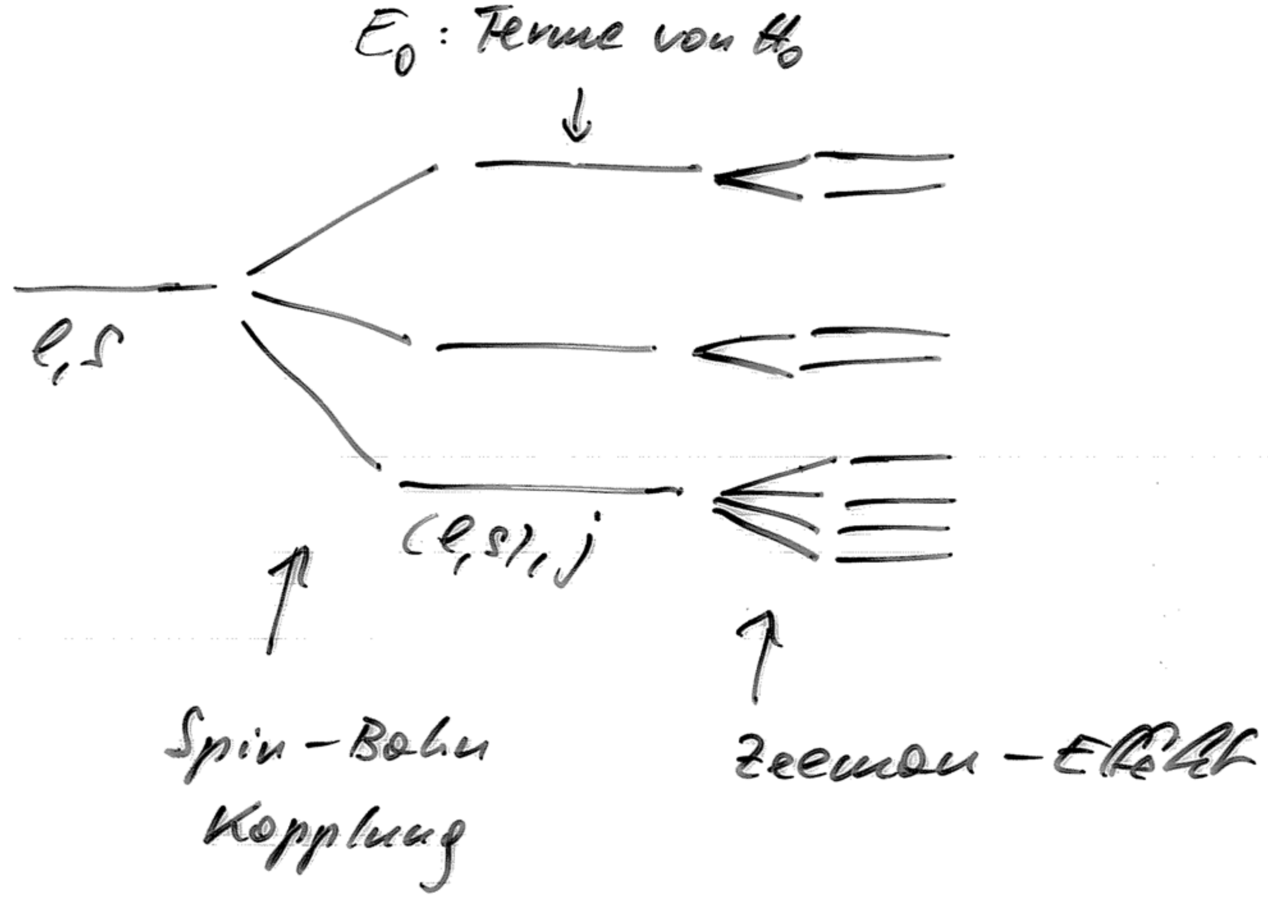
$$H_{1S} = -\vec{B} \cdot \vec{\mu}$$

über das magnetische Moment

$$\vec{\mu} = -g_0 \mu_B \vec{S}$$

(werden sehen: $g_0 = 2$), also

$$H_{1S} = g_0 \mu_B \vec{B} \cdot \vec{S}$$



Hamilton-Operator: $\quad H = H_0 + H_1$

- H_0 rotationssymm. (inkl. Spin-Bahn Kopp!.)

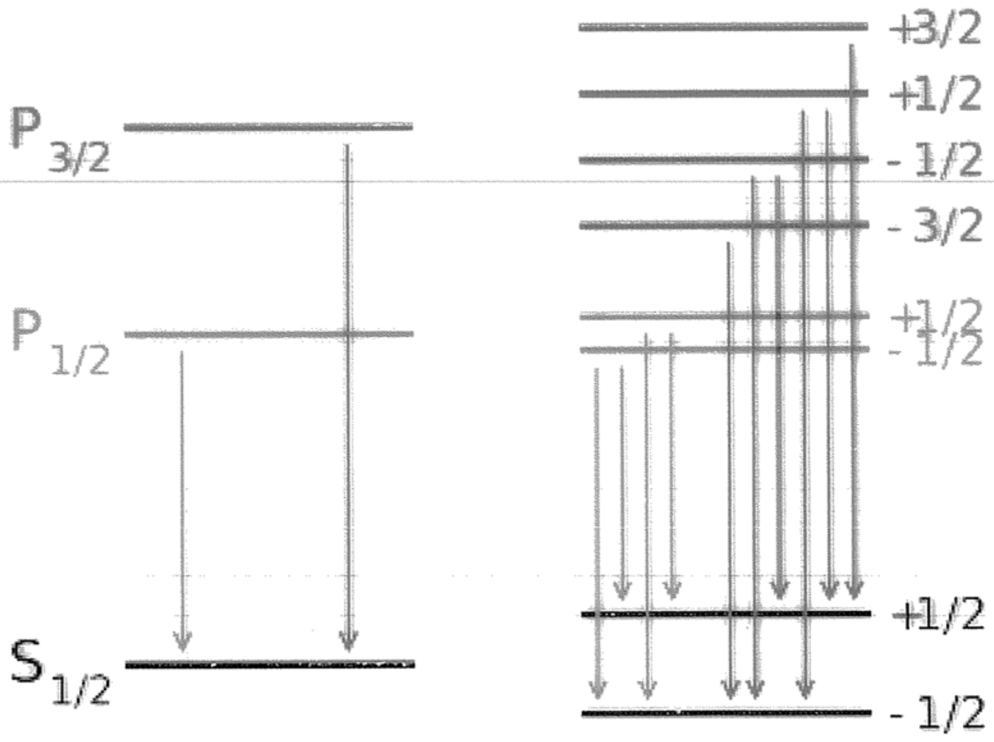
$$[H_0, \vec{J}] = 0 \qquad \text{exakt.}$$

$[H_0, \vec{L}^2] = 0$, $[H_0, \vec{S}^2] = 0$ annähernd (nur falls H_0 unter separaten Drehungen in Orts- und Spin-Raum invariant ist)

- $H_1 = \mu_B \vec{B} \cdot (\vec{L} + g_0 \vec{S}) = \mu_B \vec{B} \cdot (\vec{J} + (g_0 - 1)\vec{S})$

g_0: gyromagnetischer Faktor des e^-.

Anomaler Zeeman-Effekt



Anomaler Zeeman-Effekt

- Aufspaltung eines Terms im $\vec{B}$-Feld

$$\Delta E_m = g \mu_B B m \qquad (m = -j, \dots, j)$$

mit

$$g = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)}$$

- Übergänge genügen den Auswahlregeln

$$j \to j+1, \dots, |j-1| \,, \quad m \to m,\ m \pm 1$$

Bemerkung $\quad (\vec{J} = \vec{L} \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \vec{S})$

- j aus $l+s,\ l+s-1, \dots |l-s|$
- Für $s = 0$ $(j = l)$ ist $g = 1$

  " $l = 0$ $(j = s)$ " $g = 2$

<u>Satz</u> von Wigner-Eckart (Spezialfall)
$\mathcal{H}$ trage eine irreduzible Darstellung von $SU(2)$ mit Drehimpulsoperator $\vec{M}$. Dann ist jeder weitere Vektoroperator $\vec{W} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ proportional zu $\vec{M}$:

$$\vec{W} = \kappa \vec{M}$$

für ein $\kappa \in \mathbb{R}$.

$\mathcal{H}$ Hilbertraum mit Darstellung $U(V)$ der $SU(2) \ni V$. <u>Def</u>:

$$\vec{W} = \sum_j W_j \vec{e}_j$$

ist <u>Vektoroperator</u>, falls

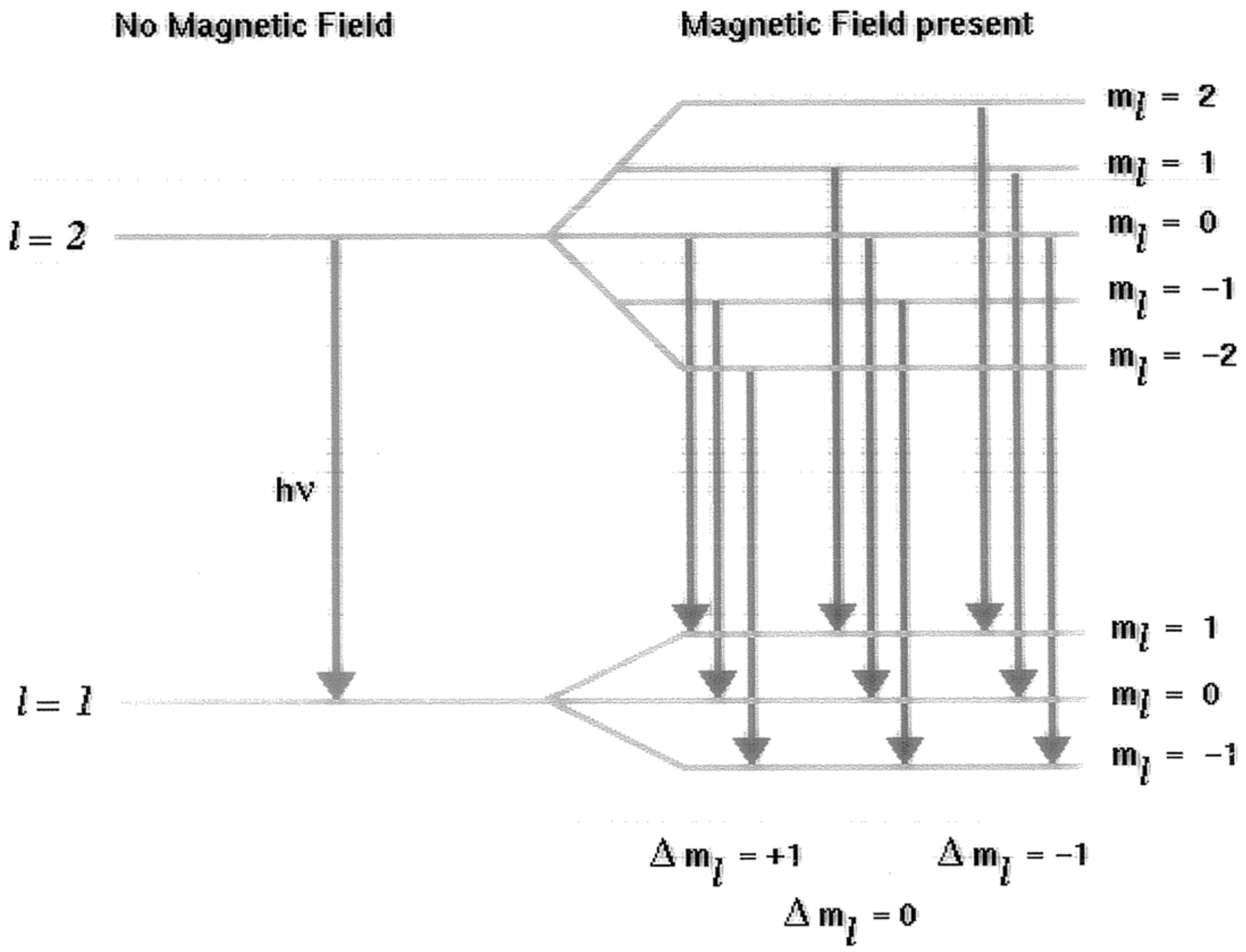
$$U(V)(\vec{W}\cdot\vec{e})\,U(V)^{-1} = \vec{W}\cdot R\vec{e}$$

(alle $\vec{e} \in \mathbb{R}^3$, $V \in SU(2)$) mit $R = R(V)$, d.h.

$$U(V)\,W_j\,U(V)^{-1} = \sum_{i=1}^{3} R_{ij}\,W_i$$

<u>Beispiele</u>: $\vec{x}, \vec{p}, \vec{L}, \vec{S}$

Normaler Zeeman-Effekt



Zeeman-Effekt (Theorie ohne Spin)

Aufspaltung der Energieniveaus (Terme) eines Atoms im äusseren Magnetfeld $B\vec{e}_3$

$$H = H_0 + \mu_B B M_3$$

mit

H_0 : ungestörtes Atom, rotationssymmetrisch

$\mu_B = \frac{|e|\hbar}{2mc}$ (Bohrsches Magneton)

$\vec{L} = \hbar \vec{M}$ Bahndrehimpuls

Jedem Term E_0 entspricht Eigenraum; dieser trägt eine i.A. irreduzible Darstellung $\mathcal{D}_j$ der $\underline{SO(3)}$.

→ Aufspaltung: $E_0 \to E_0 + \underline{\mu_B B m} = E_{0m}$
$(m = -j, \dots, j)$

Folgerung:

- j ganzzahlig
- Aufspaltung universell: $\Delta E_{0m} = \mu_B B$ (unabh. vom Term)

Beobachtung: Nein (anomaler Zeeman-Effekt) zeitabhängige Störungsrechnung:

$$H(t) = H_0 + H_1(t)$$

$\uparrow$ Störung

$$H_0|\Psi_0\rangle = E_0|\Psi_0\rangle \quad , \quad H_0|\Psi_1\rangle = E_1|\Psi_1\rangle$$

Übergangsw'keit $0 \to 1$ in 1. Ordnung Störungsrechnung

$$W_{10} = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{\frac{i}{\hbar}(E_1-E_0)t} \langle\Psi_1|H_1(t)|\Psi_0\rangle\right|^2$$

$$\omega_{10} = \frac{E_1 - E_0}{\hbar} \quad : \pm \text{Bohrsche Frequenz.}$$

<u>Bsp</u>: H_0 : Atom bei $\vec{x}=0$

$H_1(t)$: WW infolge e.m. Strahlung (Dipolnäherung, $\vec{E}(t) \equiv \vec{E}(\vec{x}=0,t)$)

$$W_{10} = \frac{1}{\hbar^2}\left|\hat{\vec{E}}(\omega_{10}) \cdot \langle\Psi_1|\vec{D}|\Psi_0\rangle\right|^2$$

mit

$$\hat{\vec{E}}(\omega) = \int dt\, e^{i\omega t}\vec{E}(t)$$

$$\vec{D} = \sum_k e_k \vec{x}_k \quad : \text{Dipolmoment.}$$

Feld $\vec{E}(t) = \vec{E}(\vec{x}=0,t)$ reell

$$\hat{\vec{E}}(\omega) = \int dt\, e^{i\omega t}\,\vec{E}(t) = \overline{\hat{\vec{E}}(-\omega)}$$

$$\vec{E}(t) = \frac{1}{2\pi}\int d\omega\, e^{-i\omega t}\,\hat{\vec{E}}(\omega)$$

$$= \frac{1}{2\pi}\int_0^\infty d\omega \left(\hat{\vec{E}}(\omega)\, e^{-i\omega t} + \overline{\hat{\vec{E}}(\omega)}\, e^{i\omega t}\right)$$

Welle beschrieben durch $\hat{\vec{E}}(\omega)$, $(\underline{\omega \geq 0})$

Polarisation: $\hat{\vec{E}}(\omega) = \hat{E}(\omega)\,\vec{e}$, $(\vec{e} \in \mathbb{C}^3)$

$$\hat{\vec{E}}(-\omega) = \overline{\hat{E}(\omega)}\;\overline{\vec{e}}$$

Übergang $0 \to 1$, $\omega_{10} = (E_1 - E_0)/\hbar$

- Absorption $E_1 > E_0$

$$W_{10} = \frac{1}{\hbar^2}\,|\hat{E}(\omega_{10})|^2\,|\langle\psi_1|\vec{D}\cdot\vec{e}|\psi_0\rangle|^2$$

- Emission $E_1 < E_0$

$$W_{10} = \frac{1}{\hbar^2}\,|\hat{E}(\omega_{01})|^2\,|\langle\psi_1|\vec{D}\cdot\overline{\vec{e}}|\psi_0\rangle|^2$$

- <u>Ungestörter</u> Hamiltonoperator H_0 mit normierbarem <u>Eigenzustand</u> $|\psi_0\rangle$

$$H_0|\psi_0\rangle = E_0|\psi_0\rangle \quad , \quad \langle\psi_0|\psi_0\rangle = 1$$

und <u>Kontinuumseigenzustände</u> $|\psi(E)\rangle$

$$H_0|\psi(E)\rangle = E|\psi(E)\rangle \, , \quad \langle\psi(E)|\psi(E')\rangle = \delta(E-E')$$

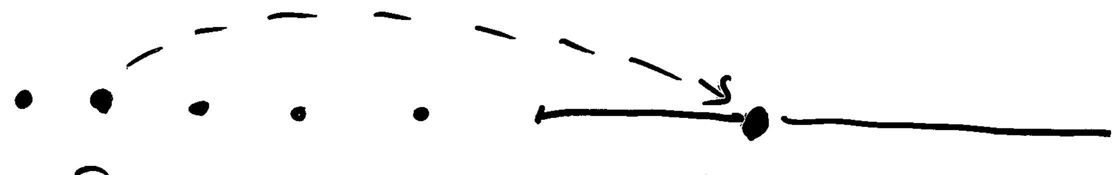
- Monochromatische Störung

$$H_1(t) = H_1 e^{-i\omega t} + H_1^* e^{i\omega t} \quad , \ (\omega > 0)$$

bzw.

$$H_1(t) = H_1 = H_1^* \qquad , \ (\omega = 0)$$

induziert Übergänge ins Kontinuum



E_0 $\qquad\qquad$ $E = E_0 + \hbar\omega$

mit der W'keits<u>rate</u>

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle\psi(E_0+\hbar\omega)|H_1|\psi_0\rangle|^2$$

(Goldene Regel)

Ausgangspunkt für Übergangsraten

$$H(t) = H_0 + H_1(t)$$

H_0 : Atom (bei $\vec{x} \approx 0$), Eigenzustände $|\psi_i\rangle$, $(i=0,1)$

$$H_0 |\psi_i\rangle = E_i |\psi_i\rangle$$

$$E_1 - E_0 =: \hbar\omega_{10}$$

$H_1(t)$: Wechselwirkung Strahlung $\leftrightarrow$ Atom in Dipolnäherung

$$H_1(t) = -\frac{1}{c}\vec{A}(\vec{x}=0,t)\cdot\sum_k e_k \frac{\vec{p}_k}{m_k}$$

$$= -\frac{1}{c}\vec{A}(0,t)\cdot\frac{i}{\hbar}[H_0,\vec{D}]$$

Zeitabhängige Störungsrechnung

$$H(t) = H_0 + H_1(t) \quad , \quad (0 \leq t \leq T)$$

- H_0 ungestörter Hamiltonoperator mit Eigenzuständen $|\psi_0\rangle$, $|\psi_1\rangle$ (Energien E_0, E_1
- $H_1(t)$ entweder

(i) stationäre Störung : $H_1(t) = H_1 = H_1^*$

oder

(ii) Störung fester Frequenz:

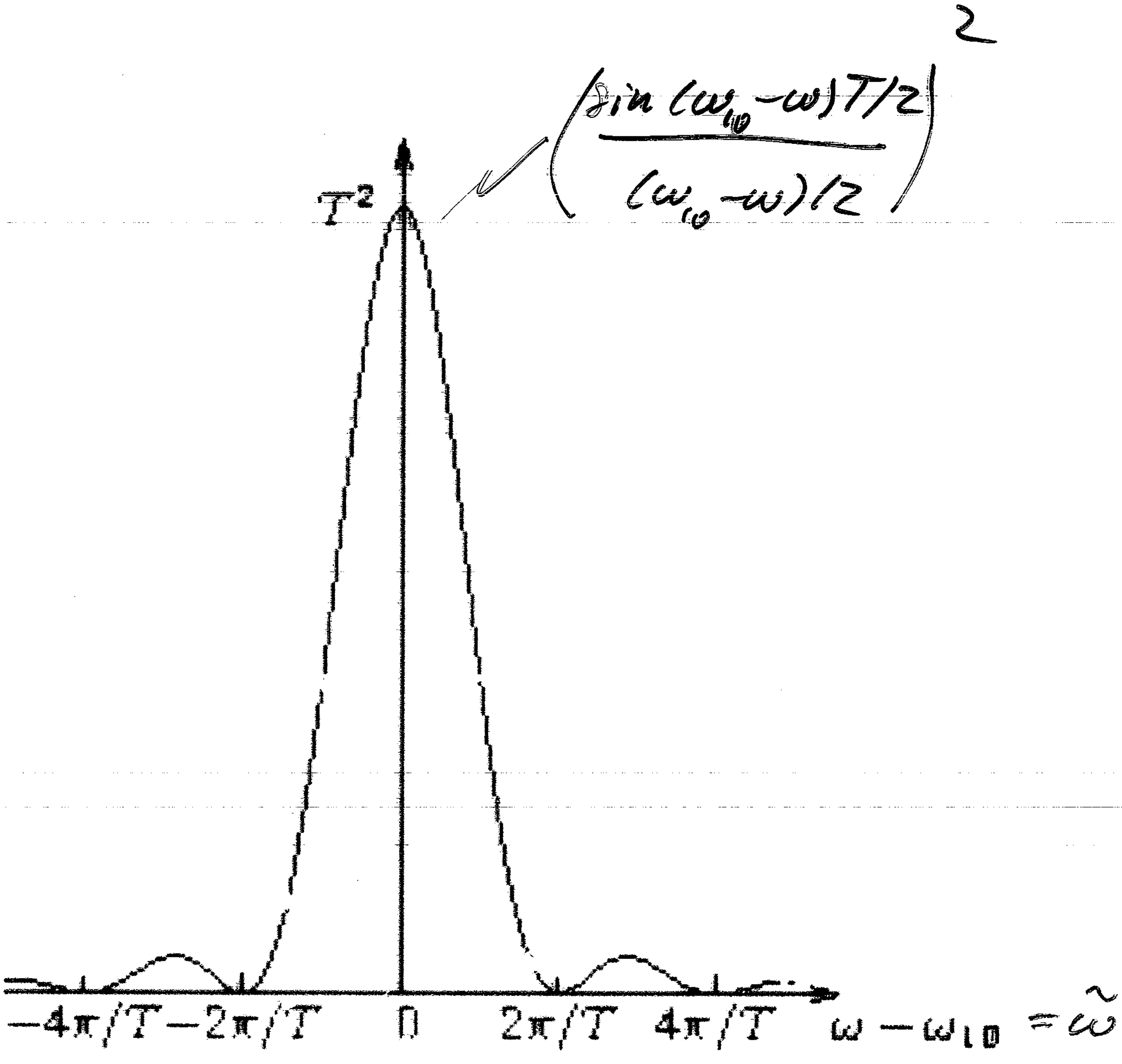
$$H_1(t) = H_1 e^{-i\omega t} + H_1^* e^{i\omega t} \quad , \quad (\omega > 0)$$

Rechnung für $H_1(t) = H_1 e^{-i\omega t}$.

Wahrscheinlichkeit für Übergang $|\psi_0\rangle \to |\psi_1\rangle$

$$W = \frac{1}{\hbar^2} |\langle\psi_1|H_1|\psi_0\rangle|^2 \left(\frac{\sin(\omega_{10}-\omega)T/2}{(\omega_{10}-\omega)/2}\right)^2$$

wobei $\omega_{10} = \frac{E_1 - E_0}{\hbar}$



Übergänge $|\varphi_0\rangle \to |\varphi_1\rangle$ im Wesentlichen nur für

$$|\omega_{10}-\omega| \lesssim \frac{2\pi}{T}$$

d.h. für

$$|(E_1-E_0)-\hbar\omega| \lesssim \frac{2\pi\hbar}{T}$$

Beweis beruht auf

$$\int_0^T e^{i\tilde{\omega} t}\, dt = e^{i\tilde{\omega} T/2} \frac{\sin \tilde{\omega} T/2}{\tilde{\omega}/2}.$$

Folgerung (aus Bild)

$$\left(\frac{\sin \tilde{\omega} T/2}{\tilde{\omega}/2}\right)^2 \approx c(T)\,\delta(\tilde{\omega})$$

mit $c(T) \propto T$. In der Tat (Parseval-Identität)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\sin \tilde{\omega} T/2}{\tilde{\omega}/2}\right)^2 d\tilde{\omega} = 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} P^2_{[0,T]}(t)\, dt$$

$$= 2\pi T \quad (= c(T))$$

($P_{[0,T]}(\cdot)$ charakteristische Funktion von $[0,T]$)

Goldene Regel: Übergänge von $|\Psi_0\rangle$ (Energie E_0) zu einem Kontinuum von Endzuständen $|\Psi_1\rangle$ (Energie E_1) infolge Störung H_1 erfolgen mit Rate

$$\frac{2\pi}{\hbar} |\langle \Psi_1 | H_1 | \Psi_0 \rangle|^2 \delta(E_1 - E_0),$$

zu summieren über alle ausgewählten Endzustände $|\Psi_1\rangle$.

Auch:

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \Psi_1 | H_1 | \Psi_0 \rangle|^2 \rho(E_0)$$

wobei $\rho(E_0)$ Zustandsdichte der ausgewählten Endzust. $|\Psi_1\rangle$, sofern

$$|\langle \Psi_1 | H_1 | \Psi_0 \rangle|^2$$

davon unabhängig ist (ansonsten: Mittelwert)

Alternative Schreibweisen:

- $$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{d}{d\lambda} \langle \psi_0 | H_1 P_{(-\infty,\lambda)}(H_0) H_1 | \psi_0 \rangle \Big|_{\lambda = E_0 + \hbar\omega}$$

mit dem spektralen Projektor

$$P_{(-\infty,\lambda)}(H_0) = \int_{-\infty}^{\lambda} |\psi(E)\rangle\langle\psi(E)|\, dE + \underbrace{\sum_{\substack{i \\ E_i < \lambda}} |\psi_i\rangle\langle\psi_i|}_{\text{unabh. von } \lambda \text{ nahe } E_0 + \hbar\omega}$$

Alternative Schreibweisen von H_0

- Oft: Kontinuumseigenzustände nicht durch Energie E gekennzeichnet, sondern durch andere Quantenzahlen

<u>Bsp</u>: Freies Teilchen; durch Impuls $\hbar\vec{k}$

$$H_0 |\psi(\vec{k})\rangle = E(\vec{k}) |\psi(\vec{k})\rangle$$

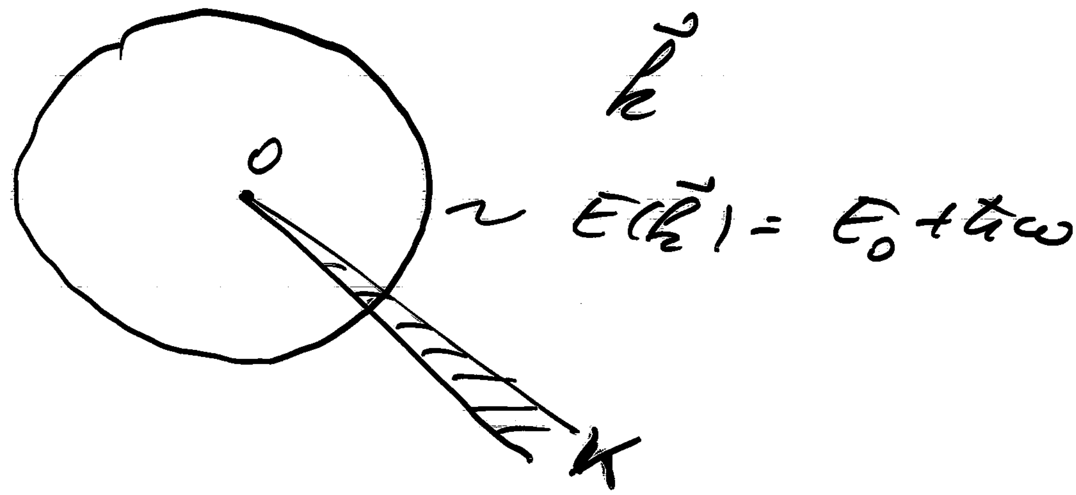
mit $\langle\psi(\vec{k})|\psi(\vec{k}')\rangle = \delta^{(3)}(\vec{k}-\vec{k}')$

$$E(\vec{k}) = \hbar^2\vec{k}^2/2m$$

Dann

$$\Gamma_{abs} = \frac{2\pi}{\hbar}\int_K d^3k \, |\langle\psi(\vec{k})|H_1|\psi_0\rangle|^2 \delta(E(\vec{k})-(E_0+\hbar\omega))$$

wobei $\vec{k}\in K$ eine Selektion der Endzustände ist (z.B. Streuung in einen Kegel $K \subset \mathbb{R}^3$)



Bei Quasi-Kontinuum:

$$\rho(E_0) = \varepsilon^{-1} \# \{ \alpha \mid |E_\alpha - E_0| < \varepsilon/2 \}$$

Dichte der Endzustände α

Klassisches Feld im Hohlraum $V \subset \mathbb{R}^3$, ideal leitende Wände:

$$\vec{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \qquad \vec{B} = \operatorname{rot} \vec{A}$$

mit Coulomb-Eichung $\operatorname{div} \vec{A} = 0$, $\varphi = 0$

<u>Randbedingung</u>:

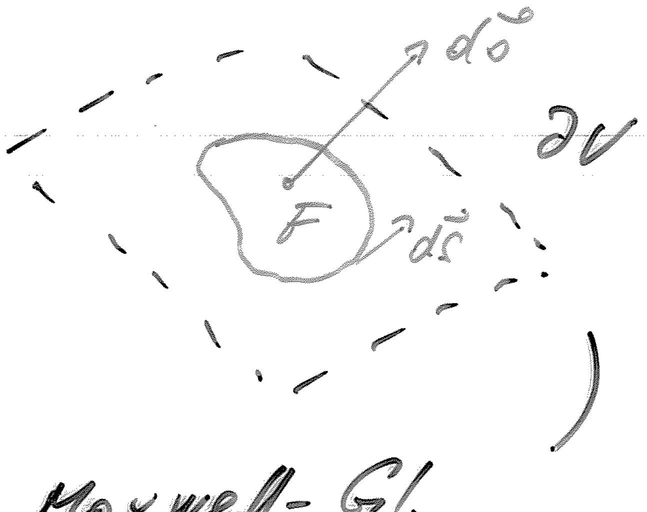
$$\vec{E}_{\parallel} = 0, \qquad \vec{B}_{\perp} = 0 \qquad (\text{auf } \partial V)$$

erfüllt durch

$$\vec{A}_{\parallel} = 0 \qquad (\text{auf } \partial V)$$

(denn für $F \subset \partial V$

$$\int_{\partial F} \vec{A}_{(\parallel)} \cdot d\vec{s} = \int_{F} \vec{B}_{(\perp)} \cdot d\vec{o}$$



also $\vec{A}_{\parallel} = 0 \Rightarrow \vec{B}_{\perp} = 0$)

<u>Bewegungsgleichung</u>: Maxwell-Gl.

$$\Box \vec{A} \equiv \left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\vec{A} - \Delta \vec{A}\right) = 0$$

Klassische Feld im Hohlraum V

Eigenschwingungen

$$\vec{A}(\vec{x},t) = \vec{A}_\alpha(\vec{x})\, e^{\pm i\omega_\alpha t}$$

mit

$$\left.\begin{aligned} -\Delta \vec{A}_\alpha &= \left(\frac{\omega_\alpha}{c}\right)^2 \vec{A}_\alpha \\ \operatorname{div} \vec{A}_\alpha &= 0 \end{aligned}\right\} \quad \text{in } V$$

$$\vec{A}_{\alpha\parallel} = 0 \qquad \text{auf } \partial V$$

$-\Delta$ (mit Randbedingung) ist selbstadjungiert auf divergenzfreien Vektorfeldern mit Skalarprodukt

$$(\vec{A}_1, \vec{A}_2) = \int_V d^3x\, \overline{\vec{A}_1(\vec{x})} \cdot \vec{A}_2(\vec{x})$$

$\rightarrow \quad (\vec{A}_\alpha, \vec{A}_\beta) = 0 \quad (\alpha \neq \beta)$

Normierung: $\quad (\vec{A}_\alpha, \vec{A}_\beta) = 4\pi c^2 \delta_{\alpha\beta}$

- Falls $\vec{A}_\alpha$ Eigenschwingung (zur Freq. ω_α), so auch $\bar{\vec{A}}_\alpha$

  → Eigenschw. können reell gewählt werden (müssen aber nicht)

<u>Bsp.</u> 1. Würfel V, $(0 \le x_i \le L,\ i = 1,2,3)$ ideal leitende Wände.

Eigenschwingungen sind $\vec{A} = \vec{A}_\alpha$ mit

$$A_i(\vec{x}) = e_i \cdot \cos(k_i x_i) \sin(k_{i+1} x_{i+1}) \sin(k_{i+2} x_{i+2})$$

wobei

$$k_i = \frac{\pi}{L} \nu_i \qquad (\nu_i \text{ ganz}, \ge 0, \text{ höchstens eines } = 0)$$

$$\sum_i e_i k_i \equiv \vec{e} \cdot \vec{k} = 0,$$

also $\alpha = (\vec{k}, \vec{e})$ (reelle ES)

<u>Bsp.</u> 2. Würfel mit periodischen Rd. bdg.

Eigenschwingungen

$$\vec{A}_\alpha(\vec{x}) = \sqrt{\frac{4\pi c^2}{V}}\, \vec{e}\, e^{i\vec{k}\vec{x}}$$

wobei $k_i = \frac{2\pi}{L} \nu_i$ (ν_i ganz), $\vec{e} \cdot \vec{k} = 0$

(komplexe ES)

Beispiel: Kasten mit periodischen Randbedingungen:

$s = (\vec{k}, \vec{e})$ mit $\vec{k}$ quantisiert

$\vec{k} \perp \vec{e}$ $\quad$ $\vec{e}$: 2 mögliche Polarisationen

$$\vec{A}_s(\vec{x}) = \sqrt{\frac{4\pi c^2}{V}}\, \vec{e}\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$$

Zerlegung nach Eigenschwingungen

$$\vec{A}(\vec{x},t) = \sum_\alpha q_\alpha(t)\, \vec{A}_\alpha(\vec{x})$$

$$\vec{E}(\vec{x},t) = -\frac{1}{c}\sum_\alpha p_\alpha(t)\, \vec{A}_\alpha(\vec{x})$$

Feldenergie

$$\frac{1}{8\pi}\int_V d^3x\,(\vec{E}^2 + \vec{B}^2) = \frac{1}{2}\sum_\alpha (p_\alpha^2 + \omega_\alpha^2 q_\alpha^2) =: H$$

- Maxwell-Gl. $\equiv$ kanonische Bewegungsgleichungen zu H
- E.m. Feld $\equiv$ ∞-viele unabhängige harmonische Oszillatoren

• Modendichte:

$N(\omega) = \#\{\text{Moden mit Frequenzen} \leq \omega\}$

$$\frac{dN}{d\omega} = \frac{V}{\pi^2 c^3}\,\omega^2 \qquad (\omega \to \infty)$$

für beide Beispiele
(und überhaupt für jede Gestalt des Hohlraums)

Quantisierung

$$H = \sum_\alpha \hbar\omega_\alpha \, a_\alpha^* a_\alpha$$

mit Erzeugungs- und Vernichtungs operatoren

$$a_\alpha^* = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_\alpha}} (\omega_\alpha q_\alpha + i p_\alpha)$$

($\bar{\alpha}$ bei komplexen Eigenschw.)

$$a_\alpha = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_\alpha}} (\omega_\alpha q_\alpha - i p_\alpha)$$

- erfüllen $[a_\alpha, a_\beta] = 0 = [a_\alpha^*, a_\beta^*]$

$$[a_\alpha, a_\beta^*] = \delta_{\alpha\beta}$$

- wirken auf Vakuum $|0\rangle$,

$$a_\alpha |0\rangle = 0$$

und auf die Zustände

$$|n_1, n_2, \ldots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! \, n_2! \ldots}} (a_1^*)^{n_1} (a_2^*)^{n_2} \ldots |0\rangle$$

$(n_\alpha \in \mathbb{N}, \sum_\alpha n_\alpha < \infty)$

Die Anregungen jeder Mode α sind quantisiert.

Photonen, in Anzahl n_α

- $a_\alpha^* |n_1, n_2, \dots n_\alpha \dots\rangle = \sqrt{n_\alpha + 1}\, |n_1, n_2, \dots n_\alpha + 1, \dots\rangle$

$$a_\alpha |n_1, n_2 \dots n_\alpha \dots\rangle = \begin{cases} \sqrt{n_\alpha}\, |n_1, n_2 \dots n_\alpha - 1, \dots\rangle & (n_\alpha > 0), \\ 0 & (n_\alpha = 0) \end{cases}$$

$\rightarrow a_\alpha^* a_\alpha |n_1, n_2 \dots\rangle = n_\alpha |n_1, n_2 \dots\rangle$

- Feldoperator

$$\vec{A}(\vec{x}) = \sum_\alpha \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_\alpha}}\, (a_\alpha + a_\alpha^*)\, \vec{A}_\alpha(\vec{x})$$

Atom im Strahlungsfeld (Dipolnäherung)

Hilbertraum $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{at} \otimes \mathcal{H}_{strah}$

$$H = H_0 + H_1$$

$$H_0 = H_{at.} + H_{strah} \qquad \text{(ungekoppelt)}$$

$$H_1 = -\frac{1}{c} \vec{A}(0) \frac{i}{\hbar} [H_{at}, \vec{D}]$$

(Kopplung, zeitunabh.)

Feldoperator

$$\vec{A}(0) = \sum_\alpha \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_\alpha}} \left(a_\alpha \vec{A}_\alpha(0) + \overline{a_\alpha^* \vec{A}_\alpha(0)} \right)$$

Atom (bei $\vec{x}=0$) im quantisierten Strahlungsfeld in Dipolnäherung

$$H = H_0 + H_1 \quad \text{auf } \mathcal{H} = \mathcal{H}_{at} \otimes \mathcal{H}_{str}$$

$$H_0 = H_{at} + H_{str} \qquad \text{(ungestört)}$$

$$H_1 = -\frac{1}{c}\breve{A}(0)\cdot\frac{i}{\hbar}[H_{at}, \vec{D}] \qquad \text{(Kopplung)}$$

- Zustände von H_{at} : $H_{at}|\varphi_i\rangle = \varepsilon_i|\varphi_i\rangle$ $(i=0,1)$
- Übergänge zwischen Eigenzuständen von H_0: Von

$$|\psi_0\rangle = |\varphi_0\rangle \otimes |n_1, n_2, \dots\rangle$$

nach

$$|\psi_1\rangle = |\varphi_1\rangle \otimes |n_1', n_2', \dots\rangle$$

Energien $H_0|\psi_i\rangle = E_i|\psi_i\rangle$

$$E_0 = \varepsilon_0 + \sum_\alpha \hbar\omega_\alpha n_\alpha$$

$$E_1 = \varepsilon_1 + \sum_\alpha \hbar\omega_\alpha n_\alpha'$$

- V gross: E_1 liegt in Quasi-Kontinuum von Eigenwerte

Anfangszustand in $\mathcal{H}_{at} \otimes \mathcal{H}_{Strahlung}$

$$|\Psi_0\rangle = |\varphi_0\rangle \otimes |n_1, n_2, \dots\rangle$$

mit • $H_{at} |\varphi_0\rangle = \varepsilon_0 |\varphi_0\rangle$,

• Strahlung polarisiert in Rtg. $\vec{e}$:

$n_\beta = 0$ für $\beta = (\vec{k}, \vec{e}\,')$ mit $\vec{e}\,' \neq \vec{e}$

und mit spektraler Dichte $u(\omega)$

$$\hbar\omega_\beta n_\beta \frac{1}{V} \frac{dN}{d\omega} = u(\omega) \quad (V \text{ groß})$$

$\omega_\beta \in [\omega, \omega + \Delta\omega]$

$\Delta N = \# \{\text{Moden } (\vec{k}, \vec{e}) \text{ mit Freq. in } \Delta\omega\}$

Energie von $|\Psi_0\rangle$

$$H_0 |\Psi_0\rangle = E_0 |\Psi_0\rangle$$

$$E_0 = \varepsilon_0 + \sum_\alpha \hbar\omega_\alpha n_\alpha$$

Nachtrag: Bei unpolarisierter, von allen Richtungen einfallender Strahlung ist

$$\Gamma = u(\omega_{10}) \cdot \frac{4\pi^2}{\hbar^2} \frac{1}{3} |\langle \psi_1 | \vec{D} | \psi_0 \rangle|^2$$

wobei $|\vec{d}|^2 = \overline{\vec{d}} \cdot \vec{d}$.

Denn: Fortpflanzungsrtg $\vec{e}_0$
Polarisationen $\vec{e}_1, \vec{e}_2$
} $\vec{e}_0, \vec{e}_1, \vec{e}_2$ Dreibein

$$\underbrace{\frac{1}{4\pi} \int de_0}_{\text{Mittelung über } \vec{e}_0} \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{2} |\vec{d} \cdot \vec{e}_i|^2}_{\text{Mittelung über Polarisationen}}$$

$$= \frac{1}{4\pi} \int de_0 \, \frac{1}{2} \left(|\vec{d}|^2 - |\vec{d} \cdot \vec{e}_0|^2 \right)$$

$$= \frac{1}{4\pi} \int de_0 \, \frac{1}{2} \left(|\vec{d}|^2 - \frac{1}{3} |\vec{d}|^2 \right) = \frac{1}{3} |\vec{d}|^2$$

Äusseres, klassisches elektromagnetisches Feld der Polarisation $\vec{e}$ mit spektraler Energiedichte $u(\omega)$ bewirkt atomare Übergänge $0 \to 1$ mit Rate

$$\Gamma_{1 \leftarrow 0} = u(\omega_{10}) \cdot \frac{4\pi^2}{\hbar^2} |\langle \psi_1 | \vec{D} \cdot \vec{e} | \psi_0 \rangle|^2$$

(Absorption)

$$\Gamma_{1 \leftarrow 0} = u(\omega_{01}) \cdot \frac{4\pi^2}{\hbar^2} |\langle \psi_1 | \vec{D} \cdot \vec{e} | \psi_0 \rangle|^2$$

(Emission)

Atom im quantisierten Strahlungsfeld:

Übergänge $0 \to 1$ mit Raten:

- Absorption

$$\Gamma_{1\leftarrow 0} = \frac{4\pi^2}{\hbar^2}\, u(\omega_{10})\, \frac{1}{3} |\langle \varphi_1 | \vec{D} | \varphi_0 \rangle|^2$$

- Emission

$$\Gamma_{1\leftarrow 0} = \frac{4\pi^2}{\hbar^2} \Big(u(\omega_{01}) + \underbrace{\frac{\hbar\omega_{01}^3}{\pi^2 c^3}}_{\text{spontane Emission}} \Big) \cdot \frac{1}{3} |\langle \varphi_1 | \vec{D} | \varphi_0 \rangle|^2$$

Zum Vergleich (Einstein): A, B-Koeffizienten

- Absorption

$$\Gamma_{1\leftarrow 0} = B_{01}\, u(\omega_{10})$$

- Emission

$$\Gamma_{0\leftarrow 1} = B_{10}\, u(\omega_{10}) + A_{10}$$

mit $B_{01} = B_{10}$, $\dfrac{A_{10}}{B_{10}} = \dfrac{\hbar\omega_{10}^3}{\pi^2 c^3}$ $\quad\checkmark\,!$

Identische Teilchen : $1, 2, \ldots N$

- keine Observable kann Teilchen i von j unterscheiden

$$\rightarrow \quad [A, P_\sigma] = 0 \qquad (\sigma \in S_N)$$

- $\rightarrow |\psi\rangle$ und $P_\sigma |\psi\rangle$ sind ununterscheidbare Zustände, da keine Observable sie unterscheiden kann.

- Postulat: Also soll

$$P_\sigma |\psi\rangle = \chi(\sigma) |\psi\rangle$$

für eine Phase $\chi(\sigma)$ $\quad (|\chi(\sigma)| = 1)$

- Es folgt:

$$\chi(\sigma) \equiv 1 \qquad \text{oder} \qquad \chi(\sigma) \equiv \operatorname{sgn} \sigma$$

1-dimensionale Darstellungen der S_N

Sei $\chi : S_N \to \mathbb{C}$, $\chi(\tau\sigma) = \chi(\tau)\chi(\sigma)$

mit $\chi \not\equiv 0$. Dann ist entweder

$$\chi(\sigma) \equiv 1$$

oder

$$\chi(\sigma) \equiv \operatorname{sgn} \sigma$$

$\mathcal{H}$: 1-Teilchen-Hilbertraum

(Bsp: $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^{2j+1}$: Spin j Teilchen, $\psi = \psi(\xi)$, $\xi = (\vec{x}, \ldots$

Auf

$$\otimes^N \mathcal{H} = \underbrace{\mathcal{H} \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}}_{N \text{ Faktoren}}$$

wirkt die Permutationsgruppe $S_N \ni \sigma$: Darstellung

$$P_\sigma : \psi_1 \otimes \ldots \otimes \psi_N \longmapsto \psi_{\sigma^{-1}(1)} \otimes \ldots \otimes \psi_{\sigma^{-1}(N)}$$

(Bsp:

$(P_\sigma \psi)(\xi_1, \ldots \xi_N) = \psi(\xi_{\sigma(1)}, \ldots \xi_{\sigma(N)})$)

Unterräume von $\otimes^N \mathcal{H}$:

- Hilbertraum von N Bosonen

$$\mathcal{H}_s^{(N)} = \{\psi \mid P_\sigma \psi = \psi\} \quad \forall \sigma \in S_N$$

(symmetrische Zustände)

- Hilbertraum von N Fermionen

$$\mathcal{H}_a^{(N)} = \{\psi \mid P_\sigma \psi = (\operatorname{sgn} \sigma)\, \psi\}$$

(antisymmetrische Zustände)

- Entsprechende Unterräume von $\bigotimes^N \mathcal{H}$

$$\mathcal{H}_S^{(N)} = \{ \psi \mid P_\sigma |\psi\rangle = |\psi\rangle,\ \sigma \in S_N \}$$

(symmetrische Zustände)

$$\mathcal{H}_a^{(N)} = \{ \psi \mid P_\sigma |\psi\rangle = (\operatorname{sgn} \sigma) |\psi\rangle,\ \sigma \in S_N \}$$

(antisymmetrische Zustände)

Spin-Statistik-Zusammenhang

Teilchen mit Spin $j \in \{0, 1, \ldots\}$: Bosonen

" " " $j \in \{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \ldots\}$: Fermionen

---

Projektoren $\bigotimes^N \mathcal{H} \to \bigotimes^N \mathcal{H}$ auf $\mathcal{H}_s^{(N)}$, $\mathcal{H}_a^{(N)}$

$$\mathcal{S} = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in S_N} P_\sigma \quad , \quad \mathcal{A} = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in S_N} (\operatorname{sgn} \sigma) P_\sigma$$

erfüllen $\mathcal{S} = \mathcal{S}^* = \mathcal{S}^2$, $\mathcal{A} = \mathcal{A}^* = \mathcal{A}^2$

Unabhängige Fermionen und Bosonen

- 1 Teilchen

  Hilbertraum $\mathcal{H}$

  Hamiltonoperator h

  Eigenwertproblem von h:

  $$h|\varphi_\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha |\varphi_\alpha\rangle \quad , \quad \langle\varphi_\alpha|\varphi_\beta\rangle = \delta_{\alpha\beta}$$

  ($\alpha = 0,1,2,.$ Quantenzahlen;
  $|\varphi_\alpha\rangle$ 1-Teilchenzustände)

  $$\varepsilon_0 \leq \varepsilon_1 \leq \varepsilon_2 \leq \ldots$$

- N Teilchen ohne "Statistik"

  Hilbertraum $\otimes^N \mathcal{H}$

  Hamiltonoperator (unabh. Teilchen)

  $$H = \sum_k^N h_k = \sum_{k=1}^N \mathbb{1} \otimes \cdots \otimes \underset{\substack{\uparrow \\ k\text{-ter Faktor}}}{h} \otimes \cdots \mathbb{1}$$

  Eigenwertproblem von H:

  $$|\varphi_{\alpha_1 \ldots \alpha_N}\rangle = |\varphi_{\alpha_1}\rangle \otimes \cdots \otimes |\varphi_{\alpha_N}\rangle$$

  d.h. $\varphi_{\alpha_1 \ldots \alpha_N}(\xi_1, \ldots \xi_N) = \varphi_{\alpha_1}(\xi_1) \cdots \varphi_{\alpha_N}(\xi_N)$

$$H|\Psi_{\alpha_1 \dots \alpha_N}\rangle = E_{\alpha_1 \dots \alpha_N} |\Psi_{\alpha_1 \dots \alpha_N}\rangle$$

mit

$$E_{\alpha_1 \dots \alpha_N} = \varepsilon_{\alpha_1} + \dots + \varepsilon_{\alpha_N}$$

- N <u>Fermionen</u>: Hilbertraum $\mathcal{H}_a^{(N)} \subset \bigotimes^N \mathcal{H}$

$$|\Psi_{\{\alpha_1 \ldots \alpha_N\}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma \in S_N} (\operatorname{sgn} \sigma) |\varphi_{\alpha_{\sigma^{-1}(1)}} \otimes \ldots \otimes \varphi_{\alpha_{\sigma^{-1}(N)}}\rangle$$

hängt (bis aufs Vorzeichen) nur von Menge $\{\alpha_1 \ldots \alpha_N\}$ ab (nicht von Reihenfolge)

$$\langle \Psi_{\{\alpha_1 \ldots \alpha_N\}} | \Psi_{\{\alpha_1 \ldots \alpha_N\}} \rangle = \begin{cases} 0 & (\alpha_i = \alpha_j \text{ für ein } i \neq j) \\ 1 & (\alpha_i \neq \alpha_j \text{ für alle } i \neq j) \end{cases}$$

- Besetzungszahlbasis

$$|n_0, n_1 \ldots\rangle = |\Psi_{\{\alpha_1 \ldots \alpha_N\}}\rangle,$$

wobei ~~$n_\alpha = \#\{j \mid \alpha_j = \alpha\}$~~ erfüllen

$$n_\alpha = 0 \text{ oder } 1 \,, \quad \sum_\alpha n_\alpha = N.$$

- $H |n_0, n_1 \ldots\rangle = E \, |n_0, n_1 \ldots\rangle$

mit $E = \sum_\alpha n_\alpha \varepsilon_\alpha$

- Grundzustand: $n_0 = \ldots = n_{N-1} = 1$, $n_N = n_{N+1} = \ldots = 0$

$$E_0 = \sum_{\alpha=0}^{N-1} \varepsilon_\alpha \qquad (\varepsilon_{N-1}: \text{Fermi-Energie})$$

• N <u>Bosonen</u>: Hilbertraum $\mathcal{H}_S^{(N)} \subset \bigotimes^N \mathcal{H}$

$$|\Psi_{\{\alpha_1,\dots\alpha_N\}}\rangle \equiv |n_0, n_1, \dots\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!\, n_0!\, n_1! \dots}} \sum_{\sigma\in S_N} |\varphi_{\alpha_{\sigma^{-1}(1)}} \otimes \dots \otimes \varphi_{\alpha_{\sigma^{-1}(N)}}\rangle$$

mit $n_\alpha = \#\{j \mid \alpha_j = \alpha\}$.

• $\langle \Psi_{\{\alpha_1\dots\alpha_N\}} | \Psi_{\{\alpha_1,\dots\alpha_N\}}\rangle = 1$

• n_α erfüllen

$$n_\alpha \in \mathbb{N} \quad , \quad \sum_\alpha n_\alpha = N$$

• $H|n_0, n_1, \dots\rangle = E|n_0, n_1 \dots\rangle$ mit

$$E = \sum_\alpha n_\alpha \varepsilon_\alpha$$

• Grundzustand: $n_0 = N$, $n_1 = n_2 = \dots = 0$

$$E_0 = N\varepsilon_0$$

Grundzustand freier Fermionen im Gefäss
(Spin $\frac{1}{2}$, N Teilchen, Volumen V)

- Dichte $n = \frac{N}{V}$

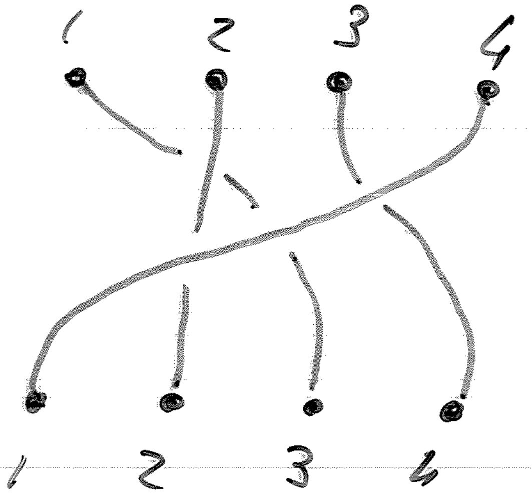
- Energie E_0

$$\frac{E_0}{V} = \frac{\hbar^2}{2m} \underbrace{(3\pi^2)^{2/3}}_{=:\gamma} \cdot \frac{3}{5} n^{5/3}$$

- Zustand: Alle 1-Teilchenzustände mit $|\vec{k}| \leq k_F$ besetzt:

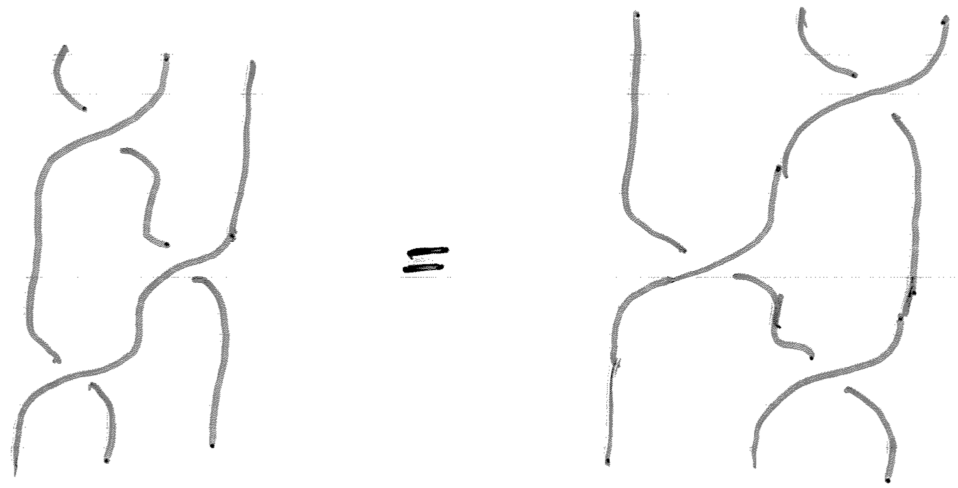
$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3} = \gamma^{1/2} n^{1/3}$$

Zopf b aus N Strängen. Bsp: N=4



Regeln:

- Ein Strang pro n = 1, .. N (unten und oben)
- Stränge nur nach oben
- Deformationen erzeugen keine neuen Zöpfe



Eigenschaften:

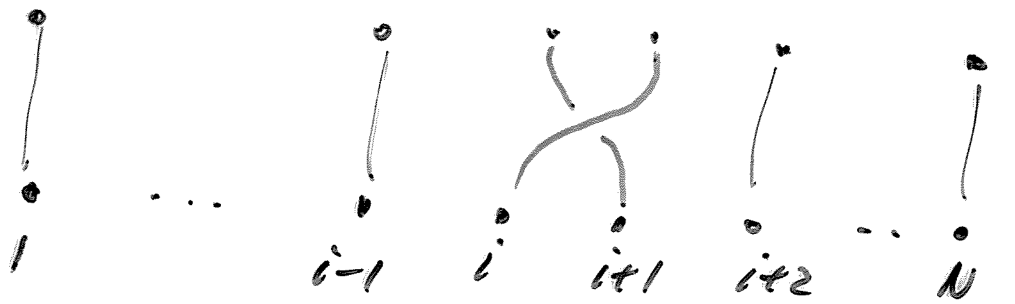
- Zöpfe bilden Gruppe B_N (Zopfgruppe,

Produkt $b_1 b_2$: b_1 liegt über b_2

Neutralel. id : gerade Stränge

inverses El. b^{-1} : Spiegelung von b an Horizontale

- Elementare Zöpfe $b_i = [i\ i{+}1]$ $(i = 1, \ldots N-1)$



erzeugen B_N.

- 1-dim. Darstellungen der B_N:

Sei $\chi : B_N \to U(1) = \{z \in \mathbb{C} \mid |z| = 1\}$ mit $\chi(b'b'') = \chi(b')\chi(b'')$. Dann gibt es $\alpha \in \mathbb{R} \mod 2\pi$ so, dass

$$\chi(b) = e^{i\alpha} \qquad (*)$$

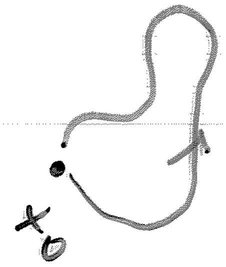
für alle elementaren Zöpfe b.

Umgekehrt ist durch $(*)$ eine Darstellung definiert.

M (topologischer) Raum

$x_0 \in M$ ausgezeichneter Punkt

- Schleife in x_0: Stetiger Pfad von x_0 nach x_0



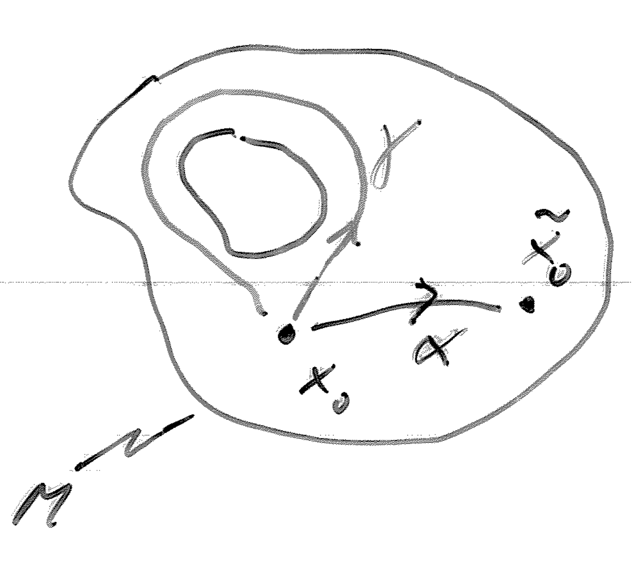
Deformationen (in M) erzeugen keine neue Schleifen

- $\pi_1(M, x_0) = \{\gamma \mid \gamma \text{ Schleife in } x_0\}$

  ist <u>Gruppe</u> (Produkt = Zusammensetzung)

- Falls M zusammenhängend,

$$\pi_1(M, x_0) \cong \pi_1(M, \tilde{x}_0) \equiv \pi_1(M)$$



$\alpha \gamma \alpha^{-1}$

ist Schleife in $\tilde{x}_0$

- $\pi_1(M)$ heisst (erste) <u>Homotopiegruppe</u>

$\pi_1(M)$ trivial $\Leftrightarrow$ M einfach zusammen-hängend

$x \in M_0$: Konfiguration von
N nicht koinzidenten Teilchen

$x \subset \mathbb{R}^d$: Teilmenge aus N
Elementen (ohne
Wiederholungen)

Hilbertraum N identischer Teilchen
trägt Darstellung

$$|\psi\rangle \longmapsto \chi(\gamma)|\psi\rangle$$

mit

$$\chi : \pi_1(M_0) \to U(1), \quad \gamma \longmapsto \chi(\gamma)$$

Es gilt:

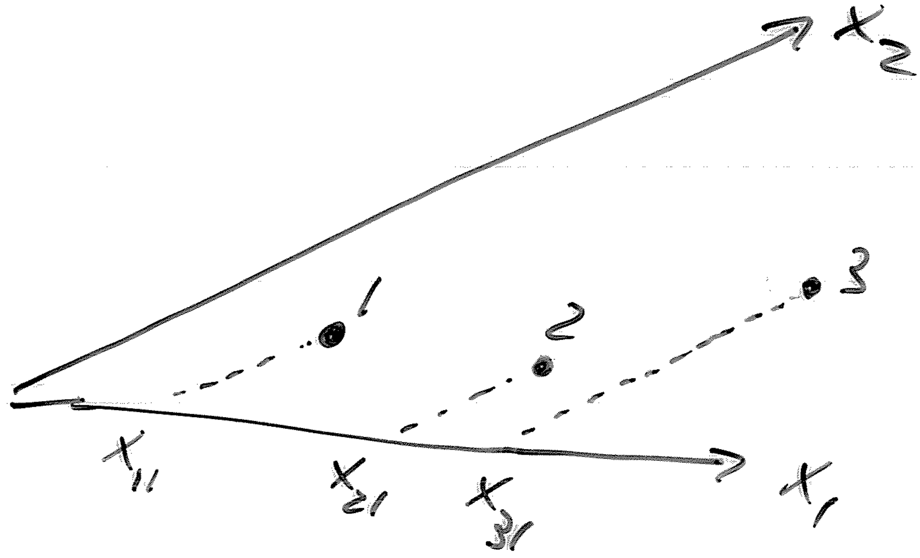
$$\pi_1(M_0) \cong B_N \qquad (d=2)$$

$$\pi_1(M_0) \cong S_N \qquad (d \geq 3)$$

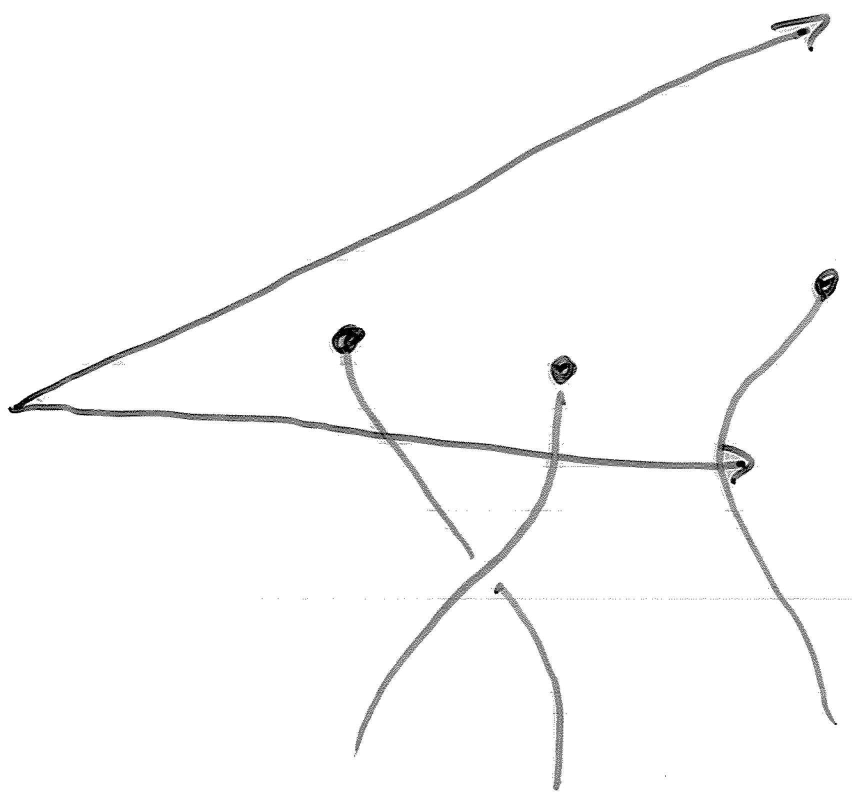
Bemerkung

$$\pi_1(M_0) \longrightarrow S_N, \quad \gamma \mapsto \sigma$$

(natürlich definiert) ist (surjektiver)
Homomorphismus



x_2
1
2
3
x_{11}
x_{21}
x_{31}
x_1



γ

Projektion auf 1-Achse längs 2-Achse

$$\gamma \longmapsto b$$

(Schleife) (Zopf)

ist injektiver (und surjektiver) Homomorphismus

$$\pi_1(M_0) \longrightarrow B_N$$

Anwendung:

Fraktionärer Quanten-Hall Effekt
(2D-Systeme)

Hall-Leitfähigkeit

$$\sigma_H = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \cdot \nu \qquad \text{mit } \nu = \frac{p}{q}$$

(p, q ganz)

Für $\nu = \frac{1}{m}$: Anregungen über dem Grundzustand sind Quasi-Teilchen mit

$$\alpha = \frac{\pi}{m} \qquad \text{(Anyonen)}$$

Das Thomas-Fermi Atommodell (oder Ion)

(Einheiten: $\frac{\hbar^2}{2m} = 1$, $|e| = 1$)

- fester Kern bei $\vec{x} = 0$ der Ladung Z,
- Hülle von N Elektronen, beschrieben durch Dichte $n(\vec{x})$,
- Energie der Dichte-Funktional

$E[n] =$

$$= \int d^3x \, \gamma \, \frac{3}{5} \, n(\vec{x})^{5/3} - \int d^3x \, \frac{Z \, n(\vec{x})}{|\vec{x}|} + \frac{1}{2} \int d^3x \, d^3y \, \frac{n(\vec{x}) \, n(\vec{y})}{|\vec{x} - \vec{y}|}$$

mit $\gamma = (3\pi^2)^{2/3}$

1. Term: Kinetische Energie der Elektronen, als ob Zusammenhang $n \to E_0/V$ lokal gelten würde
2. Term: Anziehung Elektronen $\Leftrightarrow$ Kern
3. Term: Abstossung der Elektronen (ignoriert Korrelationen)

- Gesucht: <u>Minimisierende Dichte</u> $n(\vec{x})$ für $E[n]$ unter Nebenbedingungen

  - $n(\vec{x}) \geq 0$, • $\int d^3x \, n(\vec{x}) = N$

- Lösung bestimmt durch

$$\delta E \equiv \frac{d}{dt} E[n + t\,\delta n] \Big|_{t=0+} \geq 0$$

für alle mit den Nebenbedingungen verträglichen Variationen $\delta n(\vec{x})$:

  - $\delta n(\vec{x}) \geq 0$ falls $n(\vec{x}) = 0$
  - $\int d^3x \, \delta n(\vec{x}) = 0$

- Euler-Lagrange Gl.

$$\gamma \, n(\vec{x})^{2/3} = (\mu - \phi(\vec{x}))_+ \qquad (1)$$

(TF-Gleichung)

mit

$$\phi(\vec{x}) = -\frac{Z}{|\vec{x}|} + \int d^3y \, \frac{n(\vec{y})}{|\vec{x} - \vec{y}|} \qquad (2)$$

(elektrisches Potential des Atoms)

(1,2): selbstkonsistentes Gleichungspaar

- sphärisch symmetrische Lösungen

Ansatz:

$$(\mu - \phi(r))_+ =: \frac{Z}{r}\chi(r)$$

mit $\chi(r) \geq 0$, $\chi(0) = 1$. Dann:

$$n(r) = \frac{Z}{4\pi r}\chi''(r) \quad , \quad (r>0, \chi>0)$$

→ TF-Gleichung:

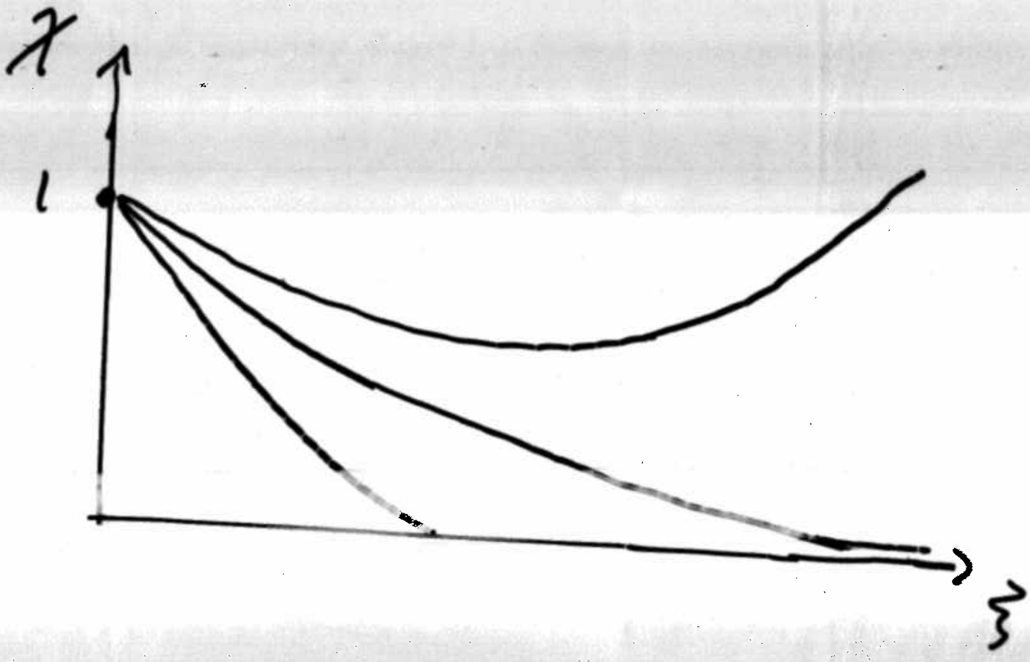
$$\chi''(r) = \frac{4}{3\pi} Z^{-1/2} r^{-1/2} \chi(r)^{3/2},$$

$$(r>0, \chi>0)$$

Lösungen von

$$\chi''(\xi) = \xi^{-1/2}\,\chi(\xi)^{3/2}$$

($\chi > 0$, $\xi \geq 0$) mit $\chi(0) = 1$ parametrisiert durch $\chi'(0)$:



Folgt $\chi(\xi) = 0$ für $\xi < \infty$, so $\chi'(\xi) \neq 0$

(ansonsten $\chi \equiv 0$)

Atom-Modell $(\hbar = 2m = |e| = 1)$

$$H = \sum_{k=1}^{N} \left(\vec{p}_k^{\,2} - \frac{Z}{|\vec{x}_k|} \right) + \sum_{i<j} \frac{1}{|\vec{x}_i - \vec{x}_j|}$$

$$\equiv \sum_{k=1}^{N} h_k + \sum_{i<j} w_{ij}$$

auf $\mathcal{H}_a^{(N)} = \mathcal{A}\Big(\bigotimes^N \underbrace{L^2(\mathbb{R}^3,\mathbb{C}^2)}_{\text{1-Teilchen HR } \mathcal{H}}\Big)$

$|\psi\rangle \in \mathcal{H}$: $\quad \psi(\xi)$, $\xi = (\vec{x}, \sigma)$, $\int d\xi = \sum_\sigma \int d^3x$

Quantenmechanische(r) Grundzustand(e)

$$E_0 = \min_{\|\psi\|=1} \langle \psi | H | \psi \rangle$$

Hartree-Fock Näherung

$$E_{HF} = \min_{\psi \in SD} \langle \psi | H | \psi \rangle$$

ψ ist Slater-Determinante

Slater-Determinante:

$$|\psi\rangle = \sqrt{N!}\, \mathcal{A}\, |\varphi_1 \otimes \cdots \otimes \varphi_N\rangle$$

mit $|\varphi_\alpha\rangle \in \mathcal{H}$, $\langle\varphi_\alpha|\varphi_\beta\rangle = \delta_{\alpha\beta}$.
(Orbitale)

- $|\psi\rangle$ invariant (bis auf Phase) unter unitären Transformationen unter den Orbitalen:

$$|\varphi_\alpha'\rangle = \sum_{\beta=1}^{N} U_{\alpha\beta} |\varphi_\beta\rangle \quad , \text{ bzw.}$$

$$\varphi_\alpha'(\xi) = \sum_\beta U_{\alpha\beta}\, \varphi_\beta(\xi)$$

$\rightarrow$ $|\psi\rangle$ bestimmt durch N-dimensionalen Unterraum

$$M = [\varphi_1 \dots \varphi_N] \subset \mathcal{H}$$

- Erwartungswert von H

$$\langle \Psi | H | \Psi \rangle = \sum_k \langle \varphi_k | h | \varphi_k \rangle +$$

$$+ \sum_{i<j} \underbrace{\langle \varphi_i \otimes \varphi_j | w | \varphi_i \otimes \varphi_j \rangle}_{\text{Direkter Term}} - \underbrace{\langle \varphi_j \otimes \varphi_i | w | \varphi_i \otimes \varphi_j \rangle}_{\text{Austausch-Term}}$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} = \frac{1}{2} \sum_{i,j}$$

Hartree-Fock Gleichungen

$$h_{HF} |\varphi_\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha |\varphi_\alpha\rangle \qquad (\alpha = 1, \dots N)$$

bzw.

$$\left(\vec{p}_1^{\,2} - \frac{Z}{|\vec{x}_1|}\right) \varphi_\alpha(\xi_1)$$

$$+ \sum_\beta \int d\xi_2 \, \overline{\varphi_\beta(\xi_2)} \frac{1}{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|} \left(\varphi_\alpha(\xi_1) \varphi_\beta(\xi_2) - \varphi_\beta(\xi_1) \varphi_\alpha(\xi_2)\right)$$

$$= \varepsilon_\alpha \varphi_\alpha(\xi_1)$$

bestimmen die Orbitale $|\varphi_\alpha\rangle$, damit Slater-Determinante

$$|\psi\rangle = \sqrt{N!} \mathcal{A}(|\varphi_1 \otimes \cdots \varphi_N\rangle)$$

ein stationärer Punkt der Energie

$$\langle \psi | H | \psi \rangle$$

ist. Insbesondere wenn $|\psi\rangle$ Minimisierer von

$$E_{HF} = \min_{|\psi\rangle \in SD} \langle \psi | H | \psi \rangle$$

ist.

Energien des GZ in Ry

einfacher Variationsansatz

Atom	E_{HF}	E_0 (exakt)	E_{QMI}
He	-5.724	-5.808	-5.685
Be	-29.146	-29.334	
Ne	-257.1	-257.86	

Atom-Modell (N Elektronen, $N = Z$)

$$H = \sum_{k=1}^{N} \left(\vec{p}_k^{\,2} - \frac{Z}{|\vec{x}_k|} \right) + \sum_{i<j} \frac{1}{|\vec{x}_i - \vec{x}_j|}$$

auf $\mathcal{H}_a^{(N)}$. Eigenräume tragen (in der Regel irreduzible) Darstellungen der $SO(3) \times SU(2)$, notiert $\mathcal{D}_L \otimes \mathcal{D}_S$. Welche, zumindest für den Grundzustand?

- Vorerst: Schalenmodell

$$H_{SM} = \sum_{k=1}^{N} \left(\vec{p}_k^{\,2} + \phi(r_k) \right) \qquad (r_k = |\vec{x}_k|)$$

beschreibt unabhängige e^- im Zentralpotential $\phi(r)$: Summarische Beschr. der WW eines e^- mit $N-1$ restlichen & Kern. Für $h = \vec{p}^{\,2} + \phi(r)$:

Schalen: nl

$l = 0, 1, 2, \ldots$ (auch: $s, p, d, \ldots$)

$n = l+1, l+2, \ldots$

Entartung: $2(2l+1)$

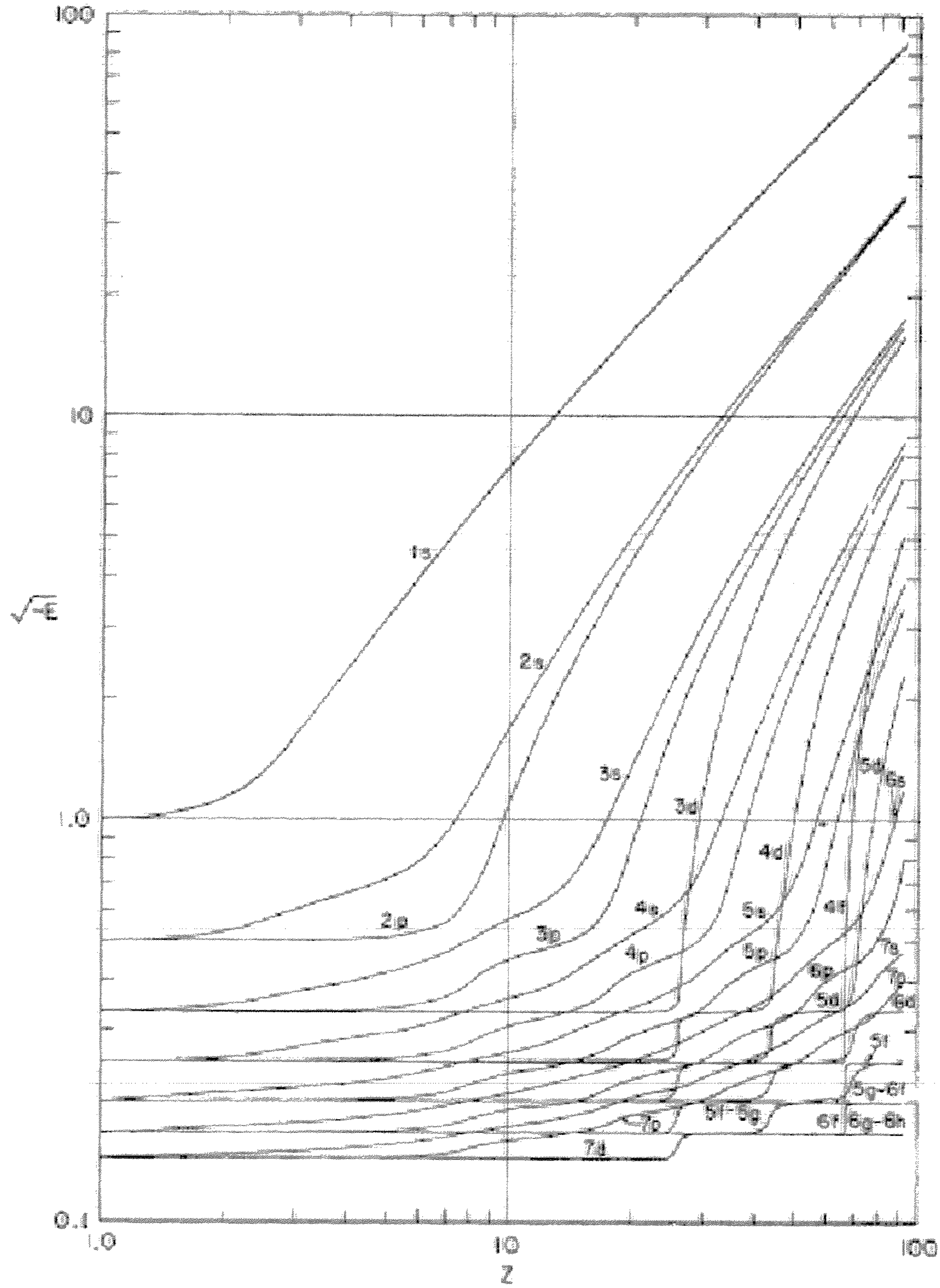


FIG. 7. The square root of the term values of Table I for the Thomas-Fermi atom is shown as a function of Z.

Mit wachsendem $N = Z$, Schalen sukzessive gefüllt gemäss Madelung-Regel. → <u>Konfigurationen</u>

<u>Bsp.</u> $Z = 6$ (Kohlenstoff C)

Konfig. des GZ: $\underbrace{(1s)^2(2s)^2}_{\text{geschloss.}}\underbrace{(2p)^2}_{\text{offene}}$

Schale

Entartung

$$\binom{6}{2} = 15$$

(Ent. von 2p: 6 ; $\# e^-$: 2)

<u>Bsp.</u> $Z = 7$ (Stickstoff N)

$$(1s)^2(2s)^2(2p)^3$$

Entartung

$$\binom{6}{3} = 20$$

Beachte: Konfig. tragen in der Regel eine <u>reduzible</u> Darstellung der $SO(3) \times SU($

	s	p	d	f	g	
$2(2l+1) =$	2	6	10	14	18	22
$l =$	0	1	2	3	4	5
$n = 1$	•					
2	•	•				
3	•	•	•			
4	•	•	•	•		
5	•	•	•	•	•	
6	•	•	•	•	•	•

$n + l = \text{konst}$

Schale	# Zustände	# Zustände (kumulativ)	Schalennummer
1s	2	2	1
2s	2	4	2
2p	6	10	
3s	2	12	3
3p	6	18	
4s	2	20	4
3d	10	30	
4p	6	36	
5s	2	38	5
...			

Periodensystem der Elemente

http://www.pse-online.de

Benennung mit Haupt- und Nebengruppen
IUPAC – Empfehlung
Von Chemical Abstracts Service bis 1986 verwendet

Relative Atommasse (Massenzahl des langlebigsten Isotops)	243,0614	* Künstliches Element
	$[Rn]5f^7 7s^2$	Elektronenkonfiguration
Ordnungszahl	95Am	Elementsymbol
	3,4,5,6	Oxidationszahlen (häufigste)
Schmelzpunkt [°C]	994 ~1.2	Elektronegativität
Siedepunkt [°C]	2607 6.0	Erste Ionisierungsenergie [eV]
Elementname	Americium	

Elementsymbol:
Tc = kein stabiles Isotop bekannt
N = gasförmig
Br = flüssig (bei 20 °C)
Am = fest

	1 1. Hg IA	2 2. Hg IIA	3 3. Ng IIIB	4 4. Ng IVB	5 5. Ng VB	6 6. Ng VIB	7 7. Ng VIIB	8 8. Ng VIII	9 8. Ng VIII	10 8. Ng VIII	11 1. Ng IB	12 2. Ng IIB	13 3. Hg IIIA	14 4. Hg IVA	15 5. Hg VA	16 6. Hg VIA	17 7. Hg VIIA	18 8. Hg VIIIA
1	1,00794 $1s^1$ 1H -1,1 -259 2.2 -253 13.6 Wasserstoff																	4,002602 $1s^2$ 2He -272 - -269 24.6 Helium
2	6,941 $[He]2s^1$ 3Li 1 181 1.0 1317 5.4 Lithium	9,012182 $[He]2s^2$ 4Be 2 1278 1.5 2970 9.3 Beryllium											10,811 $[He]2s^2 2p^1$ 5B 3 2300 2.0 2550 8.3 Bor	12,0107 $[He]2s^2 2p^2$ 6C -4,2,4 3550 2.5 4827 11.3 Kohlenstoff	14,00674 $[He]2s^2 2p^3$ 7N -3,2,3,4,5 -210 3.1 -196 14.5 Stickstoff	15,9994 $[He]2s^2 2p^4$ 8O -2,-1 -218 3.5 -183 13.6 Sauerstoff	18,9984032 $[He]2s^2 2p^5$ 9F -1 -220 4.1 -188 17.4 Fluor	20,1797 $[He]2s^2 2p^6$ 10Ne -249 - -246 21.6 Neon
3	22,989770 $[Ne]3s^1$ 11Na 1 98 1.0 892 5.1 Natrium	24,3050 $[Ne]3s^2$ 12Mg 2 649 1.2 1107 7.6 Magnesium											26,981538 $[Ne]3s^2 3p^1$ 13Al 3 661 1.5 2467 6.0 Aluminium	28,0855 $[Ne]3s^2 3p^2$ 14Si -4,4 1410 1.7 2355 8.2 Silicium	30,973761 $[Ne]3s^2 3p^3$ 15P -3,3,5 44 2.1 280 10.5 Phosphor	32,066 $[Ne]3s^2 3p^4$ 16S -2,2,4,6 113 2.4 445 10.4 Schwefel	35,4527 $[Ne]3s^2 3p^5$ 17Cl -1,1,3,5,7 -101 2.8 -35 13.0 Chlor	39,948 $[Ne]3s^2 3p^6$ 18Ar -189 - -186 15.8 Argon
4	39,0983 $[Ar]4s^1$ 19K 1 64 0.9 774 4.3 Kalium	40,078 $[Ar]4s^2$ 20Ca 2 839 1.0 1487 6.1 Calcium	44,955910 $[Ar]3d^1 4s^2$ 21Sc 3 1539 1.2 2832 6.5 Scandium	47,867 $[Ar]3d^2 4s^2$ 22Ti 3,4 1660 1.3 3260 6.8 Titan	50,9415 $[Ar]3d^3 4s^2$ 23V 0,2,3,4,5 1890 1.5 3380 6.7 Vanadium	51,9961 $[Ar]3d^5 4s^1$ 24Cr 0,2,3,6 1857 1.6 2482 6.8 Chrom	54,938049 $[Ar]3d^5 4s^2$ 25Mn -1,0,2,3,4,6,7 1244 1.6 2097 7.4 Mangan	55,845 $[Ar]3d^6 4s^2$ 26Fe -2,0,2,3,6 1535 1.6 2750 7.9 Eisen	58,93320 $[Ar]3d^7 4s^2$ 27Co -1,0,2,3 1495 1.7 2870 7.9 Cobalt	58,6934 $[Ar]3d^8 4s^2$ 28Ni 0,2,3 1453 1.8 2732 7.6 Nickel	63,546 $[Ar]3d^{10} 4s^1$ 29Cu 1,2 1084 1.8 2595 7.7 Kupfer	65,39 $[Ar]3d^{10} 4s^2$ 30Zn 2 420 1.7 907 9.4 Zink	69,723 $[Ar]3d^{10} 4s^2 4p^1$ 31Ga 3 30 1.8 2403 6.0 Gallium	72,61 $[Ar]3d^{10} 4s^2 4p^2$ 32Ge 4 937 2.0 2830 7.9 Germanium	74,92160 $[Ar]3d^{10} 4s^2 4p^3$ 33As -3,3,5 613(subl.) 2.2 9.8 Arsen	78,96 $[Ar]3d^{10} 4s^2 4p^4$ 34Se -2,4,6 217 2.5 685 9.8 Selen	79,904 $[Ar]3d^{10} 4s^2 4p^5$ 35Br -1,1,3,5,7 -7 2.7 59 11.8 Brom	83,80 $[Ar]3d^{10} 4s^2 4p^6$ 36Kr 2 -157 - -152 14.0 Krypton
5	85,4678 $[Kr]5s^1$ 37Rb 1 39 0.9 688 4.2 Rubidium	87,62 $[Kr]5s^2$ 38Sr 2 769 1.0 1384 5.7 Strontium	88,90585 $[Kr]4d^1 5s^2$ 39Y 3 1523 1.1 3337 6.4 Yttrium	91,224 $[Kr]4d^2 5s^2$ 40Zr 4 1852 1.2 4377 6.8 Zirconium	92,90638 $[Kr]4d^4 5s^1$ 41Nb 3,5 2468 1.2 4927 6.9 Niobium	95,94 $[Kr]4d^5 5s^1$ 42Mo 0,2,3,4,5,6 2617 1.3 5560 7.1 Molybdän	[98] $[Kr]4d^5 5s^2$ 43Tc 7 2172 1.4 5030 7.3 Technetium	101,07 $[Kr]4d^7 5s^1$ 44Ru -2,0,2,3,4,6,8 2310 1.4 3900 7.4 Ruthenium	102,90550 $[Kr]4d^8 5s^1$ 45Rh 0,1,2,3,4,5 1966 1.5 3727 7.5 Rhodium	106,42 $[Kr]4d^{10}$ 46Pd 0,2,4 1552 1.4 3140 8.3 Palladium	107,8682 $[Kr]4d^{10} 5s^1$ 47Ag 1,2 962 1.4 2212 7.6 Silber	112,411 $[Kr]4d^{10} 5s^2$ 48Cd 2 321 1.5 765 9.0 Cadmium	114,818 $[Kr]4d^{10} 5s^2 5p^1$ 49In 3 157 1.5 2080 5.8 Indium	118,710 $[Kr]4d^{10} 5s^2 5p^2$ 50Sn 2,4 232 1.7 2270 7.3 Zinn	121,760 $[Kr]4d^{10} 5s^2 5p^3$ 51Sb -3,3,5 631 1.8 1750 8.6 Antimon	127,60 $[Kr]4d^{10} 5s^2 5p^4$ 52Te -2,4,6 450 2.0 990 9.0 Tellur	126,90447 $[Kr]4d^{10} 5s^2 5p^5$ 53I -1,1,5,7 114 2.2 184 10.5 Iod	131,29 $[Kr]4d^{10} 5s^2 5p^6$ 54Xe 2,4,6 -112 - -107 12.1 Xenon
6	132,90545 $[Xe]6s^1$ 55Cs 1 28 0.9 690 3.9 Cäsium	137,327 $[Xe]6s^2$ 56Ba 2 725 1.0 1640 5.2 Barium	57 – 71 La-Lu Lanthanoide	178,49 $[Xe]4f^{14} 5d^2 6s^2$ 72Hf 4 2150 1.2 5400 7.0 Hafnium	180,9479 $[Xe]4f^{14} 5d^3 6s^2$ 73Ta 5 2996 1.3 5425 7.9 Tantal	183,84 $[Xe]4f^{14} 5d^4 6s^2$ 74W 0,2,3,4,5,6 3407 1.4 5927 8.0 Wolfram	186,207 $[Xe]4f^{14} 5d^5 6s^2$ 75Re -1,2,4,6,7 3180 1.5 5627 7.9 Rhenium	190,23 $[Xe]4f^{14} 5d^6 6s^2$ 76Os -2,0,2,3,4,6,8 3045 1.5 5027 8.7 Osmium	192,217 $[Xe]4f^{14} 5d^7 6s^2$ 77Ir -1,0,1,2,3,4,6 2410 1.6 4130 9.1 Iridium	195,078 $[Xe]4f^{14} 5d^9 6s^1$ 78Pt 0,2,4 1772 1.4 3827 9.0 Platin	196,96655 $[Xe]4f^{14} 5d^{10} 6s^1$ 79Au 1,3 1064 1.4 2940 9.2 Gold	200,59 $[Xe]4f^{14} 5d^{10} 6s^2$ 80Hg 1,2 -39 1.5 357 10.4 Quecksilber	204,3833 $[Xe]4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^1$ 81Tl 1,3 304 1.4 1457 6.1 Thallium	207,2 $[Xe]4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^2$ 82Pb 2,4 328 1.6 1740 7.4 Blei	208,98038 $[Xe]4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^3$ 83Bi 3,5 271 1.7 1560 7.3 Bismut	[209] $[Xe]4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^4$ 84Po 2,4,6 254 1.8 962 8.4 Polonium	[210] $[Xe]4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^5$ 85At -1,1,3,5,7 302 2.0 337 9.5 Astat	[222] $[Xe]4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^6$ 86Rn 2 -71 - -62 10.7 Radon
7	[223] $[Rn]7s^1$ 87Fr 1 27 0.9 677 4.0 Francium	[226] $[Rn]7s^2$ 88Ra 2 700 1.0 1140 5.3 Radium	89 –103 Ac-Lr Actinoide	[261] * $[Rn]5f^{14} 6d^2 7s^2$ 104Rf Rutherfordium	[262] * $[Rn]5f^{14} 6d^3 7s^2$ 105Db Dubnium	[263] * $[Rn]5f^{14} 6d^4 7s^2$ 106Sg Seaborgium	[264] * $[Rn]5f^{14} 6d^5 7s^2$ 107Bh Bohrium	[265] * $[Rn]5f^{14} 6d^6 7s^2$ 108Hs Hassium	[268] * $[Rn]5f^{14} 6d^7 7s^2$ 109Mt Meitnerium	[269] * $[Rn]5f^{14} 6d^9 7s^1$ 110Uun Ununilium	[272] * $[Rn]5f^{14} 6d^{10} 7s^1$ 111Uuu Unununium	[277] * 112Uub Ununbium	113Uut Ununtrium[1]	[289] * 114Uuq Ununquadium	115Uup Ununpentium[1]	[289] * 116Uuh Ununhexium	117Uus Ununseptium[1]	[293] * 118Uuo Ununoctium

[1] Die Elemente mit den Ordnungszahlen 113, 115, 117 wurden noch nicht synthetisiert!

6	138,9055 $[Xe]5d^1 6s^2$ 57La 3 920 1.1 3454 5.6 Lanthan	140,116 $[Xe]4f^2 6s^2$ 58Ce 3,4 798 1.1 3257 5.5 Cer	140,90765 $[Xe]4f^3 6s^2$ 59Pr 3,4 931 1.1 3212 5.4 Praseodym	144,24 $[Xe]4f^4 6s^2$ 60Nd 3 1010 1.1 3127 5.5 Neodym	[145] $[Xe]4f^5 6s^2$ 61Pm 3 1080 1.1 2730 5.6 Promethium	150,36 $[Xe]4f^6 6s^2$ 62Sm 2,3 1072 1.1 1778 5.6 Samarium	151,964 $[Xe]4f^7 6s^2$ 63Eu 2,3 822 1.0 1597 5.7 Europium	157,25 $[Xe]4f^7 5d^1 6s^2$ 64Gd 3 1311 1.1 3233 6.1 Gadolinium	158,92534 $[Xe]4f^9 6s^2$ 65Tb 3,4 1360 1.1 3041 5.9 Terbium	162,50 $[Xe]4f^{10} 6s^2$ 66Dy 3 1406 2335 5.9 Dysprosium	164,93032 $[Xe]4f^{11} 6s^2$ 67Ho 3 1470 1.1 2720 6.0 Holmium	167,26 $[Xe]4f^{12} 6s^2$ 68Er 3 1522 1.1 2510 6.1 Erbium	168,93421 $[Xe]4f^{13} 6s^2$ 69Tm 2,3 1545 1.1 1727 6.2 Thulium	173,04 $[Xe]4f^{14} 6s^2$ 70Yb 2,3 824 1.1 1193 6.3 Ytterbium	174,967 $[Xe]4f^{14} 5d^1 6s^2$ 71Lu 3 1656 1.1 3315 5.4 Lutetium
7	[227] $[Rn]6d^1 7s^2$ 89Ac 3 1047 1.0 3197 6.9 Actinium	[232] $[Rn]6d^2 7s^2$ 90Th 4 1750 1.1 4787 7.0 Thorium	[231] $[Rn]5f^2 6d^1 7s^2$ 91Pa 4,5 1554 1.1 4030 - Protactinium	[238] $[Rn]5f^3 6d^1 7s^2$ 92U 3,4,5,6 1132 1.2 3818 6.1 Uran	[237] $[Rn]5f^4 6d^1 7s^2$ 93Np 3,4,5,6 640 1.2 3902 Neptunium	[244] $[Rn]5f^6 7s^2$ 94Pu 3,4,5,6 641 1.2 3327 5.8 Plutonium	[243] * $[Rn]5f^7 7s^2$ 95Am 3,4,5,6 994 ~1.2 2607 6.0 Americium	[247] * $[Rn]5f^7 6d^1 7s^2$ 96Cm 3,4 1340 ~1.2 3100 Curium	[247] * $[Rn]5f^9 7s^2$ 97Bk 3,4 986 ~1.2 Berkelium	[251] * $[Rn]5f^{10} 7s^2$ 98Cf 3,4 900 ~1.2 Californium	[252] * $[Rn]5f^{11} 7s^2$ 99Es 3 860 ~1.2 Einsteinium	[257] * $[Rn]5f^{12} 7s^2$ 100Fm 3 ~1.2 Fermium	[258] * $[Rn]5f^{13} 7s^2$ 101Md 3 ~1.2 Mendelevium	[259] * $[Rn]5f^{14} 7s^2$ 102No 2,3 Nobelium	[262] * $[Rn]5f^{14} 6d^1 7s^2$ 103Lr 3 Lawrencium

lars@pse-online.de
http://www.pse-online.de

• Zurück zu

$$H = H_{SM} + W$$

$$W = \underbrace{-\sum_{k=1}^{N} \frac{Z}{|\vec{x}_k|} + \sum_{i<j} \frac{1}{|\vec{x}_i - \vec{x}_j|}}_{\text{WW exakt}} \underbrace{- \sum_{k=1}^{N} \phi(r_k)}_{\text{WW summarisch}}$$

Bei $H_{SM} \rightsquigarrow H$: Entartung der Konfigurationen teilweise aufgehoben

Aufspaltung einer Konfiguration

Beispiel: offene Schale $(p)^2$, z.B. C, Si

Entartung $\binom{6}{2} = 15$

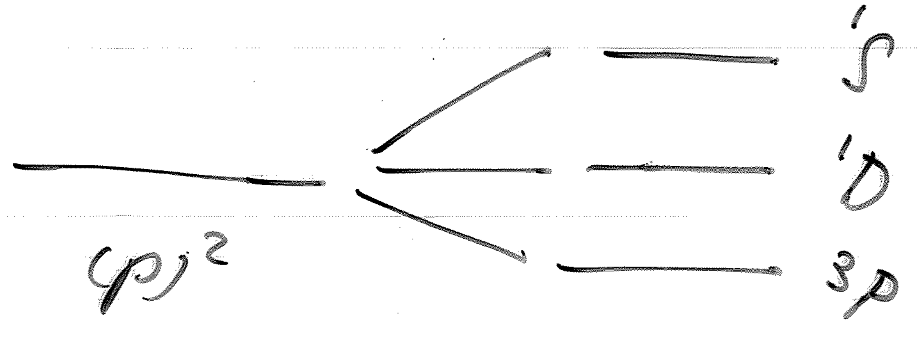
Vorkommende Darstellungen $D_L \otimes D_S$

$$(D_0 \otimes D_0) \oplus (D_1 \otimes D_1) \oplus (D_2 \otimes D_0)$$

$$= {}^1S \oplus {}^3P \oplus {}^1D$$

(Notation: ${}^{2S+1}L$)

Aufspaltung durch W



Konfiguration Multipletts

Ordnung der Multipletts → Hundsche Regeln.

Hund'sche Regeln

1. Das LS-Multiplett mit dem grössten S hat die kleinste Energie

2. Falls mehrere L mit dem gleichen S vorkommen, hat das grösste L die kleinste Energie

---

Für höchstens halb gefüllte Schalen

$$N \leq \frac{1}{2} \cdot 2(2l+1) = 2l+1 :$$

$$\| \quad S = \frac{N}{2} \quad , \quad L = l + (l-1) + \ldots + (l-N+1) \|$$

enthält Zustand der Symbolreihe

$$l^+ (l-1)^+ \ldots (l-N+1)^+$$

Speziell: halb gefüllte Schale $N = 2l+1$:

$$L = 0$$

Ergänzung des Atommodells durch Spin-Bahn-Kopplung

$$\tilde{H} = H + H_{SB}$$

$$H_{SB} = \sum_{k=1}^{N} \frac{\hbar^2}{2m \cdot mc^2} \frac{1}{r_k} \frac{d\phi}{dr_k} \vec{L}_k \cdot \vec{S}_k$$

Bei $H \rightsquigarrow \tilde{H}$, Reduktion der Symmetrie:

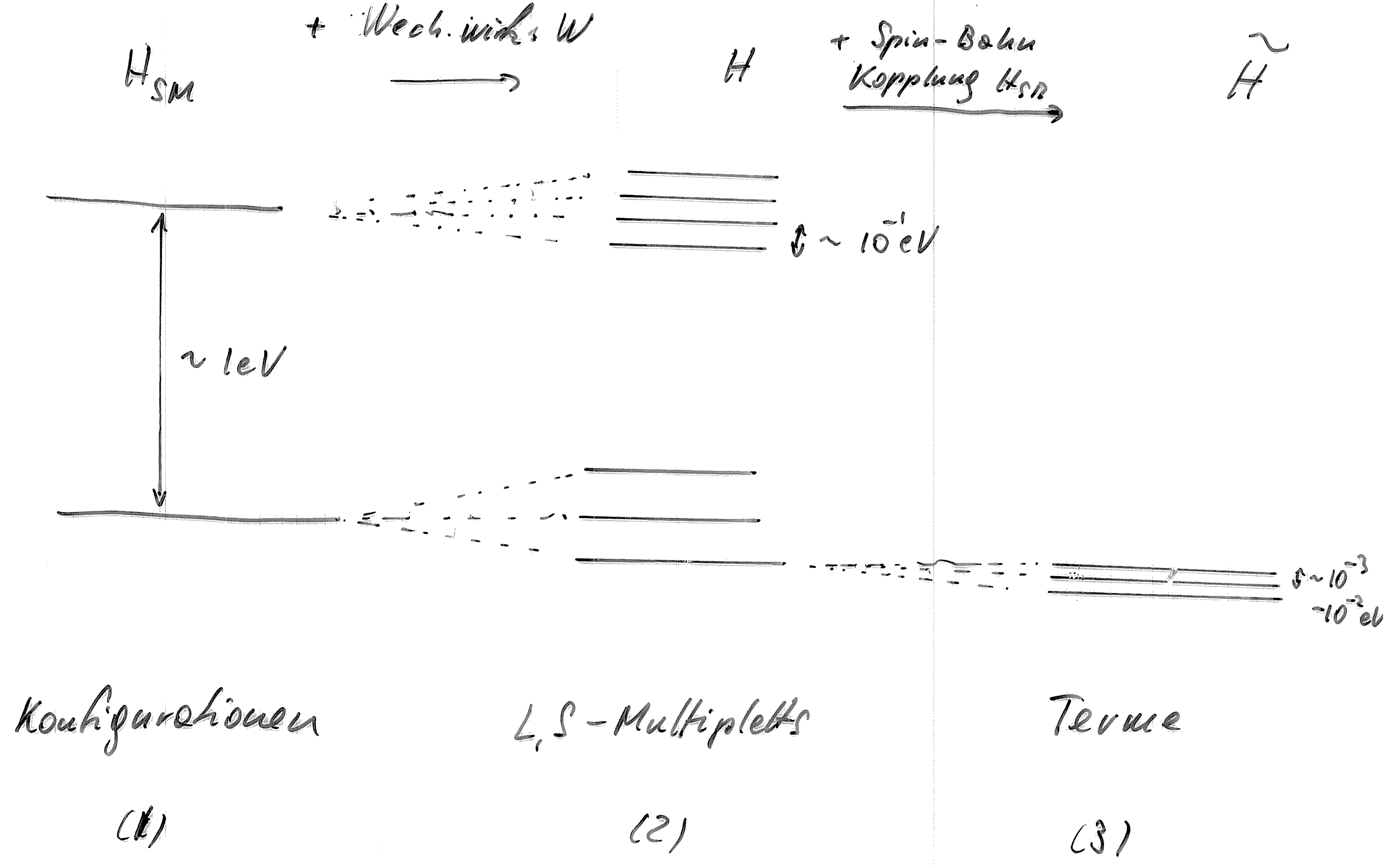
$$(R, U) \in SO(3) \times SU(2) \rightsquigarrow (R(U), U)$$

separate Drehungen von Ort und Spin aller Elektronen. | gemeinsame Drehungen

$\vec{L}, \vec{S}$ $\rightsquigarrow$ $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$

Erhaltungsgrössen

Atombau, insb. Bestimmung von L, S, J im Grundzustand



Fock-Raum : Hilbertraum für Zustände beliebiger, endlicher Teilchenzahl

$\mathcal{H}$: 1-Teilchen-Raum

$$\mathcal{H}^{(n)}_{s/a} = \left\{ \psi \in \otimes^n \mathcal{H} \,/\, P_\sigma \psi = \left\{ {1 \atop \mathrm{sgn}\,\sigma} \right\} \psi \right\}$$

für $\begin{cases} \text{Bosonen (s)} \\ \text{Fermionen (a)} \end{cases}$

$$\left(\mathcal{H}^{(0)}_{s/a} = \mathbb{C} ,\ \mathcal{H}^{(1)}_{s/a} = \mathcal{H} \right)$$

$\mathcal{H}^{(n)}_{s/a}$: n-Teilchen-Raum

Fock-Raum:

$$\mathcal{F}_{s/a} = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathcal{H}^{(n)}_{s/a}$$

Zustand $\Psi \in \mathcal{F}$ ist Folge

$$|\Psi\rangle = \{ \psi^0, \psi^1, \psi^2, \dots \} \quad \text{mit } \psi^n \in \mathcal{H}^{(n)}_{s/a}$$

Wir identifizieren

$$|\psi^n\rangle \equiv \{0, 0, \dots 0, \psi^n, 0, \dots\}$$

n-ter Eintrag

<u>Vakuum</u>:

$$|0\rangle = \{1, 0, 0, \dots\}$$

<u>Vernichtungsoperator</u>

(Sei $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^2)$, $|\psi\rangle \leftrightarrow \psi(\xi)$, $\xi = (\vec{x}, s)$)

Für $|f\rangle \in \mathcal{H}$ sei

$$a(f) : \mathcal{F}_{sra} \to \mathcal{F}_{sra}, \quad \Psi \mapsto a(f)\Psi$$

definiert durch

$$(a(f)\Psi)^{n-1}(\xi_2, \dots \xi_n)$$

$$:= \sqrt{n} \int d\xi_1 \, \overline{f(\xi_1)} \, \psi^n(\xi_1, \xi_2, \dots \xi_n).$$

Insbesondere:

- $a(f) : \mathcal{H}_{sra}^{(n)} \to \mathcal{H}_{sra}^{(n-1)}$, $(n \geq 1)$
- $a(f)|0\rangle = 0$

Erzeugungsoperator $a^*(f) := (a(f))^*$

$$(a^*(f)\psi)^n(\xi_1, \dots \xi_n) \qquad (n \geq 1)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{k=1}^{n} (\pm 1)^{k-1} f(\xi_k)\, \psi^{n-1}(\xi_1, \dots \hat{\xi}_k, \dots \xi_n)$$

Auslassung

$$(a^*(f)\psi)^0 = 0$$

Insbesondere: $a^*(f) : \mathcal{H}_{s/a}^{(n)} \to \mathcal{H}_{s/a}^{(n+1)}$

Kommutator / Antikommutator

$$[A,B]_{\mp} = AB \mp BA \quad \begin{cases} \text{Bosonen} \\ \text{Fermionen} \end{cases}$$

Vertauschungsrelationen

$$[a(f), a(g)]_{\mp} = 0 \quad , \quad [a^*(f), a^*(g)]_{\mp} = 0$$

$$[a(f), a^*(g)]_{\mp} = \langle f, g \rangle$$

($|f\rangle, |g\rangle \in \mathcal{H}$ 1-Teilchenzustände)

ONBasis $|f_i\rangle$ für $\mathcal{H}$. Setze

$$a_i = a(f_i)$$

Basiswechsel: $|f_i\rangle \to |\tilde{f}_i\rangle$

$$\tilde{a}_i = \sum_j a_j \langle \tilde{f}_i | f_j \rangle$$

$$\tilde{a}_i^* = \sum_j a_j^* \langle f_j | \tilde{f}_i \rangle$$

Observablen in der Fock-Darstellung

- 1-Teilchenoperator b

$$d\Gamma(b) = \sum_{i=1}^{n} b^{(i)}$$

auf n-Teilchenzuständen ($b^{(i)}$ ist b auf i-tes Teilchen wirkend). Dann

$$d\Gamma(b) = \sum_{kl} a_k^* b_{kl} a_l$$

(k,l indizieren Vektoren der 1-Teilchenbasis) mit

$$b_{kl} = \langle f_k | b | f_l \rangle$$

- 2-Teilchenoperator b

$$d\Gamma(b) = \sum_{i<j} b^{(ij)} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} b^{(ij)} \text{ auf } \mathcal{H}^{(n)}$$

Dann

$$d\Gamma(b) = \frac{1}{2} \sum_{k_1 k_2 l_1 l_2} a_{k_2}^* a_{k_1}^* b_{k_1 k_2 l_1 l_2} a_{l_1} a_{l_2}$$

mit

$$b_{k_1 k_2 l_1 l_2} = \langle f_{k_1} \otimes f_{k_2} | b | f_{l_1} \otimes f_{l_2} \rangle$$

Observablen in der Fock-Darstellung (Fort.)

- 1-Teilchenoperator b auf $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$

Erwartungswerte ($|\psi\rangle \in \mathcal{H}$)

$$\langle\psi|b|\psi\rangle = \int d^3x\, d^3x' \langle\psi|\vec{x}\rangle \underbrace{\langle\vec{x}|b|\vec{x}'\rangle}\langle\vec{x}'|\psi\rangle$$

$$= \int d^3x\, d^3x'\, \overline{\psi(\vec{x})}\, b(\vec{x},\vec{x}')\, \psi(\vec{x}')$$

Zum Vergleich:

$$d\Gamma(b) = \int d^3x\, d^3x'\, \Psi^*(\vec{x})\, b(\vec{x},\vec{x}')\, \Psi(\vec{x}')$$

"Rezept" der 2.ten Quantisierung:

$b \rightsquigarrow d\Gamma(b)$ erhält man durch

$$\underset{\substack{\uparrow \\ \text{Wellenfunktion}}}{\psi(\vec{x})} \longrightarrow \underset{\text{Feldoperator}}{\Psi(\vec{x})}$$

im Ausdruck für $\langle\psi|b|\psi\rangle$.

- 2-Teilchenoperator: analog, s. Beispiele

Beispiele (Abkürzung $\hat{\sigma} \equiv d\Gamma(\sigma)$)

1) Dichte in $\vec{x}_0$: 1-T.op.

$$\rho(\vec{x}_0) = \delta(\vec{x}-\vec{x}_0)$$

$$\langle\psi|\rho(\vec{x}_0)|\psi\rangle = \int d^3x\, |\psi(\vec{x})|^2 \delta(\vec{x}-\vec{x}_0)$$

$$= |\psi(\vec{x}_0)|^2 = \overline{\psi(\vec{x}_0)}\psi(\vec{x}_0)$$

Also:

$$\hat{\rho}(\vec{x}_0) = \Phi^*(\vec{x}_0)\Phi(\vec{x}_0).$$

2) Kinetische Energie : 1-T. op

$$T = \frac{\vec{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$$

$$\langle\psi|T|\psi\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\int d^3x\, \overline{\psi(\vec{x})}(\Delta\psi)(\vec{x})$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\int d^3x\, \overline{\vec{\nabla}\psi(\vec{x})}\cdot\vec{\nabla}\psi(\vec{x})$$

Also:

$$\hat{T} = \frac{\hbar^2}{2m}\int d^3x\, \vec{\nabla}\Phi^*(\vec{x})\cdot\vec{\nabla}\Phi(\vec{x})$$

3) Paarwechselwirkung : 2-T. op.

$W(\vec{x}-\vec{y})$

$$\langle\psi|W|\psi\rangle = \int d^3x\, d^3y\, \overline{\psi(\vec{x},\vec{y})}\, W(\vec{x}-\vec{y})\, \psi(\vec{x},\vec{y})$$

Also

$$\hat{W} = \frac{1}{2}\int d^3x\, d^3y\, \Phi^*(\vec{y})\,\Phi^*(\vec{x})\, W(\vec{x}-\vec{y})\, \Phi(\vec{x})\,\Phi(\vec{y})$$

Anwendung: Der Vielteilchen-Hamilton operator

$$H = \sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\vec{P}_i^{\,2}}{2m} + V(\vec{x}_i)\right) + \sum_{i<j}^{n} W(\vec{x}_i - \vec{x}_j)$$

ist auch

$$H = \int d^3x \left(\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}\Phi^*(\vec{x})\cdot\vec{\nabla}\Phi(\vec{x}) + \Phi^*(\vec{x})\, V(\vec{x})\,\Phi(\vec{x})\right)$$

$$+ \frac{1}{2}\int d^3x\, d^3y\, \Phi^*(\vec{y})\,\Phi^*(\vec{x})\, W(\vec{x}-\vec{y})\,\Phi(\vec{x})\,\Phi(\vec{y})$$

Freie Teilchen im Quantisierungsvolumen $[0,L]^3$, $(V=L^3)$:

- 1-Teilchenzustände (Basis) $|\varphi_{\vec{k},s'}\rangle$

$$\langle\vec{x},s|\varphi_{\vec{k},s'}\rangle = \delta_{ss'}\frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$$

$(\vec{k}\in\left(\frac{2\pi}{L}\right)\mathbb{Z}^3, s=\pm$

- Zweite Quantisierung

Basis $|\varphi_{\vec{k},s}\rangle \longrightarrow a_{\vec{k},s}$

Basis $|\xi\rangle = |\vec{x},s\rangle \longrightarrow \Psi(\xi)$

$$\Psi(\vec{x},s) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}\, a_{\vec{k},s}$$

"Feldoperator"

Any serious consideration of a physical theory must take into account the distinction between the objective reality, which is independent of any theory, and the physical concepts with which the theory operates. These concepts are intended to correspond with the objective reality, and by means of these concepts we picture this reality ourselves.

(Einstein, Podolsky, Rosen)

Die Arbeit von Einstein, Podolsky, Rosen:

- Hinreichendes Kriterium für ein Element (i) physikalischer Wirklichkeit:

  "Falls wir, ohne das System in irgend einer Art zu stören, mit Sicherheit (d.h. mit W'keit gleich Eins) den Wert einer physikalischen Grösse voraussagen können, dann existiert ein Element physikalischer Wirklichkeit, das dieser physikalischen Grösse entspricht"

- Notwendiges Kriterium, damit eine Theorie (ii) vollständig ist:

  "Jedes Element physikalischer Wirklichkeit muss ein Gegenstück in der physikalischen Theorie haben"

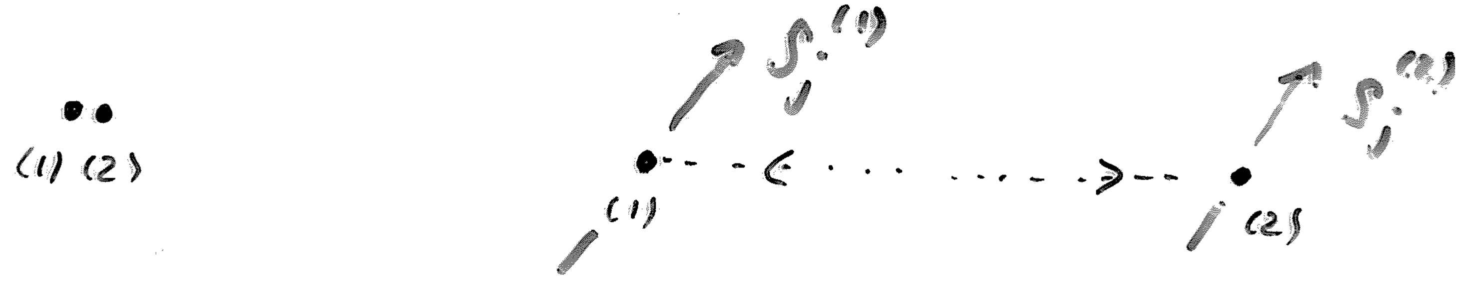
- Schlussfolgerung:

  "Wir haben gezeigt, dass die Wellenfunktion keine vollständige Beschreibung der physikalischen Wirklichkeit liefert; wir haben die Frage offen gelassen, ob eine solche Beschreibung existiert. Wir glauben aber, dass eine solche Theorie möglich ist."

EPR Anordnung (nach Bohm): Zwei Spin $\frac{1}{2}$ Teilchen:

vorher

nachher



(z.B. Zerfall $\pi \to e^- e^+$)

Spinzustand

$$|\psi\rangle \equiv |0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\vec{e}_1, -\vec{e}_1\rangle - |-\vec{e}_1, \vec{e}_1\rangle\right)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\vec{e}_2, -\vec{e}_2\rangle - |-\vec{e}_2, \vec{e}_2\rangle\right)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\vec{e}_3, -\vec{e}_3\rangle - |-\vec{e}_3, \vec{e}_3\rangle\right)$$

Die Messungen* von $S_j^{(1)}$ und $S_j^{(2)}$ ergibt

$$(S_j^{(1)}, S_j^{(2)}) = \left(\frac{\hbar}{2}, -\frac{\hbar}{2}\right) \quad \text{mit W'keit } \frac{1}{2}$$

$$(S_j^{(1)}, S_j^{(2)}) = \left(-\frac{\hbar}{2}, \frac{\hbar}{2}\right) \quad \text{"} \quad \frac{1}{2}$$

* raumartig getrennte Ereignisse

Für $j=1,2$ oder 3 könnte $S_j^{(1)}$ bestimmt werden durch Messung von $S_j^{(2)}$ ($\rightarrow S_j^{(1)} = -S_j^{(2)}$), also ohne Teilchen (1) in irgend einer Art zu stören.

Nach EPR:

$S_j^{(1)}$, ($j=1,2$ und 3) sind je ein Element phys. Wirklichkeit, das in einer vollständigen Theorie ein Gegenstück haben muss

$\rightarrow$ Die QM ist nicht (EPR-)vollständig: Bestimmte Werte hat eine Observable in der QM nur in Eigenzuständen. Ein gemeinsamer Eigenzustand von $S_1^{(1)}, S_2^{(1)}, S_3^{(1)}$ mit Eigenwerten $\pm\hbar/2$ ist unmöglich wegen

$$[S_1^{(1)}, S_2^{(1)}] = i\hbar S_3^{(1)}$$

Bohrs Entgegnung

"es kann keine Rede sein einer mechanischen Störung des untersuchten Systems"

"... da ist die Frage einer Beeinflussung der eigentlichen Bedingungen, die die möglichen Sorten von Voraussagen über das zukünftige Verhalten des Systems festlegen. Da diese Bedingungen einen inhärenten Bestandteil der Beschreibung jedes Phänomens bilden, dem der Ausdruck "physikalische Wirklichkeit" zugewiesen werden kann, sehen wir, dass die Argumentation der erwähnten Autoren ihre Schlussfolgerung, dass die quantenmechanische Beschreibung unvollständig sei, nicht gerechtfertigt."

Gibt es (im Sinne von EPR) vollständige Theorien, die entweder:

(a) die QM reproduzieren?

oder

(b) von der QM abweichen, aber durch das Experiment bestätigt werden?

Modelle "verborgener Variablen"

- Verborgene Variablen (reine Zustände)

  $\omega \in \Omega$ (Ω: W'keitsraum)

- Statistische Mischungen

  $\rho(\cdot)$: W'keitsmass auf Ω

- Observablen

  $A(\omega)$: Funktionen auf Ω

  ($A(\omega)$: Wert von A in ω)

→ Erwartungswerte

$$\langle A \rangle = \int A(\omega)\, d\rho(\omega)$$

Kann ein Modell verborgener Variablen die QM reproduzieren?

Auslegung (V-): Es gibt Abbildungen

Zustände $\psi \longmapsto$ W'keitsmasse $\rho_\psi(\cdot)$

Observablen $A = A^* \longmapsto$ Funktionen $A(\cdot)$

sodass: Falls $A = \sum_i a_i P_i$ die Spektralzerlegung ist, so

$$\langle \psi | P_i | \psi \rangle = \rho_\psi(\{\omega \in \Omega \mid A(\omega) = a_i\}) \quad (1$$

(d.h. QM und V- liefern selbe W'keiten für Messergebnisse).

Kann die QM durch eine Theorie verborgener Variablen reproduziert werden?

Auslegung — V_- (schwächer)
— V_+ (stärker)

<u>V_-</u>: Es gibt einen Raum Ω ($\omega \in \Omega$ ist die verborgene Variable) und zwei Abbildungen

Zustände $\psi \mapsto$ W'keitsverteilungen $d\rho_\psi(\omega)$ auf Ω

Observablen $A = A^* \mapsto$ Funktion $A(\omega)$ auf Ω
($A(\omega)$ ist Wert der Observablen in ω)

sodass qm W'keiten für Messwerte wiedergegeben werden:

Ist $A = \sum_i a_i P_i$ die Spektralzerlegung von A, so gilt

$$\langle \psi | P_i | \psi \rangle = \rho_\psi(\{\omega \in \Omega \mid A(\omega) = a_i\})$$

Folgerungen aus (V–):

- $A(\omega) \in \{a_1, \dots a_n\}$ (ρ_ψ – fast sicher) (2)
- $\langle \psi | A | \psi \rangle = \int_\Omega A(\omega)\, d\rho_\psi(\omega)$ (3)
- $A|\psi\rangle = a_1 |\psi\rangle \Rightarrow A(\omega) = a_1$

  (ρ_ψ – fast sicher)

Antwort: Ja, V- ist möglich.

Kritik: In der QM ist der Projektor P eines Ereignisses fundamentaler als die Observable ("Kontext"), in dessen Spektralzerlegung er vorkommt.

Es ist möglich:

$P = P_i$ für ein i in $A = \sum_i a_i P_i$

und

$P = \tilde{P}_j$ für ein j in $\tilde{A} = \sum_j \tilde{a}_j \tilde{P}_j$

(Bsp: (Spin $\frac{1}{2}$): $A = \vec{S} \cdot \vec{e}$, $\tilde{A} = \vec{S} \cdot (-\vec{e})$.)

V- lässt es zu, dass

$$\{\omega \in \Omega \,/\, A(\omega) = a_i\} \neq \{\omega \in \Omega \,/\, \tilde{A}(\omega) = a_j\}$$

$\underline{V+}^{*}$: Ω, $\psi \mapsto d\rho_\psi$ wie vorher.

Statt $A \mapsto A(\omega)$, neu: Abbildung

Projektoren $P = P^2 = P^* \longmapsto$ Teilmengen $P \subset \Omega$

sodass

$$\langle \psi | P | \psi \rangle = \rho_\psi (P)$$

$$\sum_i P_i = \mathbb{1} \Rightarrow \{P_i\} \text{ ist Partition von } \Omega$$

Antwort: $V+$ ist möglich, falls $\dim \mathcal{H} = 2$.
sonst:

__Satz__ (Kochen, Specker 1967) Sei $\dim \mathcal{H} \geq 3$. Dann ist $V+$ nicht möglich.

* Nicht-Kontextualität

Folgerungen aus V+:

1) $V+ \Rightarrow V-$, und zwar mit

$$A(\omega) := \sum_i a_i \chi_{P_i}(\omega)$$

für $A = \sum_i a_i P_i$.

2) $f(A)(\omega) = f(A(\omega))$

3) Falls $[A_1, A_2] = 0$

(und demzufolge $(A_1 A_2)^* = A_1 A_2$),

so

$$(A_1 A_2)(\omega) = A_1(\omega) A_2(\omega).$$

Alternative zu V+ (schwächer)

L: <u>Lokalitätshypothese</u> (im Rahmen von V−)

Sei $A = A^*$, $B = B^*$. Falls

- $[A, B] = 0$ (also $(AB)^* = AB$)
- A, B zu raumartig getrennten Messungen gehören,

dann $(AB)(\omega) = A(\omega) B(\omega)$

<u>Satz</u> (Bell 1964)

Die QM ist unvereinbar mit (V−, L)

(<u>Bem</u>: V+ $\Rightarrow$ L)

Die Bellschen Ungleichungen

beziehen sich <u>nicht</u> auf die QM sondern auf beliebige lokale Theorien verborgener Variablen:

1) Zustände $\equiv$ W'keitsverteilungen $dp(\omega)$, Observablen $\equiv$ Funktionen $A(\omega)$ auf Zustandsraum $\Omega \ni \omega$, sodass Erwartungswerte

$$\langle A \rangle_p = \int_\Omega A(\omega)\, dp(\omega).$$

2) Lokalität: Entsprechen A, B raumartig getrennten Messungen, so

$$(AB)(\omega) = A(\omega)\, B(\omega).$$

Beachte: Übereinstimmung mit QM <u>nicht</u> verlangt.

__Satz__ (CHSH Ungleichung; Clauser, Horne, Shimony, Holt, 1969).

Seien A, A' von B, B' raumartig getrennt; alle mit Werten ± 1.

Dann:

$$|\langle AB\rangle + \langle A'B\rangle + \langle AB'\rangle - \langle A'B'\rangle| \leq 2$$

__Beweis__: Es ist

$$-2 \leq (A(\omega)+A'(\omega))B(\omega) + (A(\omega)-A'(\omega))B'(\omega) \leq 2$$

und zwar ist der Ausdruck $= \pm 2$; denn:

$$A(\omega) = A'(\omega) \Rightarrow \begin{array}{l} A(\omega)+A'(\omega) = \pm 2 \\ A(\omega)-A'(\omega) = 0 \end{array}$$

$$A(\omega) = -A'(\omega) \Rightarrow \begin{array}{l} A(\omega)+A'(\omega) = 0 \\ A(\omega)-A'(\omega) = \pm 2 . \end{array}$$

Bildung des Erwartungswerts liefert CHSH. $\square$

Anwendung: • "Spin $\frac{1}{2}$"-Teilchen, Messung der Spinkomponente

$$S_{\vec{n}} =: \frac{\hbar}{2} \sigma_{\vec{n}}$$

in Richtung $\vec{n}$, $(|\vec{n}|=1)$.

- Teilchen 1, 2 (zu geg. Zeitpunkt) räumlich getrennt
- Observablen

$$A = \sigma^{(1)}_{\vec{n}_1}, \; A' = \sigma^{(1)}_{\vec{n}_1'}, \; B = \sigma^{(2)}_{\vec{n}_2}, \; B' = \sigma^{(2)}_{\vec{n}_2'}$$

- Korrelationen

$$C(\vec{n}_1, \vec{n}_2) := \langle \sigma^{(1)}_{\vec{n}_1} \sigma^{(2)}_{\vec{n}_2} \rangle$$

- CHSH:

$$|C(\vec{n}_1, \vec{n}_2) + C(\vec{n}_1', \vec{n}_2) + C(\vec{n}_1, \vec{n}_2') - C(\vec{n}_1', \vec{n}_2')| \leq 2.$$

Korrelationen quantenmechanisch berechnet:

$$\sigma^{(i)}_{\vec{n}} = \vec{\sigma}^{(i)} \cdot \vec{n}$$

mit $\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ Pauli-Matrizen

Zustand: EPR-Paar

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\vec{n}, -\vec{n}\rangle - |-\vec{n}, \vec{n}\rangle\right)$$

(unabhängig von $\vec{n}$). Es gilt:

$(\vec{\sigma}^{(1)} + \vec{\sigma}^{(2)}) \cdot \vec{n}\, |\psi\rangle = 0$, $\langle\psi|\vec{\sigma}^{(1)} \cdot \vec{n}\,|\psi\rangle = 0$

Also:

$$\underline{C(\vec{n}_1, \vec{n}_2)} = \langle\psi|(\vec{\sigma}^{(1)} \cdot \vec{n}_1)(\vec{\sigma}^{(2)} \cdot \vec{n}_2)|\psi\rangle$$

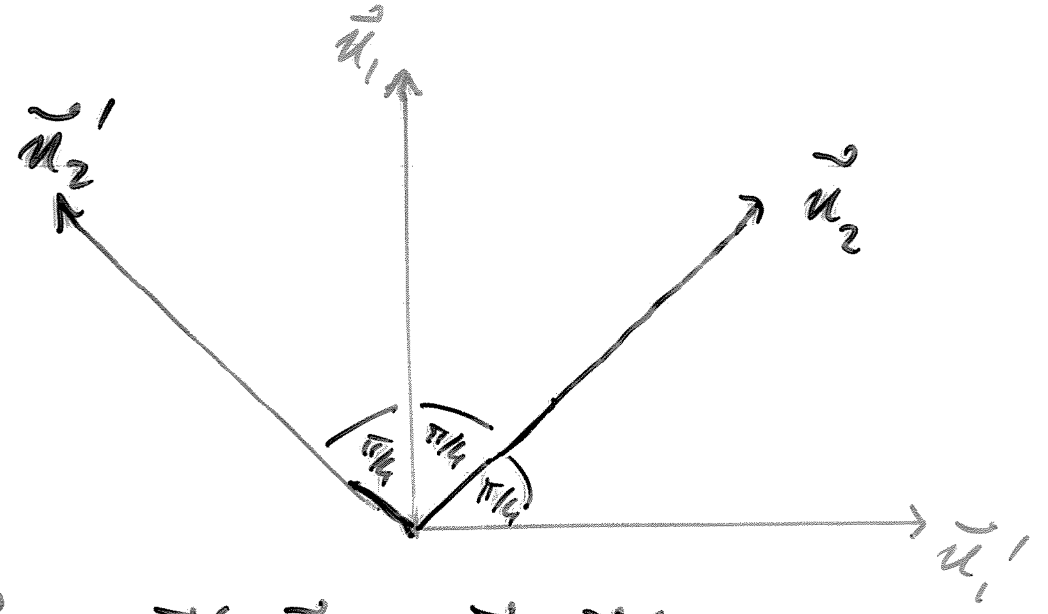
$$= -\langle\psi|\underbrace{(\vec{\sigma}^{(1)} \cdot \vec{n}_1)(\vec{\sigma}^{(1)} \cdot \vec{n}_2)}_{(\vec{n}_1 \cdot \vec{n}_2)\mathbb{1} + i\,\vec{\sigma}^{(1)} \cdot (\vec{n}_1 \wedge \vec{n}_2)}|\psi\rangle = \underline{-\vec{n}_1 \cdot \vec{n}_2}$$

Erfüllt QM die CSCH-Ungleichung?
D.h. gilt

$$|\vec{n}_1 \cdot \vec{n}_2 + \vec{n}_1' \cdot \vec{n}_2 + \vec{n}_1 \cdot \vec{n}_2' - \vec{n}_1' \cdot \vec{n}_2'| \le 2 \quad (*)$$

für alle $\vec{n}_i, \vec{n}_i'$ mit $|\vec{n}_i| = |\vec{n}_i'| = 1$?

Antwort: Nein:



$$\vec{n}_1 \cdot \vec{n}_2 = \vec{n}_1' \cdot \vec{n}_2 = \vec{n}_1 \cdot \vec{n}_2' = \cos\frac{\pi}{4} = \frac{\sqrt{2}}{2}$$

$$\vec{n}_1' \cdot \vec{n}_2' = \cos\frac{3\pi}{4} = -\frac{\sqrt{2}}{2}$$

und (*) verlangt

$$2\sqrt{2} \le 2 \quad : \text{Nein.}$$

→ (nochmals)

QM kann nicht durch eine lokale Theorie verborgener Variablen reproduziert werden:

Alice (1) Bob (2)

je ein Teilchen eines EPR-Paars

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\vec{e}_3, -\vec{e}_3\rangle - |-\vec{e}_3, \vec{e}_3\rangle \right)$$

<u>Aufgabe</u>:

A übermittle unbekannten Zustand $|\varphi\rangle$ eines (weiteren) Teilchens (0) an B, unter blosser Verwendung klassischer Information

Unmöglich?

- Transport des Teilchens (0) und damit von $|\varphi\rangle$: qm Information
- A kann $|\varphi\rangle$ nicht messen, sondern nur (z.B.) ob Teilchen $|+\vec{e}\rangle$ oder $|-\vec{e}\rangle$ ist.

- Zustand aller drei Teilchen

$$|\varphi\rangle \otimes |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\varphi, \vec{e}_3\rangle \otimes |-\vec{e}_3\rangle - |\varphi, -\vec{e}_3\rangle \otimes |\vec{e}_3\rangle\right)$$

- Messung von $\mathbb{1} = \sum_{i=1}^{4} P_i$ mit

$$|\chi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\vec{e}_3, -\vec{e}_3\rangle - |-\vec{e}_3, \vec{e}_3\rangle\right)$$

$$|\chi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\vec{e}_3, -\vec{e}_3\rangle + |-\vec{e}_3, \vec{e}_3\rangle\right)$$

$$|\chi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\vec{e}_3, \vec{e}_3\rangle - |-\vec{e}_3, -\vec{e}_3\rangle\right)$$

$$|\chi_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\vec{e}_3, \vec{e}_3\rangle + |-\vec{e}_3, -\vec{e}_3\rangle\right)$$

- Zst. der Teilchen <u>nach</u> Messung

$$P_1 |\varphi\rangle \otimes |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \overbrace{|\chi_1\rangle}^{A} \otimes \overbrace{\left(-|-\vec{e}_3\rangle\langle -\vec{e}_3|\varphi\rangle - |\vec{e}_3\rangle\langle \vec{e}_3|\varphi\rangle\right)}^{B}$$

$$P_2 |\varphi\rangle \otimes |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\chi_2\rangle \otimes \left(|-\vec{e}_3\rangle\langle -\vec{e}_3|\varphi\rangle - |\vec{e}_3\rangle\langle \vec{e}_3|\varphi\rangle\right)$$

$$P_3 |\varphi\rangle \otimes |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\chi_3\rangle \otimes \left(|-\vec{e}_3\rangle\langle \vec{e}_3|\varphi\rangle + |\vec{e}_3\rangle\langle -\vec{e}_3|\varphi\rangle\right)$$

$$P_4 |\varphi\rangle \otimes |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\chi_4\rangle \otimes \left(|-\vec{e}_3\rangle\langle \vec{e}_3|\varphi\rangle - |\vec{e}_3\rangle\langle -\vec{e}_3|\varphi\rangle\right)$$

- Alice übermittelt Ergebnis $i=1,2,3,4$ (2 klassische Bits) an Bob; dieser wendet folgende unitärer Operator auf Teilchen (2) an:

Alices Ergebnis	Bobs Operation	Zustand
1	$\mathbb{1}$	$-\vert\varphi\rangle$
2	σ_3	$-\vert\varphi\rangle$
3	σ_1	$\vert\varphi\rangle$
4	σ_2	$-i\vert\varphi\rangle$

(Operation ist unitäre Trsf.)

In allen Fällen ist der Zustand $|\varphi\rangle$ wiederhergestellt! (Phase ohne Bedeutung)

5. Der Grover-Algorithmus

Problemstellung. A, B Mengen mit N Elementen, $N \gg 1$.

$$u : A \to B \quad , \quad a \mapsto b = u(a)$$

Bijektive Abbildung. Also u^{-1} auch.

Aufwand für

$$(i) \quad a \overset{u}{\longmapsto} b \qquad , \quad (ii) \quad b \overset{u^{-1}}{\longmapsto} a$$

kann verschieden sein. Bsp. Telefonbuch

$$\begin{array}{cccccc} A = \{ \text{Anna}, & \text{Bertha}, & \ldots, & \text{Max}, & \text{Moritz}, & \ldots \} \\ \downarrow & \downarrow & & \downarrow & \downarrow & \\ B = 6381 & 4101 & & 7013 & 3298 & \end{array}$$

Aufwände:

(i) $O(\log N)$ (ii) $O(N)$

Frage: Ist $u^{-1}(b) = a'$? Ob ja/nein (=1/0) ist Abbildung

$$a' \longmapsto \delta_{a' u^{-1}(b)} = \delta_{u(a') b}$$

Aufwand ist (i), nicht (ii). [Orakel]

- Ausgezeichneter Zustand

$$|s\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{a' \in A} |a'\rangle$$

$$V: \mathcal{H} \to \mathcal{H}, \quad V = 2|s\rangle\langle s| - 1$$

(Spiegelung an s)

- Algorithmus
  - Initialisiere System in $|s\rangle$ (Aufwand $O(\log N)$)
  - Bilde

$$|\psi\rangle = (VU)^k |s\rangle$$

mit $k = [\frac{\pi}{4}\sqrt{N}]$

  - Messung: In welchem Zst. $|a'\rangle$ $(a' \in A)$ ist $|\psi\rangle$? Mit grosser W'keit in $a' = a$:

$$W = |\langle a|\psi\rangle|^2 = 1 - O(\tfrac{1}{N})$$

Beachte: Massgeblicher Aufwand ist

$$k = O(\sqrt{N}).$$

Beweis.

- Anfangszustand $|s\rangle = |\theta_0\rangle$

$$\sin\theta_0 = \frac{1}{\sqrt{N}}$$

- Iterationsschritt $|\theta\rangle \mapsto |\theta'\rangle = VO|\theta\rangle$

$$\theta' = 2\theta_0 + \theta$$

Folglich: $\theta_0, 3\theta_0, 5\theta_0, \ldots, (2k+1)\theta_0 \ldots$

Wann $\theta_k = (2k+1)\theta_0 \approx \frac{\pi}{2}$?

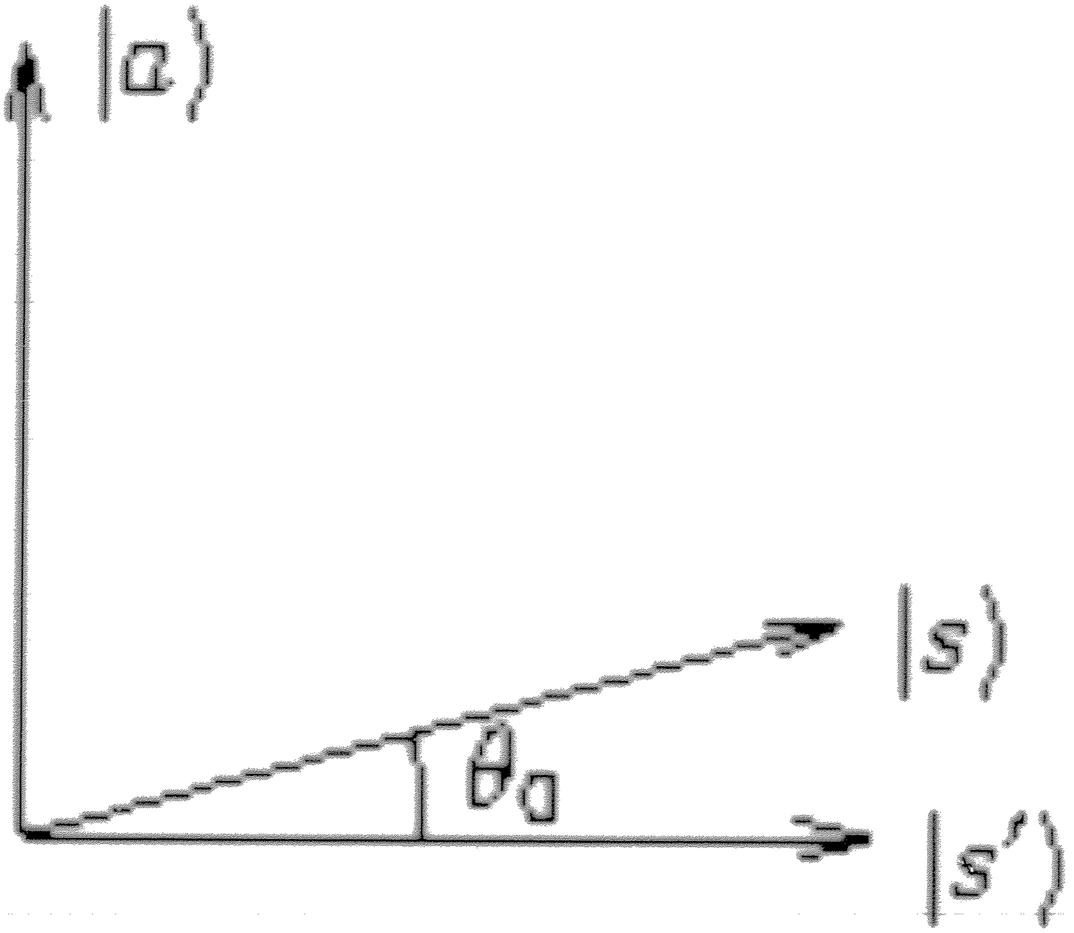
$$k \approx \frac{\pi}{4\theta_0} + O(1)$$

Dann $\cos\theta_k = O(\theta_0) = 1/\sqrt{N}$

$$1 - W = |\langle s' | \underbrace{\theta_k\rangle}_{|\psi\rangle}|^2 = \cos^2\theta_k = \frac{1}{N}.$$

Unterraum, durch $|a\rangle, |s\rangle$ aufgespannt

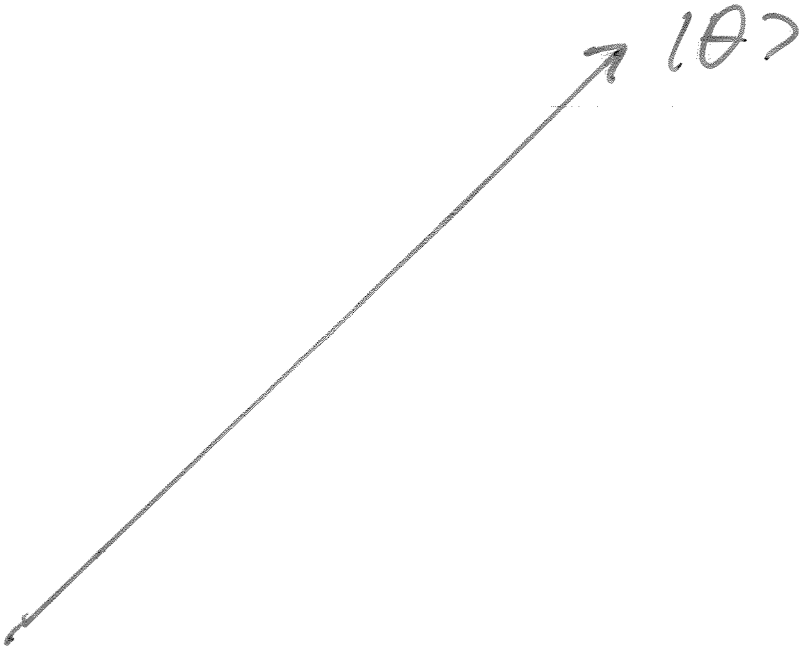
$$\langle s|a\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} = \sin\theta_0$$



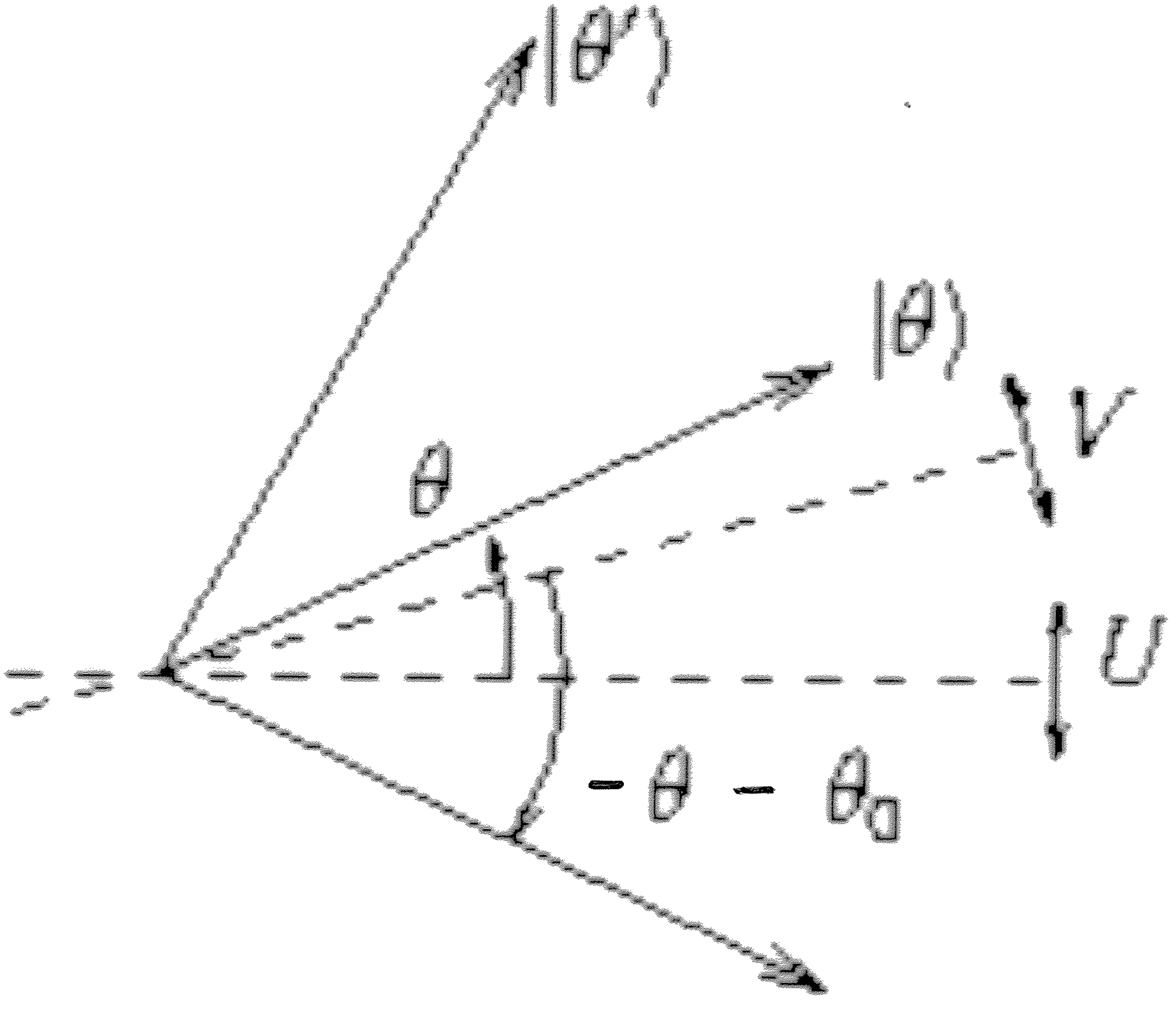
$$|s'\rangle = \frac{1}{\sqrt{N-1}} \sum_{\substack{a' \in A \\ a' \neq a}} |a'\rangle$$

$$|\theta\rangle = (\cos\theta)\,|s'\rangle + (\sin\theta)\,|a\rangle$$

$(\theta = \pi/2)$



$(\theta = \theta_0)$


$|\theta')$
$|\theta)$
V
θ
U
$-\theta - \theta_0$