7. Weitere Aspekte der Quantenmechanik

7.1 Magnetfeld

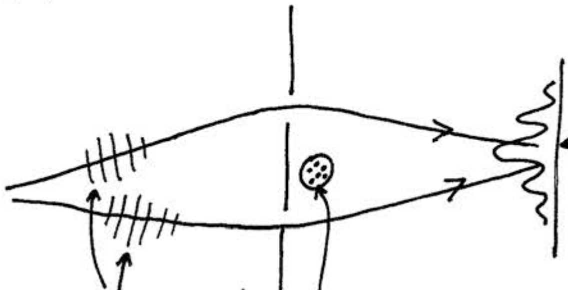
mit Vektorpotential $\vec{A}$: $\vec{B} = \mathrm{rot}\,\vec{A}$

und :
$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{\vec{p}} - q\vec{A}\right)^2 + V(\vec{r})$$

⊛

Bem.: Materiewellen können Effekt von $\vec{A}$ spüren, auch dort, wo $\vec{B}=0$ ist !

"Aharonov-Bohm-Effekt"



Interferenzmuster verschiebt sich um Phase

$$\varphi_{AB} = \frac{q}{\hbar}\oint \vec{A}\,d\vec{s}$$

auf unteren Weg hin, auf oberen zurück

$$= \frac{q}{\hbar}\int \vec{B}\,d\vec{f}$$

$$= \frac{q}{\hbar}\Phi$$

magnetischer Fluß innerhalb Pfaden

"Eich-Invarianz"

⊛ $\vec{A} \longmapsto \vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla}\chi$ liefert dasselbe $\vec{B}$

gleichzeitig

$\psi \longmapsto \psi' \cdot e^{i\frac{q}{\hbar}\chi}$

Dann: ψ' löst SGl mit $\vec{A}'$

falls ψ die SGl mit $\vec{A}$ gelöst hat.

(und $|\psi'(\vec{r})|^2 = |\psi(\vec{r})|^2$)

7.2 Spin

Ein e^- hat "Spin $\frac{1}{2}$", also einen zusätzlichen "inneren Zustand", dessen Quantenzahl zwei Werte annehmen kann:
(auch p^+ oder n)

$|\uparrow\rangle$ $m_s = +\frac{1}{2}$

$|\downarrow\rangle$ $m_s = -\frac{1}{2}$

$\Rightarrow$ im H-Atom: (n, ℓ, m, m_s) als vollständiger Satz von Quantenzahlen!

Formal: Für $\hat{\vec{L}} = \vec{r} \times \hat{\vec{p}}$ hatten wir

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z \quad (\text{\& zyklisch})$$

Diese Relation wird auch erfüllt für $\hat{\vec{S}}$, wenn wir setzen

$$\hat{S}_{x,y,z} = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_{x,y,z}$$

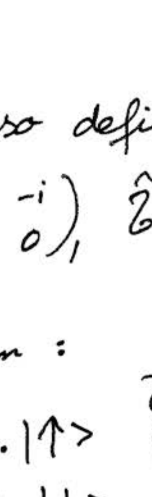
wobei die "Paulimatrizen" so definiert sind:

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

und $m_s = \pm\frac{1}{2}$ entspricht dann:

$$\left.\begin{aligned} \hat{\sigma}_z |\uparrow\rangle &= (+1) \cdot |\uparrow\rangle \\ \hat{\sigma}_z |\downarrow\rangle &= (-1) \cdot |\downarrow\rangle \end{aligned}\right\} \text{Basisvektoren eines Zweiniveausystems!}$$

Die "Zeeman-Energie" eines e^--Spins im Magnetfeld ist dann:


B

$$-\hat{\vec{\mu}} \cdot \vec{B}$$

mit $\hat{\vec{\mu}} = \mu_B g_s \hat{\vec{S}}$

und $g_s \approx -2$

$\mu_B = \frac{q\hbar}{2m}$ "Bohrsches Magneton"

7.3 Viele Freiheitsgrade

z.B.: N harmonische Oszillatoren, gekoppelt

$\Rightarrow$ Koordinaten $x_1, x_2, \ldots, x_N$

$\psi(x_1, x_2, \ldots, x_N)$ als Wellenfunktion

Formal: Hilbertraum

$$\mathcal{H} = \underbrace{\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}_N}_{\text{"Produktraum"}}$$

mit "Produktbasis"

$$|n_1, n_2, \ldots, n_N\rangle \equiv |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle \otimes \ldots \otimes |n_N\rangle$$

In der Ortsbasis:

$$\psi_{n_1,\ldots,n_N}(x_1,\ldots,x_N) \equiv \psi^{(1)}_{n_1}(x_1) \cdot \psi^{(2)}_{n_2}(x_2) \cdot \ldots \cdot \psi^{(N)}_{n_N}(x_N)$$

Operatoren wirken so:

$$\hat{a}_2 \, |n_1, n_2, \ldots, n_N\rangle = |n_1\rangle \otimes (\hat{a}_2 |n_2\rangle) \otimes \ldots \otimes |n_N\rangle$$

$$= \sqrt{n_2}\, |n_1, n_2 - 1, n_3, \ldots\rangle$$

Vernichter für zweiten Oszillator

Wir haben: $[\hat{a}_i, \hat{a}_j] = [\hat{a}_i^+, \hat{a}_j^+] = 0$ und $[\hat{a}_i, \hat{a}_j^+] = \delta_{ij}$

Hamiltonoperator enthält z.B. Wechselwirkung

$$\hat{H} = \hbar\omega_1 \hat{a}_1^+ \hat{a}_1 + \hbar\omega_2 \hat{a}_2^+ \hat{a}_2 + \hbar g \left(\hat{a}_1^+ \hat{a}_2 + \hat{a}_2^+ \hat{a}_1\right)$$

(Bem.: Dieser kann "diagonalisiert" werden durch Ansatz

$$\left.\begin{aligned} \hat{b}_1 &= c_{11}\hat{a}_1 + c_{12}\hat{a}_2 \\ \hat{b}_2 &= c_{21}\hat{a}_1 + c_{22}\hat{a}_2, \end{aligned}\right\} \Rightarrow \hat{H} = \hbar\Omega_1 \hat{b}_1^+ \hat{b}_1 + \hbar\Omega_2 \hat{b}_2^+ \hat{b}_2$$

aber nur weil er rein quadratisch in $\hat{a}_1^{(+)}$ und $\hat{a}_2^{(+)}$ ist)

7.4 Fermionen und Bosonen

N Identische Teilchen $\Rightarrow$ $\hat{H}$ ändert sich nicht bei Vertauschung $x_i \leftrightarrow x_j$

$\Rightarrow$ Zeitentwicklung (SGl) ändert nicht die Symmetrie von Ψ unter $x_i \leftrightarrow x_j$

Zwei Fälle:

$$\Psi(x_1, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_N) = +\Psi(x_1, \dots, x_j, \dots, x_i, \dots, x_N) \quad \forall i,j$$

"symmetrisch"

$\Rightarrow$ Teilchen = "Bosonen" (^{4}He, … & alle Atome/Moleküle mit gerader Zahl von Fermionen)

$$\Psi(\dots, x_i, \dots, x_j, \dots) = -\Psi(\dots, x_j, \dots, x_i, \dots) \quad \forall i,j$$

"anti-symmetrisch"

$\Rightarrow$ Teilchen = "Fermionen"

Bsp.: e^-, p^+, n und alle Objekte, die aus ungerader Zahl solcher elementarer Fermionen bestehen

$\Rightarrow$ Verwende symmetrisierte oder antisymmetrisierte Produktbasis

z.B.

Bosonen

$$\psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\phi_A(x_1)\,\phi_B(x_2) \pm \phi_B(x_1)\,\phi_A(x_2)\right]$$

Fermionen
(↳ "Slater-Determinante")

"Einteilchen-
Basis-Zustände"

$\Rightarrow \ldots \Rightarrow$ "Besetzungszahlbasis" (gegeben sei M-dim. Einteilchen-Basis)

$$|n_1, n_2, \ldots, n_M\rangle$$

[im Bsp. also
$|n_A = 1, n_B = 1\rangle$]

"wie oft ist der
Basiszustand $\phi_{(2)}$ besetzt?"
(wie oft kommt er vor
in dem Produkt?)

Resultat: für Fermionen darf n_j nur 0 oder 1 sein
("<u>Pauli-Prinzip</u>"),

für Bosonen: $n_j = 0, 1, 2, \ldots$

↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓
(Spin zählt als
eigene Quantenzahl!)

Führe Erzeuger & Vernichter ein, $\hat{a}_j, \hat{a}_j^+$

$\longrightarrow$ Für Bosonen: exakt dieselben Eigenschaften
wie bei harmon. Oszillator,
also $[\hat{a}_i, \hat{a}_j^+] = \delta_{ij}$ und $[\hat{a}_i, \hat{a}_j] = 0$

$\longrightarrow$ Für Fermionen: $\underbrace{\{\hat{a}_i, \hat{a}_j^+\}}_{=\hat{a}_i\hat{a}_j^+ + \hat{a}_j^+\hat{a}_i} = \delta_{ij}$ und $\{\hat{a}_i, \hat{a}_j\} = 0$

$\Rightarrow \hat{a}_j^2 = 0$
und auch $\hat{a}_j^{+2} = 0$

Typischer Hamiltonoperator: (hier: "Bose-Hubbard-Hamiltonian")

$$\hat{H} = -J\sum_\ell \underbrace{\left(\hat{a}_\ell^+\hat{a}_{\ell+1} + \hat{a}_{\ell+1}^+\hat{a}_\ell\right)}_{\text{"Hüpfen"}} + \underbrace{\frac{U}{2}\sum_\ell \hat{n}_\ell(\hat{n}_\ell - 1)}_{\text{Wechselwirkung}}$$