Formelsammlung zur Vorlesung

Quantenmechanik

zum Gebrauch neben der Vorlesung

Sommersemester 2001

H.G. Dosch und C. Ewerz

durchgesehen von T. Bittig und S. Hönig

Letzte Änderung 27. Mai 2002

Inhaltsverzeichnis

Kapitel 1

Literatur,Notation

Grunlegende Werke, immer noch lesenswert:

Werner Heisenberg Die Physikalischen Prinzipien der Quantentheorie (1930)

P.A.M. Dirac The Pinciples of Quantum Mechanics (1930, 1958)

Hermann Weyl Gruppentheorie und Quantenmechanik (1928)

Johann v. Neumann Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik (1932)

****

Lehrbücher (Auswahl):

Grundsatz: Das Lehrbuch, das Ihnen am besten gefällt, ist (für Sie) auch das beste.

Leonard I. Schiff Quantum Mechanics (Klassiker, 1955)

C. Cohen-TannoudjiB. Diu, F. Laloë Mécanique Quantique (sehr umfangreich)

W. Thirring Lehrbuch der Mathematischen Physik, Bd. 3
Quantenmechanik von Atomen und Molekülen (mathematisch genau)

G. Grawert Quantenmechanik (vergriffen),empfohlen.

V.F. Müller Quantenmechanik,empfohlen

F. Schwabl Quantenmechanik,empfohlen

Baym, G., Lectures on Quantum Mechanics, wird gelobt

Böhm, A. Quantum Mechanics, Springer, wird gelobt

Sakurai, J.J. Modern Quantum Mechanics wird gelobt

Gottfried, K. Quantum Mechanics, wird gelobt

Ludwig, G., Quantum Mechanics geht auf Grundsatzfragen ein

***

Zur Geschichte und Interpretation (nicht für Vorlesung):

Espagnat, B. d', Veiled reality.... and Conceptual Foundations of Quantum Mechanics

Bunge, M., Foundations of Physics

Jammer, M., The Conceptual Development of Quantum Mechanics

Omnès, R. , The Interpretation of Quantum Mechanics

Stapp, H.P., Mind Matter and Quantum Mechanics

Notation

$\partial = \frac{\partial}{\partial x}, \quad \partial_i = \frac{\partial}{\partial x_i}, \quad \partial_t = \frac{\partial}{\partial t}\vec{\partial} = (\partial_1, \partial_2, \partial_3) = \vec{\nabla}; \quad \vec{\partial}^{\,2} = \vec{\nabla}^{\,2} = \sum_{i=1}^{3} \partial_i^2 = \triangle$

Operatoren durch **Fettdruck** gekennzeichnet: **H** : Hamilton-Operator.

e bezeichnet die Ladung im allgemeinen Fall, e_0 steht für die Elementarladung.

(*) bedeudet, dass die Aussage etwas vereinfacht ist.

Kapitel 2

Grundgrößen der klassischen Physik und der Quantenphysik

Klassische Physik	Quantenphysik
Reiner Zustand	
z.B. Punkt im Phasenraum $\vec{q}\ \vec{p}$	Vektor $\lvert\psi>$ aus Hilbertraum $\mathcal{H}$
z.B. ebene e.m. Welle $\vec{E}_0 \sin(kr)$	
gemischter Zustand	
Dichte im Phasenraum	statistischer Operator
$\rho(\vec{p},\vec{q})\ \rho \geq 0, \int \rho = 1$	selbstadj. Operator $\boldsymbol{\rho}$ in $\mathcal{H}$
unpolarisierte ebene e.m. Welle	mit tr $\boldsymbol{\rho} = 1$ und Eigenwerten ≥ 0
Observable	
Funktion des Zustands $f(\vec{q},\vec{p})$	selbstadj. Operatoren in $\mathcal{H}$, $\mathbf{A}$
z.B.$E = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{q})$	z.B. Hamilton-Operator $\mathbf{H}$,
mögliche Messwerte	
Wertebereich von $f(\vec{q},\vec{p})$	Eigenwerte von $\mathbf{A}$
beobachtete Messwerte	
Wert der Funktion $f(\vec{q},\vec{p})$	Erwartungswert: $<\psi\lvert\mathbf{A}\ \psi>$
Funktional des gemischten Zustands:	Spur
$<f>=\int d^3q\, d^3p\, \rho(\vec{p},\vec{q}) f(\vec{q},\vec{p})$	tr $(\boldsymbol{\rho}\mathbf{A})$
zeitliche Entwicklung	
Hamilton-Jakobi für $\vec{p}(t), \vec{q}(t)$	Schrödinger Bild: Schrödinger-Gl.
$\partial_t p_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad \partial_t q_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}$	$i\hbar\partial_t\lvert\psi>=\lvert\mathbf{H}\ \psi>$

Kapitel 3

Der Hilbertraum

3.1 Eigenschaften

Ein separabler, abgeschlossener, metrischer Vektorraum $\mathcal{H}$ mit Elementen (Vektoren) $f, g, h \ldots$.

1)Vektorraum: $\alpha f + \beta g \;\epsilon\; \mathcal{H}$, $\alpha, \beta \ldots$ komplexe Zahlen etc.

2)Metrisch: Es existiert ein Skalarprodukt: (f, g) mit

$$\begin{aligned} (f,g) &= (g,f)^* \\ (f, \alpha g + \beta h) &= \alpha(f,g) + \beta(f,h) \\ (f,f) &\geq 0, \qquad = 0 \text{ nur für } \quad f = 0 \end{aligned} \tag{3.1}$$

$||f|| = \sqrt{(f,f)}$

3) abgeschlossen: Jede Cauchyfolge, d.h. $||f_{(n)} - f_{(m)}|| \leq \epsilon$ für $n, m > M$ hat Grenzwert in $\mathcal{H}$.

4) separabel(*) : Es gibt eine abzählbare orthonormale Basis $e_{(1)}, e_{(2)}, e_{(3)}, \ldots, e_{(n)}, \ldots$ mit $(e_{(j)}, e_{(k)}) = \delta_{jk}$, so dass für jedes $f \epsilon \mathcal{H}$ gilt:

$f = \sum_{n=1}^{\infty} c_n e_{(n)}$ mit $c_n = (e_n, f)$.

Aus 3.1 folgt: $\langle \alpha f \mid \beta g \rangle = \alpha^* \beta \langle f \mid g \rangle$.

Beispiele:

- Komplexer n-dimensionaler Vektorraum.
- $\mathcal{L}_2(R_d)$, die komplexwertigen (nach Lesbesgue) quadratintegrablen Funktionen

$\phi(\vec{x})$ im R_d,
Skalaprodukt:$(\psi, \phi) = \int d^d x \ \psi^*(\vec{x})\phi(\vec{x})$

Notation in der QM:

Vektor(*) aus einem Hilbertraum bezeichnet durch Ket $| >$, z.B $|f >$.

Skalarprodukt durch $< f|g >$.

Durch ein voS läßt sich jeder separable Hilbertraum in einen (i.A. unendlich dimensionalen) Vektorraum mit Folgen als Vektoren isomorph abbilden:

$$|f > \to (c_1, c_2, \dots c_n, \dots) \quad \text{mit} \quad c_n =< e_{(n)}|f > \tag{3.2}$$

3.2 Das direkte Produkt von Hilberträumen

Seien $\mathcal{H}_1$ und $\mathcal{H}_2$ zwei Hilberträume mit Elementen $|f^1\rangle, |g^1\rangle, \dots$ und $|f^2\rangle, |g^2\rangle, \dots$. Das direkte Produkt ist ein geordnetes Paar

$$|f\rangle = \left|f^1\right\rangle \otimes \left|f^2\right\rangle \tag{3.3}$$

mit dem Skalarprodukt:

$$\langle f \mid g\rangle = \left\langle f^1 \,\middle|\, g^1\right\rangle \left\langle f^2 \,\middle|\, g^2\right\rangle \tag{3.4}$$

Der Produktraum $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ ist die lineare abgeschlossene Hülle dieser Produkte 3.3, grob(*) alle Linearkombinationen aus den $|f^1\rangle \otimes |f^2\rangle$.

•Satz: Ist $\dots\left|\phi_{(n)}\right\rangle\dots$ ein voS aus $\mathcal{H}_1$ und $\dots\left|\psi_{(n)}\right\rangle\dots$ ein voS aus $\mathcal{H}_2$ dann bildet $\dots\left|\phi_{(n)}\right\rangle \otimes \left|\psi_{(m)}\right\rangle\dots$ ein voS aus $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$.

d.h. für jeden Vektor $|f\rangle \in \mathcal{H}$ gilt:

$$|f\rangle = \sum_{n,m} c_{nm} \left|\phi_{(n)}\right\rangle \otimes \left|\psi_{(m)}\right\rangle \tag{3.5}$$

mit $\sum_{nm} c_{nm}^2 < \infty$

•Beispiele:

•$C_n \otimes C_m = C_{n \cdot m}$.

•$\mathcal{L}_2(R_n) \otimes \mathcal{L}_2(R_m) = \mathcal{L}_2(R_{n \cdot m})$

•Seien $Y(\theta, \phi)$ die auf der Oberfläche der Einheitskugel im R_3 mit dem Maß $d\cos\theta d\phi$ integrablen Funktionen, der $\mathcal{L}_2(S_2)$ und $g(r)$ die auf der positiven reellen Achse mit dem Mass $r^2 dr$ integrablen Funktionen, $\mathcal{L}_2(R_+)$, dann gilt: $\mathcal{L}_2(S_2) \otimes \mathcal{L}_2(R_+) = \mathcal{L}_2(R_3)$.

•Der **antisymmetrische Produktraum** $\mathcal{H}_{antisym} \subset \mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1$ ist die lineare Hülle der antisymmetrisierten Produktvektoren $\frac{1}{\sqrt{2}}(|f\rangle \otimes |g\rangle - |g\rangle \otimes |f\rangle)$

•Der **symmetrische Produktraum** $\mathcal{H}_{sym} \subset \mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1$ ist die lineare Hülle der symmetrisierten Produktvektoren $\frac{1}{\sqrt{2}}(|f\rangle \otimes |g\rangle + |g\rangle \otimes |f\rangle)$.

Diese Definitionen werden sinngemäß übertragen auf $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1 \ldots \otimes \mathcal{H}_1$

Kapitel 4

Lineare Operatoren

4.1 Matrices

(Erinnerung)

$$\mathbf{A} = (a_{ik}) = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \dots \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \dots \\ vdots & & & \\ \dots & & & a_{nn} \end{pmatrix} \tag{4.1}$$

hermitisch adjungierte Matrix: komplex konjugiert und transponiert

$$\mathbf{A}^{\dagger} = (a^*_{ki}) = \begin{pmatrix} a^*_{11} & a^*_{21} & a^*_{31} & \dots \\ a^*_{12} & a^*_{22} & a^*_{32} & \dots \\ a^*_{13} & a^*_{23} & a^*_{33} & \dots \\ \vdots & & & \\ \dots & & & a^*_{nn} \end{pmatrix} \tag{4.2}$$

Die Einheitsmatrix ist

$$\mathbf{1} = (\delta_{ik}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & \dot{s} \\ \vdots & & & \\ \dots & & & 1 \end{pmatrix} \tag{4.3}$$

$$|\mathbf{A}\ f >= \begin{pmatrix} \sum_i a_{1i} f_i \\ \sum_i a_{2i} f_i \\ \sum_i a_{3i} f_i \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{4.4}$$

In der mathematischen Literatur wird oft verwendet:
$\mathbf{A}^*$ anstelle von $\mathbf{A}^\dagger$ und $\bar{\alpha}$ anstelle von α^*.

•Es gilt wegen 3.1, 4.2, 4.4:

$$< f|\mathbf{A}\ g >=< \mathbf{A}^\dagger\ f|g >=< g|\mathbf{A}^+ f >^* \tag{4.5}$$

•Die Zahl a heißt Eigenwert und $|f_a>$ Eigenvektor zu $\mathbf{A}$ wenn

$$|\mathbf{A}\ f_a >= a\ |f_a > \tag{4.6}$$

Eine Matrix $\mathbf{U}$ heißt unitär, wenn

$$\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U}^\dagger \tag{4.7}$$

Es gilt wegen 4.5 und 4.7:

$$< \mathbf{U}\ f|\mathbf{U}\ g >=< f|g > \tag{4.8}$$

(verallgemeinerte Drehung).

Ist $|e_{(1)}>, \ldots |e_{(n)}>$ ein vollständiges Orhonormalsystem (voS), dann auch $|\mathbf{U}\ e_{(1)}>, \ldots |\mathbf{U}\ e_{(n)}>$.

Eine Matrix $\mathbf{A}$ heißt hermitisch (symmetrisch, selbstadjungiert), wenn

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}^\dagger \tag{4.9}$$

Satz: Wenn $\mathbf{A}$ hermitisch, dann existiert eine unitäre Matrix $\mathbf{U}$, so dass

$$\mathbf{U}^\dagger \mathbf{A} \mathbf{U} = \text{diagonal} \tag{4.10}$$

mit reellen Diagonalelementen (Eigenwerten). Diese Eigenwerte sind die Lösungen der „Säkulargleichung"

$$||\mathbf{A} - x\mathbf{1}|| = 0 \tag{4.11}$$

$||\mathbf{A}||$ ist die Determinante von $\mathbf{A}$.

Die Spur einer Matrix ist die Summe der Diagonalelemente:

$$\text{tr}\ (\mathbf{A}) = \sum_{i=1}^{n} a_{ii} \tag{4.12}$$

Es gilt

$$\text{tr}\ (\mathbf{U}^\dagger \mathbf{A} \mathbf{U}) = \text{tr}\ (\mathbf{A} \mathbf{U} \mathbf{U}^\dagger) = \text{tr}\ (\mathbf{A}) \tag{4.13}$$

wenn $\mathbf{U}$ unitär.

4.2 Lineare Operatoren im Hilbertraum

Linearer Operator: Lineare Abbildungsvorschrift $\mathbf{A}$ eines Elementes $|f> \in \mathcal{D}_A \subset \mathcal{H}$ nach $|g> \in \mathcal{H}$.

$$|g>=|\mathbf{A}f> \qquad |\mathbf{A}(\alpha f+\beta g)>=\alpha|\mathbf{A}f>+\beta|\mathbf{A}g>\,. \tag{4.14}$$

•$\mathbf{A}^\dagger$, zu $\mathbf{A}$ adjungierter Operator:

$$<\mathbf{A}^\dagger f|g>=<f|\mathbf{A}g>, \qquad <\mathbf{A}f|g>=<f|\mathbf{A}^\dagger g>\,. \tag{4.15}$$

•$|f>$ ist Eigenvektor zum Operator $\mathbf{A}$ mit dem Eigenwert a wenn

$$|\mathbf{A}\,f>=a|f>\,. \tag{4.16}$$

• Selbstadjungierter (hermitischer, symmetrischer (*)) Operator:

$$\mathbf{A}^\dagger=\mathbf{A} \tag{4.17}$$

und Definitionsbereiche stimmen überein.

Die Observablen in der QM sind selbstadjungierte Operatoren. Die Eigenvektoren eines selbstadjungierten Operators bilden ein vollständiges System(*).

•Erwartungswert: $<f|\mathbf{A}f>$ Es gilt:

$$<f|\mathbf{A}f>=<\mathbf{A}^\dagger f|f>=<f|\mathbf{A}^\dagger f>^* \tag{4.18}$$

d.h. für einen selbstadjungierten Operator sind Erwartungs- und Eigenwerte reell.

• Unitärer Operator $\mathbf{U}$:

$$\mathbf{U}^\dagger\mathbf{U}=\mathbf{U}\mathbf{U}^\dagger=\mathbf{1} \tag{4.19}$$

Unitäre Operatoren erhalten das Skalarprodukt. Sie bilden eine orthonormale Basis in eine andere ab (Koordinatentransformation):

$$<\mathbf{U}e_{(i)}|\mathbf{U}e_{(k)}>=<e_{(i)}|\mathbf{U}^\dagger\mathbf{U}e_{(k)}>=<e_{(i)}|e_{(k)}> \tag{4.20}$$

• Projektionsoperator $\mathbf{P}$:

$$\mathbf{P}^2=\mathbf{P} \tag{4.21}$$

Ist der Bildraum eindimensional, d.h. gebildet durch die vielfachen eines Vektors $|e>$ mit $||e||=1$, dann ist

$$\mathbf{P}_e = |e >< e| \tag{4.22}$$

mit $\mathbf{P}_e|f >= |e >< e|f >$.

Ist $|g >= \alpha|e > +|h_\perp >$ mit $< e|h \perp >= 0$, dann gilt: $\mathbf{P}_e|g >= |e >< e|g >= \alpha|e >$

•Ist $\{\dots e_{(n)} \dots\}$ irgendein beliebiges voS, so gilt:

$$\mathbf{1} = \sum_i |e_{(i)} >< e_{(i)}| \tag{4.23}$$

•Die Spur eines Operators ist definiert durch:

$$\mathrm{tr}\ (\mathbf{A}) = \sum_i < e_{(i)}|\mathbf{A}e_{(i)} > \tag{4.24}$$

wobei $\{\dots e_{(n)} \dots\}$ ein beliebiges voS ist.

Die Spur ist unabhängig von der speziellen Wahl des voS.

Bew: Sei $\{\dots e'_{(n)} \dots\} = \{\dots \mathbf{U}e_{(n)} \dots\}$ ein anderes voS. Es gilt:

$$\begin{aligned}
\sum_i < \mathbf{U}e_{(i)}|\mathbf{A}\mathbf{U}e_{(i)} > &= \sum_i < e_{(i)}|\mathbf{U}^\dagger\mathbf{A}\mathbf{U}e_{(i)} > \\
&= \sum_{i,k,m} < e_{(i)}|\mathbf{U}^\dagger e_{(k)} >< e_{(k)}|\mathbf{A}e_{(m)} >< e_{(m)}|\mathbf{U}e_{(i)} > \\
&= \sum_{i,k,m} < e_{(k)}|\mathbf{A}e_{(m)} >< e_{(m)}|\mathbf{U}e_{(i)} >< e_{(i)}|\mathbf{U}^\dagger e_{(k)} > \\
&= \sum_{k,m} < e_{(k)}|\mathbf{A}e_{(m)} >< e_{(m)}|\mathbf{U}\mathbf{U}^\dagger e_{(k)} > \\
&= \sum_k < e_{(k)}|\mathbf{A}e_{(k)} > \qquad (4.25)
\end{aligned}$$

•Das Produkt von Operatoren $\mathbf{AB}$ ist die Abbildungsvorschrift:

$$|f\rangle \to \mathbf{AB}\,|f\rangle = \mathbf{A}\,|\mathbf{B}f\rangle = |\mathbf{AB}f\rangle \tag{4.26}$$

•Der Kommutator ist:

$$[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = \mathbf{AB} - \mathbf{BA} \tag{4.27}$$

•Die Funktion eines Operators $F(\mathbf{A})$ können wir auf zwei Weisen definieren:

1) allgemein: Hat die Funktion $F(x)$ die Potenzreihenentwicklung

$$F(x) = \sum_n \frac{1}{n!} F_n x^n \tag{4.28}$$

so definieren wir $F(\mathbf{A})$ als:

$$F(\mathbf{A}) = \sum_n \frac{1}{n!} F_n \mathbf{A}^n \tag{4.29}$$

2) Für einen Eigenvektor $\phi_n >$ mit $\mathbf{A} = a_n|\phi_n >$ gilt:

$$F(\mathbf{A})|\phi_n >= F(a_n)|\phi_n > \tag{4.30}$$

Hat der Operator ein voS von Eigenvektoren, wie z.B. ein selbstadjungierter Operator, dann gilt für jeden Vektor $|g >= \sum_j c_j|\phi_j >$ und wir haben:

$$F(\mathbf{A})|g >= \sum_j c_j F(a_j)|\phi_j > \tag{4.31}$$

4.3 Direktes Produkt von Operatoren

Sei $\mathbf{A}_1$ ein linearer Operator in $\mathcal{H}_1$ und $\mathbf{A}_2$ ein linearer Operator in $\mathcal{H}_2$, dann ist

$$(\mathbf{A}_1 \otimes \mathbf{A}_2)(\left|f^1\right\rangle \otimes \left|f^2\right\rangle) = \left|\mathbf{A}_1 f^1\right\rangle \otimes \left|\mathbf{A}_2 f^2\right\rangle \tag{4.32}$$

Für einen beliebigen Vektor $|f\rangle \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ gilt (3.5)

$$|f\rangle = \sum_{n,m} c_{nm} \left|\phi_{(n)}\right\rangle \otimes \left|\psi_{(m)}\right\rangle \tag{4.33}$$

und damit:

$$(\mathbf{A}_1 \otimes \mathbf{A}_2)\,|f\rangle = \sum_{n,m} c_{nm} \left|\mathbf{A}_1 \phi_{(n)}\right\rangle \otimes \left|\mathbf{A}_2 \psi_{(m)}\right\rangle \tag{4.34}$$

•$\mathbf{A}_1$ lässt sich in $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ **einbetten** als $\mathbf{A}_1 \otimes \mathbf{1}_2$. Für $\mathbf{A}_1 \otimes \mathbf{1}_2 + \mathbf{1}_1 \otimes \mathbf{A}_2$ schreiben wir Physiker meist $\mathbf{A}_1 + \mathbf{A}_2$.

Kapitel 5

Aufbau der Quantenmechanik

5.1 Die Postulate der Quantenmechanik

1. **Observable** Die Observablen werden beschrieben durch selbstadjungierte Operatoren $\mathbf{A} = \mathbf{A}^\dagger$.

2. **Zustände** Zustände werden beschrieben durch selbstadjungierte Operatoren $\boldsymbol{\rho}$ mit positiven Eigenwerten und $\operatorname{tr} \boldsymbol{\rho} = 1$, den **statistischen Operator** (Dichtematrix).

3. **Messwerte** Die Mittelwerte von Messungen einer Funktion F von Observablen sind
$$< F(\mathbf{A}) >= \operatorname{tr} \Big(\boldsymbol{\rho} F(\mathbf{A})\Big) \tag{5.1}$$

4. **Dynamik** Die zeitliche Entwicklung des Erwartungswertes eines Zustands sind gegeben durch:
$$< \mathbf{A} > (t) = \operatorname{tr} \mathbf{U}_t \boldsymbol{\rho} \mathbf{U}_t^\dagger \mathbf{A} = \operatorname{tr} \boldsymbol{\rho} \mathbf{U}_t^\dagger \mathbf{A} \mathbf{U}_t \tag{5.2}$$
mit dem unitären Zeitentwicklungs-Operator
$$\mathbf{U}_t = \exp(-i\mathbf{H}t/\hbar) \tag{5.3}$$
Der selbstadjungierte Operator $\mathbf{H}$ heißt Hamiltonoperator. Er enspricht der Observablen ,,Energie".

5. **Korrespondenz** Die den klassischen Größen ,,Ort" und ,,kanonischer Impuls" entsprechenden Variablen $\mathbf{P}_i$ und $\mathbf{Q}_i$ erfüllen in kartesischen Koordinaten die Vertauschungsrelationen :
$$[\mathbf{P}_j, \mathbf{Q}_k] = -i\hbar\delta_{jk}, \quad [\mathbf{P}_j, \mathbf{P}_k] = 0, \quad [\mathbf{Q}_j, \mathbf{Q}_k] = 0 \tag{5.4}$$

5.2 Der statistische Operator

Der statistische Operator ist selbstadjungiert, daher existiert ein voS von Eigenvektoren $\ldots \left| r_{(n)} \right\rangle \ldots$. Der statistische Operator lässt sich schreiben als:

$$\boldsymbol{\rho} = \sum_n w_n \left| r_{(n)} \right\rangle \left\langle r_{(n)} \right| \tag{5.5}$$

mit $w_n \geq 0, \quad \sum_n w_n = 1$.

Wir können die Zeitentwicklung in 5.2 entweder zum Zustand oder zum Operator schlagen.

Schrödingerbild:

$$\boldsymbol{\rho}_t = \mathbf{U}_t \boldsymbol{\rho} \mathbf{U}_t^\dagger \tag{5.6}$$

Heisenbergbild:

$$\mathbf{A}_t = \mathbf{U}_t^\dagger \mathbf{A} \mathbf{U}_t \tag{5.7}$$

Durch Differenzieren von 5.6 nach t erhalten wir die von-Neumann-Gleichung:

$$i\hbar\partial_t \boldsymbol{\rho}_t = \mathbf{H}\boldsymbol{\rho}_t - \boldsymbol{\rho}_t \mathbf{H} = [\mathbf{H}, \boldsymbol{\rho}] \tag{5.8}$$

Beispiele:

System mit fester Teichenzahl in Wärmebad T:

$$\boldsymbol{\rho} = \frac{1}{Z}\exp(-\frac{\mathbf{H}}{kT}) \quad \text{mit} \quad Z = \text{ tr } (\exp(-\frac{\mathbf{H}}{kT}) \tag{5.9}$$

5.3 Der reine Zustand

Ein besonders wichtiger Zustand ist der „reine Zustand", ein Projektionsoperator auf einen eindimensionalen Unterraum von $\mathcal{H}$ der durch den Einheitsvektor $|f>$ aufgespannt wird, d.h. in 5.5 tritt nur ein Term auf.

$$\boldsymbol{\rho} = |f><f| \tag{5.10}$$

5.10 beschreibt tatsächlich einen statistischen Operator:

$$\begin{aligned} \text{tr } \boldsymbol{\rho} &= \sum_j < e_{(j)}|f><f|e_{(j)}> = \sum_j < f|e_{(j)}><e_{(j)}|f> \\ &= < f|f> = 1 \end{aligned} \tag{5.11}$$

$$\boldsymbol{\rho}|f>=|f><f|f>=|f> \tag{5.12}$$

alle anderen Eigenwerte 0.

Für den Mittelwert der Messungen bei einem reinen Zustand gilt:

$$\begin{aligned} <\mathbf{A}> &= \operatorname{tr}(|f><f|\mathbf{A}>) = \sum_j <e_{(j)}|f><f|\mathbf{A}e_{(j)}> \\ &= \sum_j <f|\mathbf{A}e_{(j)}><e_{(j)}|f>=<f|\mathbf{A}f> \end{aligned} \tag{5.13}$$

d.h. für reinen Zustand: **Mittelwert = Erwartungswert.**

I. A. gilt: Die Werte der Einzelmessungen schwanken um den Mittelwert $<\mathbf{A}>=<f|\mathbf{A}f>$.

$$\begin{aligned} <f|(\mathbf{A}-<\mathbf{A}>\mathbf{1})^2 f> &= <(\mathbf{A}-<\mathbf{A}>\mathbf{1})f|(\mathbf{A}-<\mathbf{A}>\mathbf{1})f>\geq 0 \\ &= <\mathbf{A}^2>+<\mathbf{A}>^2-2<\mathbf{A}><\mathbf{A}> \text{ d.h.} \\ <\mathbf{A}^2>-<\mathbf{A}>^2 &\geq 0 \\ &= 0 \quad \text{nur für } \mathbf{A}|f>=<\mathbf{A}>|f> \\ &\quad \text{d.h. } |f> \text{ ist Eigenvektor zu } \mathbf{A} \end{aligned} \tag{5.14}$$

Sei $\{\ldots|\phi_{(j)}>\}$ ein voS von Eigenvektoren von $\mathbf{A}$: $\mathbf{A}|\phi_{(j)}>=a_j|\phi_{(j)}>$, sei $|f>=\sum_j c_j|\phi_{(j)}>$. Dann gilt nach 4.30:

$$<f|F(\mathbf{A})f>=\sum_{j,k} c_j^* c_k <\phi_{(j)}|F(\mathbf{A})\phi_{(k)}>=\sum_j |c_j|^2 F(a_j). \tag{5.15}$$

•Daraus folgt:

Bei einer **Einzelmessung** sind die einzelnen Messwerte die Eigenwerte von **A**. Die Wahrscheinlichkeit, bei einer Einzelmessung den Eigenwert a_j zu finden, ist gegeben durch

$$w_j=|c_j|^2=|<\phi_{(j)}|f>|^2 \tag{5.16}$$

wobei $\mathbf{A}|\phi_{(j)}>=a_j|\phi_{(j)}>$.

•Unmittelbar nach der Messung mit dem Ergebnis a_j wissen wir, dass der Zustand durch $\left|\phi_{(j)}\right\rangle$ beschrieben wird. D.h. die Messung ist eine Projektion auf den Zustand $\left|\phi_{(j)}\right\rangle$.

•Für den reinen Zustand gilt die allgemeine zeitliche Entwicklung nach 5.6:

$$\boldsymbol{\rho}_t=|f_t><f_t|=|e^{-i\mathbf{H}t/\hbar}f><f\ e^{i\mathbf{H}t/\hbar}| \tag{5.17}$$

d.h.

$$|f_t>=|e^{-i\mathbf{H}t/\hbar}f> \tag{5.18}$$

Ist $|f>$ Eigenvektor zu $\mathbf{H}$, $\mathbf{H}|f>= E|f>$, so gilt nach 4.30:

$$|f_t>=|e^{-iEt/\hbar}f> \tag{5.19}$$

Differenzieren wir 5.18 nach t, erhalten wir die **Schrödingergleichung**:

$$i\hbar\partial_t|f_t>=\mathbf{H}|f_t> \tag{5.20}$$

mit der Anfangsbedingung: $f_0>=|f>$.

5.4 Kommutatoren und Poisson Klammern

Sei $\rho(p,q)$ eine Dichteverteilung im Phasenraum der klassischen Mechanik. Es gilt:

$$\begin{aligned}\partial_t\rho(p,q) &= \partial_p\rho(p,q)\partial_t p+\partial_q\rho(p,q)\partial_t q\\ &= -\partial_p\rho(p,q)\partial_q H(p,q)+\partial_q\rho(p,q)\partial_p H(p,q)=\{H,\rho\}\end{aligned} \tag{5.21}$$

wobei $\{.\}$ die Poissonklammer ist.

Aus mehreren Gründen (z.B. Antisymmetrie, Invarianz unter kanonischen Transformationen) wurden Heisenberg u.a. dazu geführt, beim Übergang von der klassischen Mechanik zur Quantenmechanik zu fordern:

$$\{.\}\to\frac{1}{i\hbar}[.] \tag{5.22}$$

Daraus folgen die v.Neumann Gleichung 5.8 (und damit die Schrödingergleichung 5.18) und die Vertauschungsrelationen 5.4.

Die kanonische Quantisierung 5.22 ist wichtig für die Quantisierung von Feldern (z.B. dem elektromagnetischen Feld).

Kapitel 6

Zwei-Zustandsysteme

6.1 Der NH_3 Maser

Wir reduzieren das NH_3 auf zwei orthonormale Zustände: $|u\rangle$, das N-Atom über der H_3-Ebene, und $|d\rangle$, das N-Atom unter der Ebene (s. Fig. 22.1). Der Hamiltonoperator ist eine hermitische 2x2-Matrix. Die Dynamik ist für die beiden Fälle gleich, d.h. $\mathbf{H}$ ist symmetrisch unter der Vertauschung von $|u\rangle$ und $|d\rangle$. D.h. wenn

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |d\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{6.1}$$

dann

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} E & W \\ W & E \end{pmatrix} \tag{6.2}$$

mit E, W reell. Die Eigenwerte bestimmen wir aus

$$||\mathbf{H} - \lambda \mathbf{1}|| = 0 \tag{6.3}$$

und erhalten: $\lambda_{1,2} = E \pm W$ Wir bezeichnen die beiden Energieeigenwerte mit

$$E_1 = E + W, \qquad E_2 = E - W \tag{6.4}$$

und die zugehörigen Eigenvektoren mit $|1\rangle, \quad |2\rangle$, d.h.

$$\mathbf{H}\,|i\rangle = E_i\,|i\rangle, \quad i = 1, 2 \tag{6.5}$$

Man findet leicht:

$$|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad |2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \tag{6.6}$$

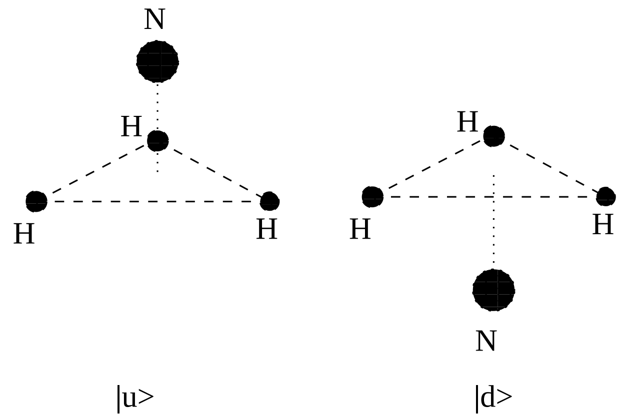


Abbildung 6.1: Beim Ammoniak-Molekül kann sich das N-Atom über der H_3-Ebene befinden, $|u\rangle$ oder darunter, $|d\rangle$

und daraus:

$$|u\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle), \quad |d\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - |2\rangle) \tag{6.7}$$

Sei $|f(t)\rangle$ ein zeitabhängiger Zustand mit $|f(0)\rangle = |u\rangle$, d.h. nach 5.18 und 4.30 erhalten wir:

$$|f(t)\rangle = \exp(-i\mathbf{H}t/\hbar)\,|u\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\exp(-iEt/\hbar)(e^{-iWt/\hbar}\,|1\rangle + e^{+iWt/\hbar}\,|2\rangle) \tag{6.8}$$

Für den Erwartungswert gilt:

$$< \mathbf{H} >= \langle f(t) \mid \mathbf{H}f(t)\rangle = \frac{1}{2}\Big((E+W)\,\langle 1 \mid 1\rangle + (E-W)\,\langle 2 \mid 2\rangle\Big) = E \tag{6.9}$$

Die Wahrscheinlichkeit, dass sich $|f(t)\rangle$ im Zustand $|u\rangle$ befindet, ist nach 5.16 gegeben durch:

$$|\,\langle u \mid f(t)\rangle\,|^2 = \frac{1}{2}\Big|(e^{-iWt/\hbar}\,\langle u \mid 1\rangle + e^{iWt/\hbar}\,\langle u \mid 2\rangle)\Big|^2 = \cos^2(Wt/\hbar) \tag{6.10}$$

analog:

$$|\,\langle d \mid f(t)\rangle\,|^2 = \sin^2(Wt/\hbar). \tag{6.11}$$

Richtig: Eine Messung zur Zeit t ergibt mit der Wahrscheinlichkeit $\cos^2(Wt/\hbar)$ den Messwert: „N-Atom oben" und mit der Wahrscheinlichkeit $\sin^2(Wt/\hbar)$ den Messwert: „N-Atom unten".

Falsch: Das N-Atom schwingt mit einer Frequenz $W/(2\pi\hbar)$ durch die H-Ebene.

Wenn $W > 0$, dann ist der energetisch günstigere Grundzustand $|2\rangle = 1/\sqrt{2}(|u\rangle - |d\rangle)$. Ist W sehr klein, dann ist auch die Energiedifferenz $E_1 - E_2$ sehr klein. Damit lassen sich kleine Energiedifferenzen „maßschneidern”. Ist W winzig, dann reicht eine geringe Wechselwirkung mit der Umgebung aus, den Zustand $|2\rangle$ in $|1\rangle$ zu heben, und umgekehrt wird der Übergang auch sehr leicht induziert. Daher geht der Phasenzusammenhang sehr bald verloren (Dekohärenz, H.D. Zeh), und der Zustand ist nicht mehr rein, sondern muss durch einen statistischen Operator beschrieben werden.

6.2 Das allgemeine Zweizustandsystem. Pauli Matrizes

Der allgemeine Hamiltonoperator für ein Zweizustandsystem ist gegeben durch:

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} h_{11} & h_{21}^* \\ h_{21} & h_{22} \end{pmatrix} \tag{6.12}$$

wobei h_{11} und h_{22} reell sind. Wir können diesen mit Hilfe der Einheitsmatrix und der **Pauli-Matrices** zerlegen:

$$\mathbf{H} = \frac{h_{11} + h_{22}}{2}\mathbf{1} + \mathrm{Re}h_{21}\boldsymbol{\sigma}_1 + \mathrm{Im}h_{21}\boldsymbol{\sigma}_2 + \frac{h_{11} - h_{22}}{2}\boldsymbol{\sigma}_3 \tag{6.13}$$

mit den 3 Pauli-Matrices:

$$\boldsymbol{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \boldsymbol{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \boldsymbol{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{6.14}$$

Die PM haben viele schöne Eigenschaften, die wir im Lauf der Vorlesung kennen lernen werden.

6.3 Der Spin $\frac{1}{2}$

Achtung hier noch nicht korrigierter Vorzeichenfehler!

Elektronen treten in zwei Zuständen auf, wir nennen diese Freiheitsgrade Spin. Ohne Berücksichtigung der anderen Freiheitsgrade (Translation !) bildet ein Elektron einen Zustand im 2-dimensionalen Raum, d.h. der Hamilton-Operator hat die Form 6.13.

Der Spin wechselwirkt mit dem Magnetfeld. Durch Experimente motiviert setzen wir für die Wechselwirkung an (Herleitung in relativistischer Quantenmechanik durch Dirac-Gleichung):

$$\mathbf{H} = (-\mu)\sum_k B_k\boldsymbol{\sigma}_k = (-\mu)\vec{B}\vec{\boldsymbol{\sigma}} \tag{6.15}$$

mit reeller Konstanten μ.

Sei $\vec{B}$ Feld in 3-Richtung, dann nach 6.14

$$\mathbf{H} = (-\mu)B\boldsymbol{\sigma}_3 = (-\mu)\begin{pmatrix} B & 0 \\ 0 & -B \end{pmatrix} \tag{6.16}$$

Man findet für die Energieeigenwerte E_+ und E_- der Eigenvektoren von $\boldsymbol{\sigma}_3$

$$\begin{aligned} |+\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad & |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad (6.17) \\ E_+ &= e_0\hbar B/(2mc) \qquad & E_- = -e_0\hbar B/(2mc) \qquad (6.18) \end{aligned}$$

d.h.

$$\mu = e_0\hbar/(2mc) \tag{6.19}$$

.

Zeitliches Verhalten

$$|\chi(t)\rangle \text{ mit } |\chi(0)\rangle = \cos(\theta/2)\,|+\rangle + \sin(\theta/2)\,|-\rangle \tag{6.20}$$

$$\begin{aligned} |\chi(t)\rangle &= \exp(-i\mu B\boldsymbol{\sigma}_3 t/\hbar)\Big(\cos(\theta/2)\,|+\rangle + \sin(\theta/2)\,|-\rangle\Big) \\ &= \cos(\theta/2)\left|e^{-i\mu Bt/\hbar}+\right\rangle + \sin(\theta/2)\left|e^{+i\mu Bt/\hbar}-\right\rangle \qquad (6.21) \end{aligned}$$

Erwartungswert von $\mathbf{A}$:

$$\begin{aligned} < A > (t) &= \langle\chi(t)\mid \mathbf{A}\chi(t)\rangle \\ &= \Big(\cos(\theta/2)\left\langle e^{-i\mu Bt/\hbar}+\right| + \sin(\theta/2)\left\langle e^{+i\mu Bt/\hbar}-\right|\Big)\mathbf{A} \\ &\qquad \Big(\cos(\theta/2)\left|e^{-i\mu Bt/\hbar}+\right\rangle + \sin(\theta/2)\left|e^{+i\mu Bt/\hbar}-\right\rangle\Big) \\ &= \cos^2\frac{\theta}{2}\,\langle +\mid \mathbf{A}+\rangle + \sin^2\frac{\theta}{2}\,\langle -\mid \mathbf{A}-\rangle \\ &+ \cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}e^{+2i\mu Bt/\hbar}\,\langle +\mid \mathbf{A}-\rangle + \cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}e^{-2i\mu Bt/\hbar}\,\langle -\mid \mathbf{A}+\rangle \qquad (6.22) \end{aligned}$$

Dabei haben wir benutzt: $\langle\alpha f\mid\beta g\rangle = \alpha^*\beta\,\langle f\mid g\rangle$.

$< \boldsymbol{\sigma}_3 > (t)$: Dazu rechnet man leicht nach:

$$\boldsymbol{\sigma}_3\,|\pm\rangle = \pm\,|\pm\rangle \tag{6.23}$$

und daraus folgt:

$$\langle +\mid \boldsymbol{\sigma}_3+\rangle = 1; \quad \langle -\mid \boldsymbol{\sigma}_3-\rangle = -1; \quad \langle +\mid \boldsymbol{\sigma}_3-\rangle = 0 \quad \langle -\mid \boldsymbol{\sigma}_3+\rangle = 0 \tag{6.24}$$

und wir erhalten mit 6.22:

$$< \boldsymbol{\sigma}_3 > (t) = \cos^2 \frac{\theta}{2} - \sin^2 \frac{\theta}{2} = \cos\theta \tag{6.25}$$

Kein Zufall denn allgemein gilt:

1. Allgemein

$$\text{Wenn} \quad [\mathbf{A}, \mathbf{H}] = 0, \quad \text{dann auch} \quad [\mathbf{A}, \exp[-i\mathbf{H}t/\hbar] = 0 \tag{6.26}$$

(Reihenentwicklung)

2. Allgemein:

$$\begin{aligned} \langle \exp(-i\mathbf{H}t/\hbar) f \mid \mathbf{A} \exp(-i\mathbf{H}t/\hbar) g \rangle &= \langle f \mid \exp(+i\mathbf{H}t/\hbar) \mathbf{A} \exp(-i\mathbf{H}t/\hbar) g \rangle \\ &= \langle f \mid \mathbf{A} \exp(+i\mathbf{H}t/\hbar) \exp(-i\mathbf{H}t/\hbar) g \rangle \\ &= \langle f \mid \mathbf{A} f \rangle \end{aligned} \tag{6.27}$$

Daraus folgt der wichtige Satz:

•Wenn $\mathbf{A}$ nicht explizit von der Zeit abhängt und wenn $[\mathbf{A}, \mathbf{H}] = 0$, dann ist der Erwartungswert $< A >$ bezüglich jedes Zustands zeitunabhängig. (Vgl. mit Poissonklammer in klassischer Mechanik)

Zurück zum Spin:

Da $\mathbf{H} = \mu B \boldsymbol{\sigma}_3$ gilt natürlich $[\boldsymbol{\sigma}_3, \mathbf{H}] = 0$.

•$< \boldsymbol{\sigma}_1 > (t)$. Dazu rechnet man leicht nach:

$$\boldsymbol{\sigma}_1 |\pm\rangle = |\mp\rangle \tag{6.28}$$

und daraus folgt:

$$\langle + \mid \boldsymbol{\sigma}_1 + \rangle = 0; \quad \langle - \mid \boldsymbol{\sigma}_1 - \rangle = 0; \quad \langle + \mid \boldsymbol{\sigma}_1 - \rangle = 1 \quad \langle - \mid \boldsymbol{\sigma}_1 + \rangle = 1 \tag{6.29}$$

Damit und 6.22:

$$\begin{aligned} < \boldsymbol{\sigma}_1 > (t) &= \cos\frac{\theta}{2} \sin\frac{\theta}{2} e^{+2i\mu Bt/\hbar} + \cos\frac{\theta}{2} \sin\frac{\theta}{2} e^{-2i\mu Bt/\hbar} \\ &= 2 \sin\theta \cos(2\mu Bt/\hbar) \end{aligned} \tag{6.30}$$

Die Kreisfrequenz $\omega_{QM} = 2\mu B/\hbar$ kann man (im Prinzip zumindest) messen und es gilt:

$$\omega_{QM} = \frac{e_0 B}{mc} \tag{6.31}$$

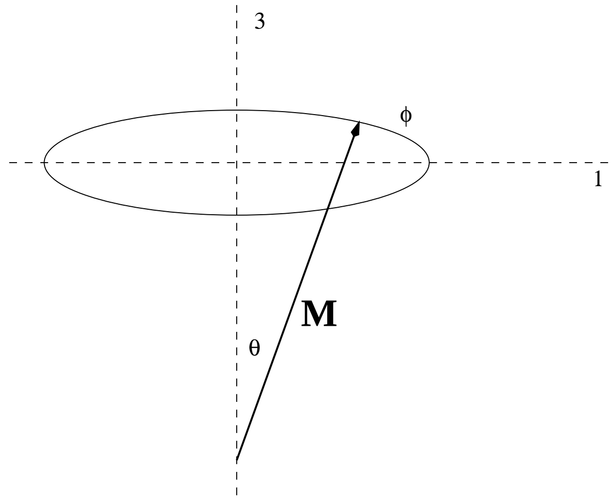


Abbildung 6.2: Klassischer magnetischer Dipol im Magnetfeld

wobei e_0 die Elementarladung (¿0) und m die (invariante) Masse des Elektrons ist, d.h.

$$\mu = \frac{e_0 \hbar}{2mc} \tag{6.32}$$

in Übereinstimmung mit 6.19

•Einschub: Die Larmor Präzession eines klassischen Kreisels

Ein Kreisel mit dem Drehimpuls $\vec{S}$ habe das magnetische Moment $\vec{M} = \gamma \vec{S}$. Er habe zur 3-Achse den Winkel θ und befinde sich in einem Magnetfeld $\vec{B} = (0, 0, B)$. Das Drehmoment $\vec{N} = [\vec{M} \times \vec{B}]$ bringt den Kreisel zur Präzession nach

$$\partial_t \vec{S} = \gamma [\vec{S} \times \vec{B}] \tag{6.33}$$

um die 3-Achse (s. Figur 6.2) mit der Larmorfrequenz $\omega_L = \gamma$. Die 3-Komponente des Drehimpulses $S_3 = |\vec{S}| \cos\theta$ bleibt konstant, die 1-Komponente oszilliert mit der Larmorfrequenz ω_L:

$$S_1 = |\vec{S}| \sin\theta \cos(\omega_L t) \tag{6.34}$$

Wir setzen nun die klassische Physik mit der Quantenphysik korrepondenzmäßig in Verbindung, indem wir die klassischen Observablen durch Operatoren ersetzen, aber die Funktionszusammenhänge beibehalten:

klassiche Physik	Quantenmechanik
$H = \vec{M}.\vec{B}$	$\mathbf{H} = \vec{\mathbf{M}}.\vec{B} = \mu\vec{\boldsymbol{\sigma}}.\vec{B}(\vec{\boldsymbol{\sigma}} = \{\boldsymbol{\sigma}_1, \boldsymbol{\sigma}_2, \boldsymbol{\sigma}_3\})$ d.h. $\vec{\mathbf{M}} = \mu\vec{\boldsymbol{\sigma}}$
$\omega_L = \gamma\|B\|$	$\omega_{QM} = 2\mu/\hbar\|B\|$ d.h. $\gamma = 2\mu/\hbar$
$\vec{S} = 1/\gamma\vec{M}$	$\vec{\mathbf{S}} = \hbar/(2\mu)\vec{\mathbf{M}}$ d.h. $\vec{\mathbf{S}} = \frac{\hbar}{2}\vec{\boldsymbol{\sigma}}$

•Subtilität der QM: Nach der Zeit $T = 2\pi/\omega_L = \frac{\pi\hbar}{\mu B}$ ist der klassiche Kreisel wieder in seine Ausgangslage zurückgekehrt, aber man sieht sofort aus 6.21, dass nach der Zeit $T = 2\pi/\omega_{QM} = 2\pi\hbar/(2\mu B)$ der Zustand $|\chi(T)\rangle = -|\chi(0)\rangle$ ist. Irrelevant für Einteilchen-Zustände, aber wichtig für Interferenzexperimente.

6.4 Messungen an Spin $\frac{1}{2}$ Systemen

Mit $\mathbf{S}_i = \frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}_i, \quad i = 1, 2, 3$ gilt $\mathbf{H} = \frac{2\mu}{\hbar}\sum_{i=1}^{3}\mathbf{S}_i B_i$.

Inhomogenes Magnetfeld erlaubt Separation der Zustände von $\vec{\mathbf{M}}$ und damit $\vec{\mathbf{S}}$ (Stern-Gerlach)

•reine Zustände:

Sei $|\chi\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, d.h. $\mathbf{S}_3|\chi\rangle = \frac{1}{2}\hbar|\chi\rangle$.

Dann wird bei einer Einzelmessung der Observablen $\mathbf{S}_3$ mit der Wahrscheinlichkeit 1 der Wert $\frac{1}{2}\hbar$ gemessen, und es ist $< \mathbf{S}_3 >= \frac{1}{2}\hbar$ und der Erwartungswert $< \mathbf{S}_1 >= 0$.

Zur Bestimmung der Wahrscheinlichkeiten bei Einzelmessungen von $\mathbf{S}_1$ entwickle nach Eigenzuständen von $\mathbf{S}_1$, s. 5.16.

$$\begin{aligned} |\xi_+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{S}_1|\xi_+\rangle = \frac{1}{2}\hbar|\xi_+\rangle \\ |\xi_-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{S}_1|\xi_-\rangle = -\frac{1}{2}\hbar|\xi_+\rangle \end{aligned} \tag{6.35}$$

Bei einer Einzelmessung der Observablen $\mathbf{S}_1$ an $|\chi\rangle$ wird mit der Wahrscheinlichkeit $|\langle\xi_+ | \chi\rangle|^2 = \frac{1}{2}$ der Wert $+\frac{1}{2}\hbar$ gemessen und mit der Wahrscheinlichkeit $|\langle\xi_- | \chi\rangle|^2 = \frac{1}{2}$ der Wert $-\frac{1}{2}\hbar$.

Hat diese Messung $+\frac{1}{2}\hbar$ ergeben, ist der Zustand in $|\xi_+\rangle$ und eine Einzelmessung der Observablen $\mathbf{S}_1$ wird mit der Wahrscheinlichkeit 1 den Wert $\frac{1}{2}\hbar$ ergeben. Aber eine Einzelmessung von $\mathbf{S}_3$ unmittelbar **nach** der vorigen Messung von $\mathbf{S}_1$ ergibt mit gleicher Wahrscheinlichkeit $\frac{1}{2}$ den Wert $+\frac{1}{2}\hbar$ und $-\frac{1}{2}\hbar$.

Die Trennung in zu messendes Objekt und Messaperatur ist natürlich willkürlich, aber SEHR bequem, in den meisten Fällen zumindest praktisch notwendig.

•Allgemeiner Spin $\frac{1}{2}$ Zustand: $\boldsymbol{\rho} = \alpha\mathbf{1} + \sum_{i=1}^{3} P_i\boldsymbol{\sigma}_i$ mit α, P_i reell.

$$\boldsymbol{\rho} = \begin{pmatrix} \alpha + \frac{1}{2}P_3 & P_1 - iP_2 \\ P_1 + iP_2 & \alpha - \frac{1}{2}P_3) \end{pmatrix} \tag{6.36}$$

Aus tr $\boldsymbol{\rho} = 1$ folgt: $\alpha = \frac{1}{2}$, aus positiven Eigenwerten folgt: $\sum_{i=1}^{3} P_i^2 \leq \frac{1}{4}$.

Man rechnet nach, direkt oder mit:

$$\text{tr }\boldsymbol{\sigma}_i = 0,\ \text{tr }(\boldsymbol{\sigma}_j\boldsymbol{\sigma}_k) = 2\delta_{jk} \tag{6.37}$$

•

$$< \mathbf{S}_i >= \text{ tr }(\boldsymbol{\rho}\mathbf{S}_i) = \hbar P_i \tag{6.38}$$

Man kann in einfachen Fällen nachrechnen, sonst sehr gut abschätzen: Durch Wechselwirkung mit der Umwelt (z.B. Stößen mit den Restgasmolekülen im Atomstrahl) verschwinden die Diagonalelemente (*) (Dekohärenz).

Messprozess besser durch statistischen Operator beschrieben:

Ausgangszustand sei $|\xi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$. $< \mathbf{S}_1 >= \frac{1}{2}\hbar$, d.h. der zugehörige statistische Operator ist

$$\boldsymbol{\rho}^{(1)} = \frac{1}{2}\mathbf{1} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_1 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \tag{6.39}$$

Im Magnetfeld in 3-Richtung tritt bald Dekohärenz ein, die Diagonalelemente verschwinden: $\boldsymbol{\rho}^{((1)} \to \frac{1}{2}\mathbf{1}$. Wenn wir schließlich $\mathbf{S}_3$ zu $+\frac{1}{2}\hbar$ messen, d.h. der statistische Operator ist übergegangen in $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$, so bleibt immer noch das Rätsel, was geschieht mit dem Rest?????

Deutungen: Kopenhagen, Vielwelten, consistent histories ...

Kapitel 7

Zweiteilchensysteme I

7.1 Der Satz von Spin und Statistik

Wird ein Teilchen im Hilbertraum $\mathcal{H}_1$, das andere im $\mathcal{H}_2$ beschrieben, dann das Zweiteilchensystem im $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$.

In der relativistischen Quantenfeldtheorie in 4 Raumzeitdimensionen kann man den **Satz von Spin und Statistik** herleiten:

•Mehrere gleiche Teilchen mit halbzahligem Spin werden durch Zustände in einem antisymmetrischen Produktraum, $\mathcal{H}_{antisym} = (\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \ldots \mathcal{H}_n)_{antisym.}$ beschrieben (Fermi-Dirac),
solche mit ganzzahligem Spin in einem symmetrischen $\mathcal{H}_{sym} = (\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \ldots \mathcal{H}_n)_{sym.}$ (Bose-Einstein).(siehe 3.2).

Dieses Theorem ist die Basis des Pauli-Prinzips.

7.2 2 Spin $\frac{1}{2}$ Teilchen

Teilchen 1 im $\mathcal{H}_1$ mit voS $|\pm_1\rangle$, Teilchen 2 im $\mathcal{H}_2$ mit voS $|\pm_2\rangle$, dann der Zweiteilchenzustand im $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ mit dem 2×2 voS $|\pm_1\rangle \otimes |\pm_2\rangle$. Sind die Teilchen gleich, z.B. zwei Elektronen, dann ist $\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_2$ und wir haben $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1$.

Wir führen ein das voS in $\mathcal{H}$:

$$|{+}{+}\rangle = |+\rangle \otimes |+\rangle\,,\ \ |{-}{-}\rangle = |-\rangle \otimes |-\rangle\,,\ \ |{+}{-}\rangle = |+\rangle \otimes |-\rangle\,,\ \ |{-}{+}\rangle = |-\rangle \otimes |+\rangle \quad (7.1)$$

Können wir die anderen Freiheitsgrade tatsächlich vernachlässigen (**sehr** starke Annahme), gilt nach sect. 1, dass nur der antisymm. Anteil, also

$$|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|{+}{-}\rangle - |{-}{+}\rangle\Big) \in \mathcal{H}_{antisym} \tag{7.2}$$

ein möglicher Zustand ist.

•Konsequenz: Messen wir an einem Teilsystem den Spin zu $\frac{1}{2}\hbar$, dann sind wir sicher, dass eine Messung am anderen System den Messwert $-\frac{1}{2}\hbar$ ergeben wird (Einstein, Podolski, Rosen; Verschränkung, Entanglement). Denn nach der Messung wird nur der Term in 7.2 übrig bleiben, bei dem ein Teilsystem im $|+\rangle$ Zustand ist und daher das andere notwendigerweise im $|-\rangle$ Zustand ist.

Kapitel 8

Der Orts und Impulsraum

8.1 Der Ortsraum

Wir gehen jetzt in die speziellen Hilberträume, die zur Beschreibung von Vorgängen im „Raum” besonders angemessen sind. Wir nutzen besonders Kap. 5.1 (5). Eine besondere Rolle spielt der Hilbertraum der komplexwertigen quadratintegrablen Funktionen von d reellen Argumenten: $\mathcal{L}_2(R_d)$ mit den Elementen $\psi(\vec{x}) : \psi : R_d \to C$ mit dem Skalarprodukt:

$$\langle \psi \mid \phi \rangle = \int d^d x \, \psi(\vec{x})^* \phi(\vec{x}) \tag{8.1}$$

$\vec{x} = (x_1 \dots x_d)$

Besonders wichtig: d=1: lineare Modelle, d=3: Einteilchen, d=6: Zwei Teilchen ....

Zusammenfassung:

Abstrakter HR	Orts-Raum
$\mathcal{H}$	$\mathcal{L}_2(R_d)$
$\vert\psi\rangle \in \mathcal{H}$	$\psi(\vec{x}) \in \mathcal{L}_2(R_d)$
$\mathbf{Q}_k \vert\psi\rangle$	$x_k \psi(\vec{x})$
$< \mathbf{Q}_k >= \langle \psi \mid \mathbf{Q}_k \psi \rangle$	$\int d^d x \psi^*(\vec{x}) x_k \psi(\vec{x})$
	$\psi^*(\vec{x})\psi(\vec{x})$ Wahrscheinlichkeitsdichte im Ortsraum
$[\mathbf{P}_j, \mathbf{Q}_k] = \frac{\hbar}{i}\delta_{jk}\mathbf{1}$	$[\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_j}\ , x_k]\psi(\vec{x}) = \frac{\hbar}{i}\delta_{jk}\psi(\vec{x})$
$\mathbf{P}_k \vert\psi\rangle$	$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_k}\psi(\vec{x})$
$[\mathbf{Q}_j, \mathbf{Q}_k] = 0$	$(x_j x_k - x_k x_j)\psi(\vec{x}) = 0$
$[\mathbf{P}_j, \mathbf{P}_k] = 0$	$-\hbar^2(\frac{\partial}{\partial x_j}\frac{\partial}{\partial x_k} - \frac{\partial}{\partial x_k}\frac{\partial}{\partial x_j})\psi(\vec{x}) = 0$
$\mathbf{H} = \frac{1}{2m}\sum_j \mathbf{P}_j^2 + V(\mathbf{Q}_k)$	$-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_j \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} + V(x_k)$

•Selbstadjungiertheit von **P** und **Q**.

$$\langle \psi \mid \mathbf{Q}_k \psi \rangle = \langle \mathbf{Q}_k \psi \mid \psi \rangle \tag{8.2}$$

im Ortsraum:

$$\int d^d x \psi(x)^* x_k \psi(x) = \int d^d x (x_k \psi(x))^* \psi(x) \tag{8.3}$$

da x_k reell.

$$\langle \psi \mid \mathbf{P}_k \psi \rangle = \langle \mathbf{P}_k \psi \mid \psi \rangle \tag{8.4}$$

im Ortsraum:

$$\int d^d x \psi(x)^* \frac{\hbar}{i} \partial_k \psi(x) = \int d^d x (\frac{\hbar}{i} \partial_k \psi(x))^* \psi(x) \tag{8.5}$$

nach partieller Integration und da Oberflächenterme=0.

8.2 Der Impulsraum

Wir können auch von einer Beschreibung im Impulsraum ausgehen:

Abstrakter H R	Impuls-Raum
$\mathbf{P}_k \left\| \tilde{\psi} \right\rangle$	$p_k \tilde{\psi}(\vec{p})$
$< \mathbf{P}_k >= \left\langle \tilde{\psi} \right\| \left. \mathbf{P}_k \tilde{\psi} \right\rangle$	$\int d^d p \tilde{\psi}^*(\vec{p}) p_k \tilde{\psi}(\vec{p})$
	$\tilde{\psi}^*(\vec{p})\tilde{\psi}(\vec{p})$ Wahrscheinlichkeitsdichte im Impulsraum
$[\mathbf{P}_j, \mathbf{Q}_k] = \frac{\hbar}{i}\delta_{jk}\mathbf{1}$	$[p_j, -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p_k}]\tilde{\psi}(\vec{p}) = \frac{\hbar}{i}\delta_{jk}\tilde{\psi}(\vec{p})$
$[\mathbf{P}_j, \mathbf{P}_k] = 0$	$(p_j p_k - p_k p_j)\tilde{\psi}(\vec{p}) = 0$
$[\mathbf{Q}_j, \mathbf{Q}_k] = 0$	$-\hbar^2(\frac{\partial}{\partial p_j}\frac{\partial}{\partial p_k} - \frac{\partial}{\partial p_k}\frac{\partial}{\partial p_j})\tilde{\psi}(\vec{p}) = 0$
$\mathbf{Q}_k \left\| \psi \right\rangle$	$i\hbar\frac{\partial}{\partial p_k}\tilde{\psi}(\vec{p})$
$\mathbf{H} = \frac{1}{2m}\sum_j \mathbf{P}_j^2 + V(\mathbf{Q}_k)$	$\frac{1}{2m}\sum_j p_j^2 + V(\frac{-\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p_k})$

8.3 Übergang zwischen Orts und Impulsraum

Wir erweitern die Definition der Fouriertransformation aus Aufgabe H3 in trivialer Weise durch
$\exp(-i\vec{k}.\vec{x}) = \prod_{j=1}^d \exp(-ik_j x_j)$
auf d Dimensionen:

$$\hat{\psi}(\vec{k}) = \mathcal{F}[\psi(\vec{x}); \vec{k}] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^d} \int_{R_d} d^d x \, \exp(-i\vec{k}.\vec{x})\psi(\vec{x}) \tag{8.6}$$

mit der inversen Transformation:

$$\psi(\vec{x}) = \bar{\mathcal{F}}[\hat{\psi}(\vec{k});\vec{x}] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^d}\int_{R_d} d^dk\ \exp(+i\vec{k}.\vec{x})\hat{\psi}(\vec{k}) \tag{8.7}$$

H7 wird dann mit 8.6:

$$\begin{aligned} \text{H7a} &\rightarrow \mathcal{F}[\frac{\partial}{\partial x_j}\psi(\vec{x});\vec{k}] = ik_j\mathcal{F}[\psi(\vec{x});\vec{k}] \\ \text{H7b} &\rightarrow \mathcal{F}[x_j\psi(\vec{x});\vec{k}] = i\frac{\partial}{\partial k_j}\mathcal{F}[\psi(\vec{x});\vec{k}] \qquad (8.8) \\ & \qquad (8.9) \end{aligned}$$

Wir suchen eine Abbildung von:

$$\begin{array}{ccc} \psi(\vec{x}) \in \mathcal{L}_2(R_d) & \rightarrow & \tilde{\psi}(\vec{p}) \in \mathcal{L}_2(R_d) \\ & \text{mit} & \\ \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_j}\psi(\vec{x}) & \rightarrow & p_j\tilde{\psi}(\vec{p}) \\ x_j\psi(\vec{x}) & \rightarrow & i\hbar\frac{\partial}{\partial p_j}\tilde{\psi}(\vec{p}) \end{array} \tag{8.10}$$

Aus 8.9 folgt:

$$\tilde{\psi}(\vec{p}) = \mathcal{F}[\psi(\vec{x});k] \quad \text{mit} \quad \vec{k} = \vec{p}/\hbar \tag{8.11}$$

ist die gewünschte Abbildung.

D.h.

$$\tilde{\psi}(\vec{p}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^d}\int_{R_d} d^dx\ \exp\Big(\frac{-i\vec{p}.\vec{x}}{\hbar}\Big)\psi(\vec{x}) \tag{8.12}$$

mit der Umkehrung:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}^d}\int_{R_d} d^dk\ \exp(+i\vec{k}.\vec{x})\hat{\psi}(\vec{k}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}^d}\int_{R_d}\frac{d^dp}{\hbar^d}\ \exp\Big(\frac{+i\vec{p}.\vec{x}}{\hbar}\Big)\tilde{\psi}(\vec{p}\ /\hbar) \end{aligned} \tag{8.13}$$

Wir können also im Orts- oder Impulsraum arbeiten, der Übergang ist einfach durch eine Fouriertransformation zu erreichen. Man wählt das bequemere.

8.4 Einige nützliche Bemerkungen zur Fouriertransformation

•Ist $\psi(\vec{x}) \in \mathcal{L}_2(R_d)$, dann auch $\hat{\psi}(\vec{k}) \in \mathcal{L}_2(R_d)$

•Theorem von Fourier und Plancherel: Die Fouriertransformation ist eine unitäre(*) Transformation.

$$\langle \psi \mid \phi \rangle = \left\langle \hat{\psi} \,\middle|\, \hat{\phi} \right\rangle \tag{8.14}$$

•Gaußfunktion

$$\int_{R_d} d^d x \, \exp\Big(- \frac{(x-\alpha)^2}{\lambda^2} \Big) = (\lambda^2 \pi)^{d/2} \tag{8.15}$$

für α beliebig komplex und $\mathrm{Re}\lambda^2 > 0$.

•„Zauberformel(*)"

$$\int_{R_d} d^d x \, \exp\Big(- i(\vec{k} - \vec{a}).\vec{x} \Big) = (2\pi)^d \delta(\vec{k} - \vec{a}) \tag{8.16}$$

So wie sie hier steht nicht mathematisch streng, kann aber in der Theorie der Distributionen begründet werden.

Kapitel 9

Der harmonische Oszillator

9.1 Der 1-dimensionale harmonische Oszillator

Hamiltonoperator aus Hamiltonfunktion:

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m}\mathbf{P}^2 + \tfrac{1}{2}m\omega^2\mathbf{Q}^2 \quad \text{mit} \quad \omega = \sqrt{D/m} \tag{9.1}$$

Wir definieren:

$$\hat{\mathbf{Q}} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,\mathbf{Q} \quad \hat{\mathbf{P}} = \sqrt{\frac{1}{m\omega\hbar}}\,\mathbf{P} \tag{9.2}$$

$$\mathbf{H} = \tfrac{1}{2}(\hat{\mathbf{P}}^2 + \hat{\mathbf{Q}}^2)\hbar\omega \tag{9.3}$$

Aus $[\mathbf{P},\mathbf{Q}] = -i\hbar, \quad [\mathbf{P},\mathbf{P}] = [\mathbf{Q},\mathbf{Q}] = 0$ folgt

$$[\hat{\mathbf{P}},\hat{\mathbf{Q}}] = -i \quad [\hat{\mathbf{P}},\hat{\mathbf{P}}] = [\hat{\mathbf{Q}},\hat{\mathbf{Q}}] = 0 \tag{9.4}$$

Wir führen ein die Leiteroperatoren:

$$\mathbf{A} = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(\hat{\mathbf{Q}} + i\hat{\mathbf{P}}) \quad \mathbf{A}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(\hat{\mathbf{Q}} - i\hat{\mathbf{P}}) \tag{9.5}$$

sowie

$$\mathbf{N} = \mathbf{A}^\dagger\mathbf{A} \tag{9.6}$$

Es gilt (mit 9.4)

$$\mathbf{H} = \hbar\omega(\mathbf{N} + \tfrac{1}{2}) \tag{9.7}$$

sowie

$$[\mathbf{A},\mathbf{A}^\dagger] = \mathbf{1} \tag{9.8}$$

Es gilt:

$$\langle \psi \mid \mathbf{N}\psi \rangle = \langle \mathbf{A}\psi \mid \mathbf{A}\psi \rangle \geq 0 \tag{9.9}$$

Sei $|\psi_\nu\rangle$ normierter Eigenvektor zu $\mathbf{N}$ mit Eigenwert ν.

$$\mathbf{N}\,|\psi_\nu\rangle = \nu\,|\psi_\nu\rangle\,; \quad \langle \psi_\nu \mid \psi_\nu \rangle = 1 \tag{9.10}$$

aus 9.9 folgt: alle Eigenwerte von $\mathbf{N}$ sind nicht-negativ.

Lemma:

$$\mathbf{A}\,|\psi_\nu\rangle = \sqrt{\nu}\;\,|\psi_{\nu-1}\rangle \tag{9.11}$$

Beweis:

Norm: $\langle \mathbf{A}\psi_\nu \mid \mathbf{A}\psi_\nu \rangle = \left\langle \psi_\nu \,\middle|\, \mathbf{A}^\dagger \mathbf{A}\psi_\nu \right\rangle = \nu$

Eigenvektor:

$$\begin{aligned}
\mathbf{N}\mathbf{A}\,|\psi_\nu\rangle &= \mathbf{A}^\dagger\mathbf{A}\mathbf{A}\,|\psi_\nu\rangle \\
&= ([\mathbf{A}^\dagger, \mathbf{A}] + \mathbf{A}\mathbf{A}^\dagger)\mathbf{A}\,|\psi_\nu\rangle \\
&= (-1 + \mathbf{A}\mathbf{N})\,|\psi_\nu\rangle \quad \text{mit} \quad 9.8 \\
&= (-1 + \nu)\,|\mathbf{A}\psi_\nu\rangle \quad \text{mit} \quad 9.10.
\end{aligned} \tag{9.12}$$

Daraus folgt:

$$|\mathbf{A}^n\psi_\nu\rangle = \sqrt{\nu(\nu-1)\ldots(\nu-n+1)}\,|\psi_{\nu-n}\rangle \tag{9.13}$$

n kann beliebig groß werden. Aber alle Eigenwerte nicht-negativ! Ausweg: Die Prozedur 9.13 bricht ab; dies geschieht, wenn alle Eigenwerte von $\mathbf{N}$ ganzzahlig; dann

$$\left|\mathbf{A}^{n+1}\psi_n\right\rangle = \sqrt{n(n-1)\ldots(n-n)}\,|\psi_{n-n-1}\rangle = 0 \tag{9.14}$$

und wir können nicht mehr tiefer steigen. D.h. es gibt mindestens ein $|\psi_0\rangle$ zum Eigenwert 0 mit

$$\mathbf{A}\,|\psi_0\rangle = 0 \tag{9.15}$$

Später werden wir zeigen, dass es im Orts- oder Impulsraum genau ein $|\psi_0\rangle$ gibt.

Aus $|\psi_0\rangle$ können alle Eigenzustände konstruiert werden, denn es ist:

$$(\mathbf{A}^\dagger)^n\,|\psi_0\rangle = \sqrt{n(n-1)\ldots 1}\,|\psi_n\rangle \tag{9.16}$$

wie man analog 9.13 zeigt.

Aus diesem und 9.7 folgt:

Die Eigenwerte des Hamiltonoperators des harmonischen Oszillators sind

$$E_n = \hbar\omega(n + \tfrac{1}{2}) \tag{9.17}$$

und die Eigenvektoren können aus dem „Grundzustand" $|\psi_0\rangle$ (s. 9.15) durch 9.16 erzeugt werden.

9.2 Darstellung im Ortsraum. Eindeutigkeit des Grundzustandes

Nach 9.15 sowie

$$\begin{aligned} 0 &= \mathbf{A}\,|\psi_0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\mathbf{Q}} + i\hat{\mathbf{P}})\,|\psi_0\rangle \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\Big(\frac{m\omega}{\hbar}\mathbf{Q} + \frac{i}{\hbar}\mathbf{P}\Big)\,|\psi_0\rangle \end{aligned} \tag{9.18}$$

Daraus folgt im Ortsraum:

$$\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\Big(\frac{m\omega}{\hbar}x + \frac{\partial}{\partial x}\Big)\psi_0(x) = 0 \tag{9.19}$$

Lösung durch Separation der Variablen:

$$\int \frac{d\psi_0}{\psi_0} = -\frac{m\omega}{\hbar}\int x\,dx \tag{9.20}$$

$$\psi_0(x) = C\exp\Big(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\Big) \tag{9.21}$$

Aus Normierung $\int dx\,|\psi_0(x)|^2 = 1$ (s. Übung) folgt:

$$C = \Big(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\Big)^{1/4} \tag{9.22}$$

d.h. der Grundzustand ist im Ortsraum eindeutig. Aus dem Grundzustand können wir mit 9.16 alle angeregten Zustände $\psi_n(x)$ konstruieren, z.B. $|\psi_1\rangle = \mathbf{A}^\dagger\,|\psi_0\rangle$

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\Big(\frac{m\omega}{\hbar}x - \frac{\partial}{\partial x}\Big)\psi_0(x) \\ &= \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\,x\Big(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\Big)^{1/4}\exp\Big(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\Big) \end{aligned} \tag{9.23}$$

Der n-te Zustand ist direkt gegeben durch die Hermite-Polynome $H_n(x)$:

Allgemein gilt in der Ortsdarstellung:

$$|\psi_n\rangle = \psi_n(x) = N_n H_n\Big(\sqrt{\frac{\omega m}{\hbar}}\,x\Big)\exp\Big(-\frac{\omega m}{2\hbar}\,x^2\Big) \tag{9.24}$$

mit

$$N_n = \sqrt{\frac{1}{2^n n!}}\Big(\frac{\omega m}{\pi\hbar}\Big)^{1/4} \tag{9.25}$$

$H_n(\xi)$ sind die Hermite-Polynome, z. B. gegeben durch:

$$\exp(-s^2+2s\xi) = \sum_n \frac{1}{n!}H_n(\xi)s^n \tag{9.26}$$

Die Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators bilden ein voS im $\mathcal{L}_2(R)$, d.h. für jedes $f(x) \in \mathcal{L}_2(R)$ gilt:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n\psi_n(x) \tag{9.27}$$

mit

$$f_n = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi_n(x)f(x) \tag{9.28}$$

Ist ein Anfangszustand $\phi(x,0)$ gegeben, so ist die zeitliche Entwicklung im Potential des harmonischen Oszillators gegeben nach 5.18:

$$\phi(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-i(n+1/2)\omega t}c_n\psi_n(x) \tag{9.29}$$

mit

$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi_n(x)\phi(x,0) \tag{9.30}$$

Ist $\phi(x,0) = \big(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\big)^{1/4}\exp\big(-\frac{m\omega}{2\hbar}(x-a)^2\big)$, d.h. um a verschobener Grundzustand, dann kann 9.29 analytisch berechnet werden und: (Schiff, IV.14):

$$|\phi(x,t)|^2 = \Big(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\Big)^{1/2}\exp\Big(-\frac{m\omega}{\hbar}(x-a\cos\omega t)^2\Big) \tag{9.31}$$

d.h. Maximum der Aufenthaltsdichte oszilliert mit klassischer Frequenz.

9.3 Anwendung: Polarisierbarkeit

Harmonischer Oszillator im elektrischen Feld. Hamiltonfunktion:

$$H = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{D}{2}q^2 + eE\,q \tag{9.32}$$

wobei e die Ladung ist. H-Operator in Ortsdarstellung:

$$\begin{aligned}\mathbf{H} &= \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{D}{2}x^2 + eE\,x \\ &= \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{D}{2}(x+eE/D)^2 - \frac{e^2E^2}{2D}\end{aligned} \tag{9.33}$$

Setze $x' = x + eE/D$, dann Lösungen: $\psi_n(x') = \psi_n(x + eE/D)$ mit Eigenwerten $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega - \frac{e^2E^2}{2D}$.

„Dipolmoment" $\langle \psi_n \mid e\mathbf{Q}\psi_n \rangle$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi_n(x') e x \psi_n(x') = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi_n(x') e(x' - eE/D)\psi_n(x') = -e^2E/D \tag{9.34}$$

da $\int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi_n(x') x' \psi_n(x') = 0$ (Übung)

9.4 Matrixdarstellung von Operatoren

9.4.1 Allgemeines zur Matrixdarstellung

Hilbertraum $\mathcal{H}$ mit voS $\{\ldots |\phi_n\rangle \ldots\}$ und s.a. Operator $\mathbf{B}$.

$$|f\rangle = \sum_k \langle \phi_k \mid f \rangle \, |\phi_k\rangle \tag{9.35}$$

$$|g\rangle = \mathbf{B}\,|f\rangle = \sum_k \langle \phi_k \mid f \rangle \, \mathbf{B}\,|\phi_k\rangle \tag{9.36}$$

$$\langle \phi_l \mid g \rangle = \sum_k \langle \phi_l \mid \mathbf{B}\phi_k \rangle \langle \phi_k \mid f \rangle \tag{9.37}$$

$$|f\rangle = \begin{pmatrix} \langle \phi_1 \mid f \rangle \\ \langle \phi_2 \mid f \rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \qquad |g\rangle = \begin{pmatrix} \langle \phi_1 \mid g \rangle \\ \langle \phi_2 \mid g \rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{9.38}$$

bilden eine Komponentendarstellung von $|f\rangle$ $|g\rangle$ im „Hilbertschen Folgenraum". Die Matrix

$$\{\langle \phi_l \mid \mathbf{B}|\phi_k\rangle\} = \begin{pmatrix} \langle \phi_1 \mid \mathbf{B}|\phi_1\rangle & \langle \phi_1 \mid \mathbf{B}|\phi_2\rangle & \cdots \\ \langle \phi_2 \mid \mathbf{B}|\phi_1\rangle & \langle \phi_2 \mid \mathbf{B}|\phi_2\rangle & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \tag{9.39}$$

ist die Matrixdarstellung des Operators $\mathbf{B}$. Es gelten die gewöhnlichen Rechenregeln wie für endliche Matrices. Insbesondere ist so die Spur eines jeden linearen Operators definiert:

$$\mathrm{tr}\ (\mathbf{B}) = \sum_k \langle \phi_k \mid \mathbf{B}|\phi_k\rangle \tag{9.40}$$

wobei die Spur unabhängig von der Wahl des voS ist.

9.4.2 Matrixdarstellung durch Eigenzustände des harmonischen Oszillators

Wir betrachten speziell das voS der Eigenzustände des harmonischen Oszillators, $|\psi_n\rangle$.

Die Matrixdarstellung 9.39 des Hamiltonoperators des harmonischen Oszillators ist natürlich besonders einfach:

$$\langle\psi_k \mid \mathbf{H}|\psi_l\rangle = (k+\tfrac{1}{2})\hbar\omega\delta_{kl} \tag{9.41}$$

Die Darstellung des Impulsoperators ist ebenfalls recht einfach: Aus 9.5:

$$\mathbf{P} = -i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\,(\mathbf{A}-\mathbf{A}^\dagger) \tag{9.42}$$

$$\begin{aligned}
\langle\psi_k \mid \mathbf{P}|\psi_l\rangle &= -i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\,\left\langle\psi_k \,\middle|\, (\mathbf{A}-\mathbf{A}^\dagger)|\psi_l\right\rangle \\
&= -i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\,\left\langle\psi_k \,\middle|\, \sqrt{l}\psi_{l-1}\right\rangle - \left\langle\psi_k \,\middle|\, \sqrt{l+1}\psi_{l+1}\right\rangle \\
&= -i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\,(\sqrt{l}\delta_{k,l-1} - \sqrt{l+1}\delta_{k,l+1}) \\
&= -i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ -1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & -\sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ \vdots & & & & \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

In der Ortsdarstellung gilt dann:

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}f(x) = \sum_{kl}\psi_k(x)\,\langle\psi_k \mid \mathbf{P}|\psi_l\rangle \int_{-\infty}^{\infty} dx'\,\psi_l(x')f(x') \tag{9.43}$$

9.5 Der 3-dimensionale harmonische Oszillator

Am anschaulichsten im Ortsraum:

$$\mathbf{H} = \frac{-\hbar^2}{2m}\sum_{k=1}^{3}\frac{\partial^2}{\partial x_k^2} + \frac{m\omega^2}{2}\sum_{k=1}^{3}x_k^2 = \sum_{k=1}^{3}\mathbf{H}^{(k)} \tag{9.44}$$

wobei $\mathbf{H}^{(k)}$ der Hamiltonoperator eines eindimensionalen harmonischen Oszillators in $k-$Richtung ist. D.h. allgemeiner Eigenzustand:

$$\psi_{n_1,n_2,n_3}(\vec{x}) = \psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2)\psi_{n_3}(x_3) \tag{9.45}$$

mit den vertrauten Eigenfunktionen des eindimensionalen harmonischen Oszillators.

$$\mathbf{H}\psi_{n_1,n_2,n_3}(\vec{x}) = (n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2})\hbar\omega\psi_{n_1,n_2,n_3}(\vec{x}) \tag{9.46}$$

Der Grundzustand ist wieder eindeutig, aber es gibt 3 linear unabhängige Eigenzustände zu $E = (1 + \frac{3}{2})\hbar\omega$ (welche ?)

Im abstrakten Hilbertraum:

Sei $\mathbf{H}^{3dim}$ der Hamiltonoperator des 3-dimensionalen harmonischen Oszillators, $\mathbf{H}^{1dim}$ der Hamiltonoperator des 1-dimensionalen harmonischen Oszillators, der im Raum $\mathcal{H}$ wirke. Dann wirkt $\mathbf{H}^{3dim}$ im $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$, es ist

$$\mathbf{H}^{3dim} = \mathbf{H}^{1dim} \otimes \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \mathbf{H}^{1dim} \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \otimes \mathbf{H}^{1dim} \tag{9.47}$$

und die Eigenzustände sind

$$|\psi_{n_1,n_2,n_3}\rangle = |\psi_{n_1}\rangle \otimes |\psi_{n_2}\rangle \otimes |\psi_{n_3}\rangle \tag{9.48}$$

Kapitel 10

Verallgemeinerte Eigenzustände

10.1 Das freie Teilchen in 1 Dimension

Allgemein:

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m}\mathbf{P}^2 \text{ in } \mathcal{H} \tag{10.1}$$

in der Ortsdarstellung:

$$\mathbf{H}_x = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} \text{ in } \mathcal{L}_2(R) \tag{10.2}$$

Eigen**funktion** von $\mathbf{H}_x$ zum Eigenwert E:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx} \tag{10.3}$$

mit Eigenwert $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

$\psi(x)$ ist auch Eigenfunktion zum Impulsoperator mit Eigenwert $p = \hbar k$:

$$\mathbf{P}_x\psi(x) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx} = \hbar k\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx} \tag{10.4}$$

Problem:

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx} \notin \mathcal{L}_2(R) \tag{10.5}$$

denn $|\psi_p(x)|^2 = \frac{1}{2\pi}$.

Aber: wir können ,,Wellenpakete" bilden:

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dk\hat{\psi}(k)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx} = \bar{\mathcal{F}}(\hat{\psi}(k); x) \tag{10.6}$$

(s. 8.6f). Wegen 8.14 gilt: Wenn $\hat{\psi}(k)$ normierbar, dann auch $\psi(x)$ und die Norm ist gleich.

Wir sehen also noch eine nützliche Eigenschaft der Fouriertransformation: Sie ist eine Entwicklung nach Eigenfunktionen des Impulses und damit auch der Eigenfunktionen des freien Hamiltonoperators 10.2. Damit gilt für die zeitliche Entwicklung eines Wellenpaketes:

$$\begin{aligned}\exp(-i\mathbf{H}_x t/\hbar)\psi(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} dk \exp(-i\mathbf{H}_x t/\hbar)\hat{\psi}(k)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dk \exp\Big(-i\frac{k^2\hbar^2}{2m\hbar}t + ikx\Big)\hat{\psi}(k) \qquad (10.7)\end{aligned}$$

Das Gaußsche Integral ist analytisch ausführbar, s. 8.15.

•Analogie zur Wellenoptik:

Wellenoptik	Quantenmechanik
Ebene Welle:	„Impulseigenfunktion"
$e^{ikx-i\omega t}$	$e^{ikx-i\omega t}$
mit	
$\omega = c\|k\|/\epsilon(k)$	$\omega = E/\hbar = \frac{k^2\hbar^2}{2m\hbar}$
$\lambda = \frac{2\pi}{\|k\|}$	$\lambda_{\text{Broglie}} = \frac{2\pi}{\|k\|} = \frac{2\pi\hbar}{\|p\|}$

Phänomene wie in der Wellenoptik, aber mit besonderer Dispersion. Dekohärenz kann wichtig werden, deshalb keine Interferenz makroskopischer Objekte.

10.2 Verallgemeinerte Eigenzustände, Gel'fandsches Raumtripel

Wir bezeichnen eine nicht normierbare Eigenfunktion als verallgemeinerten Eigenzustand.

Gefährlich, denn bei der Ableitung der Eigenwerte vom h.O. spielte die Normierbarkeit eine große Rolle (z.B. 9.9, 9.12). Wenn wir exponentiell ansteigende Eigenfunktionen zulassen, findet man beim harmonischen Oszillator eine Eigenfunktion für jedes E ! Eine mathematisch saubere Beschreibung, die Vorhersagen erlaubt, bildet das **Gel'fandsche Raumtripel**.

Sei $\mathcal{S}$ der Raum der unendlich oft differenzierbaren und schneller als jede Potenz abfallenden Funktionen. $e^{-x^2} \in \mathcal{S}$, aber $1/(10+x^2) \notin \mathcal{S}$. Es gilt $\mathcal{S} \subset \mathcal{L}_2(R)$ (dicht).

$\mathcal{S}'$ ist der Raum der auf $\mathcal{S}$ stetigen Funktionale. Distributionen, verallgemeinerte Funktionen.

schlicht (****): $T(x) \in \mathcal{S}'$ wenn $\int dx\, T^*(x)\phi(x) < \infty$ mit $\phi(x) \in \mathcal{S}$.

Natürlich ist jeder normierbare Eigenzustand $\psi(x)$ auch ein verallgemeinerter, da obige Bedingung erfüllt ist. D.h.

$$\mathcal{S} \subset \mathcal{L}_2(R) \subset \mathcal{S}'. \tag{10.8}$$

(Gelfand'sches Raumtripel).

•Beispiele:

$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} \in \mathcal{S}', \quad \delta(x-a) \in \mathcal{S}'$ aber $e^{x^2} \notin \mathcal{S}'$.
Lässt sich leicht auf R_d übertragen.

•Die Menge der Eigenwerte eines Operators, sowohl derer zu den normierbaren als auch zu den verallgemeinerten Eigenfunktionen, heißt **Spektrum** des Operators.

Sätze(*):

•Jeder selbstadjungierte Operator $\mathbf{B}$, der in $\mathcal{L}_2(R_d)$ wirkt, hat ein vollständiges System von verallgemeinerten Eigenzuständen aus $\mathcal{S}'$. Diese sind orthogonal aufeinander, wenn sich die Eigenwerte unterscheiden. Sind die Eigenzustände normierbar, dann ist der zugehörige Eigenwert ein isolierter Punkt (diskreter Spektralpunkt), ist der (verallgemeinerte) Eigenzustand nicht normierbar, dann liegt der Eigenwert in einem Kontinuum (kontinuierliches Spektrum).

•Gibt es zu einem Eigenwert 2 oder mehrere Eigenzustnde, dann können diese orthogonalisiert werden.

•Zwei selbstadjungierte Operatoren $\mathbf{A}, \mathbf{B}$ haben genau dann ein **gemeinsames** verallgemeinertes voS, wenn sie vertauschen, d.h. $[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = 0$.

$$\begin{aligned}
\mathbf{AB}\psi_\alpha &= \mathbf{A}b_\alpha\psi_\alpha = a_\alpha b_\alpha \psi_\alpha \\
\mathbf{BA}\psi_a &= \mathbf{B}a_\alpha\psi_\alpha = b_\alpha a_\alpha \psi_\alpha
\end{aligned}$$

für alle Zustände aus dem verallgemeinerten voS und damit für den ganzen Hilbertraum.

•Beispiele

Harmonischer Oszillator: $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$, diskretes Spektrum mit normierbaren Eigenzuständen, die ein voS bilden.

Impulsoperator: Eigenwerte $p = \hbar k, \quad k \in R$. Kontinuierliches Spektrum, nicht normierbare Eigenzustände

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx}$$

$$\int dx \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ik'x}\right)^* \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx} = \delta(k-k') = \delta\left(\frac{p}{\hbar}-\frac{p'}{\hbar}\right) \tag{10.9}$$

nach 8.16.

Hamiltonoperator des freien Teilchen in 1 Dimension:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} \tag{10.10}$$

hat zu $E > 0$ die 2 verallgemeinerten Eigenzustände

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ik_jx} \text{ mit } k_{1/2} = \pm\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE} \tag{10.11}$$

10.3 Einschub: Einige Regeln zum Rechnen mit verallgemeinerten Funktionen (gemäßigten Distributionen)

Jede Ableitung einer gemäßigten Distribution ist wieder eine gemäßigte Distribution, es gelten die gewöhnlichen Differentiations-Regeln.

Bsp:

$$\partial_x\theta(x-a) = \delta(x-a) \tag{10.12}$$

wobei:

$$\begin{aligned}\int dx\phi(x)\delta(x-a) &= \phi(a); \quad \phi(x)\delta(x-a) = \phi(a)\delta(x-a) \\ \delta(x-a) &= \delta(a-x); \quad \delta(bx-a) = \frac{1}{|b|}\delta(x-a/b)\end{aligned} \tag{10.13}$$

$$\int dx\, \phi(x)\partial_x\delta(x-a) = -\partial_x\phi(x)\Big|_{x=a} \tag{10.14}$$

(Formal: Partielle Integration)

Die Fourier-Transformierte einer gemäßigten Distribution ist wieder eine gemäßigte Distribution.

$$\bar{\mathcal{F}}(e^{-ika};x) = \sqrt{2\pi}\delta(x-a) \tag{10.15}$$

vergleiche Zauberformel 8.16.

10.4 Teilchen im 1-dimensionalen Raum mit stückweise konstantem Potential

.

Wir betrachten ein Stufenpotential:

$$V(x) = \theta(x)V_0 + \theta(-x)V_1, \qquad V_0, V_1 \in R \tag{10.16}$$

Wir suchen Eigenfunktionen zum Hamiltonoperator

$$\mathbf{H}_x = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \tag{10.17}$$

$$\begin{aligned} x &< 0 : \psi_{E,I}(x) = \theta(-x)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\Big(R_I e^{ik_I x} + L_I e^{-ik_I x}\Big) \quad k_I = \frac{\sqrt{2m(E-V_1)}}{\hbar} \\ x &> 0 : \psi_{E,II}(x) = \theta(x)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\Big(R_{II} e^{ik_{II} x} + L_{II} e^{-ik_{II} x}\Big) \quad k_{II} = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar} \end{aligned} \tag{10.18}$$

•Satz: Damit $\psi_{E,I}(x) + \psi_{E,II}(x)$ eine verallgemeinerte Eigendistribution zu $\mathbf{H}_x$ auf ganz R ist, muss gelten:

$$\mathbf{H}_x\Big(\psi_{E,I}(x) + \psi_{E,II}(x)\Big) = E\Big(\psi_{E,I}(x) + \psi_{E,II}(x)\Big) \tag{10.19}$$

auch an der Sprungstelle $x = 0$ im Sinne der Distributionen.

Äquivalent: Damit $\psi_{E,I}(x) + \psi_{E,II}(x)$ eine verallgemeinerte Eigendistribution zu $\mathbf{H}_x$ auf ganz R ist, muss $\psi_{E,I}(x) + \psi_{E,II}(x)$ an der Stelle $x = 0$ stetig differenzierbar sein.

Die Äquivalenz zeigt man mit Hilfe der folgenden Beziehungen (Produktregel für Differentiation im Sinne der Distributionen):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x}\theta(x-a)f(x) &= f(a)\delta(x-a) + \theta(x-a)\frac{\partial}{\partial x}f(x) \\ \frac{\partial^2}{\partial x^2}\theta(x-a)f(x) &= f(a)\delta'(x-a) + \delta(x-a)\frac{\partial}{\partial x}f(x) + \theta(x-a)\frac{\partial^2}{\partial x^2}f(x) \end{aligned} \tag{10.20}$$

wobei benutzt wurde: $\delta(x-a)f(x) = \delta(x-a)f(a)$.

10.5 Reflexion und Transmission an der Potentialstufe

Wir betrachten ein Wellenpaket

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk\, \hat{\psi}_{p_0}(k) e^{ikx} \tag{10.21}$$

bei dem $\hat{\psi}_{p_0}(k)$ sehr eng um einen festen Wert $p_0/\hbar$ verteilt ist. $\psi(x)$ ist „fast" ein Eigenzustand zu $\mathbf{P}$ (sehr geringe Schwankung) und normierbar. Wir hatten $|\psi(x)|^2$ schon als Aufenthalts-Wahrscheinlichkeitsdichte interpretiert. $|\psi(x)|^2$ ist die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen am Orte x zu finden. Den Wahrscheinlichkeitsstrom können wir definieren als (s. auch Übung):

$$\begin{aligned} j(x) &= \frac{1}{2m} \int dx\, (\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi(x))^* \psi(x) + \psi(x)^* \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi(x) \\ &\approx p_0/m|\psi(x)|^2 \end{aligned} \tag{10.22}$$

da $\frac{1}{m}(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)) \approx p_0/m\psi(x)$.

$j(x)$ gibt an, mit welcher Wahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit das durch $\psi(x)$ beschriebene Teilchen die Stelle x passiert (und dort z.B. einen Zähler ansprechen lässt), analog zum elektromagnetischen Strom $\vec{j} = \rho\vec{v}$.

•Damit können wir interpretieren:

e^{+ikx}, $k > 0$ Grenzwert eines nach rechts laufenden Wellenpakets,
e^{-ikx}, $k > 0$ Grenzwert eines nach links laufenden Wellenpakets.

Wir starten von 10.17 mit $V_1 = 0$.

Versuchsaufbau (Randbedingungen): Potentialstufe (z.B. Metalloberfläche) bei $x = 0$. Von links nach rechts eingeschossener Strahl von Teilchen mit der Dichte 1 und der Energie $E > V_0$: Wir erwarten u.U. einen reflektierten, d.h. von rechts nach links laufenden Strahl, dessen Dichte wir berechnen wollen. Im Gebiet $x > 0$ stellen wir sicher, dass kein Strahl von links nach rechts läuft (Abschirmung), und wir wollen die Dichte oder die Stromdichte des transmittierten Strahls berechnen.

Klassisch erwarten wir: wenn $E > V_0$, dann kein reflektierter, nur transmittierter Strahl.

$$\mathbf{H}_x = \frac{-\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V_0\theta(x) \tag{10.23}$$

Wir suchen den verallgemeinerten Eigenzustand $\psi_E(x)$ mit

$$\mathbf{H}_x \psi_E(x) = E\psi_E(x) \tag{10.24}$$

Ansatz: $\psi_E(x) = \psi_{E,I}(x) + \psi_{E,II}(x)$ mit

$$\begin{aligned} \psi_{E,I}(x) &= \theta(-x)\Big(\exp[ik_I x] + R\exp[-ik_I x]\Big) \\ \psi_{E,II}(x) &= \theta(x)T\exp[ik_{II}x] \end{aligned} \tag{10.25}$$

mit 10.18:

$$\frac{\hbar^2}{2m}k_I^2 = E; \qquad k_{II} = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E-V_0)} \tag{10.26}$$

sind Lösungen von 10.17 mit den Randbedingungen des Versuchsaufbaus.

Wir wollen R, T berechnen. Es gilt:

$$\begin{aligned} \partial_x\psi_{E,I}(x) &= -\delta(x)(1+R) + \theta(-x)ik_I\Big(\exp[ik_I x] - R\exp[-ik_I x]\Big) \\ \partial_x\psi_{E,II}(x) &= \delta(x)T + ik_{II}\theta(x)T\exp[ik_{II}x] \end{aligned} \tag{10.27}$$

und

$$\begin{aligned} \partial_x^2\psi_{E,I}(x) &= -\partial_x\delta(x)(1+R) - \delta(x)ik_I(1-R) \\ &\quad + \theta(-x)(ik_I)^2\Big(\exp[ik_I x] + R\exp[-ik_I x]\Big) \\ \partial_x^2\psi_{E,II}(x) &= \partial_x\delta(x)T + ik_{II}\delta(x)Tik_{II} + (ik_{II})^2\theta(x)T\exp[ik_{II}x] \end{aligned} \tag{10.28}$$

Wir setzen in 10.17 ein und sortieren:

$$\begin{aligned} &\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + \theta(x)V_0\Big)(\psi_{E,I}(x) + \psi_{E,II}(x)) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\Bigg(\partial_x\delta(x)(-1-R+T) + \delta(x)\Big(-ik_I(1-R) + ik_{II}T\Big) \\ &\quad +\theta(-x)(ik_I)^2\Big(\exp[ik_I x] + R\exp[-ik_I x]\Big) \\ &\quad +(ik_{II})^2\theta(x)T\exp[ik_{II}x] - \frac{2m}{\hbar^2}\theta(x)V_0T\exp[ik_{II}x]\Bigg) \\ &= E(\psi_{E,I}(x) + \psi_{E,II}(x)) \end{aligned} \tag{10.29}$$

Daraus:

$$1 + R = T; \quad ik_I(1-R) = ik_{II}T; \quad k_I^2 = k_{II}^2 + \frac{2m}{\hbar^2}\theta(x)V_0 \tag{10.30}$$

3. Gleichung wegen 10.18 automatisch erfüllt.

Aus den beiden ersten folgt:

$$R = \frac{k_I - k_{II}}{k_I + k_{II}}; \quad T = \frac{2k_I}{k_I + k_{II}} \tag{10.31}$$

Die einfallende Stromdichte ist: $\frac{\hbar k_I}{m}$,
die reflektierte Stromdichte ist: $\frac{\hbar k_I}{m}|R|^2$,
die transmittierte Stromdichte ist: $\frac{\hbar \mathrm{Re} k_{II}}{m}|T|^2$.

Aus der Erhaltung des Wahrscheinlichkeitsstromes muss folgen:

$$\frac{k_I}{m}|R|^2 + \frac{Rek_{II}}{m}|T|^2 = \frac{k_I}{m} \tag{10.32}$$

wie man auch leicht nachrechnet.

•Grenzfälle:

$V_0 \to \infty\ , k_{II} \to i\infty\ :\quad |T|^2 \to 0, |R|^2 \to 1$, klassisch verständlich.
$V_0 \to -\infty, k_{II} \to \infty\ :\quad |T|^2 \to 0, |R|^2 \to 1$, klassisch nicht verständlich.

Daraus allgemein: Wenn das Potential bei x_0 einen unendlichen Sprung macht, muss die Wellenfunktion dort verschwinden. Typisches Wellenphänomen, vgl. Optik.

10.6 Potentialwall: Tunneleffekt und gebundene Zustände

$$V(x) = V_L\theta(-x) + V_0\theta(x)\theta(a-x) + V_R\theta(x-a). \tag{10.33}$$

In allen 3 Gebieten getrennt: ebene Wellen Lösungen vom Typ 10.18. Stetig differenzierbar angeschlossen bei $x = 0$ und $x = a$.

Einfachheitshalber: $V_L = V_R = 0$.

•Streuung: Wir betrachten Teilchenstrahl von links, d.h wir übernehmen $\psi_{E,I}(x)$ für $x < 0$, vom Typ $\psi_{E,I}(x)$ für $0 < x < a$ aber mit k_{II} und $T\exp[ik_I x]$ für $x > a$. 5 freie Koeffizienten, inhomogenes System mit 4 Unbekannten, lösbar, eindeutig durch Normierung, einfallende Welle hat Dichte 1. S. Übung

•Gebundene Zustände: Es sei $V_0 < 0$. Dann kann es auch Eigenzustände mit $E < 0$ geben.

D.h im Außengebiet

$$k_I = \pm\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \pm i\frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar} \tag{10.34}$$

Da exponentiell ansteigende Lösungen nicht zugelassen ($\notin \mathcal{S}'$), haben wir:

$$\psi_{E,I}(x) = \theta(-x)\exp[\frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}x]; \quad \psi_{E,III}(x) = \theta(x-a)\exp[-\frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}x] \tag{10.35}$$

d.h. $\psi_E(x)$ ist normierbar, sei auf 1 normiert.

Daraus: $E \geq V_0$, denn $E = \langle \psi_E \mid \mathbf{H}\psi_E \rangle \geq V_0 \langle \psi_E \mid \psi_E \rangle$

Diskrete Energiewerte: 4 Konstanten frei, 4 Anschlussbedingungen. Homogenes System mit 4 Unbekannten, d.h. nur lösbar, wenn Determinante verschwindet.

Wir betrachten der Einfachheit halber nur den Fall, dass V_0 sehr groß, (Grenze $V_0 \to -\infty$). Wir setzen $E_B = E - V_0$, dann ist $k_{E,II} = \sqrt{2mE_B}/\hbar$ und wir haben:

$$\psi_{E,II}(x) = Z_1 \exp[ik_{E,II}x] + Z_2 \exp[-ik_{E,II}x] \tag{10.36}$$

In der Grenze $V_0 \to -\infty$ gilt $\psi_{E,II}(0) = \psi_{E,II}(a) = 0$ und damit erhält man, aus Rechnung oder durch Skizze:

$$\psi_{E,II}(x) = N_n \sin(n\frac{\pi}{a}x) \quad , n = 1, 2, \ldots \tag{10.37}$$

d.h.

$$E_{B,n} = (n+1)^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \quad n = 0, 1, 2 \ldots \tag{10.38}$$

Der Grundzustand und die geraden angeregten Zustände sind symmetrisch zur Mitte des Potentials, die ungeraden antisymmetrisch.

•Haben wir ganz allgemein ein Potential, das für $x \to \pm\infty$ genügend schnell verschwindet, so sind für $x \to \pm\infty$ die verallgemeinerten Eigenzustände wieder Überlagerungen von ein- und auslaufenden ebenen Wellen

$$\psi_E(x) = A_1 \exp[ik_{E,I}x] + A_2 \exp[-ik_{E,I}x] \tag{10.39}$$

mit $k_I = \sqrt{2mE}/\hbar$.

Die experimentell vorliegende Situation wird durch die Randbedingunen genauso wie im Modellfall berücksichtigt, z.B. $A_2 = 0$ für große positive x. Man kann auf diese Weise z.B. die Lösungen numerisch bestimmen. Ist das Potential in gewissen Abschnitten negativ, kann es auch normierbare Eigenzustände mit diskreten Eigenwerten $E < 0$ geben.

Kapitel 11

Teilchen im Zentralpotential I

11.1 Drehimpuls und kinetische Energie

In der klassischen Mechanik war es durch die Erhaltung des Drehimpulses möglich, das 3-dimensionale Problem auf ein eindimensionales zurückzuführen. Etwas analoges geht auch in der Quantenmechanik.

Klassische Mechanik:

Drehimpuls $\vec{L}$ erhalten, $\{L_k, H\} = 0$. Es gilt: $\vec{p}^{\,2} = \frac{1}{r^2}\vec{L}^{\,2} + p_r^2$

Quantenmechanik:

Wir erhalten den Drehimpulsoperator nach dem Korrespondenzprinzip aus dem Drehimpuls der klassischen Mechanik, $\vec{L} = [\vec{x} \times \vec{p}]$ bzw. $L_k = \sum_{lm} \epsilon_{klm} x_l p_m$ als:

$$\mathbf{L}_k = \sum_{lm=1}^{3} \epsilon_{klm} \mathbf{Q}_l \mathbf{P}_m \tag{11.1}$$

Selbstadjungiert: $\mathbf{L}_1^\dagger = (\mathbf{Q}_2\mathbf{P}_3 - \mathbf{Q}_3\mathbf{P}_2)^\dagger = (\mathbf{P}_3^\dagger\mathbf{Q}_2^\dagger - \mathbf{P}_2^\dagger\mathbf{Q}_3^\dagger) = \mathbf{L}_1$

•Aus den kanonischen Vertauschungsrelationen (5.1.5) folgt:

$$[\mathbf{L}_k, \vec{\mathbf{P}}^{\,2}] = 0 \tag{11.2}$$

Bew.

$$\begin{aligned}
[\mathbf{L}_k, \sum_n \mathbf{P}_n^2] &= \sum_{nlm} \epsilon_{klm} [\mathbf{Q}_l \mathbf{P}_m, \mathbf{P}_n^2] \\
&= 2\,i\,\hbar \sum_{nlm} \epsilon_{klm} \delta_{ln} \mathbf{P}_n \mathbf{P}_m = 0
\end{aligned} \tag{11.3}$$

Genauso folgt

$$[\mathbf{L}_k, \vec{\mathbf{Q}}^{\,2}] = 0 \tag{11.4}$$

Daraus folgt wieder $[\mathbf{L}_k, V(\vec{\mathbf{Q}}^{\,2})] = 0$ und damit für radialsymmetrische Hamiltonoperatoren:

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m}\vec{\mathbf{P}}^{\,2} + V(\vec{Q}^{\,2}) \tag{11.5}$$

$$[\mathbf{L}_k, \mathbf{H}] = 0 \tag{11.6}$$

Dies erlaubt uns, nach gemeinsamen voS von Eigenfunktionen von $\vec{\mathbf{L}}$ und $\mathbf{H}$ zu suchen.

•Beziehung zwischen $\vec{\mathbf{P}}^{\,2}$ und $\vec{\mathbf{L}}^{\,2}$.

$$\begin{aligned}\sum_k \mathbf{L}_k\mathbf{L}_k &= \sum_{klmnr} \epsilon_{klm}\epsilon_{knr}\mathbf{Q}_l\mathbf{P}_m\mathbf{Q}_n\mathbf{P}_r \\ &= \sum_{lm}(\mathbf{Q}_l\mathbf{P}_m\mathbf{Q}_l\mathbf{P}_m - \mathbf{Q}_l\mathbf{P}_m\mathbf{Q}_m\mathbf{P}_l) \\ &= \vec{\mathbf{Q}}^{\,2}\vec{\mathbf{P}}^{\,2} - (\vec{\mathbf{Q}}.\vec{\mathbf{P}}\,)^2 + i\hbar\vec{\mathbf{Q}}.\vec{\mathbf{P}}\end{aligned} \tag{11.7}$$

d.h.

$$\vec{\mathbf{P}}^{\,2} = \frac{1}{\vec{\mathbf{Q}}^{\,2}}\Big(\vec{\mathbf{L}}^{\,2} + (\vec{\mathbf{Q}}.\vec{\mathbf{P}}\,)^2 - i\hbar\vec{\mathbf{Q}}.\vec{\mathbf{P}}\Big) \tag{11.8}$$

Im Ortsraum führen wir die sphärischen Polarkoordinaten (r, ϑ, ϕ) ein und wir haben:

$$\begin{aligned}\vec{\mathbf{Q}}^{\,2} &\to r^2; \quad \vec{\mathbf{P}}^{\,2} \to -\hbar^2\vec{\nabla}^2; \\ \vec{\mathbf{Q}}.\vec{\mathbf{P}} &\to \frac{\hbar}{i}\vec{x}.\vec{\nabla} = \frac{\hbar}{i}r\partial_r\end{aligned} \tag{11.9}$$

Der Hamiltonoperator im Ortsraum hat damit die Form:

$$\mathbf{H}_x = -\frac{\hbar^2}{2m}\Big(\partial_r^2 + \frac{2}{r}\partial_r\Big) + \frac{\vec{\mathbf{L}}_x^{\,2}}{2mr^2} + V(r) \tag{11.10}$$

Wegen 11.4 wirkt der Operator $\vec{\mathbf{L}}_x$ nicht auf die Radialkoordinate r, sondern nur auf die Winkelkoordinaten ϑ und ϕ.

Bevor wir diesen Hamiltonoperator weiter diskutieren, diskutieren wir die Eigenschaften der Drehimpulsoperatoren $\vec{\mathbf{L}}$.

Kapitel 12

Der Drehimpuls

12.1 Die Vertauschungsrelationen

Wir hatten den Operator der Observablen Drehimpuls aus dem Korrespondenzprinzip erhalten 11.1.

$$\mathbf{L}_k = \sum_{lm=1}^{3} \epsilon_{klm} \mathbf{Q}_l \mathbf{P}_m \tag{12.1}$$

Aus den kanonischen Vertauschungsrelationen folgt:

$$[\mathbf{L}_k, \mathbf{L}_n] = i\hbar \sum_{m=1}^{3} \epsilon_{knm} \mathbf{L}_m \tag{12.2}$$

d.h. $[\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2] = i\hbar \mathbf{L}_3$ etc. zyklisch.

Bew.

a) zu Fuß:

$$\begin{aligned}
[\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2] &= [(\mathbf{Q}_2\mathbf{P}_3 - \mathbf{Q}_3\mathbf{P}_2), (\mathbf{Q}_3\mathbf{P}_1 - \mathbf{Q}_1\mathbf{P}_3)] \\
&= [\mathbf{Q}_2\mathbf{P}_3, \mathbf{Q}_3\mathbf{P}_1] - [\mathbf{Q}_2\mathbf{P}_3, \mathbf{Q}_1\mathbf{P}_3] - [\mathbf{Q}_3\mathbf{P}_2, \mathbf{Q}_3\mathbf{P}_1] + [\mathbf{Q}_3\mathbf{P}_2, \mathbf{Q}_1\mathbf{P}_3] \\
&= -i\hbar\mathbf{Q}_2\mathbf{P}_1 + i\hbar\mathbf{Q}_1\mathbf{P}_2 \\
&= i\hbar\mathbf{L}_3 \qquad (12.3)
\end{aligned}$$

etc. zyklisch.

b) mit ϵ Tensor

$$[\mathbf{L}_k, \mathbf{L}_n] = \sum_{lmrs} \epsilon_{klm}\epsilon_{nrs}[\mathbf{Q}_l\mathbf{P}_m \, , \, \mathbf{Q}_r\mathbf{P}_s]$$

$$
\begin{aligned}
&= \sum_{lmrs} \epsilon_{klm}\epsilon_{nrs}(\mathbf{Q}_l\mathbf{P}_m\mathbf{Q}_r\mathbf{P}_s - \mathbf{Q}_r\mathbf{P}_s\mathbf{Q}_l\mathbf{P}_m) \\
&= \sum_{lmrs} \epsilon_{klm}\epsilon_{nrs}(\mathbf{Q}_l\mathbf{P}_m\mathbf{Q}_r\mathbf{P}_s - \mathbf{Q}_r\mathbf{Q}_l\mathbf{P}_s\mathbf{P}_m) + i\hbar\delta_{sl}\mathbf{Q}_r\mathbf{P}_m) \\
&= \sum_{lmrs} \epsilon_{klm}\epsilon_{nrs}(\mathbf{Q}_l\mathbf{P}_m\mathbf{Q}_r\mathbf{P}_s - \mathbf{Q}_l\mathbf{P}_m\mathbf{Q}_r\mathbf{P}_s - i\hbar\delta_{rm}\mathbf{Q}_l\mathbf{P}_s + i\hbar\delta_{sl}\mathbf{Q}_r\mathbf{P}_m) \\
&= i\hbar(\mathbf{Q}_k\mathbf{P}_n - \mathbf{Q}_n\mathbf{P}_k) \qquad (12.4)
\end{aligned}
$$

Die letzte Zeile lässt sich wieder durch einen ϵ-Tensor ausdrücken und wir erhalten das Ergebnis 12.2

Aus 12.2 folgt:

$$[\vec{\mathbf{L}}^{\,2}, \mathbf{L}_k] = 0; \quad \text{mit} \quad \vec{\mathbf{L}}^{\,2} = \sum_{n=1}^{3} \mathbf{L}_k^2 \qquad (12.5)$$

•Eine alternative, geometrische Herleitung von 12.2 geht über die **Darstellungseigenschaften** des Drehimpulses:

Eine Drehung $\vec{\omega}$ (d.h. Drehung um Achse $\vec{\omega}$ mit Winkel $|\vec{\omega}|$ hat auf eine Funktion des $\mathcal{L}_2(R_3)$ die Wirkung:

$$f(\vec{x}) \to f(\vec{x}') = \exp[\frac{i}{\hbar}\vec{\omega}.\vec{\mathbf{L}}]f(\vec{x}) \qquad (12.6)$$

wobei $\vec{x}'$ der gedrehte Vektor $\vec{x}$ ist. (s.z.B. Schwabl, 5.1). Daher verschwinden auch die Kommutatoren der Form $[\mathbf{A}, \mathbf{L}_k]$, wenn $\mathbf{A}$ drehinvariant ist (s. 11.2,11.4,12.5).

12.2 Konsequenzen der Vertauschungsrelationen. Das Spektrum des Drehimpulses

Wir betrachten **selbstadjungierte** Operatoren $\hat{\mathbf{J}}$ mit den Vertauschungsrelationen der Struktur :

$$[\hat{\mathbf{J}}_k, \hat{\mathbf{J}}_n] = i\sum_m \epsilon_{knm}\hat{\mathbf{J}}_m \qquad (12.7)$$

d.h.

$$[\hat{\mathbf{J}}_1, \hat{\mathbf{J}}_2] = i\hat{\mathbf{J}}_3; \quad [\hat{\mathbf{J}}_2, \hat{\mathbf{J}}_3] = i\hat{\mathbf{J}}_1; \quad [\hat{\mathbf{J}}_3, \hat{\mathbf{J}}_1] = i\hat{\mathbf{J}}_2 \qquad (12.8)$$

$\mathbf{L}_k/\hbar$ erfüllen z.B. diese Relationen.

•Aus den Vertauschungsrelationen 12.2 folgt, dass wir nicht gleichzeitig ein voS von Eigenfunktionen von zwei verschiedenen Komponenten von $\vec{\hat{\mathbf{J}}}$ finden können, und dass gilt (s. Übung 5):

$$(\Delta\hat{\mathbf{J}}_1)(\Delta\hat{\mathbf{J}}_2) \geq \tfrac{1}{2}(\Delta\hat{\mathbf{J}}_3) \qquad (12.9)$$

Aus 12.7 folgt:

$$[\hat{\vec{\mathbf{J}}}^{\,2}, \hat{\mathbf{J}}_k] = 0 \tag{12.10}$$

mit $\hat{\vec{\mathbf{J}}}^{\,2} = \sum_{n=1}^{3} \hat{\mathbf{J}}_n^2$

d.h. wir können ein gemeinsames voS zu $\hat{\vec{\mathbf{J}}}^{\,2}$ **und einer** Komponente, etwa $\hat{\mathbf{J}}_3$ finden.

Ähnlich wie beim harmonischen Oszillator folgt aus den Vertauschungsrelationen:

•Satz: Die gemeinsamen Eigenvektoren von $\hat{\vec{\mathbf{J}}}^{\,2}$ und $\hat{\mathbf{J}}_3$, $\left|\phi_j^m\right\rangle$ und die Eigenwerte erfüllen:

$$\begin{aligned} \hat{\vec{\mathbf{J}}}^{\,2}\left|\phi_j^m\right\rangle &= j(j+1)\left|\phi_j^m\right\rangle; \quad \hat{\mathbf{J}}_3\left|\phi_j^m\right\rangle = m\left|\phi_j^m\right\rangle; \\ & 2j \text{ ganz }, m = -j, -j+1, \ldots, j-1, j. \end{aligned} \tag{12.11}$$

Bew:

$$\hat{\mathbf{J}}_\pm = \hat{\mathbf{J}}_1 \pm i\hat{\mathbf{J}}_2 \tag{12.12}$$

Es gilt:

$$[\hat{\vec{\mathbf{J}}}^{\,2}, \hat{\mathbf{J}}_\pm] = 0; \qquad [\hat{\mathbf{J}}_3, \hat{\mathbf{J}}_\pm] = \pm\hat{\mathbf{J}}_\pm \tag{12.13}$$

$$\hat{\vec{\mathbf{J}}}^{\,2} = \hat{\mathbf{J}}_-\hat{\mathbf{J}}_+ + \hat{\mathbf{J}}_3(\hat{\mathbf{J}}_3 + \mathbf{1}); \quad \hat{\vec{\mathbf{J}}}^{\,2} = \hat{\mathbf{J}}_+\hat{\mathbf{J}}_- + \hat{\mathbf{J}}_3(\hat{\mathbf{J}}_3 - \mathbf{1}) \tag{12.14}$$

Sei $|\phi_\lambda^\mu\rangle$ normierter Eigenzustand:

$$\hat{\vec{\mathbf{J}}}^{\,2}|\phi_\lambda^\mu\rangle = \lambda\,|\phi_\lambda^\mu\rangle; \qquad \hat{\mathbf{J}}_3|\phi_\lambda^\mu\rangle = \mu\,|\phi_\lambda^\mu\rangle. \tag{12.15}$$

$$\left\langle \hat{\mathbf{J}}_\pm\phi_\lambda^\mu \,\middle|\, \hat{\mathbf{J}}_\pm\phi_\lambda^\mu \right\rangle = \left\langle \phi_\lambda^\mu \,\middle|\, \hat{\mathbf{J}}_\mp\hat{\mathbf{J}}_\pm\phi_\lambda^\mu \right\rangle = \lambda - \mu(\mu \pm 1) \geq 0 \tag{12.16}$$

nach 12.14.

$$\hat{\mathbf{J}}_\pm|\phi_\lambda^\mu\rangle = \sqrt{\lambda - \mu(\mu \pm 1)}\left|\phi_\lambda^{\mu\pm 1}\right\rangle; \quad \hat{\vec{\mathbf{J}}}^{\,2}\hat{\mathbf{J}}_\pm|\phi_\lambda^\mu\rangle = \lambda\hat{\mathbf{J}}_\pm|\phi_\lambda^\mu\rangle \tag{12.17}$$

denn

$$\hat{\mathbf{J}}_3\hat{\mathbf{J}}_\pm|\phi_\lambda^\mu\rangle = (\hat{\mathbf{J}}_\pm\hat{\mathbf{J}}_3 \pm \hat{\mathbf{J}}_\pm)|\phi_\lambda^\mu\rangle = (\mu \pm 1)\hat{\mathbf{J}}_\pm|\phi_\lambda^\mu\rangle \tag{12.18}$$

Wie beim h.O. müssen die Leitern abbrechen,d.h. es gibt $\overline{\mu}$ und $\underline{\mu}$ mit

$$\lambda = \overline{\mu}(\overline{\mu} + 1); \quad \lambda = \underline{\mu}(\underline{\mu} - 1); \quad \overline{\mu} - \underline{\mu} \ \text{ ganz} \tag{12.19}$$

daraus folgt:

$$\underline{\mu} = -\overline{\mu} = -j; \quad 2j \text{ ganz}; \quad \lambda = j(j+1) \tag{12.20}$$

Im folgenden schreiben wir $\left|\phi_j^m\right\rangle$ anstelle $\left|\phi_{j(j+1)}^\mu\right\rangle$.

Kennen wir $\left|\phi_j^{-j}\right\rangle$, können wir daraus alle anderen $\left|\phi_j^{\mu}\right\rangle$ gewinnen durch Anwendung von $\hat{\mathbf{J}}_+$ nach 12.17. Es gilt:

$$\hat{\mathbf{J}}_+ \left|\phi_j^{j}\right\rangle = 0; \qquad \hat{\mathbf{J}}_- \left|\phi_j^{-j}\right\rangle = 0 \tag{12.21}$$

Da Eigenzustände zu verschiedenen Eigenwerten orthogonal, gilt:

$$\left\langle \phi_j^m \,\middle|\, \phi_{j'}^{m'} \right\rangle = \delta_{j,j'}\delta_{m,m'} \tag{12.22}$$

12.3 Der Bahndrehimpuls in der Ortsdarstellung

In der Ortsdarstellung in Polarkoordinaten:

$$x_1 = r\sin\vartheta\cos\varphi \qquad x_2 = r\sin\vartheta\sin\varphi \qquad x_3 = r\cos\vartheta \tag{12.23}$$

folgt aus 12.1 und der Kettenregel:

$$\begin{aligned}
\mathbf{L}_1 &= -\frac{\hbar}{i}\cos\varphi\,\mathrm{ctg}\vartheta\,\partial_\varphi - \frac{\hbar}{i}\sin\varphi\,\partial_\vartheta \\
\mathbf{L}_2 &= -\frac{\hbar}{i}\sin\varphi\,\mathrm{ctg}\vartheta\,\partial_\varphi + \frac{\hbar}{i}\cos\varphi\,\partial_\vartheta \\
\mathbf{L}_3 &= \frac{\hbar}{i}\partial_\varphi \\
\vec{\mathbf{L}}^{\,2} &= -\frac{1}{\sin\vartheta}\partial_\vartheta\Big(\sin\vartheta\,\partial_\vartheta\Big) - \Big(\frac{1}{\sin\vartheta}\partial_\varphi\Big)^2
\end{aligned} \tag{12.24}$$

Sei $Y_j^m(\vartheta,\varphi)$ eine Eigenfunktion zu $\mathbf{L}_3$, dann

$$Y_j^m(\vartheta,\varphi) = f(\vartheta)\exp(im\varphi) \tag{12.25}$$

Da $Y_j^m(\vartheta,\varphi) = Y_j^m(\vartheta,\varphi+2\pi)$ folgt: m ist ganzzahlig. Daraus auch j ist ganzzahlig, gemeinhin mit l bezeichnet.

Die gemeinsamen Eigenzustände von $\vec{\mathbf{L}}^2$ und $\mathbf{L}_3$ in der Ortsdarstellung, also auf der Einheitkugel im R_3, heißen Kugelfunktionen (spherical harmonics).

$$Y_l^m(\vartheta,\varphi); \quad \vec{\mathbf{L}}^2 Y_l^m(\vartheta,\varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m(\vartheta,\varphi); \quad \mathbf{L}_3 Y_l^m(\vartheta,\varphi) = m\hbar Y_l^m(\vartheta,\varphi) \tag{12.26}$$

•Bei weitem wichtigste Eigenschaft: Die $Y_l^m(\vartheta,\varphi)$ bilden ein voS auf der Einheitkugel im R_3, d.h.

$$\int_0^\pi \sin\vartheta\, d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi\, \Big(Y_l^m(\vartheta,\varphi)\Big)^* Y_{l'}^{m'}(\vartheta,\varphi) = \delta_{l,l'}\delta_{m,m'} \tag{12.27}$$

vgl. 12.22,

und für jedes quadratintegrable
$\hat{f}(\vec{x}/|\vec{x}\,|) = f(\vartheta,\varphi), \hat{g}(\vec{x}) = g(r,\vartheta,\varphi)$
gilt:

$$\begin{aligned} f(\vartheta,\varphi) &= \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} c_{lm} Y_l^m(\vartheta,\varphi) \\ g(r,\vartheta,\varphi) &= \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} d_{lm}(r) Y_l^m(\vartheta,\varphi) \end{aligned} \tag{12.28}$$

Einige weitere Eigenschaften:

$$Y_l^m(\vartheta,\varphi) = f_{lm}(\vartheta)\exp[im\varphi]; \qquad Y_l^0(\vartheta,\varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\; P_l(\cos\vartheta) \tag{12.29}$$

$$Y_l^{-m}(\vartheta,\varphi) = (-1)^m Y_l^m(\vartheta,\varphi)^* \tag{12.30}$$

$$\begin{aligned} Y_0^0 &= \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \\ Y_1^0 &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\vartheta \\ Y_1^1 &= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\vartheta\exp[i\varphi] \\ Y_1^{-1} &= \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\vartheta\exp[-i\varphi] \end{aligned} \tag{12.31}$$

Oft nützlich in Integralen, weil 12.27 angewandt werden kann:

$$\begin{aligned} c &= c\sqrt{4\pi}Y_0^0 \\ x_3 &= r\cos\vartheta \qquad = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}rY_1^0 \\ x_1 &= r\sin\vartheta\cos\varphi = \sqrt{\frac{8\pi}{3}}r\tfrac{1}{2}(Y_1^{-1} - Y_1^1) \\ x_2 &= r\sin\vartheta\sin\varphi = \sqrt{\frac{8\pi}{3}}ri\tfrac{1}{2}(Y_1^{-1} + Y_1^1) \end{aligned} \tag{12.32}$$

Kapitel 13

Teilchen im zentralsym. Potential II

13.1 Hamiltonoperator im Zentralsymmetrischen Potential

Nach 11.10:

$$\mathbf{H}\psi(r,\vartheta,\varphi) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Big(\partial_r^2 + \frac{2}{r}\partial_r\Big) + \frac{1}{2mr^2}\vec{\mathbf{L}}^{\,2} + V(r)\right)\psi(r,\vartheta,\varphi) \tag{13.1}$$

Wir suchen (verallgemeinerte) Eigenzustände:

$$\mathbf{H}\psi(r,\vartheta,\varphi) = E\psi(r,\vartheta,\varphi) \tag{13.2}$$

Wir separieren die Variablen durch den Ansatz:

$$\psi(r,\vartheta,\varphi) = \frac{u(r)}{r} Y_l^m(\vartheta,\varphi) \tag{13.3}$$

Dies ist möglich, da $[\mathbf{L}_k, \mathbf{H}] = 0$, und wir erhalten damit:

$$\begin{aligned}
\mathbf{H}\frac{u(r)}{r}Y_l^m(\vartheta,\varphi) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Big(\partial_r^2 + \frac{2}{r}\partial_r\Big) + \frac{\hbar^2}{2mr^2} l(l+1) + V(r)\right)\frac{u(r)}{r}Y_l^m(\vartheta,\varphi) \\
&= E\ \frac{u(r)}{r}Y_l^m(\vartheta,\varphi)
\end{aligned} \tag{13.4}$$

und daraus mit Produktregel:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_r^2 + \frac{\hbar^2}{2mr^2} l(l+1) + V(r)\right) u(r) = Eu(r) \tag{13.5}$$

•a) $r \to 0$

Es gehe $r^2 V(r) \to 0$. Ansatz: $u(r) = Ar^\lambda$, dann

$$A\,\lambda(\lambda-1)r^{\lambda-2} + A\,l(l+1)r^{\lambda-2} = O(r^{\lambda-2}) \tag{13.6}$$

Lösungen: $\lambda = l+1$ und $\lambda = -l$

1) $l \geq 1$, dann nur $\lambda = l+1$, sonst $\psi \notin \mathcal{S}'$, denn $\int r^2 dr\, \psi(r) * \phi(r)$ muss existieren.

2) $l = 0$, dann im Prinzip $\lambda = 0$ und $\lambda = 1$ möglich. Aber für $\lambda = 0$ gilt $\psi(r) = A'/r$ und $\vec{\nabla}^2 \frac{1}{r} = -4\pi\delta(\vec{x})$,

also stets:

$$u(r) \propto r^{l+1}. \tag{13.7}$$

•b) $r \to \infty$ Es gehe $V(r) \to 0$, etwa mindestens wie $1/r$. Bleibt:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_r^2 u(r) = \Big(E + O(1/r)\Big)u(r) \tag{13.8}$$

d.h.

$$u(r) = A\exp[ikr] + B\exp[-ikr] \tag{13.9}$$

mit $k = \sqrt{2mE}/\hbar$.

1) Wenn $E \geq 0$: $\psi \in \mathcal{S}'$

2) Wenn $E < 0$: $\psi \in \mathcal{S}'$ nur wenn $B = 0$. Dies wird nur für spezielle Werte von E der Fall sein. Isolierte Eigenwerte.

Numerisches Verfahren zur Bestimmung der Eigenwerte: Löse numerisch und schaue, ob B verschwindet. Praktisch recht einfach.

13.2 Eigenwerte und Eigenfunktionen für das Coulomb Potential

Wir betrachten

$$V(r) = \frac{-Ze_0^2}{r} \tag{13.10}$$

und interessieren uns für die gebundenen Zustände: $E < 0$. Definiere:

$$\kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}; \qquad \rho = \kappa r; \qquad \rho_0 = \frac{Ze_0^2\,\kappa}{-E} = \sqrt{\frac{2m}{-E}}\,\frac{Ze_0^2}{\hbar} \tag{13.11}$$

Dann wird 13.5:

$$\Big(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{\rho_0}{\rho} - 1\Big)u(\rho) = 0 \tag{13.12}$$

Ansatz:

$$u(\rho) = \rho^{l+1}e^{-\rho}\sum_k a_k\rho^k \tag{13.13}$$

hat das asymptotische Verhalten 13.9, 13.7 Einsetzen in 13.12 und Koeffizientenvergleich ergibt:

$$a_{k+1} = \frac{2(k+l+1)-\rho_0}{(k+1)(k+2l+2)}\,a_k \tag{13.14}$$

Wenn die Reihe nicht abbricht, dann geht die Potenzreihe in 13.13 für $\rho \to \infty$ wie $e^{2\rho}$, d.h. $u(\rho) \sim e^{\rho}$ wie nach 13.9 zu erwarten.

Reihe bricht ab bei $k = N$ wenn

$$\rho_0 = 2(N+l+1); \quad N = 0, 1, 2, \dots \tag{13.15}$$

Dann normierbarer Zustand mit Eigenwert:

$$E_n = -\frac{2mZe_0^4}{\rho_0^2\hbar^2} = -\frac{mZ^2e_0^4}{2\hbar^2n^2} \text{ mit } n = N+l+1 \tag{13.16}$$

Die endliche Potenzreihe in 13.13 ist durch 13.14 und die Normierung (bis auf eine Phase) eindeutig festgelegt und stellt sich als ein Laguerre-Polynom heraus. Diese haben viele schöne Eigenschaften, s. Literatur. Die normierte Eigenlösung zum Eigenwert E_n hat die Form:

$$\psi_{nlm}(r,\vartheta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_l^m(\vartheta,\varphi) \tag{13.17}$$

mit

$$R_{nl}(r) = \frac{u(r)}{r} = -\left(\frac{(n-l-1)!(2\kappa)^3}{2(n(n+l)!)^3}\right)^{1/2}(2\kappa r)^l L_{n+l}^{2l+1}(2\kappa r)\exp[-\kappa r] \tag{13.18}$$

Bohrscher Radius:

$$a = \frac{\hbar^2}{me_0^2} = \frac{\hbar c}{mc^2\alpha} \approx 0.529\ 10^-10m. \quad \alpha = \tfrac{e_0^2}{\hbar c} \approx 1/137(13.19)$$

Damit

$$\kappa = \frac{Z}{na}; \quad E_n = -\frac{(Ze_0)^2}{2an^2} = -mc^2\,\alpha^2\frac{Z^2}{2n^2} \tag{13.20}$$

$L_{n+l}^{2l+1}(x)$ sind die verallgemeinerten Laguerre-Polynome.

Die Zustände $\psi_{nlm}(r,\vartheta,\varphi)$ sind orthonormiert.

Niedrigste Wellenfunktionen:

$$\begin{aligned}
&n=1;\quad l=0 && \text{K-Schale, S-Orbital} \\
&\qquad R_{10} &=\;& 2\Big(\frac{Z}{a}\Big)^{3/2}\exp[-\frac{Zr}{a}] && (13.21)\\
&n=2;\quad l=0 && \text{L-Schale, S-Orbital} \\
&\qquad R_{20} &=\;& 2\Big(\frac{Z}{2a}\Big)^{3/2}\Big(1-\frac{Zr}{2a}\Big)\exp[-\frac{Zr}{2a}] && (13.22)\\
&\qquad l=1 && \text{L-Schale, P-Orbital} \\
&\qquad R_{21} &=\;& \frac{1}{\sqrt{3}}\Big(\frac{Z}{2a}\Big)^{3/2}\frac{Zr}{a}\exp[-\frac{Zr}{2a}] && (13.23)\\
&n=3;\quad l=0 && \text{M-Schale, S-Orbital} \\
&\qquad R_{30} &=\;& 2\Big(\frac{Z}{3a}\Big)^{3/2}\Big(1-\frac{2Zr}{3a}+\frac{2(Zr)^2}{27a^2}\Big)\exp[-\frac{Zr}{3a}] && (13.24)\\
&\qquad l=1 && \text{M-Schale, P-Orbital} \\
&\qquad R_{31} &=\;& \frac{4\sqrt{2}}{9}\Big(\frac{Z}{3a}\Big)^{3/2}\Big(\frac{Zr}{a}\Big)\Big(1-\frac{Zr}{6a}\Big)\exp[-\frac{Zr}{3a}] && (13.25)\\
&\qquad l=2 && \text{M-Schale, D-Orbital} \\
&\qquad R_{32} &=\;& \frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{5}}\Big(\frac{Z}{3a}\Big)^{3/2}\Big(\frac{Zr}{a}\Big)^2\exp[-\frac{Zr}{3a}] && (13.26)\\
& && && (13.27)
\end{aligned}$$

Großer Nachteil der gegenwärtigen Behandlung: Wir verstehen nicht, warum die angeregten Zustände nicht „stationär"' sind, sondern z.B. unter Aussendung eines Photons in den Grundzustand zerfallen. Ankopplung an das quantisierte Strahlungsfeld!

Diskussion der Spektren, „Rydbergatome" etc s. Exphys.

13.3 Hohe Entartung, Lenz'scher Vektor

Dass die Eigenwerte nicht vom Eigenwert m von $\mathbf{L}_3$ abhängen, ist nach 13.5 offensichtlich und gilt für jedes zentralsymmetrische Potential.

Weniger evident ist die „Entartung" in l, eine Spezialität des Coulomb-Potentials. Sie kann zurückgeführt werden auf einen weiteren Operator, der mit $\mathbf{H}$ und $\mathbf{L}^2$

vertauscht, das Operatoräquivalent zum „Lenz'schen" Vektor.

$$\mathbf{F}_j = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{kl} \epsilon_{jkl}(\mathbf{P}_k \mathbf{L}_l - \mathbf{P}_k \mathbf{L}_l) - \frac{Ze_0^2}{|\mathbf{Q}|}\mathbf{Q}_j \tag{13.28}$$

Aus $\mathbf{L}_j$ und $\mathbf{F}_j$ lassen sich wieder Auf- und Absteige-Operatoren innerhalb eines „Supermultiplett" mit festem n konstruieren, s. z.B Müller, 3.4.2 .

Zu jedem festen n gibt es n l-Werte, $l = 0, 1, 2, \ldots n-1$, zu jedem festen l (2l+1) m-Werte, $m = -l, -l+1, \ldots, l-1, l$, also insgesamt n^2 (zueinander orthonormalisierte) Eigenfunktionen.

13.4 Das Zweikörperproblem

Analog wie in der klassischen Mechanik. Zerlegung in Schwerpunktskoordinaten und Relativkoordinaten.

$\mathcal{H}_K$ und $\mathcal{H}_e$ Zustandsräume für Kern und Elektron. Atom im $\mathcal{H}_K \otimes \mathcal{H}_e$.

Operatoren: $\mathbf{P}_K,\ \mathbf{Q}_K,\ \mathbf{P}_e,\ \mathbf{Q}_e$.

Hamiltonoperator des Atoms:

$$\frac{1}{2m_K}\vec{\mathbf{P}}_K^{\,2} + \frac{1}{2m_e}\vec{\mathbf{P}}_e^{\,2} + V(\vec{\mathbf{Q}}_e - \vec{\mathbf{Q}}_K). \tag{13.29}$$

Da Operatoren, die in $\mathcal{H}_K$ wirken, mit denen, die in $\mathcal{H}_e$ wirken, vertauschen, gilt wie in der klassichen Mechanik:

$$\frac{1}{2m_K}\vec{\mathbf{P}}_K^{\,2} + \frac{1}{2m_e}\vec{\mathbf{P}}_e^{\,2} = \frac{1}{2(m_K + m_e)}\vec{\mathbf{P}}_C^{\,2} + \frac{1}{2\mu}\vec{\mathbf{P}}_r^{\,2} \tag{13.30}$$

mit

$$\vec{\mathbf{P}}_C = \vec{\mathbf{P}}_K + \vec{\mathbf{P}}_e; \qquad \vec{\mathbf{P}}_r = \frac{1}{m_K + m_e}\Big(m_K\vec{\mathbf{P}}_e - m_e\vec{\mathbf{P}}_K\Big) \tag{13.31}$$

und

$$\mu = \frac{m_e m_K}{m_e + m_K} \tag{13.32}$$

Wir gehen in den Ortsraum:

$$\vec{x}_r = \vec{x}_e - \vec{x}_K; \quad \vec{x}_C = \frac{1}{m_e + m_K}(m_e\vec{x}_e + m_K\vec{x}_K). \tag{13.33}$$

Dann folgt aus den Vertauschungsrelationen für den Ortsraum:

$$\vec{\mathbf{P}}_r = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_r; \qquad \vec{\mathbf{P}}_C = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_C \tag{13.34}$$

Der Hamiltonoperator zerfällt in 2 Teile, einen freien, der auf die Schwerpunktskoordinaten $\vec{x}_C$ wirkt, $\mathbf{H}^C$, und einen mit Potential, der auf die Relativkoordinaten $\vec{x}_r$ wirkt, $\mathbf{H}^r$.

$$\begin{aligned}
\mathbf{H} &= \mathbf{H}^C + \mathbf{H}^r \\
\mathbf{H}^C &= -\frac{\hbar^2}{2(m_e + m_K)} \vec{\nabla}_C{}^2 \\
\mathbf{H}^r &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \vec{\nabla}_r{}^2 + V(\vec{x}_r)
\end{aligned} \tag{13.35}$$

Eigenfunktion zum Eigenwert $E = E_C + E_r$, Produktansatz:

$$\psi_C(\vec{x}_C)\psi_r(\vec{x}_r) \tag{13.36}$$

mit

$$\psi_C(\vec{x}_C) = \Big(\frac{1}{2\pi}\Big)^{3/2} \exp[i\vec{k}_C.\vec{x}_c] \tag{13.37}$$

mit $|\vec{k}_C| = \sqrt{2(m_e + m_K)E_C}/\hbar$ und

$$\Big(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\vec{\nabla}_r{}^2 + V(\vec{x}_r)\Big)\psi_r(\vec{x}_r) = E_r\psi_r(\vec{x}_r) \tag{13.38}$$

d.h. auf bekannte Probleme zurückgeführt.

Im H-Atom ist die reduzierte Masse des Proton-Elektron Systems $\mu \approx m_e(1 - 0.5/940)$, im Deuterium $\mu \approx m_e(1 - 0.5/1880)$.

Kapitel 14

Teilchen im elektromagnet. Feld

14.1 Der Hamiltonoperator, Eichinvarianz

Das elektromagnetische Feld wird beschrieben durch Potentiale: $\phi(\vec{x},t)$ und $\vec{A}(\vec{x},t)$ mit

$$\vec{B} = [\vec{\nabla} \times \vec{A}]; \qquad \vec{E} = -\vec{\nabla}\phi - \frac{1}{c}\partial_t \vec{A} \tag{14.1}$$

Die Hamiltonfunktion für ein Teilchen mit Ladung e in diesem Feld:

$$H = \frac{1}{2m}\Big(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\Big)^2 + e\phi \tag{14.2}$$

wobei $\vec{p}$ der kanonische Impuls ist.

Deswegen setzen wir für den Hamiltonoperator an:

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m}(\vec{\mathbf{P}} - \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{\mathbf{Q}},t)\Big)^2 + e\phi(\vec{\mathbf{Q}},t) \tag{14.3}$$

In der Ortsdarstellung:

$$\mathbf{H}(\vec{A},\phi) = \frac{1}{2m}\Big(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{x},t)\Big)^2 + e\phi(\vec{x},t) \tag{14.4}$$

Problem: In klassischer E'dynamik sind die Potentiale nur Hilfsgrößen, die umgeeichten Potentiale

$$\vec{A}' = \vec{A} - \vec{\nabla}\Lambda; \quad \phi' = \phi + \frac{1}{c}\partial_t\Lambda \tag{14.5}$$

ändern die beobachtbaren Felder nicht, aber hier treten sie direkt im Hamiltonoperator und damit auch in der Schrödingergleichung auf.

Aber: Die Eichtransformation 14.5 kann durch eine entsprechende Phasentransformation der Wellenfunktion aufgefangen werden.

Es gilt aber:

•Die Schrödingergleichung

$$i\hbar\partial_t\psi = \mathbf{H}(\vec{A},\phi)\psi \tag{14.6}$$

mit dem Hamiltonoperator 14.4 behält bei einer Umeichung der Potentiale 14.5 **und** der Wellenfunktion:

$$\psi'(\vec{x},t) = \exp[-\frac{ie}{\hbar c}\Lambda(\vec{x},t)]\psi(\vec{x},t) \tag{14.7}$$

ihre Form, d.h.

$$i\hbar\partial_t\psi' = \mathbf{H}(\vec{A}',\phi')\psi' \tag{14.8}$$

Bew.

$$\begin{aligned}\Big(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A}'\Big)\psi' &= \Big(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - \frac{e}{c}(\vec{A} - \vec{\nabla}\Lambda)\Big)\exp[-\frac{ie}{\hbar c}\Lambda(\vec{x},t)]\psi(\vec{x},t) \\ &= \exp[-\frac{ie}{\hbar c}\Lambda(\vec{x},t)]\Big(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A}\Big)\psi(\vec{x},t)\end{aligned} \tag{14.9}$$

und damit

$$\Big(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A}'\Big)^2\psi' = \exp[-\frac{ie}{\hbar c}\Lambda(\vec{x},t)]\Big(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A}\Big)^2\psi(\vec{x},t) \tag{14.10}$$

genauso

$$i\hbar\partial_t\psi' = \exp[-\frac{ie}{\hbar c}\Lambda(\vec{x},t)]i\hbar\partial_t\psi \tag{14.11}$$

d.h.

$$\Big(i\hbar\partial_t - \mathbf{H}(\vec{A}',\phi')\Big)\psi' = \exp[-\frac{ie}{\hbar c}\Lambda(\vec{x},t)]\Big(i\hbar\partial_t - \mathbf{H}(\vec{A},\phi)\Big)\psi = 0 \tag{14.12}$$

Man kann auch umgekehrt vorgehen: Bei einem elektrisch geladenen Teilchen ändern sich die beobachtbaren Größen nicht, wenn „global umgeeicht" wird, $\psi \to \exp[ie\alpha]\psi$, $\alpha \in R$. Bei ausgedehntem System bedingt dies einen „Fernparallesismus" (H. Weyl). Sein Vorschlag: Fordere „lokale Eichinvarianz" 14.7, dann muss es ein Feld $\vec{A}$ geben, das wie in 14.3 im Hamiltonoperator steht, und das nach 14.5 umgeeicht wird.

Beispiele: Elektrodynamik, Elektroschwache Theorie, QCD, ART.

14.2 Effekte von $\vec{A}$ im magnetfeldfreien Raum. Der Bohm-Aharonov Effekt.

Der Effekt von $\vec{A}$ macht sich immer bemerkbar, wenn das Gebiet nicht einfach zusammenhängend ist.

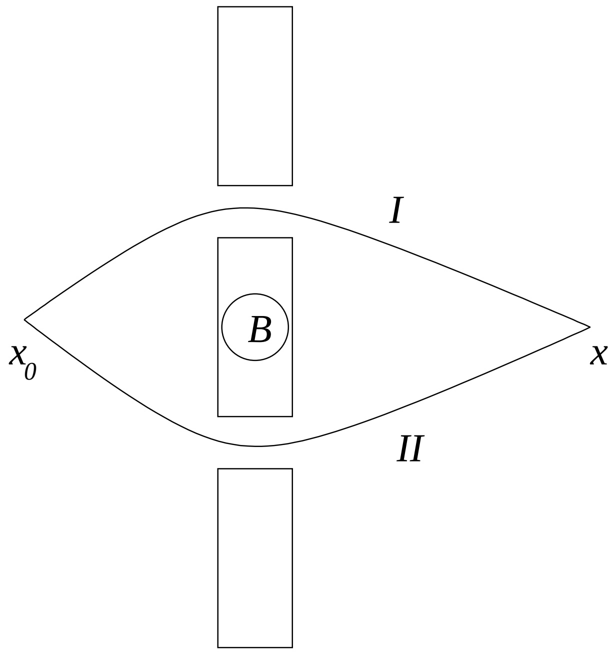


Abbildung 14.1: Schematischer Versuchsaufbau zum Bohm-Aharonov Effekt

Betrachte Spule entlang der x_3-Achse, unendlich lang mit Radius R_S. In ihr konstantes Magnetfeld $(0,0,B)$, außerhalb der Spule $\vec{B}=0$. Aber $\vec{A}$ muss $\neq 0$ außerhalb der Spule sein: Betrachte Linienintegral über Kreis mit Radius $R > R_C$ in x_1, x_2 Ebene:

$$\oint \vec{A}(\vec{x}'(s))d\vec{s} = \int_F [\vec{\nabla} \times \vec{A}] dx_1 dx_2 \tag{14.13}$$

mit $F : x_1^2 + x_2^2 \leq R_c^2$ nach Satz von Stokes.

Da $\vec{B} = [\vec{\nabla} \times \vec{A}]$ gilt also

$$\oint \vec{A}(\vec{x}'(s))d\vec{s} = \int_F B dx_1 dx_2 := \phi_m \neq 0 \tag{14.14}$$

Hätte der Weg die Spule nicht umschlossen, wäre das Resultat 0 gewesen.

•Bohm-Aharonov Effekt. Versuchsaufbau: s. Figur 14.1 Es sei $\psi_I(\vec{x},t)$ eine Lösung der Schrödingergleichung, die einen Elektronenstrahl entlang des Pfades I beschreibt. Wird das Feld eingeschaltet ändert sich ψ_I zu ψ_{IB}.

Beh:

$$\psi_{IB}(\vec{x}) = \exp[\frac{ie}{\hbar c}\Lambda_I(\vec{x})]\psi_I(\vec{x}) \tag{14.15}$$

mit

$$\Lambda_I(\vec{x}) = \int_{I(x_0,x)} \vec{A}(\vec{x}'(s))d\vec{s} \tag{14.16}$$

wobei das Linienintegral entlang des Pfades I von $\vec{x}_0$ nach $\vec{x}$ zu nehmen ist (oder in dessen Nachbarschaft).

Bew:

$$\vec{\nabla} \int_{I(x_0,x)} \vec{A}(\vec{x}'(s))d\vec{s} = \vec{A}(\vec{x}) \tag{14.17}$$

(vgl. Mechanik, Potential aus Kraftfeld).

$$\begin{aligned}
&\Big(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{x})\Big) \exp[\frac{ie}{\hbar c}\Lambda_I(\vec{x})]\psi_I(\vec{x}) \\
&= \Big(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{x})\Big) \exp[\frac{ie}{\hbar c}\int_{I(x_0,x)} \vec{A}(\vec{x}'(s))d\vec{s}]\psi_I(\vec{x}) \\
&= \exp[\frac{ie}{\hbar c}\Lambda_I(\vec{x})]\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\psi_I(\vec{x})
\end{aligned} \tag{14.18}$$

d.h. A-term hebt sich weg. Es folgt

$$\Big(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{x})\Big)^2 \exp[\frac{ie}{\hbar c}\Lambda_I(\vec{x})]\psi_I = \exp[\frac{ie}{\hbar c}\Lambda_I(\vec{x})]\Big(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\Big)^2\psi_I \tag{14.19}$$

Wenn ψ_I Lösung der SG ohne Feld, dann ψ_{IB} mit Feld. Genauso für II, mit dem Pfad I durch II ersetzt.

Das Interferenzexperiment sei nun so ausgerichtet, dass an der Stelle $\vec{x}$ der Phasenunterschied π sei, also Auslöschung. Nun schalte B-Feld ein. I und II bekommen die zusätzlichen Phasen, und die neue Phasendifferenz ist:

$$\frac{ie}{\hbar c}\Lambda_I(\vec{x}) - \frac{ie}{\hbar c}\Lambda_{II}(\vec{x}) = \frac{ie}{\hbar c}\oint \vec{A}(\vec{x}'(s))d\vec{s} = \frac{ie}{\hbar c}\int B dx_1 dx_2 \tag{14.20}$$

da der aus I und II zusammengesetzte geschlossene Pfad die Spule umschließt.

D.h. Interferenzmuster wird geändert !

Sehr empfindlich auf winzige Änderungen des Magnetfelds, da Einheit $\frac{\hbar c}{e_0} = 0.6610^{-7}$ g cm^2.

Prinzip angewandt bei SQUID (Superconducting Quantum Interference Device)

14.3 Elimination des Potentials

Wir können das Potential immer eliminieren, z.B. in der ,,Koordinateneichung" ($\vec{x}\vec{A} = 0, \quad \vec{A}(0) = 0$). Für ein statisches Feld gilt:

$$\vec{A}(\vec{x}) = \int_0^1 \lambda d\lambda [\vec{B}(\lambda x) \times \vec{x}] \tag{14.21}$$

wie man explizit nachrechnet. Zusammenhang nicht lokal, d.h. um das Potential an der Stelle $\vec{x}$ zu berechnen, muss ich $\vec{B}$ auf dem ganzen Strahl von 0 nach $\vec{x}$ kennen.

Ist das Magnetfeld konstant, dann 14.21 besonders einfach:

$$\vec{A}(\vec{x}) = \tfrac{1}{2}[\vec{B} \times \vec{x}] \tag{14.22}$$

Damit wird nun 14.4 (mit $\phi = 0$) :

$$\begin{aligned} \mathbf{H} &= \frac{1}{2m}\Big(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - \frac{e}{2c}[\vec{B} \times \vec{x}]\Big)^2 \\ &= \frac{1}{2m}\Big(- \hbar^2\vec{\nabla}^2 - 2\frac{\hbar}{i}\frac{e}{2c}([\vec{B} \times \vec{x}], \vec{\nabla}) + \Big(\frac{e}{2c}\Big)^2 |[\vec{B} \times \vec{x}]|^2\Big) \end{aligned} \tag{14.23}$$

wobei wir $\vec{\nabla}[\vec{B} \times \vec{x}] = \sum_{jkl} \epsilon_{jkl}\partial_j B_k x_l = 0$ ausgenutzt haben. Es gilt:

$$\frac{\hbar}{i}([\vec{B} \times \vec{x}], \vec{\nabla}) = \frac{\hbar}{i}\sum_{jkl} \epsilon_{jkl} B_j x_k \partial_l = \frac{\hbar}{i}(\vec{B}, [\vec{x} \times \vec{\nabla}]) = (\vec{B}.\vec{\mathbf{L}}) \tag{14.24}$$

und damit

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 - \frac{e}{2mc}(\vec{B}.\vec{\mathbf{L}}) + \frac{1}{2m}\Big(\frac{e}{2c}\Big)^2 |[\vec{B} \times \vec{x}]|^2 \tag{14.25}$$

Wir können ohne Beschränkung der Allgemeinheit die 3-Achse in die $\vec{B}$- Richtung legen, $\vec{B} = (0, 0, B)$. Dann:

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 - \frac{e}{2mc}(B\mathbf{L}_3) + \frac{1}{2m}\Big(\frac{e}{2c}\Big)^2 B^2(x_1^2 + x_2^2) \tag{14.26}$$

Unter Laborbedingungen ist im Atom oft $\frac{1}{2m}\left(\frac{e}{2c}\right)^2 |[\vec{B} \times \vec{x}]|^2 \ll \frac{e}{mc}|B|\hbar$ und damit vernachlässigbar. Ausnahmen: Wenn $< \vec{\mathbf{L}}^2 >= 0$ (Diamagnetismus) oder Felder sehr stark.

14.4 Ankopplung von Spin $\frac{1}{2}$ Teilchen an das Magnetfeld

In 6.3 hatten wir gesehen, dass die 2 Zustände, in denen sich das Elektron befinden kann, zu einer Kopplung an das Magnetfeld führen mit dem Hamiltonoperator:

$$\mathbf{H} = -\frac{e\hbar}{2m_0 c}\boldsymbol{\sigma}.\vec{B} \tag{14.27}$$

und dass durch Vergleich mit der „Präzession der Erwartungswerte" der Spinoperator, der einem Drehimpuls entspricht, mit

$$\vec{\mathbf{S}} = \tfrac{1}{2}\hbar\vec{\boldsymbol{\sigma}} \tag{14.28}$$

zu identifizieren ist. Tatsächlich rechnet man leicht nach, dass das so definierte $\vec{\mathbf{S}}$ die Drehimpuls-Vertauschungsrelationen erfüllt:

$$[\mathbf{S}_j, \mathbf{S}_k] = i\hbar \sum_m \epsilon_{jkm}\mathbf{S}_m \tag{14.29}$$

Damit lässt sich mit 6.19 der Hamiltonoperator für ein Elektron im (annähernd) konstanten Magnetfeld $\vec{B} = (0, 0, B)$ schreiben als:

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 - \frac{e}{2mc}B(\mathbf{L}_3 + g_e\mathbf{S}_3) + \frac{1}{2m}\Big(\frac{e}{2c}\Big)^2 B^2(x_1^2 + x_2^2) \tag{14.30}$$

mit $g_e = 2$.

Nutzlose Versuche: Finde Ladungsverteilung von Elektron, die $g_e = 2$ klassich ergibt.

Erfolg: Relativistische Gleichung für Elektron (Dirac-Gleichung) ergibt $g_e = 2$.

ABER: für ein Proton im Magnetfeld erwarten wir auch 14.30 mit $e = e_p = +e_0$ und $m = m_p$. Stimmt nicht! $g_p = 2.8g_e$. Proton nicht „elementar".

Die Größe $\frac{e_0\hbar}{2mc}$ heißt Magneton. Für $m = m_e$ Bohrsches Magneton μ_B, für $m = m_p$ Kernmagneton μ_K.

Wenn wir den diamagnetischen Term

$$\frac{1}{2m}\Big(\frac{e}{2c}\Big)^2 B^2(x_1^2 + x_2^2) = \frac{1}{2m}\Big(\frac{e}{2c}\Big)^2 B^2 r^2 \sin^2\vartheta \tag{14.31}$$

vernachlässigen, erhalten wir für ein Elektron im Zentralpotential und Magnetfeld :

$$\mathbf{H}(B) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m_0}\Big(\partial_r^2 + \frac{2}{r}\partial_r\Big) + \frac{1}{2m_0 r^2}\vec{\mathbf{L}}^2 + V(r)\right) + \frac{e_0}{2m_0 c}B(\mathbf{L}_3 + g_e\mathbf{S}_3) \tag{14.32}$$

Dieser Hamiltonoperator vertauscht mit $\vec{\mathbf{L}}^2, \vec{\mathbf{S}}^2, \mathbf{L}_3, \mathbf{S}_3$ (Masse m_0 um Verwechslung mit Eigenwert von $\mathbf{L}_3$ zu vermeiden).

Ist $R_{E,l,m}(r)Y_l^m(\vartheta, \varphi)$ Eigenzustand ohne Magnetfeld:

$$\mathbf{H}(B)\Big|_{B=0} R_{E,l,m}Y_l^m\,|\chi_s\rangle = E\; R_{E,l,m}Y_l^m\,|\chi_s\rangle \tag{14.33}$$

mit dem Spinor $\mathbf{S}_3\,|\chi_s\rangle = s\,|\chi_s\rangle$, $s = \pm\frac{1}{2}$; dann gilt natürlich:

$$\begin{aligned}\mathbf{H}(B)\; R_{E,l,m}Y_l^m\,|\chi_s\rangle &= \Big(\mathbf{H}(B)\Big|_{B=0} + \frac{e_0}{2m_0c}B(\mathbf{L}_3 + g_e\mathbf{S}_3)\Big)\; R_{E,l,m}Y_l^m\,|\chi_s\rangle \\ &= \Big(E + \frac{e_0}{2m_0c}B(m + g_e s)\Big)\; R_{E,l,m}Y_l^m\,|\chi_s\rangle \qquad (14.34)\end{aligned}$$

d.h. immer noch Eigenzustand, aber Entartung aufgehoben. Erwartete Aufspaltung. Recht gut für ziemlich große Magnetfelder. Es fehlt aber noch die Spin-Bahnkopplung.

Kapitel 15

Stationäre Störungstheorie

Nur wenige Probleme der Quantenmechanik lassen sich exakt lösen. Darunter sind z. B. der harmonische Oszillator, das Coulombproblem oder Kastenpotentiale. Offensichtlich sind die exakt lösbaren Probleme gut geeignet, um die Grundlagen zu studieren, weshalb sie auch in der Vorlesung einen breiten Raum einnehmen. In den meisten praktischen Anwendungen der Quantenmechanik hat man es aber mit Problemen zu tun, die nicht exakt lösbar sind. Wie in fast allen Gebieten der Physik ist es daher wichtig, gute Näherungsverfahren zu entwickeln, um auch solche Probleme behandeln zu können. Eines der wichtigsten Näherungsverfahren der Quantenmechanik ist die Störungstheorie.

Die Störungstheorie eignet sich für Probleme, die einem exakt lösbaren Problem in gewisser Weise ähnlich sind. (Wir werden noch sehen, was „ähnlich“ in diesem Zusammenhang genau bedeutet.) Die exakt lösbaren Probleme sind also nicht etwa unwichtig, weil sie in der Praxis selten vorkommen. Im Gegenteil: die Anwendung der Störungstheorie setzt voraus, daß eine exakte Lösung für ein (mehr oder weniger) ähnliches Problem bekannt ist. Damit gewinnen die exakt lösbaren Probleme sogar an Bedeutung.

Wir wollen also Probleme betrachten, deren Hamiltonoperator geschrieben werden kann als

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{W}\,, \tag{15.1}$$

wobei $\mathbf{H}_0$ der Hamiltonoperator eines exakt lösbaren Problems ist, d. h. sowohl die Energieeigenwerte als auch die zugehörigen Eigenfunktionen seien explizit bekannt. Der Hamiltonoperator $\mathbf{W}$ beschreibt dann die *Störung*. Damit das Verfahren funktionieren kann, muß offenbar $\mathbf{W}$ in einem gewissen Sinn klein gegenüber dem ungestörten Hamiltonoperator $\mathbf{H}_0$ sein. Wie wir sehen werden, bedeutet dies präzise gesprochen, daß die Matrixelemente der Störung $\mathbf{W}$ (viel) kleiner sein müssen als die Differenzen der Eigenwerte des ungestörten Hamiltonoperators H_0.

Wir werden im Rahmen der *stationären* Störungstheorie nur solche Probleme betrachten, bei denen $\mathbf{W}$ (und $\mathbf{H}_0$) nicht explizit zeitabhängig ist. (Der gegenteilige Fall ist Gegenstand der sog. zeitabhängigen Störungstheorie, s. später.) Wir wollen weiter annehmen, daß $\mathbf{H}_0$ ein diskretes Energiespektrum hat, was bei gebundenen Zuständen sicher der Fall ist.

Es wird sich als nützlich erweisen, die Störung in unserer Rechnung „an– und abschalten“ zu können. Da die Störung klein sein soll, macht es natuerlich Sinn, die Eigenwerte und Eigenfunktionen von $\mathbf{H}$ in eine Potenzreihe zu entwickeln. Die Störung $\mathbf{W}$ selbst ist aber ein Operator, kann also nicht als kleiner Parameter verwendet werden. Um dieses Problem zu lösen, können wir einen Parameter einführen. Wir schreiben also statt (15.1)

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \lambda \mathbf{W}\,, \tag{15.2}$$

worin wir dann λ zwischen 0 und 1 variieren können. Für $\lambda = 0$ erhalten wir den ungestörten Hamiltonoperator $\mathbf{H}_0$, für $\lambda = 1$ den gestörten. Dies ermöglicht uns, die Eigenwerte und Eigenfunktionen von $\mathbf{H}$ in Potenzen von λ zu entwickeln. Am Ende setzen wir dann $\lambda = 1$ und erhalten die Eigenwerte und Eigenfunktionen für $\mathbf{H}$.

Wie wir sehen werden, müssen wir unterscheiden, ob das Spektrum von $\mathbf{H}_0$ Entartung aufweist oder nicht. Zunächst behandeln wir den Fall, daß *keine* Entartung vorliegt.

15.1 Störungstheorie ohne Entartung

Wir nehmen also an, daß die Eigenwerte von $\mathbf{H}_0$ nicht entartet sind. Genauer betrachtet, reicht es aus anzunehmen, daß dasjenige Energieniveau nicht entartet ist, dessen Verschiebung wir berechnen wollen.

Zunächst die Ausgangslage: Der ungestörte Hamiltonoperator $\mathbf{H}_0$ habe normierte Eigenzustände $|\varphi_k\rangle$ mit diskreten, nicht entarteten[1] Eigenwerten ε_k,

$$\mathbf{H}_0 \,|\varphi_k\rangle = \varepsilon_k \,|\varphi_k\rangle \ , \tag{15.3}$$

die uns alle bekannt sein sollen. Die Eigenzustände des vollen Hamiltonoperators seien mit $|\psi_n\rangle$ bezeichnet, die zugehörigen Eigenwerte mit E_n,

$$\mathbf{H}\,|\psi_n\rangle = (\mathbf{H}_0 + \lambda\mathbf{W})\,|\psi_n\rangle = E_n\,|\psi_n\rangle \ , \tag{15.4}$$

wobei $\lambda \in [0,1]$. Der Operator $\mathbf{W}$ soll selbstadjungiert sein. Offenbar hängt hier einiges von λ ab, so daß wir eigentlich schreiben sollten

$$\mathbf{H}(\lambda)\,|\psi_n(\lambda)\rangle = (\mathbf{H}_0 + \lambda\mathbf{W})\,|\psi_n(\lambda)\rangle = E_n(\lambda)\,|\psi_n(\lambda)\rangle \ . \tag{15.5}$$

[1] Damit sind die Eigenzustände $|\varphi_k\rangle$ automatisch orthogonal zueinander. (Warum?)

Wir werden aber im folgenden wieder die einfachere Notation verwenden.

Für $\lambda = 0$ wollen wir aus $\mathbf{H}$ den ungestörten Operator $\mathbf{H}_0$ erhalten, deshalb ist

$$|\psi_n\rangle = |\varphi_n\rangle \qquad \text{für} \qquad \lambda = 0\,. \tag{15.6}$$

Die ungestörten Eigenzustände $|\varphi_n\rangle$ bilden ein vollständiges System, in das wir die exakten Eigenzustände $|\psi_n\rangle$ entwickeln:

$$|\psi_n\rangle = \sum_k |\varphi_k\rangle \langle \varphi_k \mid \psi_n\rangle = \sum_k c_{kn} |\varphi_k\rangle \,, \tag{15.7}$$

worin wir $\langle \varphi_k \mid \psi_n\rangle$ mit c_{kn} bezeichnen. Wir nehmen nun weiter an, daß die Energieeigenwerte $E_n(\lambda)$ und die Entwicklungskoeffizienten $c_{mn}(\lambda)$ *analytisch* von λ abhängen und also in Potenzreihen in λ entwickelt werden können:

$$E_n = \sum_{\mu=0}^{\infty} \lambda^\mu E_n^{(\mu)} = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \cdots \tag{15.8}$$

$$c_{mn} = \sum_{\mu=0}^{\infty} \lambda^\mu c_{mn}^{(\mu)} = c_{mn}^{(0)} + \lambda c_{mn}^{(1)} + \lambda^2 c_{mn}^{(2)} + \cdots \tag{15.9}$$

Wie wir gesehen haben, ist für $\lambda = 0$ gerade $|\psi_n\rangle = |\varphi_n\rangle$, also

$$\boxed{E_n^{(0)} = \varepsilon_n} \tag{15.10}$$

Weiter ergibt sich für die Entwicklung von $|\psi_n\rangle$

$$|\psi_n\rangle = \sum_k c_{kn} |\varphi_k\rangle = \sum_k \sum_\mu \lambda^\mu c_{kn}^{(\mu)} |\varphi_k\rangle = \sum_\mu \lambda^\mu \sum_k c_{kn}^{(\mu)} |\varphi_k\rangle \,. \tag{15.11}$$

Der Plan ist jetzt, in die Eigenwertgleichung für $\mathbf{H}$

$$(\mathbf{H}_0 + \lambda \mathbf{W}) |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle \tag{15.12}$$

die Potenzreihen einzusetzen,

$$(\mathbf{H}_0 + \lambda \mathbf{W}) \left(\sum_\mu \lambda^\mu \sum_k c_{kn}^{(\mu)} |\varphi_k\rangle \right) = \left(\sum_\mu \lambda^\mu E_n^{(\mu)} \right) \left(\sum_\nu \lambda^\nu \sum_k c_{kn}^{(\nu)} |\varphi_k\rangle \right) \tag{15.13}$$

und einen Koeffizientenvergleich durchzuführen. Für die linke Seite erhalten wir

$$\begin{aligned} &(\mathbf{H}_0 + \lambda \mathbf{W}) \sum_\mu \lambda^\mu \sum_k c_{kn}^{(\mu)} |\varphi_k\rangle = \\ &= \sum_\mu \lambda^\mu \sum_k c_{kn}^{(\mu)} \mathbf{H}_0 |\varphi_k\rangle + \sum_\mu \lambda^{\mu+1} \sum_k c_{kn}^{(\mu)} \mathbf{W} |\varphi_k\rangle \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= \sum_k c_{kn}^{(0)} \varepsilon_k \, |\varphi_k\rangle \\
&\quad + \lambda \left(\sum_k c_{kn}^{(1)} \varepsilon_k \, |\varphi_k\rangle + \sum_k c_{kn}^{(0)} \mathbf{W} \, |\varphi_k\rangle \right) \\
&\quad + \lambda^2 \left(\sum_k c_{kn}^{(2)} \varepsilon_k \, |\varphi_k\rangle + \sum_k c_{kn}^{(1)} \mathbf{W} \, |\varphi_k\rangle \right) + \cdots
\end{aligned}
\tag{15.14}
$$

und für die rechte Seite von (15.13)

$$
\begin{aligned}
E_n \, |\psi_n\rangle &= \left(E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \cdots \right) \times \\
&\quad \times \left(\sum_k c_{kn}^{(0)} \, |\varphi_k\rangle + \lambda \sum_k c_{kn}^{(1)} \, |\varphi_k\rangle + \lambda^2 \sum_k c_{kn}^{(2)} \, |\varphi_k\rangle + \cdots \right) \\
&= E_n^{(0)} \sum_k c_{kn}^{(0)} \, |\varphi_k\rangle \\
&\quad + \lambda \left(E_n^{(0)} \sum_k c_{kn}^{(1)} \, |\varphi_k\rangle + E_n^{(1)} \sum_k c_{kn}^{(0)} \, |\varphi_k\rangle \right) \\
&\quad + \lambda^2 \left(E_n^{(0)} \sum_k c_{kn}^{(2)} \, |\varphi_k\rangle + E_n^{(1)} \sum_k c_{kn}^{(1)} \, |\varphi_k\rangle + E_n^{(2)} \sum_k c_{kn}^{(0)} \, |\varphi_k\rangle \right) \\
&\quad + \cdots
\end{aligned}
\tag{15.15}
$$

Für die Koeffizienten von λ^0 haben wir also

$$
\sum_k c_{kn}^{(0)} \varepsilon_k \, |\varphi_k\rangle = E_n^{(0)} \sum_k c_{kn}^{(0)} \, |\varphi_k\rangle = \sum_k c_{kn}^{(0)} \varepsilon_n \, |\varphi_k\rangle \tag{15.16}
$$

wobei wir (15.10) verwendet haben. Hieraus

$$
\sum_k c_{kn}^{(0)} (\varepsilon_k - \varepsilon_n) \, |\varphi_k\rangle = 0 \tag{15.17}
$$

Von links $\langle\varphi_m|$ anwenden:

$$
\sum_k c_{kn}^{(0)} (\varepsilon_k - \varepsilon_n) \, \langle\varphi_m \mid \varphi_k\rangle = 0 \tag{15.18}
$$

$$
c_{mn}^{(0)} (\varepsilon_m - \varepsilon_n) = 0 \tag{15.19}
$$

Der Ausdruck in Klammern ist ungleich Null für $m \neq n$, also

$$
c_{mn}^{(0)} = 0 \qquad \text{für} \qquad m \neq n \, . \tag{15.20}
$$

Aber für $\lambda = 0$ ist offenbar $c_{nn} = c_{nn}^{(0)}$,

$$
c_{nn}^{(0)} = c_{nn}(\lambda = 0) = 1 \tag{15.21}
$$

Also

$$\boxed{c_{mn}^{(0)} = \delta_{mn}} \tag{15.22}$$

Weiter für den nächsten Koeffizientenvergleich (die Terme mit λ^1)

$$E_n^{(0)} \sum_k c_{kn}^{(1)} |\varphi_k\rangle + E_n^{(1)} \sum_k c_{kn}^{(0)} |\varphi_k\rangle = \sum_k c_{kn}^{(1)} \varepsilon_k |\varphi_k\rangle + \sum_k c_{kn}^{(0)} \mathbf{W} |\varphi_k\rangle \tag{15.23}$$

Mit (15.10) und (15.22)

$$\varepsilon_n \sum_k c_{kn}^{(1)} |\varphi_k\rangle + E_n^{(1)} |\varphi_n\rangle = \sum_k c_{kn}^{(1)} \varepsilon_k |\varphi_k\rangle + \mathbf{W} |\varphi_n\rangle \tag{15.24}$$

Anwenden von $\langle\varphi_n|$ ergibt

$$\varepsilon_n c_{nn}^{(1)} + E_n^{(1)} = c_{nn}^{(1)} \varepsilon_n + \langle\varphi_n \mid \mathbf{W}\varphi_n\rangle \tag{15.25}$$

Damit

$$\boxed{E_n^{(1)} = \langle\varphi_n \mid \mathbf{W}\varphi_n\rangle} \tag{15.26}$$

Wendet man andererseits auf (15.24) $\langle\varphi_m|$ mit $m \neq n$ an, so findet man

$$\varepsilon_n c_{mn}^{(1)} = c_{mn}^{(1)} \varepsilon_m + \langle\varphi_m \mid \mathbf{W}\varphi_n\rangle \tag{15.27}$$

also

$$\boxed{c_{mn}^{(1)} = \frac{\langle\varphi_m \mid \mathbf{W}\varphi_n\rangle}{\varepsilon_n - \varepsilon_m} \quad \text{für} \quad m \neq n} \tag{15.28}$$

Nebenbemerkung: Die $c_{mm}^{(s)}$ sind durch die Gleichung (15.13) für $s \geq 1$ nicht bestimmt, und wir können sie gleich Null setzen. Diese Bedingung wird aber im weiteren nicht gebraucht.

Für die Terme mit λ^2 erhalten wir schließlich

$$E_n^{(0)} \sum_k c_{kn}^{(2)} |\varphi_k\rangle + E_n^{(1)} \sum_k c_{kn}^{(1)} |\varphi_k\rangle + E_n^{(2)} \sum_k c_{kn}^{(0)} |\varphi_k\rangle = \sum_k c_{kn}^{(2)} \varepsilon_k |\varphi_k\rangle + \sum_k c_{kn}^{(1)} \mathbf{W} |\varphi_k\rangle \tag{15.29}$$

Wir benutzen (15.10) und wenden $\langle\varphi_n|$ an:

$$\varepsilon_n c_{nn}^{(2)} + E_n^{(1)} c_{nn}^{(1)} + E_n^{(2)} = c_{nn}^{(2)} \varepsilon_n + \sum_k c_{kn}^{(1)} \langle\varphi_n \mid \mathbf{W}\varphi_k\rangle \tag{15.30}$$

Mit (15.26) also

$$c_{nn}^{(1)} \langle\varphi_n \mid \mathbf{W}\varphi_n\rangle + E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} c_{kn}^{(1)} \langle\varphi_n \mid \mathbf{W}\varphi_k\rangle + c_{nn}^{(1)} \langle\varphi_n \mid \mathbf{W}\varphi_n\rangle \tag{15.31}$$

$$E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} c_{kn}^{(1)} \langle \varphi_n \,|\, \mathbf{W} \varphi_k \rangle \tag{15.32}$$

wobei nach (15.28)

$$c_{kn}^{(1)} = \frac{\langle \varphi_k \,|\, \mathbf{W} \varphi_n \rangle}{\varepsilon_n - \varepsilon_k} = \frac{\langle \varphi_n \,|\, \mathbf{W} \varphi_k \rangle^*}{\varepsilon_n - \varepsilon_k} \tag{15.33}$$

Also

$$\boxed{E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{|\langle \varphi_n \,|\, \mathbf{W} \varphi_k \rangle|^2}{\varepsilon_n - \varepsilon_k}} \tag{15.34}$$

Bis hierher haben wir die ersten drei Terme in der Potenzreihe für die exakten Energieeigenwerte und die beiden ersten Terme in der Potenzreihe für die exakten Eigenzustände (bzw. deren Entwicklung nach ungestörten Eigenzuständen) des Hamiltonoperators **H** gefunden. Nach dem gleichen Prinzip lassen sich iterativ auch die höheren Terme bestimmen. Für praktische Anwendungen ist Störungstheorie aber gerade dann besonders nützlich, wenn schon wenige Terme eine gute Näherung darstellen. (Leider ist dies dem Problem nur selten anzusehen.)

Wir wollen nun sehen, was wir aus den hergeleiteten Formeln lernen können.

- Die Formel für die Energieverschiebung in erster Ordnung,

  $$E_n^{(1)} = \langle \varphi_n \,|\, \mathbf{W} \varphi_n \rangle \tag{15.35}$$

  ist sehr wichtig. In Worten besagt sie: Die Energieverschiebung eines gegebenen Zustands in erster Näherung ist gerade der Erwartungswert der Störung in diesem Zustand.

  Wenn es sich bei der Störung um ein Potential handelt, $\mathbf{W} = W(\vec{x})$, so hat die Energieverschiebung in erster Ordnung dasselbe Vorzeichen wie die Störung. Es ist

  $$E_n^{(1)} = \int d^3x \, \varphi^*(\vec{x}) W(\vec{x}) \varphi(\vec{x}) \,. \tag{15.36}$$

  Demzufolge erhält man eine große Energieverschiebung nur dann, wenn die Störung und die Wahrscheinlichkeitsdichte gleichzeitig (d. h. am selben Ort) groß sind.

- An der Formel (15.34) für die zweite Ordnung sieht man, daß für die Konvergenz der Störungsreihe auch die Nichtdiagonalelemente der Störung **W** (viel) kleiner sein müssen als die Energiedifferenzen im Nenner.

- Ist $|\varphi_n\rangle$ der Grundzustand, so ist der Nenner in $E_n^{(2)}$ immer negativ (siehe (15.34)), und damit $E_n^{(2)}$ selber: Der Beitrag der zweiten Ordnung zur Energieverschiebung des Grundzustands ist immer negativ.

- Wenn die Matrixelemente von $\mathbf{W}$ etwa die gleiche Größe haben (in der Praxis wird man das eher vermuten als wissen), so wirken sich die näherliegenden Niveaus stärker in der Energieverschiebung 2. Ordnung aus, wie man leicht an den Energienennern in (15.34) erkennt. Um die Energieverschiebung in 2. Ordnung abzuschätzen, wird man daher zunächst die Beiträge der näherliegenden Niveaus in (15.34) betrachten.

- Aus (15.34 läßt sich weiter folgendes ablesen: Falls ein Niveau k stark zur Energieverschiebung in zweiter Ordnung und damit in (15.34) beiträgt (d. h. es liegt nahe am Niveau n oder $\langle \varphi_n \,|\, \mathbf{W} \varphi_k \rangle$ ist groß), und liegt das Niveau k *oberhalb* des Niveaus n – es gilt also $\varepsilon_k > \varepsilon_n$ — so wird das Niveau n nach *unten* verschoben. Liegt hingegen das Niveau k *unterhalb* des Niveaus n — $\varepsilon_k < \varepsilon_n$, so wird das Niveau n nach *oben* verschoben. Dies bezeichnet man als die gegenseitige Abstoßung der Niveaus in 2. Ordnung Störungstheorie.

- Die in den Ausdrücken für $c_{mn}^{(1)}$ und $E_n^{(2)}$ auftretenden Energienenner sind von Null verschieden, da wir angenommen hatten, daß das Niveau n nicht entartet ist, für das wir die Korrektur berechnen wollen. Diese Energienenner verschwinden auch dann nicht, wenn eines der anderen Niveaus k in der Summe entartet ist. Auch in diesem Fall bleibt die Herleitung gültig.

Wichtig ist auch zu beachten, daß die in Störungstheorie erhaltenen Näherungen für die exakten Eigenzustände $|\psi_n\rangle$ im allgemeinen nicht automatisch normiert sind.

15.2 Störungstheorie mit Entartung

Wenn ein Energieeigenwert von $\mathbf{H}_0$ entartet ist, können wir mit obiger Methode nicht die Energieverschiebung berechnen. Dies erkennt man leicht an obiger Herleitung, insbesondere an den Energienennern, die in diesem Fall Null werden können. Bei sehr vielen Problemen der Quantenmechanik tritt aber Entartung auf, es ist daher sehr wichtig, auch diesen Fall behandeln zu können. Meist ist die Ursache der Entartung eine zusätzlichen Symmetrie, die durch die Störung $\mathbf{W}$ ganz oder teilweise aufgehoben werden kann. Für den Fall der Entartung wollen wir uns darauf beschränken, die Energieverschiebung in 1. Ordnung Störungstheorie zu berechnen. Prinzipiell kann dies aber zu beliebiger Ordnung durchgeführt werden.

Statt eines Eigenzustands $|\varphi_n\rangle$ von $\mathbf{H}_0$ mit dem Eigenwert ε_n haben wir jetzt mehrere solche Eigenzustände mit demselben Eigenwert ε_n. Wenn dieses Niveau g_n-fach entartet ist, haben wir also g_n linear unabhängige solche Zustände, die wir jetzt mit $|\varphi_n^i\rangle$ bezeichnen wollen, wobei $i \in \{1, \ldots, g_n\}$. Wie man leicht sieht, sind dann auch alle Linearkombinationen dieser $|\varphi_n^i\rangle$ Eigenzustände von $\mathbf{H}_0$. Wir erinnern uns, daß es die zentrale Annahme der Störungstheorie war, daß die Eigenzustände von $\mathbf{H}$ *analytisch* aus denen von $\mathbf{H}_0$ hervorgehen (Entwicklung in Potenzreihen in λ, siehe oben). Die Entartung kann aber durch die Störung ganz oder teilweise aufgehoben werden. Damit ist aber unmittelbar klar, daß nicht alle der Linearkombinationen der $|\varphi_n^i\rangle$ analytisch mit den exakten Eigenzuständen von $\mathbf{H}$ zusammenhängen können. Wir müssen vielmehr gerade solche Linearkombinationen finden, aus denen die exakten Eigenzustände bei Einschalten der Störung hervorgehen. Umgekehrt betrachtet suchen wir also diejenigen Linearkombinationen der $|\varphi_n^i\rangle$, die sich aus den Eigenzuständen von $\mathbf{H}$ im Grenzwert $\lambda \to 0$ ergeben. Diese sind gerade solche Zustände, in denen die Störung diagonal ist. Wir werden deshalb gerade die Störung im Entartungsraum diagonalisieren müssen.

Wir wollen jetzt die Eigenzustände von $\mathbf{H}_0$ so wählen, daß sie ein Orthonormalsystem bilden, insbesondere für die Eigenzustände, die zu einem entarteten Eigenwert gehören. Also

$$\left\langle \varphi_m^j \,\middle|\, \varphi_n^i \right\rangle = \delta_{mn}\delta_{ij}\,, \tag{15.37}$$

wobei $i, j \in \{1, \ldots, g_n\}$. (Es können ein oder mehrere Niveaus entartet sein.) Wir erwarten natürlich auch mehrere Eigenzustände $|\psi_n^i\rangle$ (mit $i \in \{1, \ldots, g_n\}$). Das Vorgehen ist dann zunächst analog wie im nicht–entarteten Fall, wir ersetzen aber im Ansatz für die exakten Eigenzustände zu $\mathbf{H}$ die Eigenzustände $|\varphi_n\rangle$ durch eine Linearkombination der $|\varphi_n^i\rangle$,

$$|\varphi_n\rangle \quad \longrightarrow \quad \sum_i \alpha_i \, |\varphi_n\rangle\ . \tag{15.38}$$

Wir werden dann geeignete Koeffizienten α_i finden müssen. Zuerst können wir wie im nicht–entarteten Fall finden

$$\boxed{E_n^{(0)} = \varepsilon_n\,,} \tag{15.39}$$

denn dies folgte gerade aus der Analytizität in λ. Auch für $E_n^{(1)}$ können wir zunächst analog vorgehen. Im nicht–entarteten Fall hatten wir Gleichung (15.24) gefunden. Die entsprechende Gleichung, die man mit der Ersetzung (15.38) jetzt findet, ist

$$\varepsilon_n \sum_k c_{kn}^{(1)} \sum_{i_k=1}^{g_k} \alpha_{i_k} \left|\varphi_k^{i_k}\right\rangle + E_n^{(1)} \sum_{i=1}^{g_n} \alpha_i \left|\varphi_n^i\right\rangle = \sum_k c_{kn}^{(1)} \varepsilon_k \sum_{i_k=1}^{g_k} \alpha_{i_k} \left|\varphi_k^{i_k}\right\rangle + \mathbf{W} \sum_{i=1}^{g_n} \alpha_i \left|\varphi_n^i\right\rangle \tag{15.40}$$

Durch Projektion mittels $\langle\varphi_n^j|$ findet man (man beachte, daß hier wie im nicht–entarteten Fall die Terme mit $c_{kn}^{(1)}$ herausfallen)

$$\boxed{\sum_i \alpha_i \left\langle \varphi_n^j \,\middle|\, \mathbf{W}\varphi_n^i \right\rangle = E_n^{(1)} \alpha_j\,.} \tag{15.41}$$

Diese Projektion ist für jedes $j \in \{1, \ldots, g_n\}$ möglich, so daß (15.41) ein System von g_n Gleichungen ist. Dieses Gleichungssystem stellt ein endlich–dimensionales (nämlich g_n-dimensionales) Eigenwertproblem für die Energieverschiebungen $E_n^{(1)}$ in 1. Ordnung dar. Die linke Seite des Gleichungssystems ist durch die Koeffizientenmatrix $W_{ji} = \langle \varphi_n^j \,|\, \mathbf{W} \varphi_n^i \rangle$ gegeben, deren Einträge die Matrixelemente der Störung $\mathbf{W}$ im Entartungsraum sind. Die Lösungen (also die Eigenwerte $E_n^{(1)}$ und Eigenvektoren $\vec{\alpha} = (\alpha_1, \ldots, \alpha_{g_n})$) findet man also durch diagonalisieren der Koeffizientenmatrix. Dies hatten wir oben bereits vorausgesehen: Um die Energieverschiebung in 1. Ordnung Störungstheorie mit Entartung zu finden, muß man *die Störung im Entartungsraum diagonalisieren*.

Die Sache ist einfacher zu durchschauen für ein einfaches Beispiel: Bei 2-facher Entartung erhalten wir aus (15.41) wieder mit der Notation $W_{ji} = \langle \varphi_n^j \,|\, \mathbf{W} \varphi_n^i \rangle$

$$W_{11}\alpha_1 + W_{12}\alpha_2 = E_n^{(1)}\alpha_1 \tag{15.42}$$
$$W_{21}\alpha_1 + W_{22}\alpha_2 = E_n^{(1)}\alpha_2 \,, \tag{15.43}$$

woraus sich zwei (i. a. verschiedene) Eigenwerte $E_n^{(1)}$ ergeben.

Die Parameter α_i können allgemein so normiert werden, daß

$$\sum_i |\alpha_i|^2 = 1 \tag{15.44}$$

Wir können dann auch die Eigenzustände von $\mathbf{H}$ in 0. Ordnung bestimmen. Statt der c_{kn}, die wir ohne Entartung hatten, finden wir jetzt

$$c_{kn}^{i\,(0)} = \delta_{kn}\alpha_i \,, \tag{15.45}$$

wobei $i \in \{1, \ldots, g_n\}$, wobei wir in der Entwicklung der exakten Eigenzustände von $\mathbf{H}$ nach denen von $\mathbf{H}_0$ jetzt natürlich auch alle entarteten Zustände berücksichtigen müssen:

$$|\psi_n\rangle = \sum_k \sum_{i_k}^{g_k} c_{kn}^{i_k} \left|\varphi_k^{i_k}\right\rangle \,. \tag{15.46}$$

Man kann auch bei Entartung höhere Ordnungen in der Störung bestimmen, wir wollen es aber hier mit der 1. Ordnung bewenden lassen.

15.3 Beispiele

Für Beispiele siehe die Übungen.

Ohne Entartung:
P 24: endliche Kernausdehnung und atomare Energieniveaus

P 30: anharmonischer Oszillator
P 37: Potentialtopf mit Störung. Beimischung anderer Zustände in 1. Ordnung

Mit Entartung:
P 29: Zeeman-Effekt für Teilchen ohne Spin. Hier wird die Entartung durch die Störung vollständig aufgehoben, und die Störung ist bereits diagonal im Entartungsraum in der betrachteten Basis der ψ_{nlm}.
H 32: Alkali–Atome. Störung wieder bereits diagonal im Entartungsraum
H 35: Linearer Stark-Effekt. Entartung wird teilweise aufgehoben

Kapitel 16

Kopplung von Drehimpulsen

16.1 Die Spin-Bahn-Kopplung

Aus der bereits erwähnten Dirac-Gleichung für ein Spin $\frac{1}{2}$ Teilchen im elektromagnetischen Potential $V(r) = e\phi(r)$ folgt in niedrigster relativistischer Näherung ein Zustatzterm, die Spin-Bahn-Kopplung:

$$\mathbf{H}_{LS} = \frac{1}{2m_0^2c^2}\vec{\mathbf{L}}.\vec{\mathbf{S}}\frac{1}{r}\partial_r V(r) \tag{16.1}$$

wobei das Produkt ein direktes Skalarprodukt ist (s. 4.3)

$$\begin{aligned} \vec{\mathbf{L}}.\vec{\mathbf{S}} &= \sum_k \mathbf{L}_k \otimes \mathbf{S}_k \\ \vec{\mathbf{L}}.\vec{\mathbf{S}} f(r,\vartheta,\varphi)\left|\chi\right\rangle &= \sum_k \Big(\mathbf{L}_k f(r,\vartheta,\varphi)\Big)\Big(\mathbf{S}_k\left|\chi\right\rangle\Big) \end{aligned} \tag{16.2}$$

Diese Wechselwirkung lässt sich verstehen:

Elektron sieht elektrisches Feld $\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi = -(\vec{x}/r)\partial_r\phi$. Im Ruhesytem des Elektrons erzeugt dies ein Magnetfeld $\vec{B} = -\frac{1}{m_0 c}[\vec{p}\times\vec{E}]$. Dies wirkt mit dem Spin:

$$-\frac{e}{m_0c}\vec{B}.\vec{\mathbf{S}} = -\frac{e}{m_0c}\frac{1}{m_0c}[\vec{p}\times\vec{x}].\vec{\mathbf{S}}\frac{1}{r}\partial_r\phi = \frac{1}{m_0^2c^2}\vec{\mathbf{L}}.\vec{\mathbf{S}}\frac{1}{r}\partial_r V \tag{16.3}$$

nach Ersetzung durch Operatoren. Bis auf Faktor 2 obiges Resultat. Fehlt Thomas-Präzession, da kein Inertialsystem. Gleichung nichtrelativistisch nicht exakt lösbar, Störungstheorie.

Der Faktor $\vec{\mathbf{L}}.\vec{\mathbf{S}}$ lässt sich am einfachsten im Rahmen des Gesamtdrehimpulses behandeln.

16.2 Der Gesamtdrehimpuls

Da die $\mathbf{S}_k$ und $\mathbf{L}_k$ in verschiedenen Räumen operieren, kommutieren sie. Da die $\mathbf{S}_k$ die Vertauschungsrelationen des Drehimpulses erfüllen, erfüllen auch die Komponenetn des Gesamtdrehimpulses:

$$\vec{\mathbf{J}} = \vec{\mathbf{L}} \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \vec{\mathbf{S}} = \vec{\mathbf{L}} + \vec{\mathbf{S}} \tag{16.4}$$

wie wir kurz schreiben, die Vertauschungsrelationen des Drehimpulses. D.h. Eigenwerte von $\vec{\mathbf{J}}^{\,2}$ sind $j(j+1)\hbar^2$, die Eigenwerte von $\mathbf{J}_3$, $j_3\hbar$ sind ganze oder halbe Vielfache von $\hbar$ mit

$$j_3 = -j, -j+1, \ldots j-1, j \tag{16.5}$$

Seien $|\phi_l^m\rangle$ Eigenfunktionen des Bahndrehimpulses, d.h. in der Ortsdarstellung Kugelfunktionen, die Spinoren $|\chi_s\rangle$, $s = \pm\frac{1}{2}$ Eigenfunktionen zum Spin $\frac{1}{2}$.

•Man zeigt leicht:

$$\left|\psi_{l+1/2}^{l+1/2}\right\rangle = \left|\phi_l^l\right\rangle \left|\chi_{1/2}\right\rangle \tag{16.6}$$

ist Eigenzustand zum Gesamtdrehimpuls „$j = l + \frac{1}{2}$" mit höchstem j_3, d.h.

$$\begin{aligned} \vec{\mathbf{J}}^{\,2}\left|\psi_{l+1/2}^{l+1/2}\right\rangle &= j(j+1)\hbar^2\left|\psi_{l+1/2}^{l+1/2}\right\rangle, \qquad j = l + \tfrac{1}{2} \\ \mathbf{J}_3\left|\psi_{l+1/2}^{l+1/2}\right\rangle &= j\hbar\left|\psi_{l+1/2}^{l+1/2}\right\rangle \end{aligned} \tag{16.7}$$

Zum Beweis ($\hat{\mathbf{J}} = \mathbf{J}/\hbar$ etc.):

1)$(\hat{\mathbf{L}}_3 + \hat{\mathbf{S}}_3)\,|\phi_l^m\rangle\,|\chi_s\rangle = m\,|\phi_l^m\rangle\left|\chi_{1/2}\right\rangle + |\phi_l^m\rangle\, s\left|\chi_{1/2}\right\rangle = (m+s)\,|\phi_l^m\rangle\,|\chi_s\rangle$
d.h. insbesondere obige Gleichung für $\mathbf{J}_3$.

2)Nach 12.17 gilt:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{J}}_\pm\left|\psi_j^{j_3}\right\rangle &= \sqrt{j(j+1) - j_3(j_3 \pm 1)}\left|\psi_j^{j_3\pm 1}\right\rangle \\ \hat{\vec{\mathbf{J}}}^{\,2} &= \hat{\mathbf{J}}_-\hat{\mathbf{J}}_+ + \hat{\mathbf{J}}_3(\hat{\mathbf{J}}_3 + \mathbf{1}) \end{aligned} \tag{16.8}$$

$$\hat{\mathbf{J}}_+\left|\psi_{l+1/2}^{l+1/2}\right\rangle = (\hat{\mathbf{L}}_+\left|\phi_l^l\right\rangle)\left|\chi_{1/2}\right\rangle + \left|\phi_l^l\right\rangle \hat{\mathbf{S}}_+\left|\chi_{1/2}\right\rangle = 0 \tag{16.9}$$

und

$$\hat{\vec{\mathbf{J}}}^{\,2}\left|\psi_{l+1/2}^{l+1/2}\right\rangle = (l+1/2)(l+3/2)\left|\psi_{l+1/2}^{l+1/2}\right\rangle. \tag{16.10}$$

Die Zustände $\left|\psi_{l+1/2}^{j_3}\right\rangle$,$j_3 < l + 1/2$ erhalten wir durch Anwendung der Absteigeoperatoren $\hat{\mathbf{J}}_- = \hat{\mathbf{L}}_- + \hat{\mathbf{S}}_-$.

Beispiel:

$$
\begin{aligned}
\hat{\mathbf{J}}_- \left|\psi^{l+1/2}_{l+1/2}\right\rangle &= \sqrt{(l+1/2)(l+3/2)-(l+1/2)(l-1/2)}\left|\psi^{l-1/2}_{l+1/2}\right\rangle \\
&= (\hat{\mathbf{L}}_- \left|\phi^l_l\right\rangle)\left|\chi_{1/2}\right\rangle + \left|\phi^l_l\right\rangle \hat{\mathbf{S}}_- \left|\chi_{1/2}\right\rangle \\
&= \sqrt{l(l+1)-l(l-1)}\left|\phi^{l-1}_l\right\rangle\left|\chi_{1/2}\right\rangle \\
&\quad + \left|\phi^l_l\right\rangle \sqrt{1/2\cdot 3/2 - 1/2(-1/2)}\left|\chi_{-1/2}\right\rangle
\end{aligned} \tag{16.11}
$$

daraus

$$
\left|\psi^{l-1/2}_{l+1/2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2l+1}}\Big(\sqrt{2l}\left|\phi^{l-1}_l\right\rangle\left|\chi_{1/2}\right\rangle + \left|\phi^l_l\right\rangle\left|\chi_{-1/2}\right\rangle\Big) \tag{16.12}
$$

Der Zustand $\left|\psi^{l-1/2}_{l-1/2}\right\rangle$ ist der Zustand der auf $\left|\psi^{l-1/2}_{l+1/2}\right\rangle$ senkrecht steht:

$$
\left|\psi^{l-1/2}_{l-1/2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2l+1}}\Big(-\left|\phi^{l-1}_l\right\rangle\left|\chi_{1/2}\right\rangle + \sqrt{2l}\left|\phi^l_l\right\rangle\left|\chi_{-1/2}\right\rangle\Big) \tag{16.13}
$$

Phasenkonvention willkürlich aber standardisiert.

Einen Zustand zum Gesamtdrehimpuls kleiner als $l-\frac{1}{2}$ kann es nicht geben: Wir haben 2 linear unabhängige Spinoren und $(2l+1)$ unabhängige Bahndrehimpulseigenzustände, also insgesamt $2(2l+1)$. Wir haben $2(l+\frac{1}{2})+1$ Zustände zu $j=l+\frac{1}{2}$ und $2(l-\frac{1}{2})+1$ zu $j=l-\frac{1}{2}$. Dies schöpft $2(2l+1)$ aus.

Es gibt also zwei Eigenzustände $\left|\psi^{j_3}_j\right\rangle$ zu $\vec{\mathbf{J}}^{\,2}$ und $\mathbf{J}_3$, einen mit $j=l+\frac{1}{2}$ und einen mit $j=l-\frac{1}{2}$. Dies geben wir im ket an: $\left|l,\frac{1}{2};j,j_3\right\rangle$; 16.12 hat $j=l+\frac{1}{2}$, 16.13 hat $j=l-\frac{1}{2}$. Es gilt:

$$
\begin{aligned}
\vec{\mathbf{J}}^{\,2}\left|l,\tfrac{1}{2};j,j_3\right\rangle &= j(j+1)\hbar^2\left|l,\tfrac{1}{2};j,j_3\right\rangle \\
\vec{\mathbf{L}}^{\,2}\left|l,\tfrac{1}{2};j,j_3\right\rangle &= l(l+1)\hbar^2\left|l,\tfrac{1}{2},j,j_3\right\rangle \\
\vec{\mathbf{S}}^{\,2}\left|l,\tfrac{1}{2};j,j_3\right\rangle &= \frac{3}{4}\hbar^2\left|l,\tfrac{1}{2};j,j_3\right\rangle \\
\mathbf{J}_3\left|l,\tfrac{1}{2};j,j_3\right\rangle &= j_3\hbar\left|l,\tfrac{1}{2};j,j_3\right\rangle
\end{aligned} \tag{16.14}
$$

und wir fassen 16.12 und 16.13 zusammen:

$$
\left|l,\tfrac{1}{2};j,j_3\right\rangle = \sum_{m,s}\langle l,m;\tfrac{1}{2},s;j,j_3\rangle\left|\phi^m_l\right\rangle\left|\chi_s\right\rangle \tag{16.15}
$$

wobei $j=l\pm\frac{1}{2}$ und die Werte für $j_3<j$ durch weitere Anwendung der Absteigeoperatoren auf 16.12 bzw. 16.13 erhalten werden.

Die Entwicklungskoeffizienten $\langle l, m; \frac{1}{2}, s; j, j_3\rangle$ sind die Clebsch-Gordan Koeffizienten. Die Summe ist tatsächlich eine einfache Summe, da

$$\langle l, m; \tfrac{1}{2}, s; j, j_3\rangle \neq 0 \quad \textbf{nur für} \quad m + s = j_3 \tag{16.16}$$

Für die Clebsch-Gordan Koeffizienten gibt es analytische Ausdrücke. Sie sind auch tabelliert,z.B. in Mathematica: ClebschGordan[{j1,m1},{j2,m2},{j3,m3}].

16.3 Kopplung beliebiger Drehimpulse

Aus den Drehimpulseigenzuständen: $\left|\psi_{j_1}^{m_1}\right\rangle, \quad \left|\psi_{j_2}^{m_2}\right\rangle$
lassen sich die Gesamtdrehimpulszustände

$$\left|\psi_j^m\right\rangle \quad \text{mit} \quad |j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2 \quad \text{und} \quad m = m_1 + m_2 \tag{16.17}$$

konstruieren. Die Entwicklungskoeffizienten sind die Clebsch-Gordon Koeffizienten.

$$|j_1, j_2; j_3, m_3\rangle = \sum_{m_1, m_2} \langle j_1, m_1; j_2, m_2; j_3, m_3\rangle \left|\psi_{j_1}^{m_1}\right\rangle \left|\psi_{j_2}^{m_2}\right\rangle \tag{16.18}$$

Sie sind Wurzeln rationaler Zahlen.

Kapitel 17

Das H-Atom mit rel. Kor.

17.1 H-Atom mit Spin-Bahn-Kopplung

Wir gehen aus von dem Hamiltonoperator für ein Teilchen im elektrostatischen Potential $V(r) = e\Phi(r)$. Mit Spinbahnkopplung (15.1) ist

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \frac{1}{2m_0^2c^2}\vec{\mathbf{S}}.\vec{\mathbf{L}}\frac{1}{r}\partial_r V(r) \tag{17.1}$$

mit

$$\mathbf{H}_0 = \frac{-\hbar^2}{2m_0}(\partial_r^2 + \frac{2}{r}\partial_r) + \frac{1}{2mr^2}\vec{\mathbf{L}}^{\,2} + V(r) \tag{17.2}$$

Da

$$\vec{\mathbf{S}}.\vec{\mathbf{L}} = \frac{1}{2}(\vec{\mathbf{J}}^{\,2} - \vec{\mathbf{L}}^{\,2} - \vec{\mathbf{S}}^{\,2}) \tag{17.3}$$

gilt:

•17.1 vertauscht mit den Operatoren:

$$\vec{\mathbf{J}}^{\,2},\ \vec{\mathbf{L}}^{\,2},\ \vec{\mathbf{S}}^{\,2},\ \mathbf{J}_3$$

aber nicht mit $\mathbf{L}_3$, $\mathbf{S}_3$. Wir können daher gleichzeitige Eigenzustände zu diesen Operatoren und zu 17.1 finden. Diese bezeichnen wir mit $\left|n, l, \frac{1}{2}, j, j_3\right\rangle$:

$$\begin{aligned}
\mathbf{H}\left|n, l, \tfrac{1}{2}, j, j_3\right\rangle &= E_n\left|n, l, \tfrac{1}{2}, j, j_3\right\rangle \\
\vec{\mathbf{J}}^{\,2}\left|n, l, \tfrac{1}{2}, j, j_3\right\rangle &= j(j+1)\hbar^2\left|n, l, \tfrac{1}{2}, j, j_3\right\rangle \\
\vec{\mathbf{L}}^{\,2}\left|n, l, \tfrac{1}{2}, j, j_3\right\rangle &= l(l+1)\hbar^2\left|n, l, \tfrac{1}{2}, j, j_3\right\rangle \\
\vec{\mathbf{S}}^{\,2}\left|n, l, \tfrac{1}{2}, j, j_3\right\rangle &= \tfrac{1}{2}(\tfrac{1}{2}+1)\hbar^2\left|n, l, \tfrac{1}{2}, j, j_3\right\rangle \\
\mathbf{J}_3\left|n, l, \tfrac{1}{2}, j, j_3\right\rangle &= j_3\hbar\left|n, l, \tfrac{1}{2}, j, j_3\right\rangle
\end{aligned} \tag{17.4}$$

Nichtrelativistisch können wir das Problem auch für das Coulompotential nicht exakt lösen und wir benötigen die Störungstheorie. Wir starten mit Eigenzuständen von 17.2. Diese haben die Form:

$$R_{nl}(r)Y_l^m(\vartheta,\varphi)\chi_s = R_{nl}(r)\left|\phi_l^m\right\rangle\left|\chi_s\right\rangle \tag{17.5}$$

Den Zustand $\left|n,l,\frac{1}{2},j,j_3\right\rangle$ zerlegen wir zunächst in r-Anteil und Drehimpulsanteil:

$$\left|n,l,\tfrac{1}{2},j,j_3\right\rangle = R_{nl}(r)\left|l,\tfrac{1}{2};j,j_3\right\rangle \tag{17.6}$$

mit

$$\begin{aligned}
\mathbf{H}_0 R_{nl}(r)\left|l,\tfrac{1}{2};j,j_3\right\rangle &= E_n^{(0)}R_{nl}(r)\left|l,\tfrac{1}{2};j,j_3\right\rangle \\
\vec{\mathbf{J}}^{\,2}\left|n,l,\tfrac{1}{2};j,j_3\right\rangle &= j(j+1)\hbar^2\left|n,l,\tfrac{1}{2};j,j_3\right\rangle \\
\vec{\mathbf{L}}^{\,2}\left|n,l,\tfrac{1}{2};j,j_3\right\rangle &= l(l+1)\hbar^2\left|n,l,\tfrac{1}{2},j,j_3\right\rangle \\
\vec{\mathbf{S}}^{\,2}\left|n,l,\tfrac{1}{2};j,j_3\right\rangle &= \frac{3}{4}\hbar^2\left|n,l,\tfrac{1}{2};j,j_3\right\rangle \\
\mathbf{J}_3\left|n,l,\tfrac{1}{2};j,j_3\right\rangle &= j_3\hbar\left|n,l,\tfrac{1}{2};j,j_3\right\rangle
\end{aligned} \tag{17.7}$$

(s.16.14). Nach 17.3 gilt:

$$\vec{\mathbf{L}}.\vec{\mathbf{S}}\left|n,l,\tfrac{1}{2};j,j_3\right\rangle = R_{nl}(r)\frac{\hbar^2}{2}\Big(j(j+1)-l(l+1)-\tfrac{1}{2}(\tfrac{1}{2}+1)\Big)\left|l,\tfrac{1}{2};j,j_3\right\rangle \tag{17.8}$$

Damit erhalten wir für die Verschiebung durch die Spin-Bahn-Kopplung in erster Ordnung Störungstheorie:

$$\begin{aligned}
\Delta_{n,j,l} &= \left\langle n,l,\tfrac{1}{2},j,j_3\right|\Big(\frac{1}{2m_0^2c^2}\vec{\mathbf{S}}.\vec{\mathbf{L}}\frac{1}{r}\partial_r V(r)\Big)\left|n,l,\tfrac{1}{2},j,j_3\right\rangle \\
&= \frac{1}{2m_0^2c^2}\frac{\hbar^2}{2}\Big(j(j+1)-l(l+1)-\tfrac{1}{2}(\tfrac{1}{2}+1)\Big)\int_0^\infty\Big(r^2dr\left|R_{nl}(r)\right|^2\frac{1}{r}\partial_r V(r)\Big)
\end{aligned} \tag{17.9}$$

Für das **Coulomb-Potential** ist

$$V(r) = -\frac{Ze_0^2}{r}; \quad \frac{1}{r}\partial_r V(r) = \frac{Ze_0^2}{r^3} \tag{17.10}$$

und damit:

$$\Delta_{n,j,l} = \frac{1}{2m_0^2c^2}\frac{\hbar^2 Ze_0^2}{2}\Big(j(j+1)-l(l+1)-\tfrac{1}{2}(\tfrac{1}{2}+1)\Big)\int_0^\infty\Big(dr\left|R_{nl}(r)\right|^2\frac{1}{r}\Big) \tag{17.11}$$

Das Integral über r lässt sich analytisch ausführen, die Singularität bei $r=0$ spielt keine Rolle, da $|R_{nl}(r)|^2 \propto r^{2l}$ und der Koeffizient für $l=0$ verschwindet.

Die Aufspaltung zwischen den verschiedenen j-Werten zum gleichen l wird durch diese Formel ganz gut beschrieben, doch die Formel ergibt eine viel zu große Aufspaltung zwischen den gleichen Werten von j zu verschiedenem l. D.h. 17.1 ist eine schlechte Beschreibung des Wasserstoffatoms. Grund: Es fehlen noch andere relativistische Korrekturen, z.B. gilt ja:

$$E = m_0 c^2 + \frac{1}{2m_0}\vec{p}^2 - \frac{1}{8m^3c^2}(\vec{p})^4 + \dots \tag{17.12}$$

17.2 Das Spektrum der Dirac-Gleichung

Wir geben hier nur das Resultat für das Spektrum der korrekten relativistischen Gleichung, der Dirac-Gleichung wieder (Dirac 1928):

$$\begin{aligned} E_{n,j} &= m_0 c^2 \left(1 + \frac{Z^2\alpha^2}{\left(n - j - \frac{1}{2} + \sqrt{(j+\frac{1}{2})^2 - Z^2\alpha^2}\right)^2}\right)^{-1/2} \\ &= m_0 c^2 \left(1 - \frac{Z^2\alpha^2}{2n^2} - \frac{Z^4\alpha^4}{n^3(2j+1)} + \frac{3Z^4\alpha^4}{8n^4} + O(\alpha^6)\right) \end{aligned} \tag{17.13}$$

17.3 Hyperfeinstruktur

Die Hyperfeinwechselwirkung ist wegen der Kernspin-Resonanzmethode eine der wichtigsten Anwendungen der Spinphysik.

Der Kern hat auch ein magnetisches Moment, das proportional zum Kernspin $\vec{\mathbf{I}}$ ist:

$$\vec{M} = \frac{Ze_0 g_K}{2m_K c}\vec{I} \tag{17.14}$$

der ein Magnetfeld erzeugt. Ist der Kern am Ursprung, so ist das resultierende Magnetfeld:

$$\vec{B} = \frac{8\pi}{3}\vec{M}\delta(\vec{x}) + \frac{3\,\vec{M}.\vec{x}}{r^5}\vec{x} - \frac{1}{r^3}\vec{M}. \tag{17.15}$$

Der resultierende Hamiltonoperator ist:

$$\mathbf{H}_{\text{hyp}} = \frac{e_0}{m_0 c}\vec{\mathbf{S}}.\vec{\mathbf{B}} \tag{17.16}$$

Für den wichtigen Spezialfall $l = 0$ erhält man in 1. Ordnung Störungstheorie nach Integration über die Raumkoordinaten:

$$\langle \mathbf{H}_{\mathrm{hyp}} \rangle_r = \frac{4 g_K m_0^2 c^2 (Z\alpha)^4}{3 m_K n^3} \langle \vec{\mathbf{S}}.\vec{\mathbf{I}} \rangle \tag{17.17}$$

Führen wir den Gesamtspin

$$\vec{\mathbf{F}} = \vec{\mathbf{S}} + \vec{\mathbf{I}} \tag{17.18}$$

ein, so können wir den Erwartungswert in evidenter Notation wieder ausdrücken:

$$\vec{\mathbf{S}}.\vec{\mathbf{I}} = \tfrac{1}{2}(\vec{\mathbf{F}}^{\,2} - \vec{\mathbf{S}}^{\,2} - \vec{\mathbf{I}}^{\,2}) \tag{17.19}$$

$$\langle \vec{\mathbf{S}}.\vec{\mathbf{I}} \rangle = \frac{\hbar}{2}\Big(F(F+1) - \tfrac{1}{2}(\tfrac{1}{2}+1) - I(I+1) \Big) \tag{17.20}$$

Kapitel 18

H-Atom im Magnetfeld

Da 17.1 nicht mit $\mathbf{L}_3$ kommutiert, müssen wir den Einfluss des Magnetfeldes auch bei Vernachlässigung des diamagnetischen Terms störungstheoretisch behandeln.

18.1 schwaches Magnetfeld

Wir starten also von den Lösungen von 17.1 $R_{nl}(r)\left|l,\frac{1}{2};j,j_3\right\rangle$, und damit wird die Verschiebung durch $\vec{B}=(0,0,B)$ gegeben durch:

$$\Delta_{j,l,\frac{1}{2};j,j_3} = -\frac{eB}{2m_0c}\left\langle l,\tfrac{1}{2};j,j_3\,\middle|\,\left(\mathbf{L}_3+g\mathbf{S}_3\right)\middle|l,\tfrac{1}{2};j,j_3\right\rangle\int_0^\infty r^2dr|R_{nl}(r)|^2 \tag{18.1}$$

Wir setzen ein 16.14 und erhalten:

$$\begin{aligned}\Delta_{j,l,\frac{1}{2};j,j_3} &= -\frac{eB}{2m_0c}\sum_{ms}\sum_{m's'}\langle l,m;\tfrac{1}{2},s;j,j_3\rangle\langle l,m';\tfrac{1}{2},s';j,j_3\rangle\left(m+gs\right)\hbar\,\delta_{m,m'}\delta_{s,s'}\delta_{m,j_3-s}\int_0^\infty r^2dr|R_{nl}(r)|^2\\ &= -\frac{eB}{2m_0c}\int_0^\infty r^2dr|R_{nl}(r)|^2\sum_{s=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}\langle l,m;\tfrac{1}{2},s;j,j_3\rangle^2\left(j_3+(g-1)s\right)\hbar \end{aligned}\tag{18.2}$$

Summation über die CG ergibt:

$$\Delta_{j,l,\frac{1}{2};j,j_3} = \mu_B B\frac{2j+1}{2l+1}j_3\int_0^\infty r^2dr|R_{nl}(r)|^2 \tag{18.3}$$

D.h. für

$1S, \quad j = 1/2, \quad \Delta = \mu_B \; B \; 2j_3$
$2S, \quad j = 1/2, \quad \Delta = \mu_B \; B \; 2j_3$
$2P, \quad j = 1/2, \quad \Delta = \mu_B \; B \; \frac{2}{3} j_3$
$2P, \quad j = 3/2, \quad \Delta = \mu_B \; B \; \frac{4}{3} j_3$

```
In[4]:= Simplify[ClebschGordan[{l, j3 - 1 / 2}, {1 / 2, 1 / 2}, {l + 1 / 2, j3}] ^2 * (j3 + 1 / 2) +
          ClebschGordan[{l, j3 + 1 / 2}, {1 / 2, -1 / 2}, {l + 1 / 2, j3}] ^2 * (j3 - 1 / 2)]
```

Out[4]= $\frac{2\ (-1)^{4\ (j3+l)}\ j3\ (1+l)}{1+2\ l}$

```
In[5]:= Simplify[ClebschGordan[{l, j3 - 1 / 2}, {1 / 2, 1 / 2}, {l - 1 / 2, j3}] ^2 * (j3 + 1 / 2) +
          ClebschGordan[{l, j3 + 1 / 2}, {1 / 2, -1 / 2}, {l - 1 / 2, j3}] ^2 * ( j3 - 1 / 2)]
```

Out[5]= $\frac{2\ j3\ l}{1+2\ l}$

Wird das Magnetfeld so groß, dass die Aufspaltung vergleichbar mit der durch die Spin-Bahnkopplung ist, dann muss man berücksichtigen, dass Zustände mit verschiedenem j aber gleichem l mischen, d.h ($n = 2,\ l = 1,\ j = 1/2$) mit ($n = 2,\ l = 1,\ j = 3/2$), und wir müssen die resultierende Matrix diagonalisieren. Einfacher wird es für große Magnetfelder, wenn die Spinbahnkopplung als eine Störung zum Magnetfeld betrachtet werden kann.

18.2 Starkes Feld

Das Magnetfeld sei stark, aber nicht so stark, dass der diamagnetische Term wichtig wird. Ist der Einfluss des Magnetfeldes stärker als die Spin-Bahnkopplung, ist es besser mit der Basis $|\phi_l^m\rangle\,|\chi_s\rangle$ zu starten und die Spin-Bahnkopplung als schwache Störung zu betrachten. Wir erhalten dann:

$$\begin{aligned}\Delta_{n,l,m,s} &= -\frac{eB}{2m_0c}\left\langle \phi_l^{m'}\chi_s'\,|\,(\mathbf{L}_3 + g\mathbf{S}_3)\phi_l^m\chi_s\right\rangle \int_0^\infty r^2 dr |R_{nl}(r)|^2 \\ &= \mu_B B(m + gs)\int_0^\infty r^2 dr |R_{nl}(r)|^2 \end{aligned} \tag{18.4}$$

Dazu kommen noch Verschiebungen durch die Spin-Bahn-Kopplung, die in dieser Näherung unabhängig vom Magnetfeld sind.

Kapitel 19

Diskrete Symmetrieen

19.1 Raumspiegelung

$$\vec{x} \to \vec{x}_P = -\vec{x} \tag{19.1}$$

Paritätsoperator:

$$\mathbf{P}\psi(\vec{x}) = \psi(\vec{x}_P) = \psi(-\vec{x}) = \psi_P(\vec{x}) \tag{19.2}$$

Es gilt:

$$\mathbf{P}^\dagger = \mathbf{P}; \quad \mathbf{P}^2 = \mathbf{1} \tag{19.3}$$

Die möglichen Eigenwerte von $\mathbf{P}$ sind ± 1. (s. Übungen)

Sei $\mathbf{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}_x^2 + V(r)$

dann

$$[\mathbf{P}, \mathbf{H}_0] = 0 \tag{19.4}$$

Bew:

$$\begin{aligned}
\mathbf{P}\mathbf{H}_0\psi(\vec{x}) &= \Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}_{x_P}^2 + V(r_P)\Big)\psi(\vec{x}_P) \\
&= \Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}_{x}^2 + V(r)\Big)\psi(-\vec{x}) \\
\mathbf{H}_0\mathbf{P}\psi(\vec{x}) &= \Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}_{x}^2 + V(r)\Big)\psi(-\vec{x}) \qquad (19.5)
\end{aligned}$$

•Wir können also gemeinsame Eigenvektoren zu $\mathbf{H}_0$ und $\mathbf{P}$ finden.

Schon getan, denn

$$\mathbf{P}Y_l^m(\vartheta, \varphi) = Y_l^m(\pi - \vartheta, \pi + \varphi) = (-1)^l\, Y_l^m(\vartheta, \varphi) \tag{19.6}$$

•Satz: Sei $\mathbf{P}\ |\psi_P\rangle = P\ |\psi_P\rangle$, $\quad \mathbf{P}\ |\phi_P\rangle = P\ |\phi_P\rangle$ und $\mathbf{PWP} = -\mathbf{W}$, $P^2 = 1$. Dann: $\langle\phi_P\,|\,W\psi_P\rangle = 0$.

Bew.

$$\langle\phi_P\,|\,\mathbf{W}\psi_P\rangle = \left\langle\phi_P\,\middle|\,\mathbf{P}^\dagger\mathbf{PWP}^+\mathbf{P}\psi_P\right\rangle = \left\langle\mathbf{P}\phi_P\,\middle|\,\mathbf{PWP}^+\mathbf{P}\psi_P\right\rangle = -P^2\,\langle\phi_P\,|\,\mathbf{W}\psi_P\rangle \tag{19.7}$$

Beispiel: $\mathbf{W} = \mathbf{Q}_i$, Komponente des Ortsoperators.

$\mathbf{P}\mathbf{Q}_i\mathbf{P}^\dagger = -\mathbf{Q}_i$ denn

$$\begin{aligned} \mathbf{P}(\mathbf{Q}_i\psi(\vec{x})) &= \mathbf{P}(x_i\psi(\vec{x})) = -x_i\psi(-\vec{x}) \\ \mathbf{Q}_i(\mathbf{P}\psi(\vec{x})) &= x_i\psi_P(\vec{x}) = x_i\psi(-\vec{x}) \end{aligned} \tag{19.8}$$

Mit obigem Satz: $\langle\phi_P\,|\,\mathbf{Q}_i\psi_P\rangle = 0$

Konsequenz: Falls alle Wechselwirkungen mit dem Paritätsoperator kommutieren, gibt es kein permanentes elektrisches Dipolmoment eines Zustands fester Parität, da Dipoloperator $e\vec{\mathbf{Q}}$.

Dipolmoment des Elektrons: $p_e = (0.18 \pm 0.16)10^{-26}e_0\mathrm{cm}$.

19.2 Zeitspiegelung

$t \to -t$

ist $\mathbf{T}\psi(\vec{x},t) = \psi(\vec{x},-t)$ sinnvoll ?

Nein, denn dann Schrödingergleichung nicht invariant unter Zeitumkehr.

Denn $i\hbar\partial_t$ dreht bei Zeitspiegelung sein Vorzeichen um, aber nicht $\mathbf{H}$ (enthält gar kein t).

Lösung:

$$\mathbf{T}\psi(\vec{x},t) = (\psi(\vec{x},-t))^* \tag{19.9}$$

Antiunitäre Transformation:

$$\langle\mathbf{T}\phi\,|\,\mathbf{T}\psi\rangle = \langle\psi\,|\,\phi\rangle = \langle\phi\,|\,\psi\rangle^* \tag{19.10}$$

T erhält **reelle** Skalarprodukte.

19.3 CPT and all that

In der QFT gibt es noch eine dritte wichtige diskrete (antiunitäre) Symmetrie, die **Ladungskonjugation C**, die Teilchen mit Antiteilchen verknüpft.

Es gilt das wichtige **CPT-Theorem**, popularisiert:

In einer relativistischen lokalen Quantenfeldtheorie vertauschen alle Wechselwirkungen mit der Operation **CPT**.

Konsequenz: Massen von Teilchen und Antiteilchen sind exakt gleich. Am empfindlichsten:

$$(m_{K^0} - m_{\bar{K}^0})/m_{K_0} < 10^{-18}. \tag{19.11}$$

Mit dem Satz über Spin und Statistik eine der größten Triumphe der axiomatischen Quantenfeldtheorie.

Kapitel 20

Das H-Atom im elektrischen Feld

.

20.1 Der lineare Stark Effekt

Ein Magnetfeld führt zu Verschiebungen der Niveaus linear in B. Allen Gebildeten war klar: Das kann für das elektrische Feld nicht gelten. Denn es gibt kein permanentes, sondern nur induziertes elektrisches Dipolmoment, d.h. Verschiebung $\sim E^2$. In der Tat erwartet man auch nur einen Effekt in 2. Ordnung Störungstheorie, viel zu klein für damalige Messgenauigkeit. Stark hat es trotzdem versucht, und einen linearen Effekt gefunden (J.H.D Jensen: ,,Nobelpreis für Dummheit").

Sei $\vec{E} = (0, 0, E)$, d.h. $\phi(\vec{x}) = -E\ x_3$.

Wir machen 1. Ordnung Störungstheorie mit diesem Störpotential:

$$W_E = -eE\ x_3 = -eEr\cos\vartheta \tag{20.1}$$

Die Energieverschiebung ist in 1. Ordnung Störungstheorie gegeben durch die Matrix:

$$\begin{aligned}\langle n, l', m' \,|\, W_E\ n, l, m\rangle = \\ - eE\int_0^\infty dr\, r^3\ R^*_{nl'}(r)R_{nl}(r)\int d\cos\vartheta\, d\varphi Y_{l'}^{m'\,*}(\vartheta,\varphi)\cos\vartheta Y_l^m(\vartheta,\varphi)\end{aligned} \tag{20.2}$$

Aus der ϕ Integration folgt: Nur $\neq 0$ wenn $m' = m$. Es gilt ferner:

$$Y_l^m(\vartheta,\varphi) = (-1)^l Y_l^m(\pi - \vartheta, \pi + \varphi) \tag{20.3}$$

Daraus folgt:

$$\int d\cos\vartheta\, d\varphi Y_l^{m*}(\vartheta,\varphi)\cos\vartheta Y_l^m(\vartheta,\varphi) = 0 \tag{20.4}$$

Grundzustand:

$$\langle 1,0,0 \mid W_E\; 1,0,0\rangle = 0 \tag{20.5}$$

d.h. in 1. Ordnung keine Verschiebung, kein linearer Effekt.

1. angeregter Zustand: Auch vieles Null, nur Matrixelemente zwischen $|2,0,0\rangle$ und $|2,1,0\rangle$ sind ungleich 0. D.h. wir müssen nur die folgende Matrix diagonalisieren:

$$\begin{pmatrix} \langle 2,0,0 \mid W_E\; 2,0,0\rangle & \langle 2,0,0 \mid W_E\; 2,1,0\rangle \\ \langle 2,1,0 \mid W_E\; 2,0,0\rangle & \langle 2,1,0 \mid W_E\; 2,1,0\rangle \end{pmatrix} \tag{20.6}$$

$$\langle 2,0,0 \mid W_E\; 2,0,0\rangle = \langle 2,1,0 \mid W_E\; 2,1,0\rangle = 0 \tag{20.7}$$

$$\langle 2,0,0 \mid W_E\; 2,1,0\rangle = -eE\int_0^\infty dr\, r^3\; R_{20}^*(r)R_{21}(r)\int d\cos\vartheta\, d\varphi Y_0^{0*}(\vartheta,\varphi)\cos\vartheta\; Y_1^0(\vartheta,\varphi) \tag{20.8}$$

Einsetzen der Wasserstoffwellenfunktionen ergibt:

$$\langle 2,0,0 \mid W_E\; 2,1,0\rangle = -3e_0 aE \tag{20.9}$$

und damit haben wir die Matrix:

$$\begin{pmatrix} 0 & -3e_0aE \\ -3e_0aE & 0 \end{pmatrix} \tag{20.10}$$

zu diagonalisieren. Die Eigenwerte sind:

$$E_{1,2}^{(1)} = \pm 3e_0 aE \tag{20.11}$$

und die zugehörigen Eigenfunktionen:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|2,0,0\rangle \mp |2,1,0\rangle) \tag{20.12}$$

Die anderen beiden $n=2$ Zustände, $|2,1,\pm 1\rangle$ werden in 1. Ordnung nicht verschoben.

Eigentlich gemogelt, da für große r die Störung $W_E = -eE\, x_3 = -eEr\cos\vartheta$ beliebig groß wird. Für Feinheiten siehe Thirring, S. 186 ,,Leckerbissen beim Stark Effekt für mathematische Feinschmecker".

20.2 Abschätzung der 2. Ordnung für Grundzustand

In 2. Ordnung gilt:

$$E^{(2)} = \sum_{n=2}^{\infty} e_0^2 E^2 \frac{|\langle n,1,0 \mid x_3 \; 1,0,0\rangle|^2}{E_1 - E_n} \tag{20.13}$$

Wir schätzen den Nenner ab durch $E_1 - E_2 = -\frac{3e_0^2}{8an^2}$ und den Zähler durch a^2:

$$E^{(2)} \approx -\frac{8}{3} a^3 E^2 \tag{20.14}$$

Das genaue Resultat in 2. Ordnung: $E^{(2)} = -\frac{9}{4} a^3 E^2$

Kapitel 21

Zeitabhängige Störungstheorie

21.1 Formalismus für erste Ordnung

Sei

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \lambda V(t) \tag{21.1}$$

z.B. $\mathbf{H}_0$ Hamiltonoperator des H-Atoms, $V(t)$ eine Störung durch ein elektromagnetisches Feld, λ „Buchhaltungsparameter".

$$\mathbf{H}_0 \left|\psi_n\right\rangle = E_n \left|\psi_n\right\rangle ; \qquad \left|\psi_n\right\rangle \quad \text{voS.} \tag{21.2}$$

$$i\hbar\partial_t \left|\phi(t)\right\rangle = \mathbf{H} \left|\phi(t)\right\rangle \tag{21.3}$$

$$\left|\phi(t)\right\rangle = \sum_n c_n(t)\ e^{-iE_nt/\hbar} \left|\psi_n\right\rangle \tag{21.4}$$

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t \left|\phi(t)\right\rangle &= \sum_n \Big((i\hbar\partial_t c_n(t)) + c_n(t)E_n\Big) e^{-iE_nt/\hbar} \left|\psi_n\right\rangle \\ &= \sum_n \Big(E_n + \lambda V(t)\Big) c_n(t)\ e^{-iE_nt/\hbar} \left|\psi_n\right\rangle \end{aligned} \tag{21.5}$$

$$\sum_n (i\hbar\partial_t c_n(t)) e^{-iE_nt/\hbar} \left|\psi_n\right\rangle = \sum_n \lambda V(t) c_n(t)\ e^{-iE_nt/\hbar} \left|\psi_n\right\rangle \tag{21.6}$$

Es sei $c_n(0) = \delta_{ni}$, festes i. Für $\lambda = 0$ bleibt das so,
d.h. $c_i(t) = 1 + \lambda c_i^{(1)}(t), \quad c_n(t) = \lambda c_n^{(1)}(t), \quad c_n(0) = 0$ für $n \neq i$.

Damit haben wir:

$$\lambda \sum_{n\neq i} (i\hbar\partial_t c_n^{(1)}(t)) e^{-iE_nt/\hbar} \left|\psi_n\right\rangle = \lambda V(t)\ 1\ e^{-iE_it/\hbar} \left|\psi_i\right\rangle + O(\lambda^2) \tag{21.7}$$

Wir multiplizieren mit $\langle\psi_f|$:

$$\lambda\partial_t c_f^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar}\lambda\left\langle\psi_f\,\middle|\,e^{iE_ft/\hbar}V(t)e^{-iE_it/\hbar}\psi_i\right\rangle + O(\lambda^2) \tag{21.8}$$

Koeffizientenvergleich der Terme $\propto \lambda$ und Integration:

$$c_f^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt'\,\left\langle\psi_f\,\middle|\,e^{iE_ft'/\hbar}V(t')e^{-iE_it'/\hbar}\psi_i\right\rangle \tag{21.9}$$

$$\tilde{V}(\omega) = \int dt\,V(t)e^{i\omega t};\quad V(t) = \int\frac{d\omega}{2\pi}\tilde{V}(\omega)e^{-i\omega t} \tag{21.10}$$

Es sei nun $V(t) = \tilde{V}(\omega)e^{-i\omega t} + \tilde{V}(\omega)^*e^{+i\omega t}$. Zunächst nur 1. Term:

$$c_f^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt'\left\langle\psi_f\,\middle|\,e^{iE_ft'/\hbar}\tilde{V}(\omega)e^{-iE_it'/\hbar}e^{-i\omega t}\psi_i\right\rangle \tag{21.11}$$

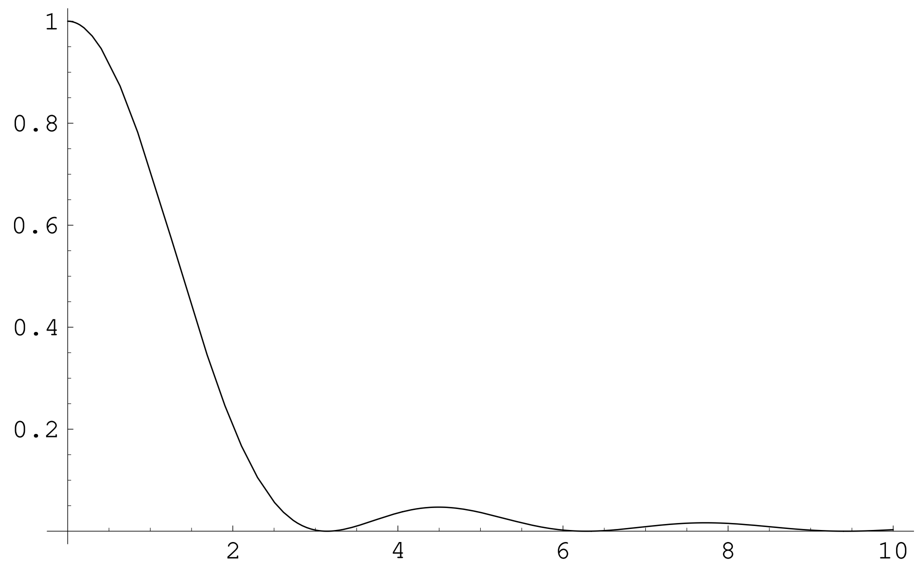
Damit erhalten wir die Wahrscheinlichkeit $P_{fi}(t)$, dass der Zustand $|\psi_i\rangle$ zur Zeit t nach $|\psi_f\rangle$ übergegangen ist:

$$\begin{aligned} P_{fi}(t) = |c_f^{(1)}(t)|^2 &= \frac{1}{\hbar^2}\Big|\int_0^t dt'\left\langle\psi_f\,\middle|\,e^{iE_ft'/\hbar}\tilde{V}(\omega)e^{-iE_it'/\hbar}e^{-i\omega t}\psi_i\right\rangle\Big|^2 \\ &= \frac{1}{\hbar^2}\left|\frac{\exp[i((E_f-E_i)/\hbar-\omega)t]-1}{(E_f-E_i)/\hbar-\omega}\right|^2\left|\left\langle\psi_f\,\middle|\,\tilde{V}(\omega)\psi_i\right\rangle\right|^2 \end{aligned} \tag{21.12}$$

Einschub: Diskussion von: $\left|\frac{\exp[i((E_f-E_i)/\hbar-\omega)t]-1}{(E_f-E_i)/\hbar-\omega}\right|^2$

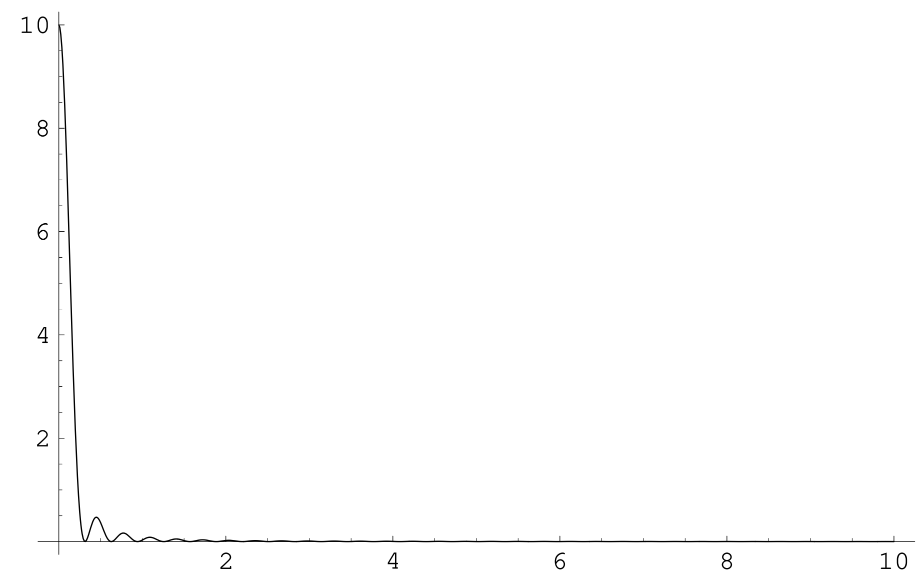
```
In[10]:= pp[t_] := Plot[Sin[x*t]^2/x^2/t, {x, 0, 10}, PlotRange → All]

In[11]:= pp[1]
```




```
Out[11]= - Graphics -

In[12]:= pp[10]
```




```
Out[12]= - Graphics -
```

$$\Delta_t(\alpha) = \Big|\frac{\exp[i2\alpha t]-1}{2\alpha}\Big|^2/t = \Big|\frac{\sin(\alpha t)}{\alpha}\Big|^2/t \tag{21.13}$$

$$\Delta_t(\alpha)\begin{cases} = t & \text{für } \alpha = 0 \\ \leq 1/\alpha^2 t & \text{für } \alpha \neq 0 \end{cases} \tag{21.14}$$

und es gilt:

$$\lim_{t\to\infty}\int_{-\infty}^{\infty} d\alpha\phi(\alpha)\Delta_t(\alpha) = \pi\phi(0) \tag{21.15}$$

d.h.

$$\Big|\frac{\exp[i((E_f-E_i)/\hbar-\omega)t]-1}{(E_f-E_i)/\hbar-\omega}\Big|^2 \to \pi t\,\delta\Big(\tfrac{1}{2}((E_f-E_i)/\hbar-\omega)\Big) = 2\pi t\,\delta\Big((E_f-E_i)/\hbar-\omega\Big) \tag{21.16}$$

und damit:

$$\begin{aligned} P_{fi}(t) &= t\frac{2\pi}{\hbar^2}\delta\Big((E_f-E_i)/\hbar-\omega\Big)|\left\langle\psi_f\,\middle|\,\tilde{V}(\omega)\psi_i\right\rangle|^2 \\ &\quad + t\frac{2\pi}{\hbar^2}\delta\Big((E_f-E_i)/\hbar+\omega\Big)|\langle\psi_f\,|\,V(\omega)\psi_i\rangle|^2 \end{aligned} \tag{21.17}$$

Die Wahrscheinlichkeit, dass $|\psi_i\rangle$ nach der Zeit t in den Zustand $|\psi_f\rangle$ übergegangen ist, wächst linear mit der Zeit. Der 2. Term rührt von $V(\omega)^* e^{i\omega t}$ her, der Interferenzterm steigt nicht mit der Zeit an.

Wie groß muss t sein, dass wir „ $t = \infty$" setzen können? Wenn t groß ist gegen $1/\delta\omega$, d.h. 1/Frequenzunschärfe der Störung. Bei einer Kohärenzlänge L ist die Frequenzunschärfe $\delta\omega = c/L$, d.h. bei Kohärenzlänge im Meter-Bereich ist $1/\delta\omega = 10^{-8}$ sec.

21.2 H-Atom in ebener e.m. Welle

Ebene e.m. Welle in Coulomb-Eichung:

$$\begin{aligned} \vec{A}(\vec{x},t) &= a_\lambda \vec{\epsilon}^{(\lambda)} e^{i\vec{k}.\vec{x}-i\omega t} + \Big(a_\lambda \vec{\epsilon}^{(\lambda)} e^{i\vec{k}.\vec{x}-i\omega t}\Big)^* \\ \phi(\vec{x},t) = 0 & \end{aligned} \tag{21.18}$$

$\vec{\epsilon}^{(\lambda)}$ Polarisationsvektor, $\vec{\epsilon}^{(\lambda)}.\vec{k} = 0$

$$\vec{B} = \vec{\nabla}\times\vec{A};\quad \vec{E} = -\frac{1}{c}\partial_t\vec{A} \tag{21.19}$$

$$\vec{E} = \frac{i\omega}{c}\Big(a_\lambda\vec{\epsilon}^{(\lambda)} e^{i\vec{k}.\vec{x}-i\omega t} - a_\lambda^*\vec{\epsilon}^{(\lambda)*} e^{-i\vec{k}.\vec{x}+i\omega t}\Big) \tag{21.20}$$

Hamiltonoperator im e.m. Feld, 14.3. Führender Beitrag wenn $ka_B \ll 1$(a_B: Bohr-Radius):

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{V}; \quad \mathbf{V} = -a_\lambda \frac{e\hbar}{imc} e^{-i\omega t} \vec{\epsilon}^{(\lambda)}.\vec{\nabla} + \text{ herm. adj.} \tag{21.21}$$

entspricht elektrischer Dipolstrahlung.

Übergangswahrscheinlichkeit in H-Atom damit, etwa für Absorption ($n' > n$):

$$P_{n,l,m;n',l',m'}(t) = t\frac{2\pi}{\hbar^2}\delta\Big((E_{n'}-E_n)/\hbar-\omega\Big)\Big|a_\lambda \frac{e\hbar}{imc}\Big|^2 \Big|\int d^3\psi^*_{nlm}\vec{\epsilon}^{(\lambda)}.\vec{\nabla}\psi_{n',l',m'}\Big|^2 \tag{21.22}$$

Daraus folgen leicht alle „Auswahlregeln" für elektrischen Dipol.

Kapitel 22

Mehrteilchenzustände

22.1 Allgemein

Ist der HR für Einteilchenzustände $\mathcal{H}_e$ dann für n gleiche Teilchen:

$$\mathcal{H} = (\mathcal{H}_e \otimes \mathcal{H}_e \otimes \ldots \mathcal{H}_e) = \mathcal{H}_e^{\otimes n} \tag{22.1}$$

Aber nicht der ganze Raum wird ausgeschöpft, sondern für Fermionen nur der antisymmetrische, für Bosonen nur der symmetrische Teilraum (s. 7.1).

Für ein Boson mit Spin 0 ist $\mathcal{H}_e = \mathcal{L}_2(R_3)$
Für ein Fermion mit Spin $\frac{1}{2}$ ist $\mathcal{H}_e = \mathcal{L}_2(R_3) \otimes C_2$.

22.2 2 Fermionen, Verschränkung

Sei $\phi_n(\vec{x})$ ein voS im $\mathcal{L}_2(R_3)$, $\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ voS in C_2. Ein vS in $\left(\mathcal{H}_e^{\otimes 2}\right)_{\text{antisym}}$ ist

$$\phi_n(\vec{x}^{(1)})\phi_{n'}(\vec{x}^{(2)})\chi_s \otimes \chi_{s'} - \phi_{n'}(\vec{x}^{(1)})\phi_n(\vec{x}^{(2)})\chi_{s'} \otimes \chi_s \tag{22.2}$$

kann in Orts- und Spinanteil zerlegt werden:

$$\begin{aligned}
&\phi_n(\vec{x}^{(1)})\phi_{n'}(\vec{x}^{(2)})\chi_s \otimes \chi_{s'} - \phi_{n'}(\vec{x}^{(1)})\phi_n(\vec{x}^{(2)})\chi_{s'} \otimes \chi_s \\
&\quad = \tfrac{1}{2}\Big(\phi_n(\vec{x}^{(1)})\phi_{n'}(\vec{x}^{(2)}) - \phi_{n'}(\vec{x}^{(1)})\phi_n(\vec{x}^{(2)})\Big)\Big(\chi_s \otimes \chi_{s'} + \chi_{s'} \otimes \chi_s\Big) \\
&\qquad + \tfrac{1}{2}\Big(\phi_n(\vec{x}^{(1)})\phi_{n'}(\vec{x}^{(2)}) + \phi_{n'}(\vec{x}^{(1)})\phi_n(\vec{x}^{(2)})\Big(\chi_s \otimes \chi_{s'} - \chi_{s'} \otimes \chi_s\Big)
\end{aligned} \tag{22.3}$$

Der Gesamtspin ist (vgl. 15.2 und 12.2)

$$\vec{\mathbf{S}}^{\,tot} = \vec{\mathbf{S}}^{(1)} + \vec{\mathbf{S}}^{(2)}, \quad \mathbf{S}_k = \frac{hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}_k \tag{22.4}$$

Mit den Methoden von 12.2,15.2 rechnet man leicht nach:

$$\mathbf{S}_3^{tot}\chi_{\frac{1}{2}} \otimes \chi_{+\frac{1}{2}} = 1\hbar\chi_{\frac{1}{2}} \otimes \chi_{\frac{1}{2}}, \quad (\vec{\mathbf{S}}^{\,tot}\Big)^2\chi_{\frac{1}{2}} \otimes \chi_{\frac{1}{2}} = 1 \cdot 2\hbar^2\chi_{\frac{1}{2}} \otimes \chi_{\frac{1}{2}} \tag{22.5}$$

und weiter:

$$\begin{aligned}
\mathbf{S}_3^{tot}\Big(\chi_s \otimes \chi_{s'} - \chi_{s'} \otimes \chi_s\Big) &= (s+s')\hbar\Big(\chi_s \otimes \chi_{s'} - \chi_{s'} \otimes \chi_s\Big) \\
\Big(\vec{\mathbf{S}}^{\,tot}\Big)^2\Big(\chi_s \otimes \chi_{s'} - \chi_{s'} \otimes \chi_s\Big) &= 0 \\
\mathbf{S}_3^{tot}\Big(\chi_s \otimes \chi_{s'} + \chi_{s'} \otimes \chi_s\Big) &= (s+s')\hbar\Big(\chi_s \otimes \chi_{s'} + \chi_{s'} \otimes \chi_s\Big) \\
\Big(\vec{\mathbf{S}}^{\,tot}\Big)^2\Big(\chi_s \otimes \chi_{s'} + \chi_{s'} \otimes \chi_s\Big) &= 1 \cdot 2\hbar^2\Big(\chi_s \otimes \chi_{s'} + \chi_{s'} \otimes \chi_s\Big)
\end{aligned} \tag{22.6}$$

Wir führen anlog Kap. 15 ein:

$$\begin{aligned}
\left|\chi_1^1\right\rangle &= \chi_{\frac{1}{2}} \otimes \chi_{\frac{1}{2}} \\
\left|\chi_1^0\right\rangle &= \sqrt{\tfrac{1}{2}}(\chi_{\frac{1}{2}} \otimes \chi_{-\frac{1}{2}} + \chi_{-\frac{1}{2}} \otimes \chi_{\frac{1}{2}}) \\
\left|\chi_1^{-1}\right\rangle &= \chi_{-\frac{1}{2}} \otimes \chi_{-\frac{1}{2}} \\
\left|\chi_0^0\right\rangle &= \sqrt{\tfrac{1}{2}}(\chi_{\frac{1}{2}} \otimes \chi_{-\frac{1}{2}} - \chi_{-\frac{1}{2}} \otimes_{\frac{1}{2}})
\end{aligned} \tag{22.7}$$

Betrachte nun einen 2-Teichenzustand von gleichen Fermionen, der Gesamtspin 0 hat und bei dem sich ein Teilchen um $+\vec{y}$ und das andere um $-\vec{y}$ herum aufhält. Seien $|\psi_R| = \exp[-((x_1 - y_1)^2 + x_2^2 + x_3^2)]\theta(x_1)$, $|\psi_L| = \exp[-(-x_1 - y_1)^2 + x_2^2 + x_3^2)]\theta(-x_1)$, $y_1 > 0$. Dann wäre eine Realisierung des oben erwähnten Zustandes:

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\mathcal{N}}\Big(\psi_R(x^{(1)})\psi_L(x^{(2)}) + \psi_L(x^{(1)})\psi_R(x^{(2)})\Big)(\chi_{\frac{1}{2}} \otimes \chi_{-\frac{1}{2}} - \chi_{-\frac{1}{2}} \otimes_{\frac{1}{2}}) \tag{22.8}$$

Sei nun $\mathbf{P}_R$ der Projektionsoperator $\theta(x_1)$:

$$\mathbf{P}_R\psi_R = \psi_R, \quad \mathbf{P}_R\psi_L = 0 \tag{22.9}$$

und $\mathbf{P}_{3+}$ der Projektionsoperator $\mathbf{S}_3/\hbar + \frac{1}{2}\mathbf{1}$:

$$\mathbf{P}_{3+}\chi_{+\frac{1}{2}} = \chi_{+\frac{1}{2}}, \quad \mathbf{P}_{3+}\chi_{-\frac{1}{2}} = 0 \tag{22.10}$$

$\mathbf{P}_R\mathbf{P}_{3+}$ beschreibt eine Messung, die nachprüft ob, das Teilchen rechts und der Spin des Teilchens $+\frac{1}{2}\hbar$ ist. Da die Teilchen ununterscheidbar sind, kann natürlich bei einem 2-Teilchenzustand nur $\mathbf{P}_R^{(1)}\mathbf{P}_{3+}^{(1)} + \mathbf{P}_R^{(2)}\mathbf{P}_{3+}^{(2)}$ realisiert werden. Nach der Messung ist der Zustand

$$|\Psi\rangle \to |\Psi'\rangle = \frac{1}{\mathcal{N}}\psi_R(x^{(1)})\psi_L(x^{(2)})\chi_{\frac{1}{2}} \otimes \chi_{-\frac{1}{2}} + \psi_L(x^{(1)})\psi_R(x^{(2)})\chi_{-\frac{1}{2}} \otimes \chi_{\frac{1}{2}} \tag{22.11}$$

Messen wir jetzt an diesem Zustand $\mathbf{P}_L^{(1)}\mathbf{P}_{3+}^{(1)} + \mathbf{P}_L^{(2)}\mathbf{P}_{3+}^{(2)}$ ist das Ergebnis 0, aber messen wir, analog definiert, $\mathbf{P}_L^{(1)}\mathbf{P}_{3-}^{(1)} + \mathbf{P}_L^{(2)}\mathbf{P}_{3-}^{(2)}$ so ist $|\Psi'\rangle$ Eigenzustand und die Messung verläuft mit Sicherheit positiv. D.h. durch die 1. Messung wurde dem linken Teilchen der $\mathbf{S}_3$-Eigenwert $-\frac{1}{2}$ aufgeprägt.

22.3 He-Atom

Hamiltonoperator, Kern fest angenommen, d.h. unendlich schwer, keine Spin-Bahn-Kopplung:

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m_0}\vec{\mathbf{P}}^{(1)\,2} + \frac{1}{2m_0}\vec{\mathbf{P}}^{(2)\,2} - \frac{Ze_0^2}{\mathbf{Q}^{(1)}} - \frac{Ze_0^2}{\mathbf{Q}^{(2)}} + \frac{e_0^2}{|\vec{\mathbf{Q}}^{(1)} - \vec{\mathbf{Q}}^{(2)}|} \tag{22.12}$$

Form:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0^{(1)} + \mathbf{H}_0^{(2)} + \mathbf{H}_{int}^{(1,2)} \tag{22.13}$$

$\mathbf{H}_0$ wasserstoffartig, mit Z=2. Ortsdarstellung:

$$\vec{\mathbf{P}}^{(i)} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}^{(i)}, \qquad \vec{\mathbf{Q}}^{(i)} = \vec{x}^{(i)} \tag{22.14}$$

Klassifikation unter Vernachlässigung von $\mathbf{H}_{int}^{(1,2)}$. Seien $\psi_{n,l,m}(\vec{x})$ wasserstoffartige Eigenfunktionen mit Z=2. Dann $\psi_{n,l,m}(\vec{x}^{(1)})\psi_{n',l',m'}(\vec{x}^{(2)})$ Eigenfunktion zu $\mathbf{H}_0^{(1)} + \mathbf{H}_0^{(2)}$ mit Eigenwert $E_n + E_{n'}$ mit $E_n = -Z^2e_0^2/(2a_Bn^2) = \frac{Z^2}{2n^2}m_0^2c^2\alpha^2, \quad Z = 2.$

Spin und Statistik: Zustand muss die Form 22.3 bekommen.

Grundzustand: $n = n' = 1$. Dann nur möglich:

$$\psi_{1,0,0;1,0,0;0,0} = \tfrac{1}{2}\Big(\psi_{1,0,0}(\vec{x}^{(1)})\psi_{1,0,0}(\vec{x}^{(2)}) + \psi_{1,0,0}(\vec{x}^{(1)})\psi_{1,0,0}(\vec{x}^{(2)})\Big)\left|\chi_0^0\right\rangle \tag{22.15}$$

Immer noch Eigenzustand zu $\mathbf{H}_0^{(1)} + \mathbf{H}_0^{(2)}$ mit Eigenwert $E_1 + E_1$

1. angeregter Zustand: Hier 2 Spin Möglichkeiten:

$$\begin{aligned}
\psi_{1,0,0;2,l,m;0,0} &= \sqrt{\tfrac{1}{2}}\Big(\psi_{1,0,0}(\vec{x}^{(1)})\psi_{2,l,m}(\vec{x}^{(2)}) + \psi_{2,l,m}(\vec{x}^{(1)})\psi_{1,0,0}(\vec{x}^{(2)})\Big)\left|\chi_0^0\right\rangle \\
\psi_{1,0,0;2,l,m;1,s} &= \sqrt{\tfrac{1}{2}}\Big(\psi_{1,0,0}(\vec{x}^{(1)})\psi_{2,l,m}(\vec{x}^{(2)}) - \psi_{2,l,m}(\vec{x}^{(1)})\psi_{1,0,0}(\vec{x}^{(2)})\Big)\left|\chi_1^s\right\rangle
\end{aligned} \tag{22.16}$$

•Störungstheorie, Matrix:

$$\Delta_{n,l,m;n',l',m';n'',l'',m'';n''',l''',m''';S,s} = \left\langle \psi_{n,l,m;n',l',m';S,s} \,\middle|\, \mathbf{H}_{int}^{(1,2)} \psi_{n'',l'',m'';n''',l''',m''';S,s} \right\rangle \tag{22.17}$$

Typischer Term

$$\int d^3x^{(1)} d^3x^{(2)} \frac{\psi^*_{nl0}(\vec{x}^{\,(1)})\psi^*_{1,0,0}(\vec{x}^{\,(2)})\psi_{nl0}(\vec{x}^{\,(1)})\psi_{1,0,0}(\vec{x}^{\,(2)})}{|\vec{x}^{\,(1)} - \vec{x}^{\,(2)}|} \langle \chi_1^s \mid \chi_1^s \rangle \tag{22.18}$$

Nützlich: $[\mathbf{L}_3^{(1)} + \mathbf{L}_3^{(2)}, H_{int}^{(12)}] = 0$.

Grundzustand: 1.Ordnung Störungstheorie: $\Delta E = \frac{5}{8} Z mc^2 \alpha^2 = 2.5\text{Ry} = 34$ eV

Qualitativ einzusehen: Im Ortsraum antisymm. Zustand wird durch die WW am wenigsten angehoben, da er dort, wo WW am größten, bei $\vec{x}^{\,(1)} = \vec{x}^{\,(2)}$ verschwindet. Also Orthohelium, Spin=1, symmetrisch, tiefer als Parahelium, Spin=0, antisymmetrisch.

•Gilt allgemein: Zustand höchster Spinsymmetrie (höchster Spin) liegt am tiefsten. Hund'sche Regel.

•Praktische Berechnung der Grundzustandsenergie: Mit Ritz'schem Variationsprinzip. Eigenfunktionen des Zentralpotentials als Funktion von Z, z.B.

$$R_{10}^{\zeta}(r) = 2\left(\frac{\zeta}{a}\right)^{3/2} \exp[-\frac{\zeta r}{a}] \tag{22.19}$$

Bilde Erwartungswert von 22.12

$$\langle \mathbf{H} \rangle(\zeta) = \int (r^{(1)})^2 dr^{(1)}\, (r^{(2)})^2 dr^{(2)}\, R_{10}^{\zeta}(r^{(1)}) R_{10}^{\zeta}(r^{(2)}) \mathbf{H}\; R_{10}^{\zeta}(r^{(1)}) R_{10}^{\zeta}(r^{(2)}) \tag{22.20}$$

und finde Minimum in ζ bei ζ_{eff}.

$\langle \mathbf{H} \rangle(\zeta_{eff})$ recht gute Approximation für Grundzustandsenergie;

$$\Psi_0^{\zeta_{eff}}(r^{(1)}, r^{(2)}) = R_{10}^{\zeta_{eff}}(r^{(1)}) R_{10}^{\zeta_{eff}}(r^{(2)}) \frac{1}{4\pi} \otimes \left| \chi_0^0 \right\rangle \tag{22.21}$$

ist Näherung für Grundzustandswellenfunktion.

Grundzustand: $\zeta_{eff} = Z - 5/16 = Z - 0.375$

Grundzustandsenergie, experimentell, ohne Wechselwirkung, incl. 1.Ordnung Störungstheorie, mit Ritz'schem Variationsverfahren:

$$E_{exp} = -78.975 \quad E_0 = -108.8 \quad E_{St} = -74.8 \quad E_{Ritz} = -77.48 \quad \text{eV} \tag{22.22}$$

Wahrscheinlichkeitsverteilung der Elektronenladung für He-Atom:

$$\begin{aligned}
\rho(\vec{x}) &= e_0 \left\langle \Psi_0^{\zeta_{eff}} \,\middle|\, \left(\delta(\vec{x}^{\,(1)} - \vec{x}) + \delta(\vec{x}^{\,(2)} - \vec{x})\right) \Psi_0^{\zeta_{eff}} \right\rangle \\
&= \int d^3r^{(1)}\, d^3r^{(2)} \left(\delta(\vec{x}^{\,(1)} - \vec{x}) + \delta(\vec{x}^{\,(2)} - \vec{x})\right) |\Psi_0(r^{(1)}, r^{(2)})|^2 \\
&= 2e_0 * \left(R_{10}^{\zeta_{eff}}(r^{(1)})\right)^2 \frac{1}{4\pi}
\end{aligned} \tag{22.23}$$

Mittlerer Ladungsradius $\sqrt{< r^2 >} = n^2 a/\zeta_{eff}$, hier n=1.

22.3.1 Alkali-Atome

$$\mathbf{H} = \sum_{i=1}^{3} \left(\frac{1}{2m_0} \vec{\mathbf{P}}^{\,(i)\,2} - \frac{Ze_0^2}{\mathbf{Q}^{(i)}} \right) + \sum_{1 \le i < j \le 3} \frac{e_0^2}{|\vec{\mathbf{Q}}^{\,(i)} - \vec{\mathbf{Q}}^{\,(j)}|} \tag{22.24}$$

Grundzustand ohne $\mathbf{H}_{int}$:

$$\left(|1,0,0\rangle \otimes |1,0,0\rangle \otimes \left|\chi_0^0\right\rangle \right) \otimes |2,l.m\rangle \otimes |\chi_s\rangle \tag{22.25}$$

muss antisymmetrisiert werden.

Leuchtelektron im Zustand $|2,l,m\rangle\, |\chi_s\rangle$ sieht effektive Ladungsverteilung: $e_0\delta(\vec{x}) - \rho(\vec{x})$ wobei ρ gegeben durch 22.23, aber ζ_{eff} berechnet ausgehend von $Z = 3$, d.h. hier $\zeta_{eff} = 3 - 6/16$. Daraus Potential:

$$V_{eff}(r) = \frac{-Ze_0^2}{r} + \frac{e_0}{r} Q_{eff}(r); \quad Q_{eff}(r) = \int_0^r 4\pi (r')^2 dr' \rho(r') \tag{22.26}$$

$Q_{eff} \to 0$ für $r \to 0$, $Q_{eff} \to (Z-1)e_0$ für $r \to \infty$. Kein Coulombpotential, daher die l-Entartung bei $n = 2$ aufgehoben. Qualitativ: S-Elektron ($l = 0$) sieht größere Ladung als P-Elektron ($l = 1$), daher S- tiefer als P-Niveau.

Quantitativer: Störungstheorie

$W(r) = \frac{-e_0^2}{r}(Z - 1 - \frac{Q_{eff}(r)}{e_0})$

Am quantitativsten: Numerische Lösung, leicht für kugelsymm. Pot..

P-S-Übergang: rote Lithium-Linie. Analog: Natrium gelb, Kalium blau etc.

22.4 Periodisches System der Elemente

Ionisierungsenergie als Funktion von Z unter **Vernachlässigung** von $\mathbf{H}_{int}$

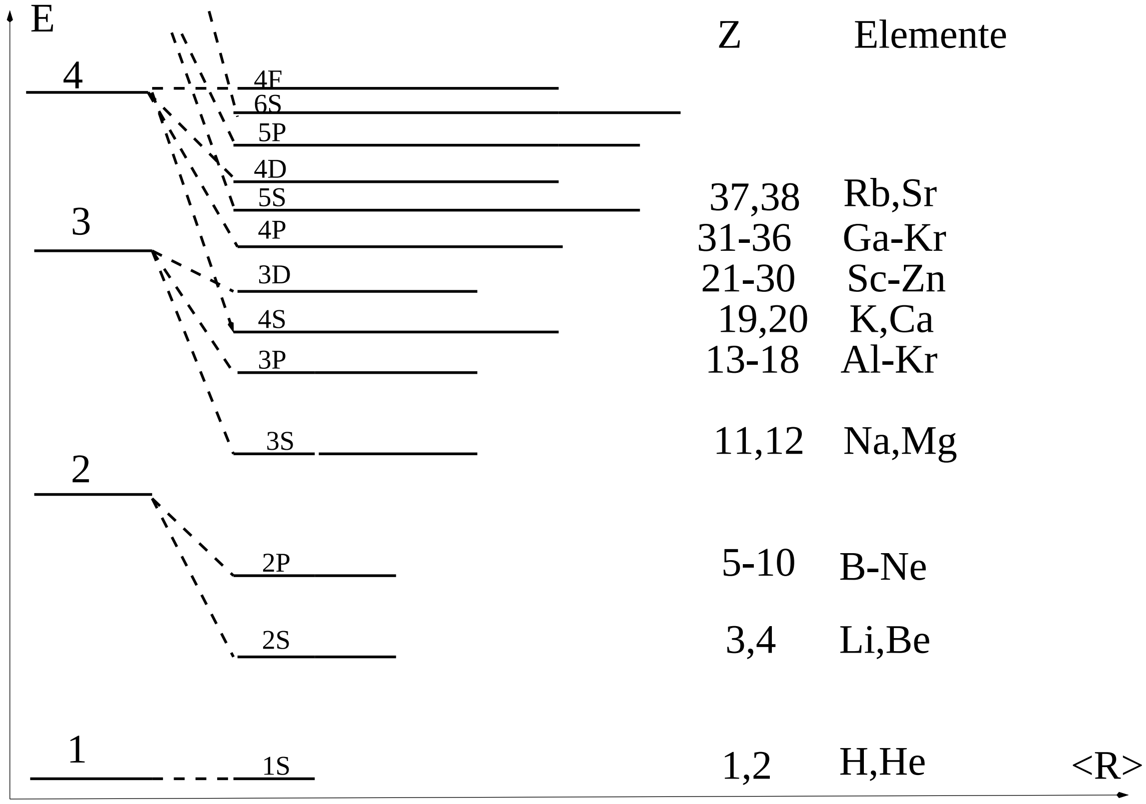


Abbildung 22.1: Schalenstruktur der Elektronenhülle der Elemente, Ionisierungs-Energie und „Atomradius" R sind nicht maß-stäblich.

$Z \leq 2, \quad 1S \quad E_I = \frac{1}{2} m_0 c^2 \alpha^2 \zeta_{eff}^2$
$Z \leq 10 \quad 2S, 2P \quad E_I = \frac{1/8}{m}{}_0 c^2 \alpha^2 \zeta_{eff}^2$
$Z \leq 18 \quad 3S, 3P \quad E_I = \frac{1/18}{m}{}_0 c^2 \alpha^2 \zeta_{eff}^2$
Jetzt ist das $4S$-Niveau tiefer als das $3D$ Niveau, wg. Abschirmung.

Periodisches System semi-quantitativ erklärbar. Ursprung des Pauli-Prinzips.

Atomradien und Ionisierungsenergieen können ausgehend vom leicht aufzustellenden Hamiltonoperator „beliebig genau" berechnet werden. Strenges Theorem für $Z \to \infty$.

Kapitel 23

Streuung

23.1 Exp. Situation und mathemat. Beschreibung

Kollimierter Teilchenstrahl mit
$|\vec{j}_0|$ =Teilchen pro Zeit und Flächeneinheit senkrecht zur Strahlrichtung.
Strahl wird auf Streuzentrum (target) gerichtet.
$|r^2 j_r'(\vartheta, \varphi)|$ die Zahl der Teilchen, die pro Zeit- und Raumwinkeleinheit in Richtung (ϑ, φ) gestreut werden.

Differentieller Wirkungsquerschnitt:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{|r^2 j_r'(\vartheta, \varphi)|}{|\vec{j}_0|} \tag{23.1}$$

In Teilchenphysik: Einheit barn (b): 1 b = 10^{-24} cm^2

Quantenmech. Beschreibung im Ortsraum. Es gelte immer:

$$r = |\vec{x}|; \quad \vec{n} = \vec{x}/r = (\sin\vartheta\cos\varphi, \sin\vartheta\sin\varphi, \cos\vartheta) \tag{23.2}$$

Hamiltonoperator:

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\vec{\nabla}^{\,2} + V(\vec{x}), \qquad V(\vec{x}) \to 0 \text{ für } r \to \infty \text{ genügend schnell.} \tag{23.3}$$

Einfachheit halber angenommen:
$V(\vec{x}) = 0$ für $r \geq R_0$.

Streulösung:

ψ_s ist Eigendistribution zu

$$\mathbf{H}\psi_s = E\psi_s \tag{23.4}$$

mit folgendem Verhalten für große r:

$$\psi_s(\vec{x}) \to e^{i\vec{k}.\vec{x}} + f(\vartheta,\varphi)\frac{e^{ikr}}{r} \tag{23.5}$$

d.h. einlaufende ebene Welle + auslaufende Kugelwelle (Grenzwerte von Wellenpaketen).

Strom allgemein:

$$\vec{j} = \psi_s(\vec{x})^* \frac{\hbar}{im_0} \vec{\nabla}\, \psi_s(\vec{x}) \tag{23.6}$$

Einfallender Strom:

$$\vec{j}_0 = e^{-i\vec{k}.\vec{x}} \frac{\hbar}{im_0} \vec{\nabla}\, e^{i\vec{k}.\vec{x}} = \frac{\hbar k}{m_0} \tag{23.7}$$

Gestreuter Strom in $\vec{n}$ Richtung ($\vec{n} = \vec{x}/|\vec{x}|, \quad \vec{n}.\vec{\nabla} = \partial_r$):

$$j_r = \left(f(\vartheta,\varphi)\frac{e^{ikr}}{r}\right)^* \frac{\hbar}{im_0} \vec{n}.\vec{\nabla} f(\vartheta,\varphi)\frac{e^{ikr}}{r} = \frac{1}{r^2}\frac{\hbar k}{m_0}|f(\vartheta,\varphi)|^2 + O\left(\frac{1}{r^3}\right) \tag{23.8}$$

d.h.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\vartheta,\varphi)|^2 \tag{23.9}$$

Ziel: Finde ψ_s, insbesondere $f(\vartheta,\varphi)$.

23.2 Gleichung für Streulösung

23.2.1 Greensfunktion der Helmholtzgleichung

•Satz: Ist $\mathbf{D}$ ein linearer Differentialoperator und gilt:

$$\mathbf{D}G(\vec{x}) = -4\pi\delta(\vec{x}) \quad \mathbf{D}\psi_0(\vec{x}) = 0 \tag{23.10}$$

dann heißt $G(\vec{x})$ Greensfunktion von $\mathbf{D}$ und es gilt:

$$\psi(\vec{x}) = \psi_0(\vec{x}) - \frac{1}{4\pi}\int d^3x' G(\vec{x}-\vec{x}')\rho(\vec{x}') \tag{23.11}$$

Lösung von

$$\mathbf{D}\psi(\vec{x}) = \rho(\vec{x}) \tag{23.12}$$

.

Bew.

$$\begin{aligned} \mathbf{D}\psi(\vec{x}) &= \mathbf{D}\psi_0(\vec{x}) - \frac{1}{4\pi}\int d^3x'\mathbf{D}G(\vec{x}-\vec{x}')\rho(\vec{x}') \\ &= 0 + \int d^3x'\delta(\vec{x}-\vec{x}')\rho(\vec{x}') = \rho(\vec{x}) \end{aligned} \tag{23.13}$$

Die Gleichung

$$(\vec{\nabla}^{\,2} + k^2)\psi(\vec{x}) = \rho(\vec{x}) \tag{23.14}$$

heißt Helmholtzgleichung. Die Lösung $G(\vec{x})$ mit

$$(\vec{\nabla}^{\,2} + k^2)G(\vec{x}) = -4\pi\delta(\vec{x}) \tag{23.15}$$

ist die Greensfunktion der H.Gl.

Satz:

$$(\vec{\nabla}^{\,2} + k^2)\frac{e^{ikr}}{r} = -4\pi\delta(\vec{x}) \tag{23.16}$$

d.h. $\frac{e^{ikr}}{r}$ ist Greensfunktion von 23.14.

“Beweis” mit Rechentips:

$$\begin{aligned} \vec{\nabla}r &= \frac{\vec{x}}{r} \\ \vec{\nabla}f(r) &= f'(r)\vec{\nabla}r = f'(r)\frac{\vec{x}}{r} \\ \vec{\nabla}\frac{1}{r^n} &= -n\frac{1}{r^{n+1}}\frac{\vec{x}}{r} \\ \vec{\nabla}e^{ikr} &= ike^{ikr}\frac{\vec{x}}{r} \\ \vec{\nabla}^{\,2}\frac{1}{r} &= -\vec{\nabla}.\frac{1}{r^2}\frac{\vec{x}}{r} \\ &= 3\frac{1}{r^4}\frac{\vec{x}}{r}.\vec{x} - \frac{1}{r^3}\vec{\nabla}.\vec{x} \\ &= 0 \text{ für } r \neq 0 \end{aligned} \tag{23.17}$$

$$\begin{aligned} \int_0^r r'^2 dr' d\Omega \left(\vec{\nabla}'\right)^2 \frac{1}{r'} &= \int d\Omega\, r^2 \vec{n}.\vec{\nabla}\frac{1}{r} \quad \text{Gauß} \\ &= \int d\Omega\, r^2 \frac{\vec{x}}{r} . \frac{-\vec{x}}{r^3} = -4\pi \end{aligned} \tag{23.18}$$

$$\begin{aligned} \vec{\nabla}^2\frac{e^{ikr}}{r} &= e^{ikr}\vec{\nabla}^2\frac{1}{r} + 2\vec{\nabla}\,e^{ikr}\vec{\nabla}\,\frac{1}{r} + \frac{1}{r}\vec{\nabla}^2\,e^{ikr} \\ &= -4\pi\delta(\vec{x})e^{ikr} + 2(ike^{ikr}\frac{\vec{x}}{r} . \frac{-\vec{x}}{r^3}) + \frac{1}{r}e^{ikr}(-k^2 + 2ik\frac{1}{r}) \\ &= -4\pi\delta(\vec{x}) - k^2\frac{e^{ikr}}{r} \end{aligned} \tag{23.19}$$

Anm: Auch $\frac{e^{-ikr}}{r}$ ist Greensfunktion.

23.2.2 Lippmann-Schwinger-Gleichung

Wir bringen nun die stationäre Schrödingergl. formal auf die Helmholtzgleichung.

$$\mathbf{H}\psi = \Big(-\frac{\hbar^2}{2m_0}\vec{\nabla}^{\,2} + V(r)\Big)\psi = E\psi \tag{23.20}$$

Definiere:

$$k^2 = 2m_0E/\hbar^2; \quad \hat{V}(r) = 2m_0V(r)/\hbar^2 \tag{23.21}$$

Dann können wir 23.20 umschreiben:

$$\Big(\vec{\nabla}^{\,2} + k^2\Big)\psi = \hat{V}(r)\psi \tag{23.22}$$

Mit Hilfe der Greensfunktion G zeigt man:

•Satz: Die Lösung der Integralgleichung

$$\psi_s(\vec{x}) = e^{i\vec{k}.\vec{x}} - \frac{1}{4\pi}\int d^3x'\,\frac{e^{ik|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|}\,\hat{V}(\vec{x}')\psi_s(\vec{x}') \tag{23.23}$$

ist Streulösung von 23.20.

23.20 heißt Lippmann-Schwinger-Gleichung.

Bew. klar nach oben, (noch einmal explizit)

$$\begin{aligned}
\Big(\vec{\nabla}^{\,2} + k^2\Big)\psi_s &= \Big(-k^2 + k^2\Big)e^{i\vec{k}.\vec{x}} - \frac{1}{4\pi}\int d^3x'\,\Big(\vec{\nabla}^{\,2} + k^2\Big)\frac{e^{ik|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|}\,\hat{V}(\vec{x}')\psi_s(\vec{x}') \\
&= 0 + \int d^3x'\,\delta(\vec{x}-\vec{x}')\,\hat{V}(\vec{x}')\psi(\vec{x}') \\
&= \hat{V}(\vec{x})\psi_s(\vec{x})
\end{aligned} \tag{23.24}$$

d.h. Lösung.

Streulösung: Für $r \gg R_0$ gilt $r \gg r'$ und wir können entwickeln:

$$|\vec{x}-\vec{x}'| = r - \frac{\vec{x}\vec{x}'}{r} + O\left(\frac{1}{r}\right) \tag{23.25}$$

und damit:

$$\frac{e^{ik|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|} = \frac{1}{r\left(1 + O\left(\frac{1}{r}\right)\right)}\exp\left(ikr - ik\frac{\vec{x}.\vec{x}'}{r} + O\left(\frac{1}{r}\right)\right) \tag{23.26}$$

Für $r \to \infty$ wird $O\left(\frac{1}{r}\right)$ beliebig klein und wir haben damit für die Lösg. von 23.23:

$$\psi_s \to e^{i\vec{k}.\vec{x}} - \frac{e^{ikr}}{4\pi r} \int d^3x' \, e^{-ik\vec{n}.\vec{x}'} \, \hat{V}(\vec{x}')\psi_s(\vec{x}') \tag{23.27}$$

d.h.

$$f(\vartheta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3x' \, e^{-ik\vec{n}.\vec{x}'} \, \hat{V}(\vec{x}')\psi_s(\vec{x}') \tag{23.28}$$

Wir haben noch keine Lösung, aber wenn Lösung, dann die richtige Form 23.5.

23.3 Neumannsche Reihe, Born-Rayleigh'sche Näherung

Wir können 23.20 wieder störungstheoretisch behandeln. Führe Buchhaltungsparameter λ ein:

$$\psi_s(\vec{x}) = e^{i\vec{k}.\vec{x}} - \frac{\lambda}{4\pi} \int d^3x' \, \frac{e^{ik|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|} \, \hat{V}(\vec{x}')\psi_s(\vec{x}') \tag{23.29}$$

Ansatz

$$\psi_s = \psi_0 + \sum_{i=1} \lambda^i \psi_i \tag{23.30}$$

Eingesetzt in 23.29:

$$\psi_0(\vec{x}) + \lambda\psi_1(\vec{x}) + \ldots = e^{i\vec{k}.\vec{x}} - \frac{\lambda}{4\pi} \int d^3x' \, \frac{e^{ik|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|} \, \hat{V}(\vec{x}')(\psi_0(\vec{x}) + \lambda\psi_1(\vec{x}) + \ldots) \tag{23.31}$$

Koeffizientenvergleich:

$$\psi_0(\vec{x}) = e^{i\vec{k}.\vec{x}}; \quad \psi_1(\vec{x}) = -\frac{\lambda}{4\pi} \int d^3x' \, \frac{e^{ik|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|} \, \hat{V}(\vec{x}') e^{i\vec{k}.\vec{x}'} \tag{23.32}$$

etc.. Die niedrigste Näherung für $f(\vartheta, \varphi)$ bekommen wir aus 23.28 durch Einsetzen von ψ_0

$$f(\vartheta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3x' \, e^{-ik\vec{n}.\vec{x}'} \, \hat{V}(\vec{x}') e^{i\vec{k}.\vec{x}'} + \ldots \tag{23.33}$$

Wir führen nun ein: $\vec{k}^{(i)} = \vec{k}$; $\quad \vec{k}^{(f)} = k\vec{n}$, d.h. beide Vektoren haben die Länge $k = \sqrt{2m_0E}\,/\hbar$, $\vec{k}^{(i)}$ hat die Richtung des einlaufenden Teilchens, $\vec{k}^{(f)}$ die Beobachtungsrichtung, also die Richtung des des auslaufenden Teilchens. Damit wird 23.33:

$$\begin{aligned} f(\vartheta, \varphi) &= -\frac{2m_0}{4\pi\hbar^2} \int d^3x' \, e^{i(\vec{k}^{(i)} - \vec{k}^{(f)})\vec{x}'} \, V(\vec{x}') \\ &= -\frac{2m_0}{4\pi\hbar^2} \tilde{V}(\vec{k}^{(i)} - \vec{k}^{(f)}) \end{aligned} \tag{23.34}$$

23.4 Beispiele

23.4.1 Yukawa- und Coulombpotential

$$V(\vec{x}) = \alpha \frac{e^{-\mu r}}{r} \tag{23.35}$$

$1/\mu$ „Reichweite" des Potentials, $\mu \to 0$ Coulombpotential.

$$\begin{aligned}
\tilde{V}(\vec{k}) &= \int r^2 dr\, d\cos\vartheta\, d\varphi e^{-ikr\cos\vartheta} \alpha \frac{e^{-\mu r}}{r} \\
&= 2\pi\alpha \int_0^\infty r^2 dr\, \frac{-1}{ikr^2}(e^{-ikr} - e^{ikr})e^{-\mu r} \\
&= 2\pi\alpha \frac{1}{ik}\left(\frac{1}{\mu - ik} - \frac{1}{\mu + ik}\right) \\
&= 4\pi\alpha \frac{1}{k^2 + \mu^2}
\end{aligned} \tag{23.36}$$

Daraus:

$$f(\vartheta, \varphi) = -\frac{2m_0}{\hbar^2}\alpha \frac{1}{(\vec{k}^{(i)} - \vec{k}^{(f)})^2 + \mu^2} \tag{23.37}$$

Der Rest Spielerei:

$$(\vec{k}^{(i)} - \vec{k}^{(f)})^2 = (k^2 + k^2 - 2k^2\cos\vartheta) = 2k^2(1 - \cos\vartheta) = 4k^2\sin^2(\vartheta/2) \tag{23.38}$$

$$f(\vartheta, \varphi) = -\alpha / \left(4E sin^2(\vartheta/2) + \frac{\mu^2\hbar^2}{2m_0}\right) \tag{23.39}$$

$\mu \to 0$ Rutherford-Streuung.

23.4.2 Strukturanalyse durch Streuung

2 Streuzentren an der Stelle $-\vec{a}/2$ und $\vec{a}/2$ d.h.

$$V(\vec{x}) = F(\vec{x} + \vec{a}/2) + F(\vec{x} - \vec{a}/2) \tag{23.40}$$

$$\begin{aligned}
\int d^3x\, e^{-i\vec{k}.\vec{x}} F(\vec{x} + \vec{a}/2) &= \int d^3y\, e^{i\vec{k}.\vec{a}/2} e^{-i\vec{k}.\vec{y}} F(\vec{y}) \\
&= e^{i\vec{k}.\vec{a}/2}\tilde{F}(\vec{k})
\end{aligned} \tag{23.41}$$

d.h.

$$\tilde{V}(\vec{k}) = \left(e^{i\vec{k}.\vec{a}/2} + e^{-i\vec{k}.\vec{a}/2}\right)\tilde{F}(\vec{k}) \tag{23.42}$$

Wir brauchen für den Wirkungsquerschnitt
$|\tilde{V}(\vec{k})|^2 = |\tilde{F}(\vec{k})|^2 4\cos^2(\vec{k}.\vec{a}/2)$

Damit

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{m_0}{2\pi\hbar^2}\right)^2 4|\tilde{F}((\vec{k}^{(i)} - \vec{k}^{(f)}))|^2 \cos^2((\vec{k}^{(i)} - \vec{k}^{(f)}).\vec{a}/2) \tag{23.43}$$

z.B. $\vec{k}^{(i)} = (0,0,k)$, $\vec{a} = (a,0,0)$, dann $(\vec{k}^{(i)} - \vec{k}^{(f)}).\vec{a}/2 = -\sin\vartheta\,\cos\varphi\; ka/2$ und damit Maxima für

$$\sin\vartheta\,\cos\varphi\; ka/2 = n\pi; \qquad n = 0, \pm 1, \pm 2\ldots \tag{23.44}$$

Dort ist Gangunterschied der deBroglie-Wellenlänge $0, \lambda, 2\lambda, \ldots$ Aus Lage der Maxima lässt sich Lage der Streuzentren in der Ebene rekonstruieren.

Anwendung auf komplexere Strukturen klar: Wenn Streuzentren an den Stellen $\vec{a}_j$, dann

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{m_0}{2\pi\hbar^2}\right)^2 4|\tilde{F}((\vec{k}^{(i)} - \vec{k}^{(f)}))|^2 |\sum_j \exp[(\vec{k}^{(i)} - \vec{k}^{(f)}).\vec{a}_j]|^2 \tag{23.45}$$

23.5 Partialwellenanalyse

23.5.1 Beispiel

Rotationssymmetrisches Potential $V(r)$, d.h. gleichzeitige Eigenzustände von **H** und **L** möglich.

$$\begin{aligned}\mathbf{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m_0}\vec{\nabla}^{\,2} + V(r) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m_0}\Big(\partial_r^2 + \frac{2}{r}\partial_r - \frac{1}{r^2}\vec{\mathbf{L}}^{\,2}/\hbar^2\Big) + V(r)\end{aligned} \tag{23.46}$$

Zeitunabh. Sch.gl. auf Eigenzustand des Drehimpulses $\psi(\vec{x}) = R_l(r)Y_l^m(\vartheta,\varphi)$ angewandt entspricht:

$$\Big(\partial_r^2 + \frac{2}{r}\partial_r - \frac{1}{r^2}l(l+1) + k^2 - \frac{2m_0}{\hbar^2}V(r)\Big)R_l(r) = 0 \tag{23.47}$$

mit $k^2 = 2m_0E/\hbar^2$.

Speziell: $V(r) = V_0\theta(\rho - r)$

dann

$$\Big(\partial_r^2 + \frac{2}{r}\partial_r - \frac{1}{r^2}l(l+1) + k^2 - \frac{2m_0}{\hbar^2}V_0\theta(\rho - r)\Big)R_l = 0 \tag{23.48}$$

Typ der Gleichung:

$$\Big(\partial_r^2 + \frac{2}{r}\partial_r - \frac{1}{r^2}l(l+1) + \kappa^2\Big)R_l = 0 \tag{23.49}$$

gelöst durch

$$R_l = Aj_l(\kappa r) + B_l(\kappa r) \tag{23.50}$$

j_l: Sphärische Besselfunktion, n_l: Sphärische Neumannfunktion.

$$\begin{aligned} j_0(x) &= \frac{\sin x}{x}, \qquad\qquad n_0(x) = -\frac{\cos x}{x} \\ j_1(x) &= \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x}, \quad n_1(x) = -\frac{\cos x}{x^2} - \frac{\sin x}{x} \end{aligned} \tag{23.51}$$

j_l regulär am Urspring ($j_l \propto x^l$); n_l singulär ($n_l \propto x^{-l-1}$).

•S-Wellenstreuung, d.h. $l = 0$ ganz elementar:

Ersetze $R_l = u_l/r$, dann mit $l = 0$:

$$\Big(\partial_r^2 + k^2 - \frac{2m_0}{\hbar^2}V_0\theta(\rho - r)\Big)u_0 = 0 \tag{23.52}$$

$r > \rho$:
$u_0 = \alpha \exp[ikr] + \beta \exp[-ikr]$
$r < \rho$:
$u_0 = \sin[\kappa r]; \quad \kappa^2 = k^2 - \frac{2m_0}{\hbar^2}V_0$
Stetig diff'barer Anschluss:

$$\begin{aligned} \sin[\kappa\rho] &= \alpha \exp[ik\rho] + \beta \exp[-ik\rho] \\ \kappa\cos[\kappa\rho] &= ik\alpha \exp[ik\rho] - ik\beta \exp[-ik\rho] \end{aligned} \tag{23.53}$$

$$\begin{aligned} \kappa\cos[\kappa\rho] - ik\sin[\kappa\rho] &= -2ik\beta \exp[-ik\rho] \\ \kappa\cos[\kappa\rho] + ik\sin[\kappa\rho] &= 2ik\alpha \exp[+ik\rho] \end{aligned} \tag{23.54}$$

Daraus: $\beta = \alpha^*; \quad \alpha = \frac{e^{-ik\rho}}{2ik}(\kappa\cos[\kappa\rho] + ik\sin[\kappa\rho])$
$\alpha = |\alpha|e^{i\delta_0}; \quad \beta = |\alpha|e^{-i\delta_0}$

Daraus $|\alpha|$ und δ_0 leicht zu berechnen.

Lösung außerhalb:

$$R_0(r) = \frac{|\alpha|e^{-i\delta_0}}{r}\Big(\exp[ikr]\exp[2i\delta_0] + \exp[-ikr]\Big) \tag{23.55}$$

Ähnlich, nur etwas komplizierter für $l \neq 0$.

subsectionPartialwellenentwicklung

Das Potential sei kugelsymmetrisch: $V(r)$. Sei $\vec{k}=(0,0,k)$, dann rotationssymmetrisch um 3-Achse, d.h. $f(\vartheta)$ und nicht $f(\vartheta,\varphi)$. Wir entwickeln die Streulösung nach Eigenzuständen des Drehimpulses. $Y_l^0(\cos\vartheta)$ reicht aus. Üblicherweise benutzt man in diesem Falle die Legendre-Polynome:

$$P_l(z)=\sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}\;Y_l^0(z); \tag{23.56}$$

$$\int_{-1}^{1}dzP_l(z)P_{l'}(z)=\frac{2}{2l+1}\delta_{l,l'}\quad P_l(z)=(-1)^lP_l(-z)\quad Pl(1)=1 \tag{23.57}$$

Wir können entwickeln:

$$f(\vartheta)=\sum_l(2l+1)f_lP_l(\cos\vartheta) \tag{23.58}$$

Ferner gilt:

$$e^{ikr\cos\vartheta}\to\sum_l(2l+1)P_l(\cos\vartheta)\frac{1}{2ikr}(e^{ikr}-(-1)^le^{-ikr}) \tag{23.59}$$

für $kr\to\infty$. Damit folgt für die Streulösung:

$$\begin{aligned}\psi_s &\to \sum_l(2l+1)P_l(\cos\vartheta)\frac{1}{2ikr}(e^{ikr}-(-1)^le^{-ikr})+\frac{1}{r}e^{ikr}\sum_l(2l+1)f_lP_l(\cos\vartheta)\\ &= \sum_l(2l+1)P_l(\cos\vartheta)\frac{1}{2ikr}\left(e^{ikr}(1+2ikf_l)-(-1)^le^{-ikr}\right)\end{aligned} \tag{23.60}$$

Die einzelnen Summanden entsprechen den einzelnen Bahndrehimpulsen. Da der Drehimpuls erhalten ist, muss der Betrag des Faktors der einlaufenden Kugelwelle gleich dem des Faktors der auslaufenden Kugelwelle sein, $|(1+2ikf_l)|=|(-1)^l|=1$, d.h.

$$1+2ikf_l=e^{2i\delta_l},\qquad f_l=(^{2i\delta_l}-1)/(2ik)=e^{i\delta_l}\frac{\sin\delta_l}{k} \tag{23.61}$$

•Streuamplitude ausgedrückt durch Streuphasen:

$$f(\vartheta)=\frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{i\delta_l}\sin\delta_lP_l(\cos\vartheta) \tag{23.62}$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\frac{1}{k^2}\sum_{l,l'=0}^{\infty}(2l+1)(2l'+1)e^{i(\delta_l-l')}\sin\delta_lP_l(\cos\vartheta)\sin\delta_l'P_{l'}(\cos\vartheta) \tag{23.63}$$

$$\sigma=\int\frac{d\sigma}{d\Omega}d\Omega=\frac{1}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}\sigma_l;\quad\sigma_l=\frac{4\pi}{k^2}(2l+1)sin^2\delta_l \tag{23.64}$$

•Optisches Theorem:

$$\mathrm{Im} f(\vartheta = 0) = \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l P_l(1) = \frac{k}{4\pi}\sum_{l=0}^{\infty}\sigma_l \tag{23.65}$$

•Berechnung der Streuphasen. In einigen Fällen analytisch möglich, z.B. $V(r) = V_0\theta(R_0 - r)$, siehe Beispiel.

Numerisch: suche Lösung zu 23.47, die sich am Ursprung wie r^l verhält und lese aus dem Verlauf für große r die Phasenverschiebung δ_l ab. Brauchen wir ∞ viele Streuphasen?

Semiklassisches Argument: Sei R_0 die ,,Reichweite" des Potentials, dann ist der größte Drehimpuls, der noch mit dem Potential in Berührung kommt, gegeben durch:

$$\hbar k R_0 = \hbar l_{max} \tag{23.66}$$

Insbesondere gilt für $k \to 0$

$$f(\vartheta) \to \frac{1}{k}e^{i\delta_0}\sin\delta_0 \tag{23.67}$$

Kapitel 24

Pfadintegrale

Zeitentwicklung eines Zustands, allgemein:

$$|\psi\rangle_t = \exp[-i\mathbf{H}t/\hbar]\,|\psi\rangle \tag{24.1}$$

Zeitentwicklung im Ortsraum (der Einfachheit halber eindimensional)

$$K(x',t',x,t): \quad \psi(x',t') = \int dx, K(x',t',x,t)\psi(x,t) \tag{24.2}$$

Gewagte, aber nützliche Schreibweise:

$$\mathbf{P}\,|p\rangle = p\,|p\rangle\,; \qquad \mathbf{Q}\,|q\rangle = p\,|q\rangle \tag{24.3}$$

in Ortsdarstellung:

$$|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ipx/\hbar}; \qquad |q\rangle = \delta(x-q) \tag{24.4}$$

Es gilt:

$$\int |p\rangle\, dp\, \langle p| = \mathbf{1}; \quad \int |q\rangle\, dq\, \langle q| = \mathbf{1}; \quad \langle q \mid p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ipq/\hbar} \tag{24.5}$$

W'keitsamplitude dafür, ein Teilchen zur Zeit t' an der Stelle q' zu finden, wenn es zur Zeit t an der Stelle q nachgewiesen wurde.

$$K(q',t',q,t) = \langle q' \mid \exp[-i\mathbf{H}t/\hbar]\; q\rangle \tag{24.6}$$

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m}\mathbf{P}^2 + V(\mathbf{Q}) \tag{24.7}$$

Sei Δt infinitesimal klein, dann gilt:

$$\exp[-i((\frac{1}{2m}\mathbf{P}^2 + V(\mathbf{Q}))\Delta t] = \exp[-i\frac{1}{2m}\mathbf{P}^2\Delta t]\exp[-iV(\mathbf{Q}))\Delta t + O((\Delta t)^2)] \tag{24.8}$$

Ziemlich formal, am besten wir geben Δt einen kleinen negativen Imaginärteil:

$$\begin{aligned}
\langle q' \mid \exp[-i\mathbf{H}\Delta t/\hbar]\ q\rangle &\approx \left\langle q' \left| \exp[-i\frac{1}{2m}\mathbf{P}^2\Delta t]\exp[-iV(\mathbf{Q}))\Delta t]q\right.\right\rangle \\
&= \int dp\ \left\langle q' \left|\exp[-i\frac{1}{2m}\mathbf{P}^2\Delta t/\hbar]p\right.\right\rangle \langle p \mid \exp[-iV(\mathbf{Q}))\Delta t/\hbar]q\rangle \\
&= \int dp\ \left\langle q' \left|\exp[-i\frac{1}{2m}p^2\Delta t/\hbar]\ p\right.\right\rangle \langle p \mid \exp[-iV(q))\Delta t/\hbar]q\rangle \\
&= \frac{1}{2\pi}\int dp\ \exp[-i\frac{1}{2m}p^2\Delta t/\hbar]\exp[ip(q'-q)/\hbar]\exp[-iV(q))\Delta t/\hbar] \\
&= \frac{1}{2\pi}\int dp\ \exp[-i\frac{\Delta t}{2m\hbar}\Big(p^2-2p(q'-q)\frac{m}{\Delta t}+(q'-q)^2\frac{m^2}{(\Delta t)^2}] \\
&\quad \times\exp[\frac{im(q'-q)^2}{2\Delta t\hbar}]\exp[-iV(q))\Delta t] \\
&= \sqrt{\frac{m\hbar}{i\Delta t 2\pi}}\exp\Big[\frac{i}{\hbar}\Big(\frac{m}{2}\frac{(q'-q)^2}{(\Delta t)^2}-V(q)\Big)\Delta t\Big] \qquad (24.9)
\end{aligned}$$

Erinnerung:

$$S_{cl}[q(t)] = \int dt\ (\frac{m}{2}\dot{q}^2 - V(q)) \qquad (24.10)$$

Integriert über klassische Lösung $q(t)$ mit $\delta S_{cl}=0$.

Damit wird in Exponent in 24.9:

$$\frac{m}{2}\frac{(q'-q)^2}{(\Delta t)^2} - V(q))\Delta t = dS_{cl} \qquad (24.11)$$

$\Delta t = t/n$

$$\begin{aligned}
&\langle q' \mid \exp[-i\mathbf{H}t/\hbar]\ q\rangle = \\
&\quad \int dq_{n-1}\dots dq_1\ \langle q' \mid \exp[-i\mathbf{H}\Delta t/\hbar]\ q_{n-1}\rangle \\
&\quad \langle q_{n-1} \mid \exp[-i\mathbf{H}\Delta t/\hbar]\ q_{n-2}\rangle\dots\langle q_1 \mid \exp[-i\mathbf{H}\Delta t/\hbar]\ q\rangle \\
&\quad = \mu^{n-1}\int dq_{n-1}\dots dq_1\ \exp\Big[\frac{i\Delta t}{\hbar}\Big(\frac{m}{2}\frac{(q'-q_{n-1})^2}{(\Delta t)^2} - V(q_{n-1}) + \dots \\
&\quad + \frac{m}{2}\frac{(q_1-q)^2}{(\Delta t)^2} - V(q)\Big)\Delta t\Big] \qquad (24.12)
\end{aligned}$$

$\mu = \sqrt{\frac{m\hbar}{i\Delta t 2\pi}}$. In der Grenze $n\to\infty$ geht der Exponent gegen

$$\frac{i}{\hbar}\int dt'\ S_{cl}[q[t']) \qquad (24.13)$$

Damit ist das **Funktionalintegral** definiert:

$$\int \mathcal{D}q \exp[\frac{i}{\hbar} S_{cl}[q]] \tag{24.14}$$

wobei hier über alle Pfade $q(t)$ und nicht nur über die klassischen Lösungen integriert wird:

Drücke das Funktional $S_{cl}[q]$ als Funktion von $q(t_k)$, $\quad k = 1 \ldots n, \quad n \to \infty$ aus. In unserem Falle:

$$\begin{aligned} S_{cl}[q] &= \int_0^t dt' \, \Big(\frac{m}{2}(\partial_{t'} q(t'))^2 - V(q(t'))\Big) \\ &= \sum_k \Big[\frac{m}{2}\Big(\frac{q(t_{k+1}) - q(t_k)}{t_{k+1} - t_k}\Big)^2 - V(q(t_k))\Big](t_{k-1} - t_k) \end{aligned} \tag{24.15}$$

und integriere über

$$\prod_k \sqrt{\frac{m\hbar}{2\pi i(t_{k+1} - t_k)}} \, dq_k, \qquad q_k = q(t_{k+1}) \tag{24.16}$$

Der Phasenfaktor $\exp[\frac{i}{\hbar} S_{cl}[q]]$ oszilliert stark bei makroskopischen Änderungen von $q[t]$. Deshalb im klassischen Grenzfall nur Beiträge nahe dem stationären Punkt: $\delta S_{cl}/\delta q = 0$, d.h. der klassischen Lösungen. Darum die Quantenfluktuaktionen !

Quantenmechanik als stochastischer Prozess. Besonders deutlich für $t \to -it$. Schrödingergl. $\to$ Diffusionsgleichung. Integral besser definiert. Euklidische Feldtheorie.