

QUANTENMECHANIK

Thomas Nattermann

gesetzt in TEX von Mariela Boevska

Wintersemester 2001/02



Inhaltsverzeichnis

1	Phänomene in atomaren Dimensionen	1
1.1	Teilcheneigenschaften elektromagnetischer Wellen	1
1.1.1	Die Hohlraumstrahlung	1
1.1.2	Photoelektrischer Effekt (Hertz 1887, Hallwachs 1888, Lenard 1900)	4
1.1.3	Compton-Effekt (Compton 1924)	6
1.2	Welleneigenschaften von Teilchen	7
1.2.1	Doppelspaltexperiment: Welle-Teilchen Dualismus	7
1.3	Diskrete Zustände	14
1.3.1	Richtungsquantelung	14
1.3.2	Energiequantelung	15
2	Wellenfunktion und Schrödingergleichung	17
2.1	Die Wellenfunktion	17
2.1.1	Wellenpaket und de-Broglie Relationen	19
2.2	Die Schrödingergleichung	24
2.2.1	Die Bewegungsgleichung im Schrödingerbild	24
2.2.2	Operatoren und Skalarprodukt	29
2.3	Normerhaltung und Kontinuitätsgleichung	31
2.4	Beschreibung klassischer Observablen durch hermitesche Operatoren	32
2.5	Rechnen mit Operatoren	38
2.6	Orts- und Impulsunschärferelation	41
2.7	Zeitunabhängige Schrödingergleichung	43
2.8	Teilchen im elektromagnetischen Feld	44
2.9	Erweiterung auf Mehrteilchensysteme	47
2.10	Grenzübergang zur klassischen Mechanik	47
2.11	Mathematische Ergänzungen	52
3	Eindimensionale Probleme	57
3.1	Der harmonische Oszillator	57
3.2	Freies Teilchen	65
3.3	Potentialstufen	67
3.4	Tunneleffekt, Potentialschwelle	70
3.5	Potentialtopf, Gebundene Zustände	72
3.6	Potentialtopf, Resonanzen	73
4	Der Drehimpuls	77
4.1	Drehimpuls und Drehgruppe	77
4.2	Eigenwerte und Eigenfunktionen von Drehimpulsoperatoren	86

5	Teilchen im Zentralpotential	93
5.1	Teilchen im kugelsymmetrischen Potential	93
5.2	Coulomb-Potential	95
5.3	Zweikörperproblem	100
6	Darstellungstheorie	101
6.1	Zustandsvektoren und Dirac-Schreibweise	101
6.2	Verschiedene Darstellungen für Operatoren	108
6.3	Unitäre Transformationen, Heisenberg- und Dirac-Bild	112
6.4	Axiome der Quantenphysik, Dichtematrix	116
7	Bewegung im Magnetfeld, Spin	123
7.1	Der normale Zeeman-Effekt	123
7.2	Freie Elektronen im Magnetfeld	126
7.3	Quasiklassische Approximation	128
7.4	Der Aharonov-Bohm-Effekt	132
7.5	Der Spin des Elektrons	139
8	Störungstheorie	143
8.1	Zeitunabhängige Störungen	143
8.2	Das Ritzsche Variationsprinzip	147
8.3	Zeitabhängige Störungstheorie	147
9	Addition von Drehimpulsen	151
9.1	Addition von Bahndrehimpulsen	151
9.2	Addition von Spin- und Bahndrehimpuls	156
10	Identische Teilchen	161
10.1	Bosonen und Fermionen	161
10.2	Helium	169
10.3	Thomas-Fermi-Näherung	174
11	Streutheorie	177
11.1	Allgemeine Theorie der elastischen Stöße	177
12	Atomaufbau und Hundsche Regeln	185
13	Verschiedenes	189
13.1	Dirac- und Weyl-Gleichung	189
13.2	Pfadintegrale via Trotter-Formel	193
A	Zusammenfassungen	A.1
A.1	Zusammenfassung 1. Woche	A.1
A.2	Zusammenfassung 2. Woche	A.2
A.3	Zusammenfassung 3. Woche	A.3
A.4	Zusammenfassung 4. Woche	A.4
A.5	Zusammenfassung 5. Woche	A.5
A.6	Zusammenfassung 6. Woche	A.6
A.7	Zusammenfassung 7. Woche	A.7
A.8	Zusammenfassung 8. Woche	A.8
A.9	Zusammenfassung 9. Woche	A.9
A.10	Zusammenfassung 10. Woche	A.10
A.11	Zusammenfassung 11. Woche	A.11
A.12	Zusammenfassung 12. Woche	A.12
A.13	Zusammenfassung 13. Woche	A.14

A.14 Zusammenfassung 14.Woche	A.15
B Übungsaufgaben	B.1

Kapitel 1

Phänomene in atomaren Dimensionen

Ende des 19. Jahrhunderts: Physik schien verstanden. Newtons Mechanik erklärte die Bewegungen auf der Erde und im Himmel, aus ihr folgten auch Hydro- und Aerodynamik (Euler, Navier, Stokes). Die Theorie Maxwells verband die Elektrizitätslehre mit dem Magnetismus und schloss auch die Optik ein, Licht war eine elektromagnetische Welle. Schließlich gelang es Boltzmann die Wärmelehre auf die (statistische) Mechanik zurückzuführen.

Gleichzeitig häuften sich in dieser Zeit experimentelle Befunde, die sich nicht in Einklang bringen ließen mit dem existierenden Gebäude. Über diese wollen wir in diesem Kapitel sprechen.

Problem: Wir machen unsere Erfahrungen nicht in der Quantenwelt \Rightarrow haben keine Intuition für Quantenmechanik; Höhlengleichnis von Plato

Zitat Feynman (1965): "...Es gab eine Zeit..."

1.1 Teilcheneigenschaften elektromagnetischer Wellen

Newton (1643–1727): Licht besteht aus Teilchen

Huygens (1629–1695), Fresnel (1788–1827): Licht ist eine Welle

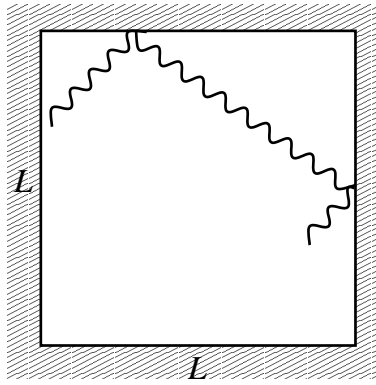
Beginn des 20. Jahrhunderts:

Photoelektrischer Effekt	}	wieder Teilchen
Compton – Effekt		

Tatsächlich: weder Teilchen noch Wellen

1.1.1 Die Hohlraumstrahlung

Hohlraum der Temperatur T , da Photonen nicht direkt miteinander wechselwirken braucht man Hilfsmittel um Strahlungsgleichgewicht herzustellen!



Strahlungsgleichgewicht, Strahlungsfeld besteht aus stehenden Wellen, Feldstärke verschwindet am Rand.

Wir interessieren uns für die Energiedichte $u(\omega)$ =Energie/Volumen- und Frequenzinheit im Hohlraum:

$$u(\omega) = \frac{k_B T}{\pi^2 c^3} \omega^2 \text{ Rayleigh - Jeans - Gesetz (klassisch),}$$

denn, wir betrachten stehende ebene Wellen im Hohlraum mit reflektierenden Metallwänden (Randbedingungen!). Durch Superposition von Wellen der Form

$$E_i(\mathbf{x}, t) \approx e^{i\omega t} \sin(k_1 x_1) \sin(k_2 x_2) \sin(k_3 x_3)$$

$$\mathbf{k} = \frac{\pi}{L}(n_1, n_2, n_3) \quad n_i = 1, 2, 3, \dots \quad \rightarrow E(0) = 0, E(L) = 0$$

und $\lambda_i = (2\pi)/k_i = (2\pi L)/(\pi n_i) = (2L)/n_i$, $\rightarrow x_1 = L : k_1 x_1 = \frac{\pi}{L} n_1 L = n_1 \pi$, lässt sich jede Feldkonfiguration im Hohlraum herstellen.

Dieser Ansatz ist tatsächlich eine Lösung der Wellengleichung, denn

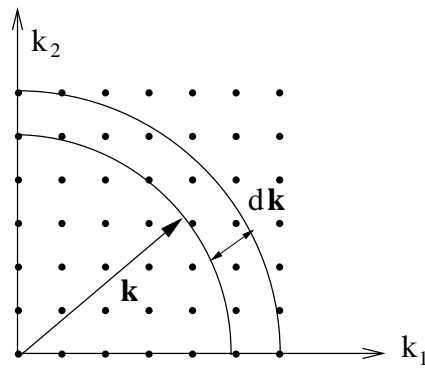
$$\left[\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \right] E_i = 0 \quad \rightarrow \quad -\frac{1}{c^2} \omega^2 + (k_1^2 + k_2^2 + k_3^2) = 0$$

$$\omega^2 = c^2 (k_1^2 + k_2^2 + k_3^2)$$

(rechte Seite: Basisfunktion eines vollständigen Funktionensystems)

Wir müssen jetzt über alle Zustände summieren, dabei brauchen wir nur die positiven \mathbf{k} -Vektoren zu betrachten, da die negativen \mathbf{k} -Vektoren den gleichen Zustand repräsentieren. Gehe von der Summation über \mathbf{k} zur Integration über $\omega = ck$ über.

Abstand der Punkte: $\Delta k = \pi/L$.



$$\omega = ck = c \frac{2\pi}{\lambda}$$

Anzahl der Wellen in $\omega, \dots, \omega + d\omega = [\omega, \omega + d\omega]$ (der Oktant der positiven \mathbf{k} ist gleich 1/8 der Vollkugel):

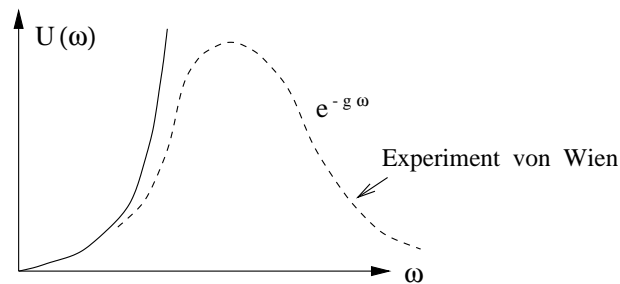
$$\begin{aligned} & \frac{1}{8} \times \text{Zahl der Punkte in der } \Delta k \text{ - Schale} \\ &= \frac{1}{8} dn_1 dn_2 dn_3 = \frac{1}{8} \frac{4\pi k^2 dk}{(\pi/L)^3} = \frac{L^3}{2\pi^2 c^3} \omega^2 d\omega \\ &= \frac{L^3}{2\pi^2} \frac{(2\pi)^3}{\lambda^2} \left(-\frac{d\lambda}{\lambda^2}\right) = -4\pi \left(\frac{L}{\lambda}\right)^3 \frac{d\lambda}{\lambda}. \end{aligned}$$

Jede stehende Welle entspricht einem Oszillator mit Energie $k_B T$ (Gleichverteilungssatz) und zwei Polarisationsrichtungen

$$u(\omega)d\omega = 2 \cdot \frac{L^3}{2\pi^2 c^3} \omega^2 \cdot k_B T \frac{d\omega}{L^3} = \frac{k_B T}{\pi^2 c^3} \omega^2 d\omega.$$

Dies kann nicht sein! Denn $\int_0^\infty u(\omega) d\omega = \infty$ divergiert.

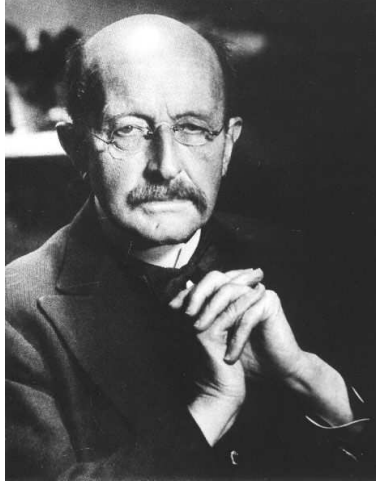
“Ultraviolett katastrophe”



Bei tiefen ω gut, nicht bei hohen.

Experiment (Wien)

$$u(\omega) \xrightarrow{\omega \rightarrow \infty} A\omega^3 e^{-g\omega/T} \quad (A, g \text{ const.}).$$



Max Planck (1858–1947)

Planck 1900 (Abkehr vom Gleichverteilungssatz der klass. Physik:

$$k_B T \rightarrow \hbar\omega / (e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1))$$

$$u(\omega) = \frac{k_B T \omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{\frac{\hbar\omega}{k_B T}}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1}$$

$$h = 6,626 \cdot 10^{-27} \text{ergsec} = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{Jsec}; \quad \hbar = 1,0546 \cdot 10^{-27} \text{ergs}; \quad g = \hbar/k_B$$

$$e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} / (e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1) \Rightarrow \begin{cases} 1 & \text{für } \hbar\omega \ll k_B T \\ (\hbar\omega/k_B T)e^{-(\hbar\omega/k_B T)} & \text{für } \hbar\omega \gg k_B T \end{cases}$$

Energieaustausch mit Wand nur in Einheiten $E_n = n \cdot \hbar\omega \rightarrow$ Quantisierung der Strahlungsenergie.

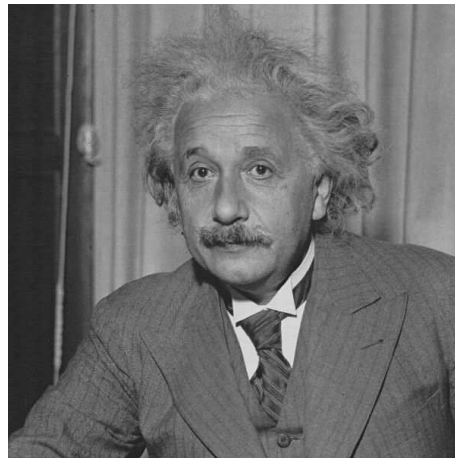
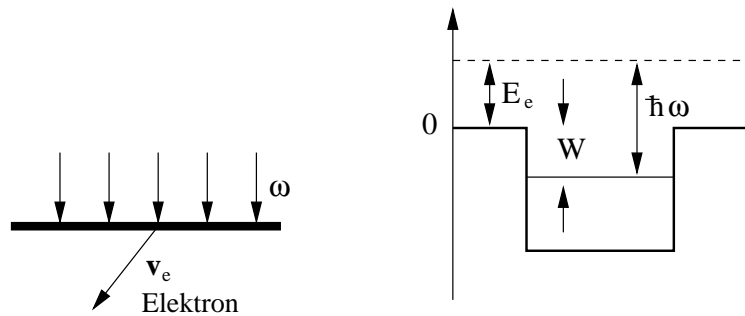
Planck-Relation $E = \hbar\omega = h\nu$

1.1.2 Photoelektrischer Effekt (Hertz 1887, Hallwachs 1888, Lenard 1900)

Einfallendes Licht der Frequenz ω schlägt Elektronen aus einer Metallfolie

Max. kinetische Energie der Elektronen (Einstein-Relation, A. Einstein, Ann. Phys. **17**, 132 (1905))

$$E_e = (m/2)v_e^2 = \hbar\omega - W$$



Albert Einstein (1879–1955)

W ist die Austrittsarbeit. Insbesondere kann ein Elektron nur aus dem Film herausgeschlagen werden, wenn $\hbar\omega > W$ ist.

<i>klassisch:</i>	Energiedichte des Feldes	$= (1/8\pi)(\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2) \sim I$
	Energiestromdichte	$s = (c/4\pi)(\mathbf{E} \times \mathbf{B})$
	Impulsdichte	$\mathbf{p} = \frac{1}{4\pi c}(\mathbf{E} \times \mathbf{B})$

→ Es gibt keine untere Frequenz $\omega_u = (W/\hbar)$ für Emission von Elektronen.

→ Es braucht gewisse Zeit, bis genügend Energie geflossen ist, die Elektronen werden ab sofort ($< 10^{-9}$ s) herausgelöst.

Beispiel: Na-Oberfläche, Photostrom tritt auf, wenn Strahlung etwa 10^{-6} W/m² erreicht. Eine atomare Schicht von 1 m² enthält 10^{19} Atome, so dass jedes Atom etwa 10^{-25} W Strahlung erhält. Klassische betrachtet dauert es einen Monat bevor das Atom genügend Energie aufgesammelt hat, damit ein Elektron freigesetzt werden kann.

→ beides im Widerspruch zum Experiment.

Austrittsarbeiten: liegen in Größenordnung von eV.

Reduziert man die Intensität, aber nicht die Frequenz, so gilt es weniger Photoelektronen, aber es werden immer noch sofort welche herausgeschlagen.

Relativitätstheorie:

$$E = (\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4)^{1/2}$$

$$\mathbf{v} = \frac{\partial E}{\partial \mathbf{p}} = \frac{\mathbf{p} c^2}{(\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4)^{1/2}}$$

Wegen $|\mathbf{v}| = c$ folgt $m = 0$, $E = pc$, und damit $pc = E = \hbar\omega = \hbar ck$ und daher

Einstein-Relation

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k} = h/\lambda$$

→ Licht besteht aus Photonen der Energie $\hbar\omega = E$, Geschwindigkeit c und Impuls $\hbar \mathbf{k} = \mathbf{p}$.

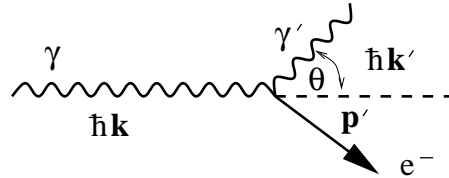
Dieses Resultat geht über Plancks Annahme hinaus, da er nur den Energieaustausch quantisiert. Monochromatisches Licht der Energie E und Frequenz ω enthält $E/\hbar\omega$ Photonen.

Vierervektor:

$$p^\mu = \begin{pmatrix} E/c \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} k \\ \mathbf{k} \end{pmatrix}$$

1.1.3 Compton-Effekt (Compton 1924)

Streuung von Röntgenstrahlen an Elektronen



$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \hat{k} \quad \sim \text{beschreibt Wellencharakter}$$

Elektron ruht zunächst, dann elastischer Stoß mit Photon γ . Viererimpuls bleibt erhalten, und $\mathbf{p}_{\text{photon}} = \hbar \mathbf{k}$, $E_{\text{photon}} = \hbar\omega = \hbar ck$. Elektron muß hier relativistisch behandelt werden, da Impulsänderung von der Ordnung $m_e c$.

$$\begin{aligned} \hbar(\mathbf{k} - \mathbf{k}') &= \mathbf{p}' && \text{Impulssatz} \\ c\hbar(k - k') + mc^2 &= (p'^2 + m^2 c^2)^{1/2} c && \text{Energiesatz} \end{aligned} \quad (1.1)$$

Quadriere den Energiesatz und dividiere durch c^2

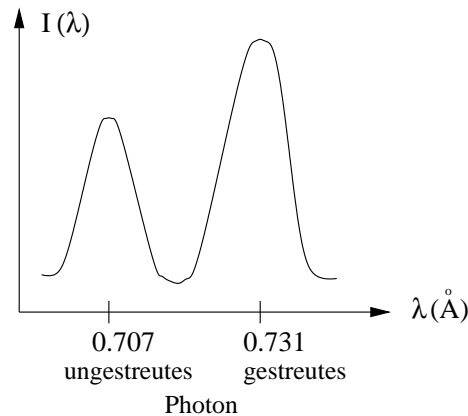
$$\begin{aligned} \hbar^2(k^2 - 2kk' + k'^2) + m^2 c^2 + 2\hbar(k - k')mc &= p'^2 + m^2 c^2 \\ &= \hbar^2(k^2 + k'^2 - 2\mathbf{k}\mathbf{k}') + m^2 c^2 \\ -2\hbar^2 kk' + 2\hbar(k - k')mc &= -\hbar^2 2\mathbf{k}\mathbf{k}' \quad \mathbf{k} \cdot \mathbf{k}' = kk' \cos \theta \end{aligned}$$

$$k - k' = \hbar \frac{kk'}{mc} (-\cos \theta + 1) = 2\pi \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'} \right) = 2\pi \frac{\lambda' - \lambda}{\lambda \lambda'}$$

$$\lambda' - \lambda = \frac{4\pi\hbar}{mc} \sin^2 \theta / 2 = 4\pi \lambda_c \sin^2 \theta / 2 \quad (*)$$

$\lambda_c = \frac{\hbar}{m_e c} = 3,86 \cdot 10^{-11} \text{cm}$ bei Elektronen. (*) von Experiment bestätigt, d.h. Licht hat Teilchencharakter. Neben der nicht verschobenen Linie der kohärenten Streuung wird noch eine Linie mit inkohärenter Streuung beobachtet. Im klassischen Limes ($\hbar \rightarrow 0$) ist dagegen $\lambda' = \lambda$. $\lambda_c = \frac{\hbar}{mc}$ ist die **Comptonwellenlänge**, die die Grenze zwischen relativistischer und nicht-relativistischer Quantentheorie darstellt.

Nach der klassischen Theorie würde hingegen das Elektron zunächst Impuls und Energie vom elektromagnetischen Feld übernehmen (die Impulsaufnahme führt zur Beschleunigung des Elektrons $\hat{=}$ "Strahlungsdruck"). Die aufgenommene Energie wird dann wieder mit gleicher Frequenz abgestrahlt, dabei ist der Gesamtimpuls der emittierten Strahlung Null, im Widerspruch zum Experiment.



$$m_e = 0,91 \cdot 10^{-27} \text{g}; c = 2,99 \cdot 10^{10} \text{cm/sec}$$

Intensität der ungestreuten und gestreuten Photonen. Beide Experimente (der Compton- und der photoelektrische Effekt) zeigen den Teilchencharakter von Licht, andererseits hat Licht auch Wellencharakter (Beugung + Interferenz).

1.2 Welleneigenschaften von Teilchen

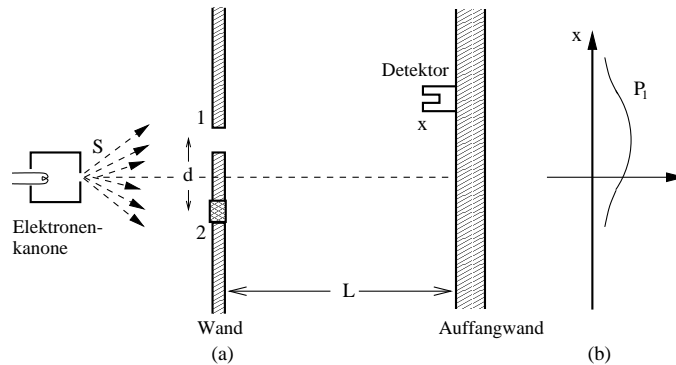
1.2.1 Doppelspaltexperiment: Welle-Teilchen Dualismus

Experimentell findet man bei Beugung von Röntgenstrahlen und Elektronen an Metallfolien ähnliche Bilder, es liegt daher nahe, den Elektronen **auch** Wellencharakter zuzuordnen. Im Folgenden beschreiben wir ein **Gedankenexperiment**. (Das reale

Experiment ist komplizierter, ist aber inzwischen durchgeführt.) Was ist ein Gedankenexperiment? Experimentelle Erfahrung wird in schematischer, idealisierter Vereinfachung dargestellt. Die experimentelle Erfahrung lehrt, daß das betrachtete physikalische System sich in ganz bestimmter Weise verhält. Man kann in einem Gedankenexperiment bestimmte Eigenschaften des physikalischen Systems betonen und zeigen, die man in wirklichen Experimenten oft nicht so isoliert vorliegen hat. Aus was besteht die atomare Welt? Aus Elektronen, den Atomkernen, bestehend aus Nukleonen, Pionen, ...; im folgenden Teilchen genannt. Die räumlichen Dimensionen sind extrem klein gegenüber unseren makroskopischen Maßstäben.

$$\text{Atome} \sim \text{\AA} = 10^{-8} \text{cm} \quad \text{Atomkerne} \sim \text{fm} = 10^{-13} \text{cm}$$

Wir denken uns folgende experimentelle Anordnung



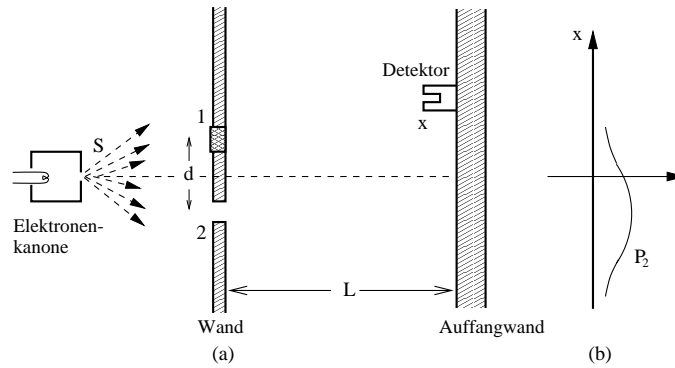
Bei klassischen Teilchen würde man das gleiche Verhalten erhalten, die Teilchen werden z.B. am Rand der Öffnung reflektiert

$$P_1(x) = \frac{\text{Zahl der Teilchen in } x \dots x + dx}{\text{Gesamtzahl der Teilchen} \cdot dx} = \frac{n(x)}{N \Delta x}.$$

Erwartungsgemäß findet man Streuung um die mittlere Position. Man beobachtet unregelmäßiges Auftreffen der Teilchen. (Falls Verhältnisse an der Teilchenquelle konstant sind, findet man über einen längeren Zeitraum gemittelt gleich viele Eintreffer pro Zeiteinheit und man kann von einem konstanten Strom sprechen.)

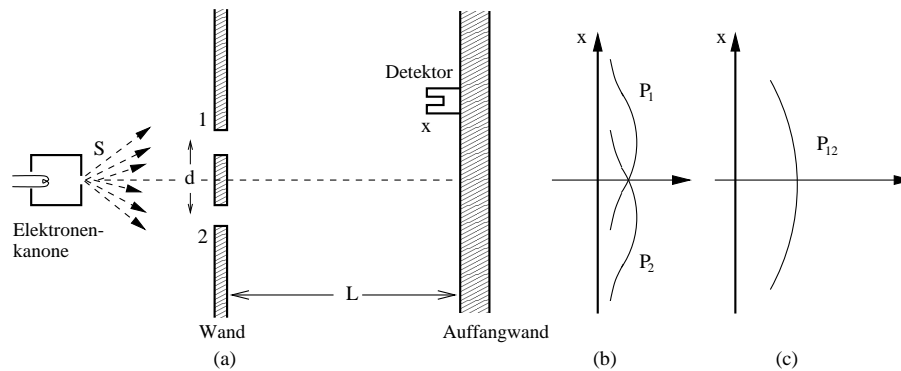
Die Ankunft eines Teilchens läßt sich durch einen kurzen "CLICK" hörbar machen; dies deutet darauf hin, daß Teilchen keine Wellen, sondern Korpuskel sind. Der Teilchenstrom benimmt sich wie ein Geschosshagel, wobei nur die Unregelmäßigkeit des Auftreffens etwas besonderes darstellt. (Bei einfallende Welle würde man für die Intensität $I = |A|^2$ der Welle ein Bild wie für $P_1(x)$ bekommen.)

Öffnen eines 2. Loches und Schließen des 1. Loches:

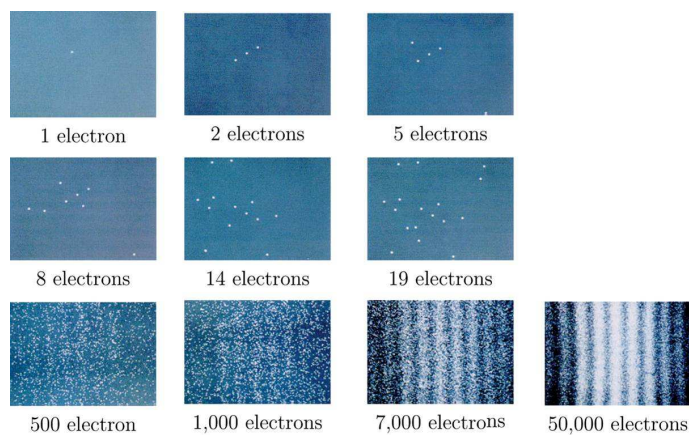


Erwartungsgemäß ist $P_2(x)$ nach unten verschoben.

Öffnen beider Löcher; man erwartet für klassische Teilchen:

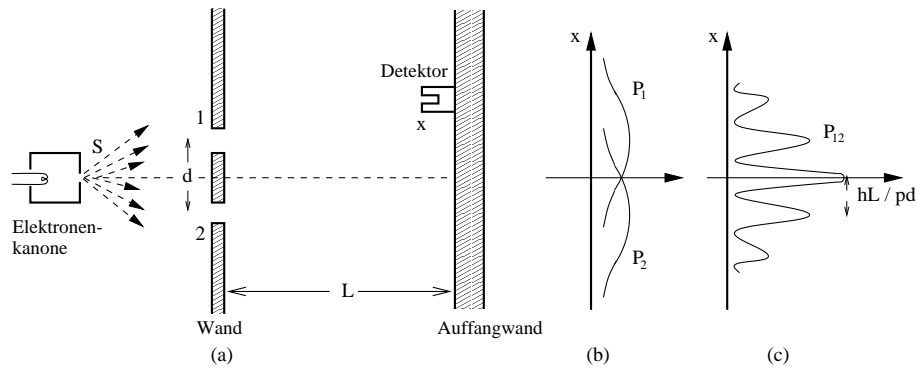


Dies ist falsch, der tatsächliche Befund ist:

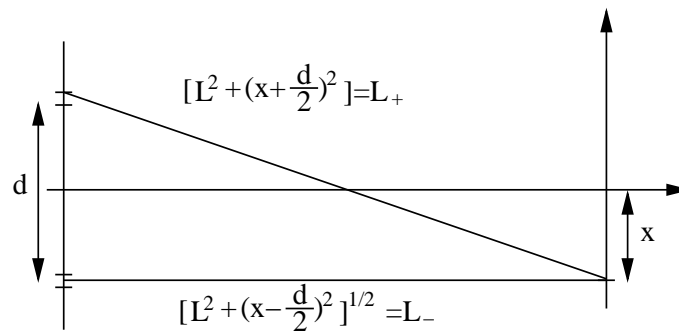


D.h. man erhält Interferenzbilder wie in der Optik. Dieses Interferenzbild entsteht aber erst, genauer: wird erst dann sichtbar, wenn hinreichend viele Elektronen auf dem Schirm aufgetroffen sind. Die Elektronen treten jeweils als Teilchen auf.

Eine Deutung ist klassisch unmöglich: wenn Elektronen als Teilchen entweder durch



Schlitz 1 **oder** Schlitz 2 gehen würden, dann müßte $P_{12} = P_1 + P_2$ sein, was nicht der Fall ist. Es gibt z.B. Stellen in der P_{12} -Verteilung, bei denen wenig Elektronen ankommen, wenn beide Löcher offen sind, die aber viele Elektronen empfangen, wenn nur eins geöffnet ist. In der Mitte ist andererseits $P_{12} > P_1 + P_2$. Dies ist anschaulich schwer zu verstehen, aber trotzdem **mathematisch** beschreibbar. Im Falle von Wellen der Länge λ ergibt sich natürlich ein Interferenzmuster.



Bedingung für Interferenz-Maximum: $L_+ - L_- = n\lambda$, $n = 0, \pm 1, \pm 2$, $x_{\max} \approx n\lambda L/d$.

de Broglie: Ordne jedem Teilchen eine Welle zu mit Wellenvektor $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$, Frequenz $\omega = E/\hbar$.

Beispiel: $M = 1\text{g}$, $v = 100\text{ km/h}$, $\lambda = 2,3 \cdot 10^{-30}\text{ cm}$,

$m_{\text{Elektron}} = 9,1 \cdot 10^{-28}\text{ g}$, $v = 100\text{ km/h}$, $\lambda = 0,025\text{ mm}$.

Aus der Bohr-Sommerfeld-Quantisierungsregel $\oint p dq = hn$ wird bei geschlossenen Teilchenbahnen etwa auf dem Kreis $p2\pi r = (h/\lambda)2\pi r = hn \rightarrow 2\pi r = \lambda n$.

Bei der Broglie sind stehende Wellen an die Stelle von Teilchenbahnen getreten.

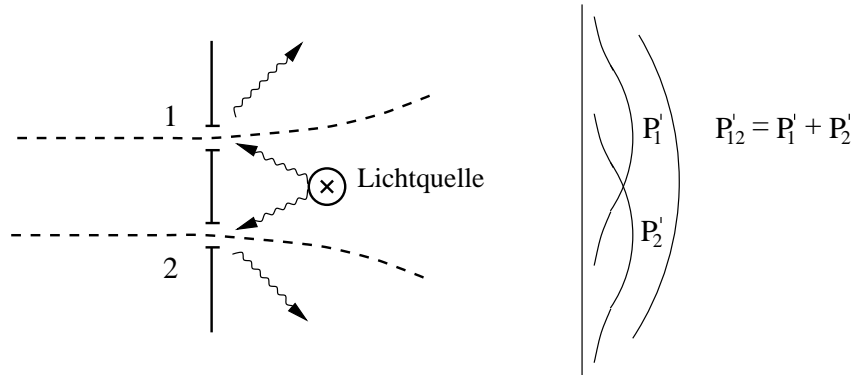
Ist **Teilchennatur wirklich vorhanden?** Verringern des Stromes einfallender Teilchen: man beobachtet die Einzelereignisse. Sie entstehen nicht als Folge des Zusammenwirkens der Teilchen. (Bild aus Experiment) - Man kann Elektronen für Elektronen einzeln verschicken.

Bei einer Welle müßte das Interferenzbild stets als ganzes vorhanden sein und würde

nur schwächer bei schwächerer einfallender Amplitude. Zwei Detektoren in verschiedenen Maxima müßten gleichzeitig ansprechen, dies ist jedoch nicht der Fall.

Die Teilchen benehmen sich wie kleine Geschosse, aber bauen ein Interferenzbild auf aus Einzelereignissen, das wie aus der Interferenz von Wellen geformt ist. Man spricht von **Teilchen–Welle Dualismus**.

Versuch einer genaueren Betrachtung: falls die Teilchen kleine Korpuskel sind, dann gehen sie entweder durch Öffnung 1 oder Öffnung 2. Dies versuchen wir zu beobachten mittels der Streuung von Licht an den Teilchen:



Das gestreute Licht kommt in der Tat vom Bereich der Öffnung 1 oder Öffnung 2 je nach Durchgang des Teilchens, d.h. das **beobachtete** Teilchen halbiert sich nicht. Der nächste Schritt ist ein Koinzidenzexperiment: gestreuter Lichtblitz wird zusammen mit “Click” im Detektor registriert. D.h. für **jedes registrierte** Teilchen kann man sagen, durch welche Öffnung es gekommen ist. Man registriert deswegen 2 Gruppen von Ereignissen:

$$P_1'(x) \text{ durch Öffnung 1}$$

$$P_2'(x) \text{ durch Öffnung 2}$$

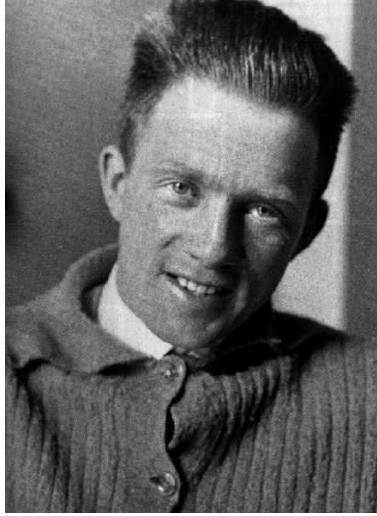
Dabei sind P_1' und P_2' sehr ähnlich den Verteilungen bei jeweils nur einer Öffnung. Man findet jedoch für die Gesamtzahl der Eintreffer an x :

$$\begin{aligned} P_1'(x) + P_2'(x) &\neq P_{12}(x), \\ &= P_{12}'(x) \end{aligned}$$

wobei man $P_{12}(x)$ registriert, wenn man die Lichtquelle ausschaltet und die Teilchen beim Durchgang durch die Öffnungen nicht beobachtet. Die Beobachtung des Versuchsablaufs stellt demnach einen Eingriff in das physikalische System dar und beeinflusst das Versuchsergebnis.

Reduziert man die Intensität der Lichtquelle, so wird nicht mehr jedes Elektron beobachtet, weil nicht mehr genug Photonen da sind, um an den Elektronen gestreut zu werden, d.h. auch das Licht verhält sich klumpig. Die “ungesehenen” Elektronen haben wieder die Verteilung P_{12} , d.h. wir beobachten wieder Interferenz! Die gesehenen Elektronen haben die Verteilung...

Man kann alternativ auch die Frequenz der Photonen ändern, d.h. immer langwelligeres Licht benutzen. Zuerst ändert sich nichts, wenn aber die Wellenlänge des Lichts von der Ordnung d wird, kann man durch dieses Experiment nicht mehr entscheiden, durch welche Öffnung das Elektron kam \rightarrow Interferenz macht sich bemerkbar und P'_{12} geht in P_{12} über.



Werner Heisenberg (1901–1976)

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4 = c^2 \left[\frac{h^2}{\lambda^2} + m^2 c^2 \right] = \hbar^2 c^2 \left[\frac{1}{\lambda^2} + \frac{1}{\lambda_c^2} \right]$$

$$p = \hbar k = h/\lambda$$

Heisenbergsches Unschärfe am Doppelspalt- ein halbquantitative Analyse:

Solange Interferenz vorhanden wissen wir nicht, durch welchen Schlitz das Elektron gelangen ist. Betrachten wir jetzt Elektronen mit Licht **langer** Wellenlänge $\lambda_L \sim h/p_L$.

Durch Stoss am Elektron wird ein Teil des Impulses des Lichts auf das Elektron übertragen, welchen genau wissen wir nicht. Betrachte insbesondere die x -Komponente vom Elektronenquelle als weit entfernt und den Abstand d der Spalte als hinreichend klein, so wird er jetzt um $\Delta p_x \sim p_L \sim h/\lambda_L$ geändert. Dies führt

zu einer Veränderung des Aufschlagspunktes um

$$\Delta x = \frac{\Delta p_x L}{p} \approx \frac{hL}{\lambda_L p}.$$

Solange Δx kleiner als der Abstand der Maxima des Beugungsbildes $\Delta x = \frac{\lambda L}{d}$ ist (λ ist hier die Wellenlänge des Elektrons $\lambda = h/p$, p dessen Impuls), bleibt das Interferenzbild bestehen

$$\frac{\Delta p_x L}{p} = \frac{hL}{\lambda_L p} = \Delta x < x_{\max} = \frac{\lambda L}{d} = \frac{hL}{pd}.$$

In diesem Fall sehen wir aber nicht mehr durch welchen Schlitz das Elektron fliegt, der Ort bleibt unbestimmt (die Unbestimmtheit des Ortes ist d). Umgekehrt, damit wir sehen, durch welchen Schlitz das Elektron fliegt, muss $d > \lambda_L$ gelten

$$d > \lambda_L \approx \frac{h}{\Delta p_x}, \quad \boxed{\Delta p_x d > h}$$

Da $d = \Delta x$ die Genauigkeit ist, mit der ich den Ort maximal bestimmen kann, gilt

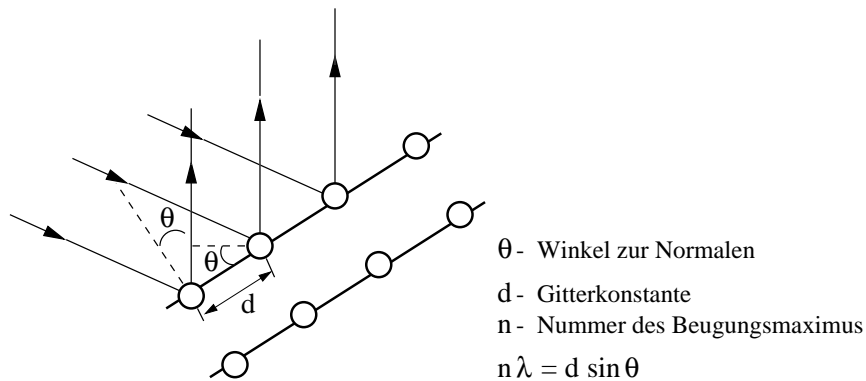
$$\boxed{\Delta p_x \Delta x > h.}$$

Dies gilt für alle $d = \Delta x$.

Aus welchen tatsächlich durchgeführten Experimenten ist das Doppelspaltexperiment abstrahiert?

Z.B. Davisson + Germer (1927):

Elektronenstreuung an Einkristal



Man findet Laue-Diagramme wie bei Röntgenstrahlen.

De Broglie postulierte (1923–1925): Wellenlänge λ , die Teilchenwelle zugeordnet ist, ist

$$\lambda = h/p$$

$$p = \sqrt{2mE}$$



Louis Viktor de Broglie (1892–1987)

p ist das Impuls der Elektronen, h – Plancksches Wirkungsquantum ($\hbar \equiv h/2\pi = 1,0545 \cdot 10^{-27} \text{ erg sec}$). Dies ist experimentell verifiziert.

Aber auch **mikroskopisch hat der Teilchenbegriff seine Berechtigung**:

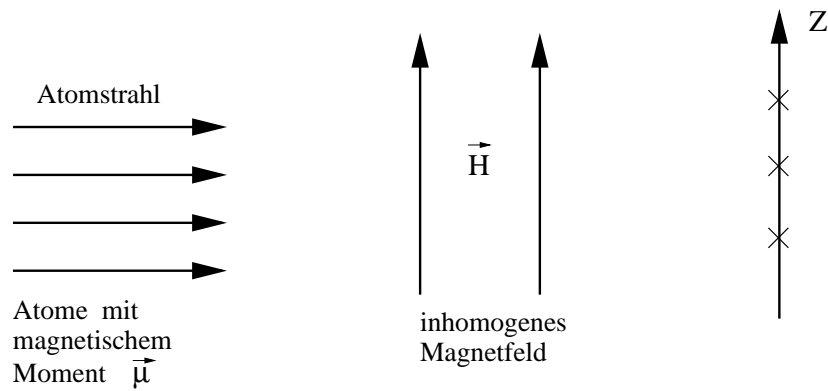
- Existieren Ionisationsspuren in Wilson–Kammer
(enthält übersättigten Wasserdampf, eindringende Elektronen ionisieren die Gasatome entlang der Flugbahn \rightarrow Ionen wirken als kondensationskeime (Wasser hat Dipolmoment \rightarrow Abschirmung der Ionen, Abschirmung der abgeschirmten Ionen etc.?) \rightarrow Expansion und damit verbundene Abkühlung \rightarrow Wassertröpfchen die sichtbar sind.)
- Streu– und Stoßexperimente zwischen mikroskopischen Teilchen (Beschleuniger)
- Milikan–Versuch: Quantisierung der Ladung $e_0 = 1,6021 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
- diskrete Natur des Festkörpers (s. z.B. Versuch von Davisson + Germer)

1.3 Diskrete Zustände

1.3.1 Richtungsquantelung

Stern–Gerlach Experiment (1922): paramagnetische Atome werden in inhomogenes Magnetfeld geschossen

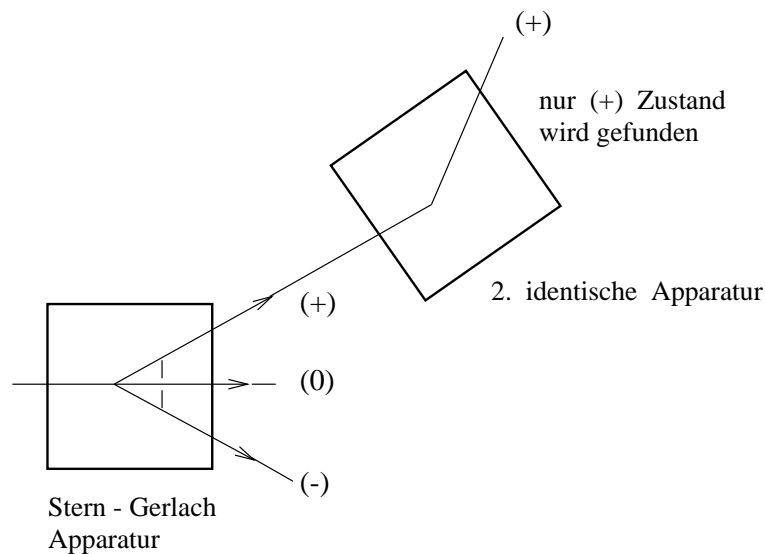
Inhomogenes Magnetfeld übt Kraft aus: $\mathbf{K} = \text{grad}(\vec{\mu} \cdot \vec{H}) = \mu_z \frac{\partial H}{\partial z} \hat{z}$. Erwarten demnach kontinuierliche Verteilung der abgelenkten Atome längs z , da μ_z kontinuierlich auf $[-\mu, \mu]$ verteilt vorliegen sollte (siehe auch Zeichnung ...).



Der experimentelle Befund jedoch: diskrete Auftreffpunkte (H : zwei Auftreffpunkte)
 $\rightarrow \mu_z$ nimmt nur diskrete Werte an.

Erklärung: diese diskreten Werte entsprechen der Richtungsquantelung des Drehimpulses (siehe später).

Dieses Experiment ist ein weiteres Beispiel zur Präparation eines quantenmechanischen Systems in einem bestimmten Zustand. Dies wird durch 2. Experiment nachgewiesen:



1.3.2 Energiequantelung

Licht wird in scharfen Spektrallinien von Atomen emittiert oder absorbiert; sie gehorchen dem Ritzschen Kombinationsprinzip (1908):

Frequenzen können als Differenzen weniger Terme ausgedrückt werden, z.B. beim H-Atom

$$\nu = R \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad m > n \text{ ganz}$$

R ist die Rydbergkonstante. Klassische Erklärung völlig unmöglich: Elektronen auf Keplerbahnen würden kontinuierlich Energie infolge Abstrahlung verlieren \rightarrow erwarten kontinuierliches Spektrum und schlimmer noch, Atome wären nicht stabil.

In Wirklichkeit scheint vorzuliegen:

Es kommen nur diskrete Energien vor: E_0, E_1, \dots . Bei Übergängen werden diskrete Energien frei,

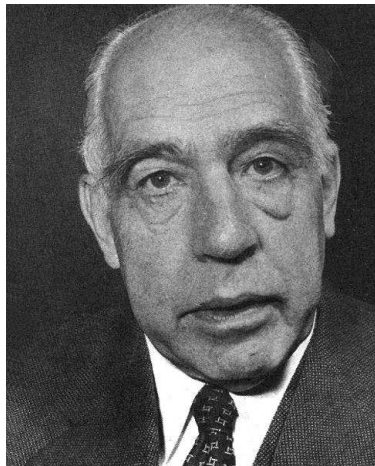
$$E_n - E_m = h\nu = \text{Energie des Lichtquants.}$$

Es folgt, die diskrete Energien entsprechen der Balmer Formel für das Elektron im Coulombfeld des Protons:

$$E_n = -h \frac{R}{n^2} \quad n = 1, 2, \dots$$

Außerdem muß es dann ein tiefstes stabiles Niveau mit der Energie E_0 geben.

Bohr 1913: Quantisierung klassischer Bahnen $\oint p dq = h \cdot n$. Mit dem Teilchencharakter ist Stabilität der Bahnen nicht zu vereinbaren.



Niels Bohr (1885–1962)

Kapitel 2

Wellenfunktion und Schrödingergleichung

In diesem Kapitel legen wir die Grundlage für die Erklärung, bescheidener: für die Beschreibung der Phänomene, die wir im Kapitel 1 geschildert haben.

Es liegt nahe, Teilchen in Analogie zu Wellen zu beschreiben, aber die Analogie ist nicht vollständig. Das direkte Wellen-Analogon zu einem Teilchen, ein Wellenpaket, läuft mit der Zeit auseinander. Elektronen bleiben aber immer als Teilchen bestehen, sie teilen sich auch nicht. Die Welle, die dem Teilchen zugeordnet ist, muss deshalb von anderer Natur sein als die der üblichen Wellenphänomene. Sie ist tatsächlich eine Wahrscheinlichkeitsamplitude, ihr Betragsquadrat gibt die Wahrscheinlichkeitsdichte an.

2.1 Die Wellenfunktion

Um das Doppelspaltexperiment quantitativ zu deuten, erinnern wir uns zunächst an die Beschreibung eines entsprechenden Experiments für elektromagnetische oder Wasserwellen.

In diesen Fällen beschreibt man elektromagnetische Wellen durch die elektrische und magnetische Feldstärke, die Wasserwellen durch den Realteil von ($e^{i\alpha} = \cos \alpha + i \sin \alpha$)

$$\begin{aligned} h_i(\mathbf{x}, t) &= |h_i(\mathbf{x})| e^{i(\varphi_i(\mathbf{x}) + \omega t)} = h_i(\mathbf{x}) e^{i\omega t}, \\ \operatorname{Re}(h_i(\mathbf{x}, t)) &= |h_i(\mathbf{x})| \cos(\varphi_i(\mathbf{x}) + \omega t). \end{aligned}$$

$h_i(\mathbf{x})$ ist die komplexe Amplitude der Welle. Die Energie (oder Intensität I_i) der Welle ist proportional zum Quadrat der zeitgemittelten Größe $(\operatorname{Re} h_i(\mathbf{x}, t))^2$, ($T =$

$2\pi/\omega$)

$$I_i = \frac{1}{T} \int_0^T dt |h_i(\mathbf{x})|^2 \cos^2(\varphi_i(\mathbf{x}) + \omega t) = \frac{1}{2} |h_i(\mathbf{x})|^2,$$

$$\frac{1}{T} \int_a^{a+\frac{2\pi}{\omega}} \cos^2(\omega t) dt = \frac{1}{2T} \left[t + \frac{1}{2\omega} \sin 2\omega t \right]_a^{a+T} = \frac{T}{2}.$$

Sind beide Spalten geöffnet, folgt aus der Superposition für die Gesamtamplitude

$$h_{12}(\mathbf{x}, t) = h_1(\mathbf{x}, t) + h_2(\mathbf{x}, t)$$

und

$$\begin{aligned} I_{12} = \frac{1}{2} |h_1(\mathbf{x}) + h_2(\mathbf{x})|^2 &= \frac{1}{2} |h_1|^2 + \frac{1}{2} |h_2|^2 + |h_1| |h_2| \cos(\varphi_1(\mathbf{x}) - \varphi_2(\mathbf{x})) \\ &= I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2} \cos(\varphi_1(\mathbf{x}) - \varphi_2(\mathbf{x})). \end{aligned}$$

Der letzte Term ist der sogenannte **Interferenztterm**. Im Falle einer Kugelwelle mit Wellenzahl k ist $\varphi_1(\mathbf{x}) = k\sqrt{L^2 + (x - \frac{d}{2})^2}$ und $\varphi_2(\mathbf{x}) = k\sqrt{L^2 + (x + \frac{d}{2})^2}$, so dass für $x, d \ll L$ $\cos(\varphi_1(\mathbf{x}) - \varphi_2(\mathbf{x})) \approx \cos(kxd/L)$ folgt. Der Abstand der Interferenz-Maxima ist daher $\Delta x = 2\pi nL/kd$.

Zur Erklärung des Experiments mit Elektronen führen wir eine der komplexen Größe $h_i(\mathbf{x}, t)$ entsprechende **Wellenamplitude (oder – funktion)** $\psi(\mathbf{x}, t)$ ein. $\psi(\mathbf{x}, t)$ kann nicht direkt als Wellenamplitude wie bei Wasserwellen interpretiert werden, wir hatten die Unterschiede im Doppelspaltexperiment bereits kennengelernt. Statt dessen sprechen wir von einer **Wahrscheinlichkeitsamplitude**. Interferenz, wie experimentell für Elektronen beobachtet, kann man erreichen, wenn man $|\psi(\mathbf{x}, t)|^2$ als **Wahrscheinlichkeitsdichte** interpretiert, ein Elektron am Ort \mathbf{x} zur Zeit t zu beobachten. Jeder Spalt ist jetzt Ausgangspunkt einer “Elektronenwelle” und

$$P_i(\mathbf{x}, T) \simeq \frac{\int_0^T dt |\psi_i(\mathbf{x}, t)|^2}{\int_0^T dt \int d^2x |\psi_i(\mathbf{x}, t)|^2}.$$

Sind beide Spalten offen, dann kommt es zur **Superposition** der Wellen,

$$\psi_1(\mathbf{x}, t) + \psi_2(\mathbf{x}, t) = \psi(\mathbf{x}, t).$$

Die Schwärzung ist dann proportional zu $|\psi(\mathbf{x}, t)|^2$.

Aber: Jedes Elektron macht einen lokalisierten Einschlag, d.h. die Schwärzung ist nicht ausgeschmiert, $|\psi|^2$ gibt die Wahrscheinlichkeitsdichte an. Die Wahrscheinlichkeitsdichte entsteht nicht durch Interferenz vieler gleichzeitig einfallender Elektronen, sondern man erhält das gleiche Interferenzbild, wenn jedes Elektron einzeln

auftritt, es ist also nicht das Resultat der Wechselwirkung der Elektronen. Mit obiger Interpretation von $|\psi(\mathbf{x}, t)|^2$ folgt unmittelbar

$$\int d^3x |\psi^2(\mathbf{x}, t)| = 1, \quad \forall t.$$

2.1.1 Wellenpaket und de-Broglie Relationen

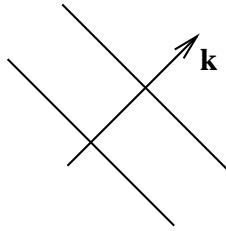
Wie kann die Wellenamplitude $\psi(\mathbf{x}, t)$ aussehen? Wir betrachten einige einfache Fälle.

Wir beginnen mit der einfachsten Situation, der **Bewegung eines freien Teilchens**.

Ansatz: einfachster Wellentyp ist der einer **ebenen Welle**: $\psi(\mathbf{x}, t) \propto e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-\omega t)}$.

Was charakterisiert diese ebene Welle?

Fläche konstanter Phase: $\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t = \text{const}$ ist Ebene $\perp \mathbf{k}$ zu fester Zeit



Fläche verschiebt sich in Richtung \mathbf{k} mit wachsender Zeit mit der Phasengeschwindigkeit $v_{\text{phase}} = \omega/|\mathbf{k}|$.

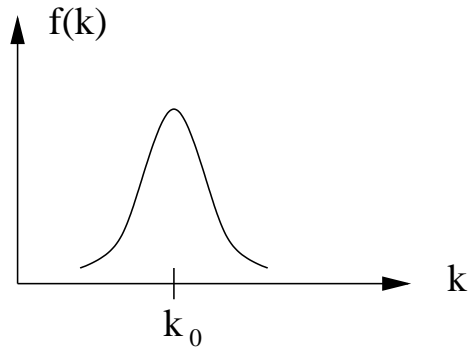
Dieser Wellentyp lokalisiert das Teilchen nicht: $|\psi(\mathbf{x}, t)| \propto \text{const}$, unabhängig von Ort und Zeit; er ist also nicht geeignet, um eine experimentelle Situation zu beschreiben, in der ein Teilchen (genauer: seine Aufenthaltswahrscheinlichkeit) räumlich lokalisiert ist. Dies lässt sich jedoch durch Überlagerung ebener Wellen erreichen:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \int d^3k f(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-\omega t)}$$

Dabei ist $\omega = \omega(\mathbf{k})$ anzunehmen.

Bei geeignetem $f(\mathbf{k})$ ist $|\psi|^2$ nur in gewissem Raumbereich merklich von Null verschieden, d.h. das Teilchen ist dort lokalisiert; dieser Raumbereich kann sich mit der Zeit verschieben, d.h. das Teilchen bewegt sich.

Beispiel hierfür: habe $f(\mathbf{k})$ bei $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$ ein ausgeprägtes Maximum:



Um die wichtigsten Charakteristika des Wellenpakets kennenzulernen entwickeln wir um $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$:

$$\begin{aligned}\omega(\mathbf{k}) &= \omega(\mathbf{k}_0) + (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \nabla_{\mathbf{k}}\omega(\mathbf{k})\Big|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0} + \dots \\ \psi(\mathbf{x}, t) &\approx e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{x} - i\omega(\mathbf{k}_0)t} \int d^3k f(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot (\mathbf{x} - (\nabla_{\mathbf{k}}\omega)t)}.\end{aligned}$$

Sei das Teilchen zur Zeit $t = 0$ lokalisiert (d.h. $f(\mathbf{k})$ geeignet gewählt) dann verschiebt sich das **Maximum** gemäß

$$\mathbf{x} = (\nabla_{\mathbf{k}}\omega(\mathbf{k}))t \equiv \mathbf{v}_{\text{Gruppe}} \cdot t.$$

Wir interpretieren diese sogenannte **Gruppengeschwindigkeit als Teilchengeschwindigkeit** (wir kommen später darauf zurück):

$$\mathbf{v} = \nabla_{\mathbf{k}}\omega(\mathbf{k}_0) = \omega'(k)\hat{k}_0 = \frac{p}{m}\hat{k}_0,$$

\hat{k}_0 ist der Einheitsvektor. Ferner haben wir die nicht-relativistische Relation $p = \hbar k$ und die Isotropie des Raumes benutzt, die $\omega(\mathbf{k}) = \omega(|\mathbf{k}|)$ liefert.

Zur Beschreibung eines freien Teilchens benutzen wir hier die de Broglie – Relation

$$\begin{aligned}E &= \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \hbar\omega(k), \\ \omega(\mathbf{k}) &= \frac{\hbar k^2}{2m}, \\ v_{\text{Gruppe}} &= \frac{\hbar k}{m}.\end{aligned}$$

Wie wirken sich nun die unterschiedlichen Phasengeschwindigkeiten

$$v_{\text{phase}} = \frac{\omega}{|k|} = \frac{\hbar}{2m}k$$

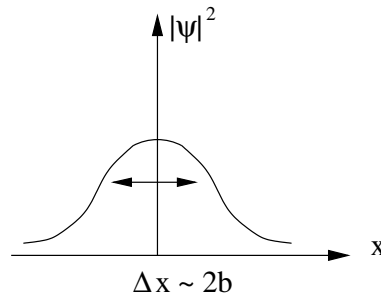
der Summanden im Wellenpaket aus? Sie werden i.a. in einer Formänderung des Wellenpaketes resultieren. Tatsächlich **zerfließt** das Wellenpaket. Es ist klar, dass damit die ursprünglich von de Broglie intendierte Interpretation von $\psi(\mathbf{x})$ als eine

Teilchenwelle nicht aufrecht erhalten werden kann. Wird $|\psi(\mathbf{x})|^2$ allerdings als Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte interpretiert, bereitet das Zerfließen kein Problem mehr.

Wir betrachten jetzt ein **analytisches Beispiel**, der Einfachheit halber in einer Raumdimension. Die lokalisierte Amplitude zur Zeit $t = 0$ sei gegeben durch

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\sqrt{b}} e^{-(x^2/2b^2)} e^{ik_0 x}, \quad \text{Normierung} \quad \int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = 1.$$

Wie sieht $\psi(x, t)$ zu einem späteren Zeitpunkt aus? Es gilt $\psi(\mathbf{x}, t) = \int d^3k f(k) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{x} - \omega t)}$. Berechne jetzt $f(k)$ bei $t = 0$. $f(k)$ ist nicht zeitabhängig.



Dieses ψ läßt sich in der Form eines Wellenpaketes darstellen.

Wir benutzen Fouriersatz: jede absolut integrierbare Funktion $\psi(x)$ ($\int dx |\psi(x)| < \infty$) läßt sich darstellen als

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dk f(k) e^{ikx}$$

und es gilt die Umkehrformel

$$f(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ikx} \psi(x).$$

Tatächlich, setzen wir die Rücktransformation in die erste Beziehung ein, so erhalten wir

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx' e^{-ikx'} \psi(x') e^{ikx} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx' e^{-ik(x'-x)} \psi(x') = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \delta(x-x') \psi(x') = \psi(x) \end{aligned}$$

wobei wir die Relation

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-ik(x'-x)} = 2\pi \delta(x-x')$$

benutzt haben. (Siehe etwa M. J. Lighthill, Einführung in die Theorie der Fourieranalyse und der verallgemeinerten Funktionen, BI, Bd. 139.)

Daraus folgt

$$\sqrt[4]{\pi}\sqrt{b}f(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ikx} e^{-x^2/2b^2} e^{ik_0x} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2/2b^2} \cos(k_0 - k)x.$$

Dieses Integral kann man mit verschiedenen Methoden berechnen. Die direkte besteht darin, $e^{iqx} = \cos qx + i \sin qx$ zu schreiben (mit $q = k_0 - k$), dann gibt der Imaginärteil aus Symmetriegründen keinen Beitrag zum Integral, der Realteil gibt

$$f(k) = \frac{\sqrt{b}}{\sqrt{2\pi^{3/2}}} e^{-\frac{b^2}{2}(k-k_0)^2}$$

(siehe "Bronstein" oder man entwickelt den Cosinus in eine Potenzreihe, rechnet die entstandenen Gauß-Integrale aus und summiert die dann entstandene (Exponential-)Reihe wieder auf, dies ist elementar machbar).

Ein weitere Methode benutzt die Funktionentheorie. Man führt zunächst eine quadratische Ergänzung im Exponenten aus:

$$\begin{aligned} \frac{-x^2}{2b^2} + i(k_0 - k)x &= -\frac{1}{2b^2} \left[x^2 - 2ib^2(k_0 - k)x \right. \\ &\quad \left. + \left(ib^2(k_0 - k) \right)^2 - \left(ib^2(k_0 - k) \right)^2 \right] \\ &= -\frac{1}{2b^2} \left[x - ib^2(k_0 - k) \right]^2 - \frac{b^2}{2}(k_0 - k)^2 \end{aligned}$$

Dies führt auf das Integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-(1/2b^2) \left[x - ib^2(k_0 - k) \right]^2} = \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-(1/2b^2)z^2} = \sqrt{2\pi}b$$

Die Variable $z = x - ib^2(k_0 - k)$ ist nun komplex, die Integration ist parallel zur reellen Achse mit dem Imaginärteil $-ib^2(k_0 - k)$ auszuführen. Nach dem Cauchyschen Integralsatz ist aber das Integral über eine analytische Funktion (wie die Exponentialfunktion) unabhängig vom Integrationsweg in der komplexen Ebene. Wir können also den Integrationsweg für $|x| < R$ von $z = x - ib^2(k_0 - k)$ auf die reelle $z = x$ Achse verschieben und die Integration dort ausführen. Im Limes $R \rightarrow \infty$ verschwinden

die Beiträge von der Integration über z mit von Null verschiedenem Imaginärteil exponentiell. Das verbleibende Integral ist eins über reelle z und gibt wieder das obige Ergebnis für $f(k)$.

Damit lässt sich $\psi(x, 0)$ in der Form

$$\psi(x, 0) = \frac{\sqrt{b}}{\sqrt{2\pi^{3/2}}} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-(b^2/2)(k-k_0)^2} e^{ikx}$$

schreiben. Die Hauptbeiträge zum Integral kommen aus der Region $|k - k_0|b \lesssim 1$.

Wir können sofort eine wichtige Einsicht hieraus gewinnen: die Ortsunschärfe $\Delta x \sim 2b$ führt auf k -Unschärfe $\Delta k \sim \frac{1}{2b} \sim \frac{1}{\Delta x}$. D.h. je besser die räumliche Lokalisierung, desto breiter die k -Verteilung und umgekehrt.

Als nächstes betrachten wir die zeitliche Entwicklung des Wellenpakets: wir benutzen hierzu das soeben berechnete $f(k)$ um die Wellenfunktion aufzuschreiben

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \frac{\sqrt{b}}{\sqrt{2\pi^{3/2}}} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-(b^2/2)(k-k_0)^2} e^{i(kx - \omega(k)t)}, \\ \omega(k) &= \frac{\hbar}{2m} k^2. \end{aligned}$$

Im Exponenten steht wiederum eine quadratische Form in k , d.h. das Integral ist von Gaußscher Form und folglich exakt integrierbar. Die Wellenfunktion selbst hat die Form

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt[3]{\pi}} \frac{1}{\sqrt{b(t)}} e^{ik_0 x + i\varphi} e^{-\frac{(x - v_{\text{Gruppe}} t)^2}{2(b^2 + i\hbar t/m)}}, \\ \varphi &= -\frac{\hbar k_0^2}{2m} t - \frac{1}{2} \arctan \underbrace{\sqrt{\frac{b^2(t) - b^2}{b^2}}}_{\text{Phasenverschiebung}}, \quad b^2(t) = b^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 b^2}, \\ |\psi(x, t)|^2 &= \frac{1}{\sqrt{b^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2}}} e^{-\frac{(x - (\hbar k_0/m)t)^2}{b^2 \left(1 + (\hbar^2/m^2)(t^2/b^4)\right)}} \frac{1}{\sqrt{\pi}} = \frac{1}{\sqrt{\pi} b(t)} e^{-\frac{(x - v_{\text{Gruppe}} t)^2}{b^2(t)}}. \end{aligned}$$

Wir sehen, daß der Bereich maximaler Aufenthaltswahrscheinlichkeit sich in x -Richtung um $x = (\hbar k_0/m)t$ bewegt; die Geschwindigkeit $\hbar k_0/m$ stimmt mit der Gruppengeschwindigkeit $v_{\text{Gruppe}} = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=k_0} = \frac{\hbar k_0}{m}$ überein, entsprechend der bereits eingeführten Interpretation. Jedoch wächst auch die Breite der Verteilung im Lauf der Zeit:

$$b(t) \equiv b \sqrt{1 + \left(\frac{\hbar t}{mb^2}\right)^2}.$$

Der Term $\frac{\hbar t}{mb^2}$ in der Klammer hat eine einfache **physikalische Bedeutung**: mit b als anfängliche Ortsunschärfe des Wellenpakets ist $\frac{\hbar}{b}$ die anfängliche Impulsunschärfe und $\frac{\hbar}{mb}$ die anfängliche Geschwindigkeitsunschärfe, nach der Zeit t ist

also zur ursprünglichen Ortsunschärfe b eine Korrektur $\delta b(t) \approx \frac{\hbar t}{mb}$ hinzugekommen und wir können $b(t)$ als

$$b(t) = \sqrt{b^2 + \delta b(t)^2}.$$

schreiben. Für große Zeiten, d.h. für $\delta b(t) \gg b(t)$ ist dann $b(t) \approx |\delta b(t)|$, wie zu erwarten. Da auch für negative Zeiten das Paket zerfließen muß, kann $b(t)$ nur eine gerade Funktion von $\delta b(t)$ sein.

Aus Teilchenstrahlexperiment weiß man, daß die Teilchen im Strahl lokalisiert sind und dabei große Strecken zurücklegen. In praxi passiert also nicht das folgende:



Bei den üblichen Anordnungen und Zeiten ist der Korrekturterm zu b völlig zu vernachlässigen.

Fazit: Das Wellenpaket bewegt sich mit der Gruppengeschwindigkeit $\frac{\hbar k_0}{m} = \frac{p_0}{m} = v_{\text{gruppe}}$.

2.2 Die Schrödingergleichung

2.2.1 Die Bewegungsgleichung im Schrödingerbild

Der eben beschriebene Weg, $\psi(\mathbf{x}, t)$ zu finden, ist nicht auf kompliziertere Probleme zu verallgemeinern. Statt dessen suchen wir eine dynamische Gleichung, eine "Wellengleichung" für die Wahrscheinlichkeitsamplitude.

$\psi(\mathbf{x}, t)$ bestimmt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens am Ort \mathbf{x} zur Zeit t . Eine vernünftige Theorie muß jetzt die Frage beantworten können: Wie sieht $\psi(\mathbf{x}, t)$ zu späteren Zeiten aus? **Man benötigt daher eine dynamische Gleichung für die zeitliche Entwicklung von $\psi(\mathbf{x}, t)$.** Die Erfahrung bestätigt, daß man von folgenden Postulaten ausgehen kann:

1. Postulat: ψ zur Zeit t ist die vollständige Beschreibung des Zustandes des Systems und legt demnach die zeitliche Entwicklung fest.

→ Die dynamische Gleichung muß eine **Differentialgleichung 1. Ordnung in der Zeit** sein (ansonsten müssten auch Zeit-Ableitungen von ψ nach t vorgegeben werden).

2. Postulat: Das Superpositionsprinzip soll gelten, d.h. mit ψ_1 und ψ_2 soll auch $\lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2$ Lösung der dynamischen Gleichung sein, $\lambda_{1,2}$ sind hier komplexe Zahlen.

→ Die dynamische Gleichung muß **linear in ψ** und **homogen** sein.

Mathematische Zwischenbemerkung: Begriff des Operators

Die Zuordnung $\psi(\mathbf{x}, t) \xrightarrow{A} \psi'(\mathbf{x}, t)$ soll geschrieben werden $\psi' = \hat{A}\psi$.

Beispiele für Operatoren sind:

$$\begin{aligned} \hat{A} &= \frac{\partial}{\partial t} & \psi'(\mathbf{x}, t) &= \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \\ \hat{A} &= \frac{\partial}{\partial x} & \psi'(\mathbf{x}, t) &= \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial x} \\ \hat{A} &= f(\mathbf{x}, t) & \psi'(\mathbf{x}, t) &= f(\mathbf{x}, t)\psi(\mathbf{x}, t) \quad \text{Multiplikationsoperator} \\ \hat{A} &= c & \psi'(\mathbf{x}, t) &= c\psi(\mathbf{x}, t) \quad \text{Multiplikation mit } c \end{aligned}$$

Lineare Operatoren erfüllen die Relation

$$\hat{A}(\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2) = \lambda_1\hat{A}\psi_1 + \lambda_2\hat{A}\psi_2.$$

Alle genannte Beispiele sind **linear**.

Eine weitere Bemerkung betrifft die **Notation der Operatoren**: Wir werden später eine **abstrakte Formulierung der Quantenmechanik** kennenlernen, die jetzt hier eingeführten Operatoren erweisen sich dann als eine spezielle Darstellung dieser abstrakten Operatoren. Um die Notation nicht unnötig zu komplizieren werden wir im Manuskript, mit Ausnahme des Abschnitts über Darstellungstheorie, die Operatoren in den verschiedenen Darstellungen mit dem gleichen Symbol bezeichnen. Die hier besprochene Darstellung ist die Ortsdarstellung.

Zurück zu den zwei Postulaten: die gesuchte Bewegungsgleichung für ψ muß daher von der Form sein:

$$\frac{d\psi(t)}{dt} = \hat{O}\psi(t), \quad \hat{O} \text{ linearer Operator}$$

oder in der bewährten Notation

$$i\hbar \frac{d\psi(t)}{dt} = \hat{H}(t)\psi(t).$$

Dies ist die grundlegende Bewegungsgleichung, die **Schrödingergleichung**, die das allg. Gesetz für die zeitliche Entwicklung eines quantenmechanischen Systems darstellt. $\hat{H}(t)$ ist ein linearer Operator, der für das System charakteristisch ist, er wird **Hamiltonoperator** genannt.

Wie kann $\hat{H}(t)$ aussehen?



Erwin Schrödinger (1887–1961)

Wir betrachten zunächst ein **freies nichtrelativistisches Teilchen** das, wie wir argumentiert haben, durch ein Wellenpaket beschreibbar ist:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \int d^3p f(\mathbf{p}) e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{x} - E(\mathbf{p})t)/\hbar},$$

dabei haben wir die Ersetzung $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$, $E = \hbar\omega = \mathbf{p}^2/2m$ benutzt. Damit ist die zeitliche Entwicklung explizit bekannt und $\hat{H}(t)$ muß sich ablesen lassen:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} &= \int d^3p f(\mathbf{p}) E(\mathbf{p}) e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{x} - E(\mathbf{p})t)/\hbar} \\ \frac{\hbar}{i} \nabla\psi &= \int d^3p f(\mathbf{p}) \mathbf{p} e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{x} - E(\mathbf{p})t)/\hbar} \\ -\hbar^2 \nabla^2\psi &= \int d^3p f(\mathbf{p}) \mathbf{p}^2 e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{x} - E(\mathbf{p})t)/\hbar} = 2m \int d^3p f(\mathbf{p}) E(\mathbf{p}) e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{x} - E(\mathbf{p})t)/\hbar} \end{aligned}$$

Durch Vergleich sieht man, dass offenbar die Beziehung

$$i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2\psi$$

ist erfüllt ist. Dies ist die **Schrödingergleichung für freie nichtrelativistische Teilchen**. Der Hamiltonoperator für freie nichtrelativistische Teilchen ist demnach

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2.$$

Formal erhält man die Schrödingergleichung für freie nichtrelativistische Teilchen offenbar aus der klassische Relation

$$E = \frac{1}{2m} \mathbf{p} \cdot \mathbf{p}$$

Die Korrespondenz zwischen klassischer und Quantenmechanik besteht nun in der Ersetzung

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \mathbf{p} \rightarrow \hat{\mathbf{p}} = \frac{\hbar}{i} \nabla,$$

d.h. wir ordnen den klassischen Größen Operatoren zu. Diese Art der Herleitung sichert das Korrespondenzprinzip (wie wir noch sehen werden).

Bevor wir uns kompliziertere Fälle anschauen, wollen wir eine kleine **Abschweifung hin zu relativistischen Teilchen** machen. In diesem Fall ist die Beziehung zwischen Energie und Impuls durch $E = \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2}$ gegeben. In dieser Form ist die Ausführung der Ersetzung von klassischen Größen durch Operatoren wegen der auftretenden Wurzel (welches Vorzeichen beim Wurzelziehen soll man nehmen?) allerdings problematisch. Es ist deshalb günstiger, diese Beziehung in der Form

$$E^2 = m^2 c^4 + p^2 c^2$$

zu schreiben. Obige Ersetzung durch Operatoren führt dann auf die Gleichung

$$(i\hbar \frac{\partial}{\partial t})(i\hbar \frac{\partial}{\partial t})\psi = (m^2 c^4 + c^2 \frac{\hbar}{i} \nabla \frac{\hbar}{i} \nabla)\psi$$

oder nach einer kleinen Umformung

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \lambda_c^{-2} \right) \psi = 0$$

wobei wir die Comptonlänge $\lambda_c = \frac{\hbar}{mc}$ eingeführt haben. Dies ist die **Klein-Gordon-Gleichung**, die allerdings den Nachteil hat, dass sie zweite Ableitungen in der Zeit enthält und ψ allein damit nicht mehr eindeutig die Entwicklung des Systems bestimmt. Erst Dirac gelang es, eine befriedigende Theorie für den relativistischen Fall aufzustellen. Wir kommen noch darauf zurück.

Als nächstes betrachten wir ein **nicht-relativistisches Teilchen in einem äußeren Potential** $V(\mathbf{x})$. Dessen klassische Hamiltonfunktion ist

$$E = H = \mathbf{p}^2 / 2m + V(\mathbf{x}).$$

Wir postulieren jetzt die zugehörige Schrödingergleichung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{x}) \right)}_{\text{Hamiltonoperator}} \psi(\mathbf{x}, t)$$

Dieses Vorgehen läßt sich unmittelbar auf ein System mit n Freiheitsgraden durch folgendes allgemeines **Postulat für Systeme mit klassischer Korrespondenz** erweitern:

Der klassischen Hamiltonfunktion $H(\mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_n, \mathbf{p}_1 \dots \mathbf{p}_n, t)$ wird der Hamiltonoperator

$\hat{H}(\mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_n, \frac{\hbar}{i} \nabla_{x_1} \dots \frac{\hbar}{i} \nabla_{x_n}, t)$ zugeordnet, und Schrödingergleichung lautet

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_n, t) = \hat{H}(\mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_n, \frac{\hbar}{i} \nabla_{x_1}, \dots, \frac{\hbar}{i} \nabla_{x_n}, t) \psi(\mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_n, t).$$

Als Beispiel betrachten wir ein Atom mit Z Elektronen:

Klassische Hamiltonfunktion:

$$\hat{H} = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \sum_{i=1}^Z \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_e} - \sum_{i=1}^Z \frac{Ze^2}{|\mathbf{X} - \mathbf{x}_i|} + \sum_{i < j} \frac{e^2}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|},$$

M ist die Masse des Atomkerns, \mathbf{X} bezeichnet die Position des Atomkerns. Die zugehörige Schrödingergleichung ist dann

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(\mathbf{X}, \mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_Z, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\mathbf{X}}^2 - \sum_{i=1}^Z \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_{x_i}^2 - \sum_{i=1}^Z \frac{Ze^2}{|\mathbf{X} - \mathbf{x}_i|} + \sum_{i < j} \frac{e^2}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|} \right) \psi(\mathbf{X}, \mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_Z, t).$$

Vorsicht bei Übergang von klassischer Hamiltonfunktion zu Hamiltonoperator in **generalisierten Koordinaten**:

$$H(q_1 \dots q_f, p_1 \dots p_f, t) \rightarrow \hat{H}(q_1 \dots q_f, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_1} \dots \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_f}, t).$$

Beispiel: freies Teilchen in zwei Dimensionen:

Übergang in kartesischen Koordinaten

$$\frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2) \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right).$$

Zur Erinnerung:

$$\begin{aligned} L &= T = \frac{m}{2}(\dot{x}^2 + \dot{y}^2), \quad p_x = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x}, \quad p_y = \frac{\partial L}{\partial \dot{y}} = m\dot{y}, \\ H &= \sum p_i \dot{q}_i - L = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2). \end{aligned}$$

Übergang zu Zylinderkoordinaten $x = \rho \cos \varphi$, $y = \rho \sin \varphi$:

$$\begin{aligned} L &= \frac{m}{2} \left\{ (\dot{\rho} \cos \varphi - \rho \sin \varphi \dot{\varphi})^2 + (\dot{\rho} \sin \varphi + \rho \cos \varphi \dot{\varphi})^2 \right\} \\ &= \frac{m}{2} \{ \dot{\rho}^2 + \rho^2 \dot{\varphi}^2 \}, \\ p_\rho &= \frac{\partial L}{\partial \dot{\rho}} = m\dot{\rho}; \quad p_\varphi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = m\rho^2 \dot{\varphi}, \\ H &= \frac{1}{2m} (p_\rho^2 + \frac{1}{\rho^2} p_\varphi^2). \end{aligned}$$

Bei Übergang von der Hamiltonfunktion in Zylinderkoordinaten zum Hamiltonoperator erhält man das **falsche Resultat**.

$$\frac{1}{2m} \left(p_\rho^2 + \frac{1}{\rho^2} p_\varphi^2 \right) \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right)$$

Den korrekten Hamiltonoperator in Zylinderkoordinaten erhält man wenn man im Hamiltonoperator in kartesischen Koordinaten zu Zylinderkoordinaten übergeht:

$$\begin{aligned} x &= \rho \cos \varphi \\ y &= \rho \sin \varphi \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right). \end{aligned}$$

Die Erfahrung lehrt, daß der Hamiltonoperator definiert durch kartesische Koordinaten der richtige ist; bezüglich Polarkoordinaten ist also die 2. Form richtig. Tatsächlich sichert der Übergang von der klassischen Hamiltonfunktion zum quantenmechanischen Hamiltonoperator in kartesischen Koordinaten automatisch die Forminvarianz der Schrödinger-Gleichung bei Achsendrehungen.

Allgemein: die Gültigkeit des Hamiltonoperators ist letztlich nur durch Vergleich mit Experimenten feststellbar. Für Systeme ohne klassische Korrespondenz ist \hat{H} nur durch "trial and error" zu gewinnen. (Invarianzeigenschaften wichtige Konstruktionshilfe!)

2.2.2 Operatoren und Skalarprodukt

Schon diskutiert Operator

$$\psi(\mathbf{x}, t) \xrightarrow{A} \psi'(\mathbf{x}, t) = \hat{A}\psi(\mathbf{x}, t), \quad \text{linear, wenn } \hat{A}(\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2) = \lambda_1\hat{A}\psi_1 + \lambda_2\hat{A}\psi_2,$$

($\lambda_{1,2}$ komplexe Zahlen).

$$\text{Beispiel: } \hat{H}, i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \hat{\mathbf{p}} = \frac{\hbar}{i} \nabla, f(\mathbf{x}, \mathbf{t})$$

$$(\hat{A} + \hat{B})\psi = \hat{A}\psi + \hat{B}\psi, \quad \hat{A}\hat{B}\psi = \hat{A}(\hat{B}\psi), \quad \text{i.a. gilt aber } \hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}.$$

Wir werden künftig Integrale der Form

$$\int d^3x \phi^*(\mathbf{x}) \hat{A}\psi(\mathbf{x}) \quad (x, y, z) \equiv q$$

oder auch

$$\int d^3x_1 \dots d^3x_n \phi^*(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) \hat{A}\psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) \quad (x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n) \equiv q$$

auszurechnen haben. Abkürzung: q sei die **Gesamtheit der Koordinaten** des quantenmechanischen Systems.

Definiere abkürzende Schreibweise für das **Skalarprodukt**

$$\int dq \phi^*(q, t) \hat{A}(q, t) \psi(q, t) =: (\phi, \hat{A}\psi)$$

Spezialfall: $\hat{A} = 1$. Es gilt dann $(\phi, \phi) \geq 0$.

Bei **quadratintegrablen Funktionen** gilt $(\phi, \phi) < \infty$. Quadratintegrale Funktionen müssen offenbar für große $|\mathbf{x}|$ schneller als $|\mathbf{x}|^{-d/2}$ abfallen: Da ϕ überall endlich ist, kann $\int dq \phi^*(q, t) \phi(q, t) = (\phi, \phi)$ nur durch Beiträge bei großen $|\mathbf{x}|$ divergieren. Fällt dort $|\phi|^2 \sim |\phi_0|^2 |\mathbf{x}|^{-(d+\epsilon)}$ mit $\epsilon > 0$, so ist das Integral offenbar konvergent.

Zu einem Operator \hat{A} lassen sich folgende Operatoren assoziieren, ein

(i) **konjugiert komplexer Operator** \hat{A}^* zu \hat{A} .

falls $\hat{A}\psi = \psi'$, dann erfüllt $\hat{A}^* : \hat{A}^*\psi^* = \psi'^*$.

Beispiel: $A = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow (i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi)^* = \psi'^* = -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^*$ d.h. $\hat{A}^* = -i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$.

(ii) **adjungierter Operator** \hat{A}^\dagger mit der Eigenschaft $(\phi, \hat{A}\psi) = (\hat{A}^\dagger \phi, \psi)$, d.h.

$\int dq \phi^* \hat{A}\psi = \int dq (A^\dagger \phi)^* \psi$ für **beliebige** Funktionen ϕ, ψ .

$(\hat{A}^\dagger)^* = \hat{A}$ heißt **transponierter** Operator.

(iii) **selbstadjungierte** oder **hermitesche** Operatoren erfüllen $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$.

Wir werden später sehen, dass reelle physikalische Größen in der Quantenmechanik durch hermitesche Operatoren beschrieben werden: $\bar{A} = \bar{A}^* = \int dq \psi^* \hat{A}\psi = \int dq (\hat{A}\psi)^* \psi$.

Aus der Definition (ii) folgt $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger$ (zeige das).

Wir zeigen jetzt, daß der Hamiltonoperator hermitesch ist, d.h. es gilt

$$(\phi, \hat{H}\psi) = (\hat{H}\phi, \psi).$$

Beispiel: Teilchen im Potential

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x), \quad V(x) \text{ reel.}$$

V ist offensichtlich hermitesch. Es bleibt die Hermitizität von Δ zu zeigen; hierzu muß der folgende Ausdruck verschwinden (wir integrieren zunächst über ein endliches Volumen \mathcal{V} und lassen dieses dann gegen Unendlich gehen)

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{V}} (\phi^* \Delta \psi - (\Delta \phi)^* \psi) d^3x &= \int_{\mathcal{V}} \nabla \cdot (\phi^* \nabla \psi - (\nabla \phi)^* \psi) d^3x \\ &= \int_{\partial \mathcal{V}} (\phi^* \nabla \psi - (\nabla \phi)^* \psi) \cdot d\mathbf{S} = 0 \end{aligned}$$

(Kugel mit Radius R , $R \rightarrow \infty$, $\mathbf{x} \equiv R\mathbf{x}'$, $|\psi|^2 \sim \frac{1}{x^d} \sim \frac{1}{R^d x'^d}$) falls ϕ, ψ im Unendlichen hinreichend schnell abfällt. Dies ist für quadratintegrale Zustände der Fall im Raum dieser Zustände ist H hermitesch. Tatsächlich verschwinden die Integrale für große $|\mathbf{x}|$ mindestens wie $|\mathbf{x}|^{-d-1+(d-1)} \sim |\mathbf{x}|^{-2}$. Verallgemeinerung auf Mehrteilchen-Hamiltonoperatoren ist einfach.

2.3 Normerhaltung und Kontinuitätsgleichung

Der Zustand eines Teilchens ist durch $\psi(\mathbf{x}, t)$ beschrieben und $|\psi(\mathbf{x}, t)|^2$ ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte. Das Teilchen muß sich irgendwo aufhalten,

$$\int dq |\psi(q, t)|^2 = (\psi, \psi) = \mathcal{N} (= 1)$$

(ψ läßt sich immer normieren $\psi' = \psi/\mathcal{N}^{1/2}$.) Dies muß für alle Zeiten gelten, da das Teilchen nicht verschwinden kann (im nichtrelativistischen Bereich.)

Garantiert die Schrödingergleichung diese Konstanz der Norm \mathcal{N} ?

Untersuchung der Normerhaltung:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} &= \hat{H}\psi \quad \text{konjugiert komplexe Gleichung} \\ -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} &= (\hat{H}\psi)^* \\ \frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 &= \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi = \frac{1}{i\hbar} (\psi^* \hat{H}\psi - (\hat{H}\psi)^* \psi) \end{aligned}$$

oder

$$\frac{\partial}{\partial t} \int d^3x |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 = \frac{1}{i\hbar} \int d^3x (\psi^* \hat{H}\psi - (\hat{H}\psi)^* \psi) = 0,$$

da \hat{H} hermitesch. Physikalische Hamiltonoperatoren müssen hermitesch sein. Demnach gilt für hermitesches \hat{H}

$$\frac{\partial}{\partial t} \int d^3x |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 = 0.$$

Folgt

$$\int d^3x |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 = \text{const. in bezug auf die Zeit.}$$

Kontinuitätsgleichung und Wahrscheinlichkeitsstromdichte:

sei

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{x}), \quad V(\mathbf{x}) \text{ reel} \\ \frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 &= -\frac{1}{i\hbar} \frac{\hbar^2}{2m} (\psi^* \Delta \psi - (\Delta \psi)^* \psi) \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \nabla \cdot (\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi)^* \psi), \end{aligned}$$

dies ist die Kontinuitätsgleichung:

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0$$

mit der **Wahrscheinlichkeitsstromdichte**:

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*) \psi) \equiv \operatorname{Re}(\psi^* \frac{\hbar}{mi} \nabla \psi) = \frac{\hbar |\psi|^2}{m} \nabla \phi$$

wobei wir im letzten Schritt $\psi = |\psi|e^{i\phi}$ geschrieben haben. Die Kontinuitätsgleichung drückt die Erhaltung der Wahrscheinlichkeit aus:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathcal{V}} |\psi|^2 d^3x = - \int_{\mathcal{V}} \operatorname{div} \mathbf{j} d^3x = - \int_{\partial \mathcal{V}} \mathbf{j} \cdot d\mathbf{S}$$

($dS = R^{d-1} d\Omega$, $j \sim \frac{1}{R} \frac{1}{R^d}$, $\int \mathbf{j} d\mathbf{S} \sim R^{d-1} \frac{1}{R^{d+1}} d\Omega$) d.h. Abnahme der Aufenthaltswahrscheinlichkeit in \mathcal{V} ist gleich dem Wahrscheinlichkeitsstrom durch die Oberfläche $\partial \mathcal{V}$. Speziell für $\mathcal{V} \rightarrow \infty$ geht $\mathbf{j} \Rightarrow 0$.

2.4 Beschreibung klassischer Observablen durch hermitesche Operatoren

\mathbf{x} sei der Ort eines Teilchens. Definiere **Erwartungswert** von \mathbf{x} (falls keine Normierung auf 1):

$$\langle \mathbf{x} \rangle \equiv \frac{\int d^3x |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 \mathbf{x}}{\int d^3x |\psi(\mathbf{x}, t)|^2}$$

d.h. jeder Punkt \mathbf{x} wird mit Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(\mathbf{x}, t)|^2$ gewichtet. Dies ist völlig analog zum Würfelspiel, die mittlere Zahl \bar{i} der gewürfelten Augen ergibt sich aus:

$$\text{mittlere Zahl } \bar{i} = \sum_{i=1}^6 ip_i / \sum_{i=1}^6 p_i.$$

\bar{i} stellt sich experimentell ein, falls man sehr oft würfelt. Die Vorhersage jedoch für einen bestimmten Wurf ist unbestimmt.

Entsprechendes gilt hier: für die **Ortsmessung eines Elektrons** im allgemeinen Zustand ψ **ist keinerlei Vorhersage zu machen**; jedoch wenn man an einem identischen Systemen (dieselben Zustände ψ) wiederholt Messungen ausführt, findet man

Postulat: Der mittlere Ort $\bar{\mathbf{x}}$ über viele identische Systeme im Zustand ψ gemessen ist gleich dem quantenmechanischen Erwartungswert $\langle \hat{\mathbf{x}} \rangle$

$$\bar{\mathbf{x}} = \langle \hat{\mathbf{x}} \rangle .$$

Wir ordnen also der **klassischen Variablen** \mathbf{x} den **Operator** $\hat{\mathbf{x}}$ zu; \mathbf{x} ist Multiplikationsoperator.

Wir verallgemeinern nun diese Betrachtung auf beliebige Funktionen von \mathbf{x} . Einer beliebigen Ortsfunktion $F(\mathbf{x})$ wird demnach Multiplikationsoperator $\hat{F}(\mathbf{x})$ zugeordnet. Die Messung von $F(\mathbf{x})$ an vielen identischen Systemen ergibt den Erwartungswert

$$\langle \hat{F} \rangle = \int d^3x |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 F(\mathbf{x}) / \int d^3x |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 = (\psi, \hat{F}(\mathbf{x})\psi) / (\psi, \psi).$$

Falls F reell ist, ist \hat{F} hermitesch

$$\langle \hat{F} \rangle = \langle \hat{F} \rangle^* = \frac{1}{\mathcal{N}} \int d^3x \psi^* \hat{F} \psi = \frac{1}{\mathcal{N}} \int d^3x (\hat{F} \psi)^* \psi \quad \text{q.e.d.}$$

Welcher Operator wird dem klassischen Impuls \mathbf{p} zugeordnet?

Wir betrachten die zeitliche Entwicklung von $\langle \hat{\mathbf{x}} \rangle$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{\mathbf{x}} \rangle &= \frac{d}{dt} \int d^3x |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 \mathbf{x} \quad (\psi \text{ auf 1 normiert}) \\ &= \int d^3x (\psi^* \mathbf{x} \dot{\psi} + \dot{\psi}^* \mathbf{x} \psi) \\ &= -\frac{i}{\hbar} \int d^3x \psi^* \mathbf{x} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right) \psi + \frac{i}{\hbar} \int d^3x \left(\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x) \right) \psi \right)^* \mathbf{x} \psi \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \int d^3x (\psi^* \mathbf{x} \Delta \psi - (\Delta \psi)^* \mathbf{x} \psi). \end{aligned}$$

Zweimal partielle Integration; keine Oberflächenterme falls $\psi \rightarrow 0$ hinreichend schnell für $|\mathbf{x}| \rightarrow \infty$ ($\mathbf{x} = x\mathbf{e}_x + y\mathbf{e}_y + z\mathbf{e}_z$)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{\mathbf{x}} \rangle &= \frac{i\hbar}{2m} \int (\psi^* \mathbf{x} \Delta \psi - \psi^* \Delta(\mathbf{x}\psi)) d^3x \\ \Delta(\mathbf{x}\psi) &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\mathbf{e}_x \psi + \mathbf{x} \frac{\partial}{\partial x} \psi \right) + \frac{\partial}{\partial y} \dots \\ &= \nabla \psi + \nabla \psi + \mathbf{x} \nabla^2 \psi = 2\nabla \psi + \mathbf{x} \Delta \psi. \end{aligned}$$

Somit

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{\mathbf{x}} \rangle = -\frac{i\hbar}{2m} \int \psi^* 2\nabla \psi d^3x = \frac{1}{m} \int \psi^* \frac{\hbar}{i} \nabla \psi d^3x.$$

Dies legt folgende Deutung nahe:

$$m \frac{d}{dt} \langle \hat{\mathbf{x}} \rangle \equiv \langle \hat{\mathbf{p}} \rangle,$$

wobei $\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle$ der Erwartungswert des Impulses des Teilchens im Zustand ψ ist:

$$\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle \equiv \int \psi^* \frac{\hbar}{i} \nabla \psi d^3x.$$

Also Zuordnung: klassischer Impuls $\mathbf{p} \rightarrow$ Operator $\frac{\hbar}{i} \nabla$. Wir haben diese Zuordnung schon beim Übergang der Hamiltonfunktion $H = \mathbf{p}^2/2m$ zum Hamiltonoperator $\hat{H} = -(\hbar^2/2m)\nabla^2$ verwendet.

$\hat{\mathbf{p}} = \frac{\hbar}{i}\nabla$ ist hermitesch. Mit $\nabla(\psi^*\psi) = (\nabla\psi^*)\psi + \psi^*(\nabla\psi)$ folgt

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{V}} \psi^* \frac{\hbar}{i} \nabla \psi \, d^3x &= - \int_{\mathcal{V}} \frac{\hbar}{i} (\nabla \psi)^* \psi \, d^3x + \frac{\hbar}{i} \int_{\partial\mathcal{V}} \psi^* \psi \, d\mathbf{S} \\ &= \int_{\mathcal{V}} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla \psi \right)^* \psi \, d^3x. \end{aligned}$$

Hier haben wir im letzten Schritt $\mathcal{V} \rightarrow \infty$ betrachtet. Dies gilt natürlich nur in Bezug auf einen Raum von quadratintegralen Zuständen.

$|\psi(\mathbf{x})|^2$ ist die Wahrscheinlichkeitsdichte ein Teilchen am Ort \mathbf{x} zu finden. **Kann man die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\tilde{\psi}(\mathbf{p})|^2$ angeben, den Impuls \mathbf{p} zu finden?** Zur Beantwortung dieser Frage betrachten wir die Fouriertransformation von $\psi(\mathbf{x})$.

Wiederholung zur Fouriertransformation

Wir betrachten nur den 1-dimensionalen Fall, die Erweiterung auf höhere Dimensionen ist geradlinig und kann als sukzessive Fouriertransformation für jeweils eine Komponente des Ortsvektors aufgefaßt werden; $f(x, y, z)$ wird zunächst bezüglich x zu $\tilde{f}(k_x, y, z)$ transformiert, dann $\tilde{f}(k_x, y, z)$ bezüglich y zu $\tilde{\tilde{f}}(k_x, k_y, z)$ usw..

Hat eine Funktion $f(x)$ in jedem endlichen Teilintervall höchstens endlich viele Sprungstellen, ist $f(x)$ ferner in jedem endlichen Teilintervall von beschränkter Schwankung und gilt $\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)| dx < \infty$ (diese drei Bedingungen bilden das sogenannte Kriterium von Dirichlet–Jordan), so läßt sich $f(x)$ als Fourierintegral darstellen.

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \tilde{f}(k) e^{ikx}, \quad (2.1)$$

wobei k reell und $\tilde{f}(k)$ komplex ist. Da $f(x)$ reell ist, folgt $\tilde{f}^*(k) = \tilde{f}(-k)$. Dies läßt sich einfach zeigen, indem man $\tilde{f}(k) = \tilde{f}_1(k) + i\tilde{f}_2(k)$ und $e^{ikx} = \cos kx + i \sin kx$ in Real- und Imaginärteil zerlegt und dann fordert, daß die rechte Seite der Transformation (2.1) reell ist. Die Umkehrtransformation ist durch

$$\tilde{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) e^{-ikx} \quad (2.2)$$

gegeben. Dies überprüft man leicht wenn man die wichtige Identität

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx} = 2\pi\delta(x) \quad (2.3)$$

benutzt. Tatsächlich, setzt man (2.2) in (2.1) ein, so folgt

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx'} f(x') dx' \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx' \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ik(x-x')} f(x') = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \delta(x-x') f(x') = f(x). \end{aligned}$$

Die Identität (2.3) läßt sich unter Einführung eines konvergenzerzeugenden Faktor zeigen

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx} &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left\{ \int_0^{\infty} dk e^{(ix-\varepsilon)k} + \int_{-\infty}^0 dk e^{(ix+\varepsilon)k} \right\} \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left\{ \frac{-1}{ix-\varepsilon} + \frac{1}{ix+\varepsilon} \right\} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{2\varepsilon}{\varepsilon^2 + x^2} \equiv 2\pi\delta(x), \end{aligned}$$

wobei wir im letzten Schritt die Grenzwertdarstellung $\delta_\varepsilon(x) \equiv \frac{\varepsilon}{\pi(\varepsilon^2 + x^2)}$ der δ -Funktion benutzt haben. Man überprüft an dieser auch leicht, daß $\int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x) = 1$ gilt.

Natürlich gilt (2.3) auch wenn man k und x vertauscht!

Wir betrachten jetzt die **Fourierzerlegung** von $\psi(\mathbf{x}, t)$:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p \tilde{\psi}(\mathbf{p}, t) e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar}$$

Wie drückt sich die Normierung durch $\tilde{\psi}(\mathbf{p}, t)$ aus?

$$\int d^3x |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3x \int d^3p \tilde{\psi}^*(\mathbf{p}, t) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar} \int d^3p' \tilde{\psi}(\mathbf{p}', t) e^{i\mathbf{p}'\cdot\mathbf{x}/\hbar}$$

Es gilt

$$\begin{aligned} \int d^3x e^{i(\mathbf{p}'-\mathbf{p})\cdot\mathbf{x}/\hbar} &= (2\pi\hbar)^3 \delta^3(\mathbf{p}'-\mathbf{p}) \\ \rightarrow \int d^3x |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 &= \int d^3p |\tilde{\psi}(\mathbf{p}, t)|^2 = 1. \end{aligned}$$

Folglich gilt

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mathbf{p}} \rangle &= \int d^3x \psi^*(\mathbf{x}, t) \frac{\hbar}{i} \nabla \psi(\mathbf{x}, t) \\ &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^3 \int d^3x \int d^3p e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar} \tilde{\psi}^*(\mathbf{p}, t) \frac{\hbar}{i} \nabla_x \int d^3p' e^{i\mathbf{p}'\cdot\mathbf{x}/\hbar} \tilde{\psi}(\mathbf{p}', t) \\ &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^3 \int d^3x \int d^3p e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar} \tilde{\psi}^*(\mathbf{p}, t) \int d^3p' \mathbf{p}' e^{i\mathbf{p}'\cdot\mathbf{x}/\hbar} \tilde{\psi}(\mathbf{p}', t) \\ &= \int d^3p \mathbf{p} |\tilde{\psi}(\mathbf{p}, t)|^2. \end{aligned}$$

Daraus folgt die Interpretation für $|\tilde{\psi}(\mathbf{p}, t)|^2$ als Wahrscheinlichkeitsdichte, das Teilchen zur Zeit t mit dem Impuls \mathbf{p} anzutreffen. $\tilde{\psi}(\mathbf{p}, t)$ ist die sogenannte Impulsdarstellung des Zustands.

Wie gewinnt man $\tilde{\psi}(\mathbf{p}, t)$? Durch Fouriertransformation:

$$\tilde{\psi}(\mathbf{p}, t) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{3/2} \int d^3x e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar} \psi(\mathbf{x}, t).$$

Somit finden wir, daß man $\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle$ auf zwei Arten ausrechnen kann:

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mathbf{p}} \rangle &= \int d^3x \psi^*(\mathbf{x}, t) \frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{x}} \psi(\mathbf{x}, t) = (\psi, \hat{\mathbf{p}}\psi), \\ \langle \hat{\mathbf{p}} \rangle &= \int d^3p \tilde{\psi}^*(\mathbf{p}, t) \mathbf{p} \tilde{\psi}(\mathbf{p}, t) = (\tilde{\psi}, \hat{\mathbf{p}}\tilde{\psi}). \end{aligned}$$

Man erwartet, daß dies dann auch für $\langle \hat{\mathbf{x}} \rangle$ gelten sollte. Forme

$$\langle \hat{\mathbf{x}} \rangle = \int d^3x \psi^*(\mathbf{x}, t) \mathbf{x} \psi(\mathbf{x}, t)$$

um:

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mathbf{x}} \rangle &= \int d^3x \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3 \int d^3p \tilde{\psi}^*(\mathbf{p}, t) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar} \int d^3p' \tilde{\psi}(\mathbf{p}', t) e^{i\mathbf{p}'\cdot\mathbf{x}/\hbar} \\ &= \int d^3x \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3 \int d^3p \tilde{\psi}^*(\mathbf{p}, t) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar} \int d^3p' \tilde{\psi}(\mathbf{p}', t) \frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{p}'} e^{i\mathbf{p}'\cdot\mathbf{x}/\hbar} \\ &= \int d^3p \tilde{\psi}^*(\mathbf{p}, t) \int d^3p' \tilde{\psi}(\mathbf{p}', t) \frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{p}'} \delta^3(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \\ &= - \int d^3p \tilde{\psi}^*(\mathbf{p}, t) \int d^3p' \delta^3(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{p}'} \tilde{\psi}(\mathbf{p}', t), \\ \langle \hat{\mathbf{x}} \rangle &= \int d^3p \tilde{\psi}^*(\mathbf{p}, t) \left(-\frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{p}}\right) \tilde{\psi}(\mathbf{p}, t) = (\tilde{\psi}, \hat{\mathbf{x}}\tilde{\psi}). \end{aligned}$$

Somit wird bezüglich der Amplitude $\tilde{\psi}(\mathbf{p}, t)$ der Operator $\hat{\mathbf{x}}$ durch $-\frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{p}}$ dargestellt.

$\psi(\mathbf{x}, t)$ und $\tilde{\psi}(\mathbf{p}, t)$ kennzeichnen den Zustand ψ in gleicher Weise; man spricht von verschiedenen Darstellungen des Zustandes ψ im Ortsraum und Impulsraum. Dies ist das erste Beispiel für verschiedene äquivalente Darstellungen eines Zustandes (siehe später).

Man hätte auch in folgender Weise zur Impulsdarstellung kommen können: Durch die kanonische Transformation $\mathbf{x}_i = -\mathbf{P}_i$, $\mathbf{X}_i = \mathbf{p}_i$ kann man den klassischen Hamiltonian in der Form $H = \frac{1}{2m} \mathbf{X}^2 + V(-\mathbf{P})$ schreiben. Wir machen jetzt den Übergang zur Quantenmechanik in "Ortsdarstellung": $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{X}^2 + V(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{X}_i})$, dies ist aber der Hamiltonoperator in Impulsdarstellung.

Zusammenstellung der Darstellung von Operatoren

Klassische Variablen	quantenmechanische im Ortsraum	Operatoren im Impulsraum
Ort \mathbf{x}	\mathbf{x}	$-\frac{\hbar}{i}\nabla_{\mathbf{p}}$
Impuls \mathbf{p}	$\frac{\hbar}{i}\nabla_{\mathbf{x}}$	\mathbf{p}
Drehimpuls $\mathbf{x} \times \mathbf{p}$	$\mathbf{x} \times \frac{\hbar}{i}\nabla_{\mathbf{x}}$	$-\frac{\hbar}{i}\nabla_{\mathbf{p}} \times \mathbf{p}$
Energie $\mathbf{p}^2/2m$	$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$	$\mathbf{p}^2/2m$
Potential $V(\mathbf{x})$	$V(\mathbf{x})$	$V(i\hbar\nabla_{\mathbf{p}})$
$G(\mathbf{p})$	$G(\frac{\hbar}{i}\nabla_{\mathbf{x}})$	$G(\mathbf{p})$

Erwartungswerte sind alle vom Typ

$$\langle \hat{A} \rangle = (\psi, \hat{A}\psi) \quad (\text{Beispiel Ortsraum}).$$

Falls A eine **Observable** ist, d.h. meßbar, muß der Meßwert $\langle \hat{A} \rangle$ reell sein:

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \hat{A} \rangle^* = \int dq \psi^*(q) \hat{A}\psi(q) = \int dq (\hat{A}\psi(q))^* \psi(q).$$

Der der Observablen A zugeordnete Operator \hat{A} muß hermitesch sein. Das ist für die oberen Beispiele erfüllt.

Vorsicht bei der Zuordnung von Operatoren zu klassischen Größen: z.B. klassisch

$$\mathbf{x} \cdot \mathbf{p} = \mathbf{p} \cdot \mathbf{x},$$

die zugeordneten quantenmechanischen Operatoren jedoch sind nicht gleich

$$\mathbf{x} \cdot \frac{\hbar}{i}\nabla \neq \frac{\hbar}{i}\nabla \cdot \mathbf{x}.$$

Die beiden Operatoren sind auch nicht hermitesch:

$$\begin{aligned} \int \psi^*(\mathbf{x}) \mathbf{x} \cdot \frac{\hbar}{i}\nabla \psi(\mathbf{x}) &= \int \psi^*(\mathbf{x}) \left(x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} + \dots \right) \psi(\mathbf{x}) \\ &= - \int \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} (\psi^*(\mathbf{x}) x) \psi(\mathbf{x}) + \dots \\ &= - \int \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi^*}{\partial x} x \psi(\mathbf{x}) - \frac{\hbar}{i} \int \psi^*(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) - \dots \\ &= \int \left(\mathbf{x} \cdot \frac{\hbar}{i}\nabla \psi \right)^* \psi(\mathbf{x}) - \frac{3\hbar}{i}. \end{aligned}$$

Dies erhält man auch einfacher mit der Relation $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger$, i.e. $(\hat{\mathbf{x}}\hat{\mathbf{p}})^\dagger = \hat{\mathbf{p}}^\dagger\hat{\mathbf{x}}^\dagger = \hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{x}} \neq \hat{\mathbf{x}}\hat{\mathbf{p}}$. Ebenso zeigt man, daß der 2. Ausdruck nicht hermitesch ist.

Hermitesch ist der symmetrisierte Ausdruck:

$$\mathbf{x} \cdot \mathbf{p} = 1/2(\mathbf{x} \cdot \mathbf{p} + \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}) \rightarrow 1/2 \left(\mathbf{x} \frac{\hbar}{i}\nabla_x + \frac{\hbar}{i}\nabla_x \cdot \mathbf{x} \right).$$

Dies ist zugleich der richtige quantenmechanischen Operator für die klassische Größe $\mathbf{x} \cdot \mathbf{p}$.

Verallgemeinerung: sind \hat{A}, \hat{B} hermitesche Operatoren, dann sind auch $\frac{1}{2}(\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A})$ und $\frac{i}{2}(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) = \frac{i}{2}[\hat{A}, \hat{B}]$ hermitesch.

2.5 Rechnen mit Operatoren

Vertauschungsklammer oder **Kommutator**:

$$[\hat{F}, \hat{G}] \equiv \hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F}$$

Im **Allgemeinen** ist der **Kommutator** zweier Operatoren wieder ein **Operator**!

Obwohl wir im Folgenden die Kommutatoren in der Ortsdarstellung berechnen ist es wichtig festzustellen, daß die **Kommutatorrelationen unabhängig von der Darstellung** sind, d.h. in jeder Darstellung gelten. In gewisser Weise stellen sie den "Kern" der Quantenmechanik dar.

Beispiele: Heisenbergsche Vertauschungsrelationen

$$\begin{aligned} [\hat{p}_j, \hat{x}_k] &= \left[\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j}, x_k \right] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} x_k - x_k \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} = \frac{\hbar}{i} \delta_{jk} \\ [\hat{p}_j, \hat{p}_k] &= 0 = [\hat{x}_j, \hat{x}_k]. \end{aligned}$$

Drehimpulsoperatoren $\hat{\mathbf{l}} = \hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}}$,

$$\begin{aligned} \hat{l}_x &= \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \\ \hat{l}_y &= \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z \\ \hat{l}_z &= \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x. \end{aligned}$$

Es gilt

$$\begin{aligned} [\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] &= \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} \\ [\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] &= \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C}. \end{aligned}$$

Unter Benutzung dieser Relation erhält man durch geradlinige Rechnung

$$\begin{aligned} [\hat{l}_x, \hat{l}_y] &= [(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y), (\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z)] = [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{z}\hat{p}_x] - [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{x}\hat{p}_z] - [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x] + [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{x}\hat{p}_z] \\ &= \hat{y}[\hat{p}_z, \hat{z}\hat{p}_x] + [\hat{z}, \hat{x}\hat{p}_z]\hat{p}_y = \hat{y}[\hat{p}_z, \hat{z}]\hat{p}_x + \hat{x}[\hat{z}, \hat{p}_z]\hat{p}_y \\ &= \frac{\hbar}{i}(\hat{y}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_y) = \hbar i \hat{l}_z. \end{aligned}$$

Es folgen die wichtigen Vertauschungsrelationen für Drehimpulsoperatoren:

$$[\hat{l}_x, \hat{l}_y] = \hbar i \hat{l}_z \text{ und zyklisch.}$$

Wie wir später sehen werden, ist die Konsequenz daraus, daß nur halbzahlige und ganzzahlige Vielfache von \hbar als Drehimpulse in der Natur vorkommen.



Paul Ehrenfest (1880–1933)

Ehrenfest'scher Satz:

Zeitliche Ableitung eines Erwartungswertes einer Größe $F(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)$

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \langle \hat{F} \rangle &= \int d^3x \dot{\psi}^* \hat{F} \psi + \int d^3x \psi^* \dot{\hat{F}} \psi + \int d^3x \psi^* \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \psi \\
 &= \frac{i}{\hbar} \int d^3x (\hat{H} \psi)^* \hat{F} \psi - \frac{i}{\hbar} \int d^3x \psi^* \hat{F} \hat{H} \psi + \int d^3x \psi^* \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \psi \\
 &= \frac{i}{\hbar} \int d^3x \psi^* \hat{H} \hat{F} \psi - \frac{i}{\hbar} \int d^3x \psi^* \hat{F} \hat{H} \psi + \int d^3x \psi^* \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \psi \\
 &= \frac{i}{\hbar} \int d^3x \psi^* [\hat{H}, \hat{F}] \psi + \int d^3x \psi^* \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \psi,
 \end{aligned}$$

also

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{F} \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{F}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \right\rangle =: \langle \dot{\hat{F}} \rangle$$

oder

$$\dot{\hat{F}} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}] + \frac{\partial \hat{F}}{\partial t}.$$

Dies ist der **Ehrenfest'sche Satz**. $\dot{\hat{F}}$ ist Operator zu Observablen \hat{F} (und ist nicht mit der Zeitableitung des Operators $\hat{F}_H(t)$ in der Heisenbergdarstellung zu verwechseln, siehe Kap 6.3).

Für **Erhaltungsgrößen** gilt $\dot{\hat{F}} \equiv 0$, d.h. mit $\frac{\partial \hat{F}}{\partial t} = 0$ gilt $[\hat{H}, \hat{F}] = 0$.

Im **klassischen Limes** sollte diese Relation in $\frac{dF(q,p)}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial F}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) = \frac{\partial F}{\partial t} + \{H, F\}$ übergehen, mit $\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}$, $\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$. $\{\dots\}$ bezeichnet die Poissonklammer: $\{F, G\} = \sum_i \left(\frac{\partial G}{\partial q_i} \frac{\partial F}{\partial p_i} - \frac{\partial G}{\partial p_i} \frac{\partial F}{\partial q_i} \right)$

Wir können unsere Kenntnis der Vertauschungsregeln benutzen und $[\hat{H}, \hat{F}]$ nach Potenzen von \hbar entwickeln.

Sei $\hat{H} = \hat{H}(\hat{q}, \hat{p})$, $\hat{F} = \hat{F}(\hat{q}, \hat{p})$

$$\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}] = \frac{i}{\hbar} \underbrace{O(0)}_{=0} + \frac{i}{\hbar} \frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial F}{\partial p_j} \underbrace{[\hat{q}_i, \hat{p}_j]}_{i\hbar\delta_{ij}} + \frac{i}{\hbar} \frac{\partial H}{\partial p_j} \frac{\partial F}{\partial q_i} \underbrace{[\hat{p}_j, \hat{q}_i]}_{-i\hbar\delta_{ij}} + O(\hbar^1),$$

d.h. wir erhalten für \hat{F} in der Ordnung \hbar^0 (aber: der Kommutator selbst geht in $O(\hbar)$ in die Poissonklammer über)

$$\frac{d}{dt} F = \frac{\partial}{\partial t} F + \{H, F\}.$$

Mehr im Detail: $\langle \hat{q}_i \rangle = q_i$, $\langle \hat{p}_i \rangle = p_i$

$$\begin{aligned} \hat{q}_i &= q_i + (\hat{q}_i - q_i) = q_i + \hbar^{1/2} \hat{Q}_i, & [\hat{q}_i, \hat{p}_j] &= i\hbar\delta_{ij} \\ \hat{p}_i &= p_i + \hbar^{1/2} \hat{P}_i, & [\hat{Q}_i, \hat{P}_j] &= i\delta_{ij} \end{aligned}$$

$(q, p) = \{q_1, \dots, q_f, p_1, \dots, p_f\}$ f Zahl der Freiheitsgrade.

$$\begin{aligned} \hat{F} &= F(\hat{q}, \hat{p}) = F(q, p) + \hbar^{1/2} \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \hat{Q}_i + \frac{\partial F}{\partial p_i} \hat{P}_i \right) + O(\hbar) \\ \hat{\mathcal{H}} &= \mathcal{H}(\hat{q}, \hat{p}) = \mathcal{H}(q, p) + \hbar^{1/2} \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \hat{Q}_i + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \hat{P}_i \right) + O(\hbar) \\ \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{F}] &= \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, F] + 2 \frac{i}{\hbar} \hbar^{1/2} O + \frac{i}{\hbar} \hbar \sum_{i,j} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \frac{\partial F}{\partial p_j} [Q_i, P_j] + \frac{i}{\hbar} \hbar \sum_{i,j} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \frac{\partial F}{\partial q_j} [P_i, Q_j] + \frac{i}{\hbar} O(\hbar^{3/2}) \\ &= O + \sum_i \left[\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \frac{\partial F}{\partial q_j} - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \frac{\partial F}{\partial p_j} \right] + O(\hbar^{1/2}) \end{aligned}$$

Damit wird

$$\begin{aligned} \dot{\hat{F}}(q, p, t) &= \dot{F}(\hat{q}, \hat{p}, t) = \dot{F}(q, p, t) + O(\hbar^{1/2}) \\ \frac{\partial}{\partial t} \hat{F}(q, p, t) &= \frac{\partial}{\partial t} F(\hat{q}, \hat{p}, t) = \frac{\partial}{\partial t} F(q, p, t) + O(\hbar^{1/2}) \end{aligned}$$

und damit im Limes $\hbar \rightarrow 0$

$$\dot{F}(q, p, t) = \{\mathcal{H}, F\} + \frac{\partial}{\partial t} F(q, p, t)$$

q.e.d.

Beispiele:

(i) $\hat{F} = \hat{\mathbf{x}}$, $\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{x})$. Es folgt

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{\mathbf{x}} \rangle &= \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{\mathbf{x}}] \rangle = \frac{i}{\hbar} \frac{1}{2m} \langle [\hat{\mathbf{p}}^2, \hat{\mathbf{x}}] \rangle \\ &= \frac{i}{2m\hbar} \left\langle \frac{\hbar}{i} \hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}} \frac{\hbar}{i} \right\rangle = \frac{1}{m} \langle \hat{\mathbf{p}} \rangle . \end{aligned}$$

(ii) $\hat{F} = \hat{\mathbf{p}}$, $\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{x})$. Folgt

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{\mathbf{p}} \rangle &= \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{\mathbf{p}}] \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [V(\mathbf{x}), \hat{\mathbf{p}}] \rangle \\ &= \langle V(\hat{\mathbf{x}}) \nabla_{\mathbf{x}} - \nabla_{\mathbf{x}} V(\hat{\mathbf{x}}) \rangle = \left\langle \underbrace{\left(-\nabla_{\mathbf{x}} V(\hat{\mathbf{x}}) \right)}_{\mathbf{K}(\hat{\mathbf{x}})} \right\rangle \\ \rightarrow m \frac{d^2 \langle \hat{\mathbf{x}} \rangle}{dt^2} &= \langle \mathbf{K}(\hat{\mathbf{x}}) \rangle , \end{aligned}$$

d.h. die klassische Gleichungen gelten für Mittelwerte!

Für **Erwartungswerte** von $\hat{\mathbf{p}}$ und \mathbf{K} gelten demnach die Newtonschen Bewegungsgleichungen. Dies bedeutet nicht, daß Teilchen der klassischen Bahn folgen. Nur wenn $\psi(\mathbf{x}', t)$ räumlich scharf um $\mathbf{x}(t)$ lokalisiert ist, so daß $|\psi(\mathbf{x}', t)|^2 \approx \delta_\varepsilon(\mathbf{x}' - \mathbf{x}(t))$ gilt, ist dies der Fall:

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mathbf{K}} \rangle &= \int d^3 x' \psi^*(\mathbf{x}', t) \hat{\mathbf{K}}(\mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}', t) \approx \mathbf{K}(\mathbf{x}(t)) \int d^3 x' |\psi^*(\mathbf{x}', t)|^2 \\ &= \mathbf{K}(\mathbf{x}(t)) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{\mathbf{x}} \rangle &= \frac{1}{m} \langle \hat{\mathbf{p}} \rangle \\ \frac{d}{dt} \langle \hat{\mathbf{p}} \rangle &= m \frac{d^2}{dt^2} \langle \hat{\mathbf{x}} \rangle = m \frac{d^2}{dt^2} \int d^3 x' \psi^*(\mathbf{x}, t) \mathbf{x}' \psi(\mathbf{x}', t) \\ &\approx m \frac{d^2}{dt^2} \mathbf{x}(t) . \end{aligned}$$

2.6 Orts- und Impulsunschärferelation

Orts- und Impulsverteilungen sind fest korreliert:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{x}) &\leftrightarrow \tilde{\psi}(\mathbf{p}) , \\ \psi(\mathbf{x}) &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^{3/2} \int d^3 p \tilde{\psi}(\mathbf{p}) e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar} , \\ \tilde{\psi}(\mathbf{p}) &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^{3/2} \int d^3 x \psi(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar} . \end{aligned}$$

Im Gegensatz zu makroskopischen Objekten sind Orts- und Impulsverteilungen von Mikroteilchen nicht unabhängig zu wählen.

$\langle \hat{A} \rangle$ und $\langle \hat{B} \rangle$ seien mittlere Meßwerte im Zustand ψ ($[\hat{A}, \hat{B}] = i\hbar\hat{C}$). Bei Messungen findet man auch Werte in der Umgebung von $\langle \hat{A} \rangle$ und $\langle \hat{B} \rangle$; Maß für Schwankungsbreite dieser Werte ist $\Delta\hat{A} = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle$ und $\Delta\hat{B} = \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle$.

$$\begin{aligned} \langle \Delta\hat{A}^2 \rangle &\equiv \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle = \langle \hat{A}^2 - 2\hat{A}\langle \hat{A} \rangle + \langle \hat{A} \rangle^2 \rangle \\ &= \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2 =: \Delta A^2 \end{aligned}$$

analog

$$\begin{aligned} \langle \Delta\hat{B}^2 \rangle &= \langle (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle)^2 \rangle =: \Delta B^2 \\ \Delta\hat{B}\Delta\hat{A} - \Delta\hat{A}\Delta\hat{B} &= [\hat{B}, \hat{A}] = (\hbar/i)\hat{C}. \end{aligned}$$

Trick: Betrachte $I(\lambda) \equiv \int d^3x |\Delta\hat{A}\psi + i\lambda\Delta\hat{B}\psi|^2 \geq 0$ für alle reellen λ (ich beschränke mich auf **reelle** λ !)

$$\begin{aligned} I(\lambda) &= \int d^3x (\Delta\hat{A}\psi + i\lambda\Delta\hat{B}\psi)^* (\Delta\hat{A}\psi + i\lambda\Delta\hat{B}\psi) \\ &= \int d^3x \left(\Delta\hat{A}^2 |\psi|^2 + \Delta\hat{A}\psi^* i\lambda\Delta\hat{B}\psi - i\lambda(\Delta\hat{B}\psi)^* \Delta\hat{A}\psi + \lambda^2 (\Delta\hat{B}\psi)^* \Delta\hat{B}\psi \right) \\ &= \langle \Delta\hat{A}^2 \rangle + \lambda^2 \langle \Delta\hat{B}^2 \rangle + i\lambda \int d^3x \psi^* \underbrace{(\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} - \Delta\hat{B}\Delta\hat{A})}_{\hbar i\hat{C}} \psi \\ &= (\Delta A)^2 + \lambda^2 (\Delta B)^2 - \hbar\lambda \langle \hat{C} \rangle \geq 0 \text{ für alle } \lambda. \end{aligned}$$

Wir suchen jetzt die Nullstellen von $I(\lambda)$: $\lambda^2 - \frac{\hbar\langle\hat{C}\rangle}{\langle\Delta\hat{B}^2\rangle}\lambda + \frac{\langle\Delta\hat{A}^2\rangle}{\langle\Delta\hat{B}^2\rangle} = 0$

$$\begin{aligned} \lambda_{1;2} &= \frac{\langle \hat{C} \rangle \hbar}{2\Delta B^2} \pm \sqrt{\frac{\langle \hat{C} \rangle^2 \hbar^2}{4\Delta B^4} - \frac{\Delta A^2}{\Delta B^2}} \\ &= \frac{\langle \hat{C} \rangle \hbar}{2\Delta B^2} \left\{ 1 \pm \sqrt{1 - \frac{4}{\hbar^2} \frac{\Delta A^2 \Delta B^2}{\langle \hat{C} \rangle^2}} \right\}. \end{aligned}$$

Damit keine reelle Lösungen für $\lambda^2 (\Delta B)^2 - \langle \hat{C} \rangle \hbar \lambda + (\Delta A)^2 = 0$ existieren (wir wissen, daß $I(\lambda) > 0$ ist), muß für die Diskriminante $\equiv \hbar^2 \langle \hat{C} \rangle^2 - 4(\Delta\hat{B})^2(\Delta\hat{A})^2 \leq 0$ oder

$$(\Delta B) \cdot (\Delta A) \geq \hbar/2 \left| \langle \hat{C} \rangle \right|$$

gelten. Entsprechend findet man ($C = 1$):

$$\begin{aligned} \Delta p_y \cdot \Delta y &\geq \hbar/2, \\ \Delta p_z \cdot \Delta z &\geq \hbar/2. \end{aligned}$$

Dies sind die Heisenbergschen Unschärferelationen. Je genauer im Zustand ψ das Teilchen im Ort lokalisiert ist, desto ungenauer ist sein Impuls und umgekehrt.

In bezug auf makroskopische Skalen und Objekte ist dies wegen des numerischen Wertes von \hbar keine Einschränkung.

Man kann diese Rechnung leicht auf den Fall zweier hermitescher Operatoren \hat{A}, \hat{B} mit dem Kommutator

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hbar\hat{C}$$

verallgemeinern. Mit

$$\Delta A^2 := \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2$$

$$\Delta B^2 := \langle \hat{B}^2 \rangle - \langle \hat{B} \rangle^2$$

folgt völlig analog (man identifiziere \hat{A} mit \hat{x} und \hat{B} mit \hat{p}) unter Benutzung obiger Kommutatorrelation

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{\hbar}{2} | \langle \hat{C} \rangle |$$

2.7 Zeitunabhängige Schrödingergleichung

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

\hat{H} sei **zeitunabhängig**. Wir suchen eine Lösung $\psi(x, t)$, so daß $|\psi(\mathbf{x}, t)|^2$ **stationär** (**zeitunabhängig**) ist. Wir wählen die Form

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{x}, t) &= \psi(\mathbf{x}) \cdot f(t) \quad (\text{Produktansatz}) \\ i\hbar \frac{df(t)}{dt} \psi(\mathbf{x}) &= \hat{H}\psi(\mathbf{x})f(t) \\ \rightarrow i\hbar \frac{df(t)}{f(t)} &= \frac{\hat{H}\psi(\mathbf{x})}{\psi(\mathbf{x})} \equiv E. \end{aligned}$$

Beide Seiten müssen konstant sein:

$$i\hbar(df/dt) = E f(t) \rightarrow f(t) = \exp(-iEt/\hbar) \text{ und}$$

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi_E(\mathbf{x}) &= E\psi_E(\mathbf{x}) \\ \psi(\mathbf{x}, t) &= \psi_E(\mathbf{x})e^{-iEt/\hbar}. \end{aligned}$$

Welche Bedeutung hat E ?

Sei \hat{H} der Hamiltonoperator zur klassischen Hamiltonfunktion $H = T + V$:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V},$$

dann ist

$$\begin{aligned} \int d^3x \psi^*(\mathbf{x}, t) \hat{H} \psi(\mathbf{x}, t) &= \int d^3x \psi^*(\mathbf{x}, t) (\hat{T} + \hat{V}) \psi(\mathbf{x}, t) \\ &= \langle \hat{T} \rangle + \langle \hat{V} \rangle = E \int d^3x \psi_E^*(x) \psi_E(x) = E. \end{aligned}$$

ψ sei auf 1 normiert und damit auch ψ_E . E hat die Bedeutung der Gesamtenergie.

Man nennt

$$\hat{H} \psi_E(\mathbf{x}) = E \psi_E(\mathbf{x})$$

die **zeitunabhängige Schrödingergleichung**. Sie erfordert zur vollständigen Definition noch Randbedingungen (siehe später).

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \psi_E(\mathbf{x}) e^{-iEt/\hbar}$$

sind **stationäre Lösungen** der zeitabhängigen Schrödingergleichung; für diese Zustände sind alle Erwartungswerte zeitunabhängig. Als Überlagerung dieses Lösungstyps kann man die allgemeinste Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung aufbauen (siehe später).

Im **stationären Zuständen** ist

- (i) die Zeitabhängigkeit der Wellenfunktion eindeutig durch den Energiewert in diesem Zustand bestimmt.
- (ii) die Wahrscheinlichkeitsdichte und die Wahrscheinlichkeitsstromdichte sind zeitunabhängig
- (iii) falls $\frac{\partial \hat{F}}{\partial t} = 0$ gilt, $\langle \hat{F} \rangle = \text{const.}$

2.8 Teilchen im elektromagnetischen Feld

Exkurs in die klassische Elektrodynamik und Mechanik:

\mathbf{E} und \mathbf{B} läßt sich durch \mathbf{A} und ϕ darstellen:

$$\begin{aligned} \mathbf{B} &= \text{rot } \mathbf{A} = \nabla \times \mathbf{A}, \\ \mathbf{E} &= -\text{grad } \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = -\nabla \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}. \end{aligned}$$

Die klassische Bewegungsgleichung für ein geladenes Teilchen erhält man aus den Hamiltonschen Gleichungen für folgende Hamiltonfunktion

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + e\phi + V.$$

Tatsächlich mit ($\mathbf{A} = \mathbf{A}(\mathbf{x}, t)$, $\phi = \phi(\mathbf{x}, t)$)

$$\begin{aligned}\dot{x}_i &= \frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{1}{m} \left(p_i - \frac{e}{c} A_i \right), \\ \dot{p}_i &= -\frac{\partial H}{\partial x_i} = \frac{1}{m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \frac{e}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} (e\phi + V) = \dot{x}_j \frac{e}{c} \frac{\partial A_j}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} (e\phi + V)\end{aligned}$$

folgt

$$m\ddot{x}_i = \dot{p}_i - \frac{e}{c} \frac{\partial A_i}{\partial t} - \frac{e}{c} \frac{\partial A_i}{\partial x_j} \dot{x}_j = -e \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \phi + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} A_i \right) + \frac{e}{c} \dot{x}_j \left(\frac{\partial A_j}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} V$$

und damit

$$m \frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} = e \mathbf{E} + \frac{e}{c} \left(\frac{d\mathbf{x}}{dt} \times \mathbf{B} \right) - \text{grad } V.$$

Übergang zur Quantenmechanik:

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{p}} &= \frac{\hbar}{i} \nabla, \\ \hat{H}\psi &= \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \psi + (e\phi + V)\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}.\end{aligned}$$

$\hat{\mathbf{p}}$ und \mathbf{A} vertauschen nicht

$$\begin{aligned}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 &= \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \cdot \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \\ &= \hat{\mathbf{p}}^2 - \frac{e}{c} \underbrace{\left(\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}} \right)}_{\text{ist hermitesch}} + \left(\frac{e}{c} \right)^2 \mathbf{A}^2.\end{aligned}$$

\mathbf{A} und ϕ sind durch physikalische Felder \mathbf{E} und \mathbf{B} nicht eindeutig definiert; Eichtransformationen lassen \mathbf{E} und \mathbf{B} ungeändert:

$$\begin{aligned}\mathbf{A}' &= \mathbf{A} - \text{grad } \chi(\mathbf{x}, t), \\ \phi' &= \phi + \frac{1}{c} \frac{\partial \chi}{\partial t}.\end{aligned}$$

Mit der Ersetzung von \mathbf{A} und ϕ durch \mathbf{A}' und ϕ' ändert sich der \hat{H} -Operator und damit auch ψ .

Frage: ändert sich die Physik?

Diese sollte nicht von der Wahl von \mathbf{A} und ϕ abhängen; es sollte **Eichinvarianz** vorliegen. Betrachten die Schrödingergleichung für die transformierten Felder:

$$\frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}' \right)^2 \psi' + (e\phi' + V)\psi' = i\hbar \frac{\partial \psi'}{\partial t}$$

oder

$$\frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \nabla \chi - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \psi' + (e\phi + V)\psi' = i\hbar \frac{\partial \psi'}{\partial t} - \frac{e}{c} \frac{\partial \chi}{\partial t} \psi'.$$

Diese Gleichung sollte dieselbe Physik beschreiben wie

$$\frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \psi + (e\phi + V)\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}.$$

Tatsächlich läßt sich leicht zeigen, daß ψ und ψ' über die Transformation

$$\psi' = \psi e^{-(ie/\hbar c)\chi}$$

zusammenhängen. Die Erwartungswerte physikalischer Größen hängen nicht vom Phasenfaktor $e\chi/\hbar c = 2\pi\chi/\phi_0$, $\phi_0 = \frac{hc}{e}$ ist das elementare Flußquantum (in der Supraleitung ist das Flußquantum durch $e = 2e_0$ mit e_0 als Elementarladung definiert) ab.

Nachweis:

$$\begin{aligned} & \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \nabla \chi \right) \psi e^{-(ie/\hbar c)\chi} \\ &= e^{-(ie/\hbar c)\chi} \hat{\mathbf{p}} \psi + \psi \frac{\hbar}{i} \nabla e^{-(ie/\hbar c)\chi} + \frac{e}{c} (\nabla \chi) \psi e^{-(ie/\hbar c)\chi} \\ &= e^{-(ie/\hbar c)\chi} \hat{\mathbf{p}} \psi \\ & \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \nabla \chi \right)^2 e^{-(ie/\hbar c)\chi} \psi = \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \nabla \chi \right) e^{-(ie/\hbar c)\chi} \hat{\mathbf{p}} \psi = e^{-(ie/\hbar c)\chi} \hat{\mathbf{p}}^2 \psi \\ & \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \nabla \chi \right) \mathbf{A} e^{-(ie/\hbar c)\chi} \psi = e^{-(ie/\hbar c)\chi} \hat{\mathbf{p}} \mathbf{A} \psi \\ & \mathbf{A} \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \nabla \chi \right) e^{-(ie/\hbar c)\chi} \psi = e^{-(ie/\hbar c)\chi} \mathbf{A} \hat{\mathbf{p}} \psi \\ & i\hbar \frac{\partial \psi'}{\partial t} - \frac{e}{c} \frac{\partial \chi}{\partial t} \psi' = e^{-(ie/\hbar c)\chi} i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{-(ie/\hbar c)\chi} - \frac{e}{c} \frac{\partial \chi}{\partial t} \psi e^{-(ie/\hbar c)\chi} \\ &= e^{-(ie/\hbar c)\chi} i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}. \end{aligned}$$

Somit läßt sich die Phase herauskürzen und man erhält die Gleichung für ψ .

Diese willkürliche Phase in ψ' führt zu keinen meßbaren Konsequenzen. (Der Aharanov-Bohm Effekt zeigt, daß die eichinvariante Phase bezüglich \mathbf{A} meßbar ist, siehe M. Peskin, A. Tomomura, Lecture Notes in Physics 340 (1989)3.)

Wir betrachten noch einmal die Kontinuitätsgleichung

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 &= \frac{1}{i\hbar} (\psi^* \hat{H} \psi - \psi (\hat{H} \psi)^*) \\ \hat{H} &= \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{e}{2mc} (\hat{\mathbf{p}} \mathbf{A} + \mathbf{A} \hat{\mathbf{p}}) + \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{e}{mc} \mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}} - \frac{e\hbar}{2imc} (\nabla \mathbf{A}) + \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2. \end{aligned}$$

Der letzte Term liefert offenbar keinen Beitrag in der Kontinuitätsgleichung.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 &= \frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \Delta \psi - (\Delta \psi)^* \psi) - \frac{1}{i\hbar} \frac{e}{mc} \mathbf{A} \frac{\hbar}{i} (\psi^* \nabla \psi + \psi (\nabla \psi)^*) \\ &\quad - \frac{1}{i\hbar} \frac{e\hbar}{2imc} (\nabla \mathbf{A}) (\psi^* \psi + \psi^* \psi) \\ &= -\frac{\hbar}{2mi} \nabla (\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi)^* \psi) + \frac{e}{mc} \mathbf{A} \nabla (\psi^* \psi) + \frac{e}{mc} (\nabla \mathbf{A}) (\psi^* \psi) \end{aligned}$$

oder

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 + \nabla \mathbf{j} = 0$$

mit

$$\mathbf{j} = \frac{1}{m} \operatorname{Re} \left\{ \psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \psi \right\} = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi)^* \psi \right) - \frac{e}{mc} \mathbf{A} \psi^* \psi = \frac{\hbar}{m} |\psi|^2 \left(\nabla \varphi - \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A} \right)$$

$(\hbar/i)\nabla - (e/c)\mathbf{A}$ ist der kinematische Impuls. Im letzten Ausdruck ist φ die Phase der Wellenfunktion, $\psi = |\psi|e^{i\varphi}$, $\frac{\hbar c}{e} = \Phi_0$ ist das elementare Quantum des magnetischen Flusses. \mathbf{j} und $|\psi|^2$ sind wieder eichinvariant (zeige das!).

2.9 Erweiterung auf Mehrteilchensysteme

$|\psi(\mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_n, t)|^2$ ist die Wahrscheinlichkeitsdichte, die Teilchen $1, 2, \dots, n$ an den Orten $\mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_n$ anzutreffen. Daraus lassen sich abgeleitete Größen bilden, wie z.B. Aufenthaltswahrscheinlichkeit für Teilchen 1 unabhängig von den Positionen der anderen:

$$P(\mathbf{x}_1) = \int d^3x_2 \dots d^3x_n |\psi(\mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_n)|^2$$

Wellenfunktion im Impulsraum

$$\tilde{\psi}(\mathbf{p}_1 \dots \mathbf{p}_n) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^{3n/2} \int d^3x_1 \dots d^3x_n e^{-i \sum_{j=1}^n \mathbf{p}_j \mathbf{x}_j / \hbar} \psi(\mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_n)$$

und die Umkehrformel mit (+) im Exponenten.

Konstanz der Norm:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \prod_l d^3x_l |\psi(\mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_n)|^2 = 0$$

ist Folge der Hermitizität von H .

Erwartungswerte z.B.

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}_1 \rangle &= \int d^3x_1 \dots d^3x_n \psi^*(\mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_n) \mathbf{x}_1 \psi(\mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_n) \\ \langle \mathbf{p}_2 \rangle &= \int d^3x_1 \dots d^3x_n \psi^*(\mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_n) \frac{\hbar}{i} \nabla_{x_2} \psi(\mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_n) \quad \text{etc.} \end{aligned}$$

Verallgemeinerungen der bisherigen Notationen sind offensichtlich.

2.10 Grenzübergang zur klassischen Mechanik

Wir schreiben formal die Wellenfunktion in der Form

$$\psi(\mathbf{x}, t) = |\psi(\mathbf{x}, t)| e^{\frac{i}{\hbar} S(\mathbf{x}, t)},$$

und S ist reell. Die Schrödingergleichung $-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi + \hat{H} \psi = 0$, $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V$ nimmt dann die Form

$$|\psi| \frac{\partial S}{\partial t} - i\hbar \frac{\partial |\psi|}{\partial t} + \frac{|\psi|}{2m} (\nabla S)^2 - \frac{i\hbar}{2m} |\psi| \Delta S - \frac{i\hbar}{m} \nabla S \nabla |\psi| - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta |\psi| + |\psi| V = 0$$

an. Hieraus gewinnen wir **zwei Gleichungen für Real- und Imaginärteil**.

Realteil:

$$\begin{aligned} \text{Realteil:} \quad & \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}(\nabla S)^2 + V - \frac{\hbar^2}{2m|\psi|}\Delta|\psi| = 0. \\ \text{Imaginärteil:} \quad & \frac{\partial|\psi|}{\partial t} + \frac{|\psi|}{2m}\Delta S + \frac{1}{m}\nabla S \cdot \nabla|\psi| = 0. \end{aligned}$$

Betrachte jetzt den Limes $\hbar \rightarrow 0$, dann verschwindet der letzte Term der 1. Gleichung und wir erhalten die **Hamilton–Jacobische Differentialgleichung**

$$\frac{\partial S_0}{\partial t} + \frac{1}{2m}(\nabla S_0)^2 + V = 0.$$

$S_0(\mathbf{x}, t)$ genügt hier also der Gleichung für die klassische Wirkung $S_0(\mathbf{x}, t) = \int_0^t L(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}, t) dt$ eines Systems mit der Hamiltonfunktion $H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x})$, berechnet für **wirkliche klassische Bahnen** (diese genügen $\frac{\partial L}{\partial \mathbf{x}} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{x}}} = 0$) als Funktion des Endpunktes $\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}$, bei festgehaltenen Anfangspunkt $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0$. Wir zeigen das noch. Wir zeigen jetzt noch, daß S_0 tatsächlich die Hamilton–Jacobi–Gleichung erfüllt.

$$\begin{aligned} \frac{dS_0}{dt} = L &= \frac{\partial S_0}{\partial t} + \nabla S_0 \cdot \dot{\mathbf{x}} = \frac{\partial S_0}{\partial t} + \mathbf{p}\dot{\mathbf{x}} \rightarrow \\ \frac{\partial S_0}{\partial t} - L + \mathbf{p}\dot{\mathbf{x}} &= \frac{\partial S_0}{\partial t} + H(\mathbf{p}, \mathbf{x}) = \frac{\partial S_0}{\partial t} + \frac{1}{2m}(\nabla S_0)^2 + V(\mathbf{x}) = 0. \end{aligned}$$

Zur Erinnerung: aus der Variation der Wirkung durch Variation des Endpunktes

$$\delta S_0 = \int_0^t \left(\frac{\partial L}{\partial \mathbf{x}} \delta \mathbf{x} + \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{x}}} \delta \dot{\mathbf{x}} \right) dt' = \int_0^t \left(\frac{\partial L}{\partial \mathbf{x}} \delta \mathbf{x} + \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{x}}} \frac{d}{dt'} \delta \mathbf{x} \right) dt'$$

folgt mit partieller Integration und Benutzung der Bewegungsgleichungen

$$\delta S_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0, t) = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{x}}} \delta \mathbf{x} \Big|_0^t + \int_0^t \underbrace{\left(\frac{\partial L}{\partial \mathbf{x}} - \frac{d}{dt'} \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{x}}} \right)}_{=0} \delta \mathbf{x} dt' = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{x}}} \delta \mathbf{x} = \mathbf{p}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0, t) \delta \mathbf{x} \quad (2.4)$$

oder

$$\nabla_{\mathbf{x}} S_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0, t) = \mathbf{p}(\mathbf{x}, t).$$

d.h. der Gradient von S_0 ist gleich dem Impuls. \mathbf{x} gibt hier den Ort der Trajektorie mit dem Anfangspunkt $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0$ zum Zeitpunkt t an, der Gradient von $S_0(\mathbf{x})$ ist dann gleich dem Impuls zur Zeit t (verschiedene Trajektorien, die alle bei $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0$ beginnen, werden also nicht durch die Vorgabe der Anfangsgeschwindigkeit $\dot{\mathbf{x}}(t=0)$

sondern durch die Wahl des Endpunktes \mathbf{x} zur Zeit t voneinander unterschieden). Man kann deshalb sofort durch Integration

$$S_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0, t) = \int_{\mathbf{x}_0}^{\mathbf{x}} \mathbf{p}(\mathbf{x}') d\mathbf{x}' + C$$

rekonstruieren, wobei die **Integration entlang der klassischen Trajektorie** (Pfad) erfolgt. Ist die Bewegung periodisch, kann sich die Phase der Wellenfunktion nur um ein Vielfaches von 2π ändern und man erhält die Bohr–Sommerfeldsche Quantisierungsbedingung

$$\oint \mathbf{p} d\mathbf{x} = 2\pi n\hbar = nh$$

Dies ist die Hamilton–Jacobi–Gleichung, die wir oben als klassische Näherung für den Realteil der Schrödingergleichung gewonnen haben. Durch Anwendung von ∇ erhalten wir aus dieser

$$\nabla \frac{\partial}{\partial t} S_0 + \frac{1}{2m} \nabla (\nabla S_0)^2 + \nabla V(\mathbf{x}) = 0$$

und mit

$$\frac{1}{2} \nabla (\nabla S_0)^2 = \nabla S_0 \times (\nabla \times \nabla S_0) + (\nabla S_0 \cdot \nabla) \nabla S_0$$

und $\nabla S_0 = \mathbf{p} = m\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ erhalten wir die Newton–Euler–Gleichung

$$m \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla \right) \mathbf{v} = m \frac{d}{dt} \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = -\nabla V.$$

Diese beschreibt die zeitliche Änderung des **Geschwindigkeitsfelds** in einer **idealen Flüssigkeit**. In unserem Fall entsprechen die Flüssigkeitsteilchen jeweils einer Realisierung der realen Teilchenbewegung (im klassischen Limes), die Flüssigkeit ist hier also als Ensemble–Flüssigkeit zu verstehen. Die Dichte der Ensemble–Flüssigkeit ist durch $|\psi|^2$ gegeben und genügt der Kontinuitätsgleichung, die unmittelbar aus der Gleichung für den Imaginärteil (s.o) folgt ($\nabla S_0 = m\mathbf{v}$)

$$\frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} + \nabla (\mathbf{v} |\psi|^2) = 0.$$

Fazit: **Im Limes $\hbar \rightarrow 0$ beschreibt ψ eine strömende Flüssigkeit von klassischen, nicht–wechselwirkenden Teilchen, Dichte– und Stromdichte der Flüssigkeit entsprechen hier der Wahrscheinlichkeitsdichte und Wahrscheinlichkeitsstromdichte.**

Im Grenzfall $|\psi|^2 = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}(t))$ folgt $\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{v}(\mathbf{x}(t), t)$ und $m\ddot{\mathbf{x}}(t) = -\nabla V(\mathbf{x})$.

Bei stationären Zuständen $S_0(\mathbf{x}, t) = \sigma_0(\mathbf{x}) - Et$, $\psi = \psi_E \exp(-\frac{i}{\hbar}Et)$

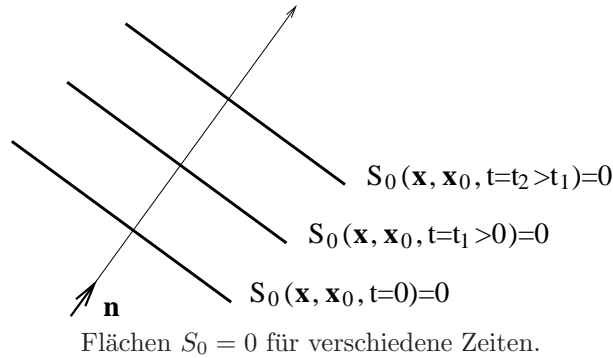
$$\frac{(\nabla\sigma_0)^2}{2m} + V(\mathbf{x}) - E = 0.$$

Als einfaches **Beispiel** betrachten wir zunächst ein **freies Teilchen** mit dem Hamiltonoperator $\hat{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$. Im **stationären Zustand** folgt aus $(\nabla\sigma_0)^2 = 2mE$, $\sigma_0(\mathbf{x}) = \sqrt{2mE} \mathbf{n}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$, wobei \mathbf{n} der Einheitsvektor in Ausbreitungsrichtung des Teilchens und $\mathbf{p} = \sqrt{2mE} \mathbf{n}$ sein Impuls sind. Damit ist die Phase zu $S_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0, t) = \mathbf{p}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) - Et$ bestimmt.

Im stationären Zustand muss ferner $|\psi|^2$ unabhängig von der Zeit sein. Aus der Gleichung für $|\psi|$ folgt

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2m}(\nabla\mathbf{p}) + \frac{1}{m}\mathbf{p}\nabla \right) |\psi| = 0$$

und damit $\nabla|\psi| \perp \mathbf{p}$, d.h. $|\psi|$ ändert sich entlang einer klassischen Trajektorie nicht. Letztere verlaufen senkrecht zu den Flächen $S_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0, t) = \text{const}$, die durch $\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} = \text{const}$ gegeben sind. Die Komponenten des Vektors \mathbf{x} senkrecht zu \mathbf{n} sind durch $\mathbf{x} - \mathbf{n}(\mathbf{x} \cdot \mathbf{n}) \equiv \mathbf{x}_\perp$ gegeben.



Die Wellenfunktion des freien Teilchens hat daher im (quasi-) klassischen Limes die Form

$$\psi(\mathbf{x}, t) = f(\mathbf{x} - \mathbf{n}(\mathbf{x} \cdot \mathbf{n})) e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{x} - Et)}.$$

$|\psi(\mathbf{x}, t)| = f(\mathbf{x} - \mathbf{n}(\mathbf{x} \cdot \mathbf{n}))$ hängt **nicht** von \hbar ab und muß noch der Normierungsforderung $\int d^3x f^2(\mathbf{x} - \mathbf{n}(\mathbf{x} \cdot \mathbf{n})) = 1$ unterworfen werden. Z.B. könnte $f^2(\mathbf{x} - \mathbf{n}(\mathbf{x} \cdot \mathbf{n})) = \frac{1}{L} \delta_\varepsilon^{(2)}(\mathbf{x} - \mathbf{n}(\mathbf{x} \cdot \mathbf{n}))$ oder auch $f^2(\mathbf{x} - \mathbf{n}(\mathbf{x} \cdot \mathbf{n})) = \frac{1}{L^3}$ gewählt werden. Hier ist das Volumen $\mathcal{V} = L^3$ unseres Systems zunächst endlich gewählt, am Ende jeder Rechnung kann dann der Limes $L \rightarrow \infty$ durchgeführt werden.

Es ist jedoch zu betonen, daß i.A. eine Abhängigkeit von $|\psi|$ von $(\mathbf{x} - \mathbf{n}(\mathbf{x} \cdot \mathbf{n}))$ zu $\Delta|\psi| \neq 0$ und damit $S_0 \neq S$ führt und die quasi-klassische Näherung daher nicht

mehr eine Lösung der vollen Schrödingergleichung ist. Bei der Wahl

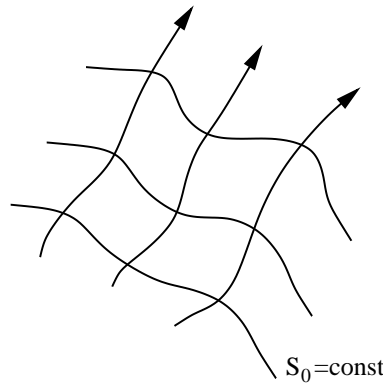
$f^2 = \frac{1}{L} \delta_\varepsilon^{(2)}(\mathbf{x} - \mathbf{n}(\mathbf{x} \cdot \mathbf{n}))$ sind z.B. sowohl der Ort ($\mathbf{x}_\perp = 0$) als auch der Impuls ($\mathbf{p}_\perp = 0$) des Teilchens in der Richtung transversal zu \mathbf{n} vorgegeben, dies widerspricht der Heisenbergschen Unschärferelation.

Schaltet man ein zusätzliches **Potential** $V(\mathbf{x})$ ein, dann wird

$$\nabla \sigma_0 = \sqrt{2m(E - V(\mathbf{x}))} \mathbf{n}(\mathbf{x}),$$

wobei der Einheitsvektor $\mathbf{n}(\mathbf{x})$ senkrecht auf den Flächen $\sigma_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) = \text{const}$ steht.

Diese Flächen sind jetzt nicht mehr, wie im Fall des freien Teilchens, Ebenen, sondern weisen eine Krümmung auf.



Durch Integration folgt $S_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0, t) = \int_0^1 ds \sqrt{2m(E - V(\mathbf{x}(s)))} - Et$, wobei wir eine Parametrisierung mit dem Parameters s eingeführt haben, $\mathbf{x}(s = 0) = \mathbf{x}_0$,

$\mathbf{x}(s = 1) = \mathbf{x}$, $\mathbf{x}(s)$ ist ein Ortsvektor entlang einer klassischen Trajektorie, die immer senkrecht auf den Flächen $\sigma_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) = \text{const}$ steht.

Wir können aber auch **nicht-stationäre-Zustände** betrachten. Man überzeugt sich leicht durch Einsetzen in die volle Hamilton-Jacobi-Gleichung, daß

$$S_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0, t) = \frac{m}{2} \frac{(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^2}{t}, \quad \mathbf{p} = \nabla S_0 = m \frac{(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)}{t}$$

die Gleichung für die Phase des **freien Teilchens** befriedigt.

Man kann diese Lösung aus der Überlagerung von stationären Lösungen mit festem Impuls erhalten

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \int d^d \mathbf{p} c(\mathbf{p}) e^{\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} t)} f(\mathbf{x}_\perp).$$

Ist $c(\mathbf{p})$ nicht von \mathbf{p} abhängig, dann folgt

$$\psi(\mathbf{x}, t) = f(\mathbf{x}_\perp) \left(\frac{2\pi m \hbar}{it} \right)^{d/2} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^2}{t}}$$

Die Flächen $S_0 = \text{const}$ sind jetzt konzentrische Kreise mit dem Mittelpunkt \mathbf{x}_0 und dem Radius $|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0| = \sqrt{2tS_0/m}$. Die Gleichung für die Amplitude wird dann (wir rechnen allgemein in d Dimensionen)

$$\left(\frac{\partial}{\partial \ln t} + \frac{d}{2} + (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \cdot \nabla \right) |\psi(\mathbf{x}, t)| = 0.$$

Da die Ortsableitung nur in die Richtung $\mathbf{m} = (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)/|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0|$ wirkt, kann man die Ortsabhängigkeit von $|\psi|$ in die Anteile parallel und senkrecht zu \mathbf{m} aufspalten.

$$|\psi(\mathbf{x}, t)| = \left(\frac{t}{t_0} |\mathbf{x} - \mathbf{x}_0| \right)^{-d/4} g(\mathbf{x} - \mathbf{m}(\mathbf{m} \cdot \mathbf{x})),$$

wobei die Konstante t_0 aus der Normierung bestimmt wird. Auch hier hat man wieder das Problem, daß ψ nur im endlichen Volumen \mathcal{V} normiert ist, da die gefundene Funktion nicht quadratintegabel ist.

Bisher vernachlässigter quantenmechanischer Term klein, wenn $\frac{\hbar^2}{2m|\psi|} \Delta|\psi| \ll \frac{1}{2m} p^2$, $p = \hbar k = \frac{2\pi}{\lambda} \hbar$ ist. Dies entspricht

$$\lambda^2 \ll (2\pi)^2 a^2$$

$$\lambda \ll a, \quad a = \text{Länge, auf der sich } |\psi| \text{ ändert}$$

→ **Teilchen müssen großen Impuls haben und sich in Feldern mit kleinen Gradienten bewegen.**

Man kann diese Relation noch etwas schärfer formulieren, wenn man aus der Kontinuitätsgleichung im stationären Fall $|\psi|^2 \nabla S_0 = \mathbf{j}_0$ oder $|\psi| = \sqrt{(\mathbf{j} \cdot \mathbf{p})/p^2}$ benutzt. Vernachlässigt man höhere Ableitungen von $\mathbf{p} = \nabla S_0$, so ist $\Delta|\psi|/|\psi|$ von der Ordnung $(\nabla \mathbf{p})^2/p^2$. Damit läßt sich die Ungleichung $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta|\psi|}{|\psi|} \ll \frac{p^2}{2m}$ in der Form $\hbar|\nabla p| \ll p^2$ schreiben. Bei einer eindimensionalen Bewegung ist $\frac{\partial}{\partial x} p^2 = 2p \frac{\partial p}{\partial x} = -2m \frac{dV}{dx} \left(p^2 = 2m(E - V(x)) \right)$ und damit gilt die klassische Näherung, sobald

$$\left| \frac{dV}{dx} \right| m\hbar \ll p^3$$

gilt.

2.11 Mathematische Ergänzungen

Wir hatten bereits die zeitunabhängige Form der Schrödingergleichung

$$\hat{H}\psi_E = E\psi_E(\mathbf{x})$$

betrachtet. Mathematisch betrachtet ist diese Gleichung eine Eigenwertgleichung, E und $\psi_E(\mathbf{x})$ sind der Eigenwert und die Eigenfunktion zum Operator \hat{H} .

Wir betrachten jetzt Eigenfunktionen zu hermiteschen Operatoren \hat{A} . Im Allgemeinen hat die Eigenwertgleichung mehrere Lösungen

$$\hat{A}\psi_{A_n} = A_n\psi_{A_n} \quad n = 1, 2, \dots$$

Im Folgenden werden wir uns auf Fälle beschränken, bei denen das Eigenwertspektrum diskret ist. Die Kürze halber werden wir, wo immer das nicht zu Mißverständnissen führen kann, $\psi_{A_n} \equiv \psi_n$ schreiben.

Es gelten folgende Sätze:

(i) **Die Eigenwerte hermitescher Operatoren sind reell.**

Denn $(\psi, \hat{A}\psi) = A(\psi, \psi) = (\hat{A}\psi, \psi) = A^*(\psi, \psi) \rightarrow A = A^* \rightarrow A$ reell. Allen Meßgrößen müssen daher hermitescher Operatoren zugeordnet werden.

(ii) **Eigenfunktionen hermitescher Operatoren zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal** (oder lassen sich orthogonalisieren).

Denn mit $\hat{A}\psi_l = A_l\psi_l$ folgt

$$\begin{aligned} (\psi_m, \hat{A}\psi_n) &= A_n(\psi_m, \psi_n) = (\hat{A}\psi_m, \psi_n) = A_m(\psi_m, \psi_n) \\ &\rightarrow (A_n - A_m)(\psi_m, \psi_n) = 0 \end{aligned}$$

wenn $A_n \neq A_m \rightarrow (\psi_m, \psi_n) = 0$.

Gehören zu einem Eigenwert mehrere Eigenfunktionen (Entartung) kann man die Funktionen orthogonalisieren. Sei $(\psi'_m, \psi'_n) = C_{mn} = C_{nm}^*$ (hermitesche Matrix), dann Diagonalisierung mit der unitären Matrix \underline{U} ($\underline{U}^\dagger \underline{U} = 1$) möglich

$$\begin{aligned} \sum_{m,n} (U_{mi}\psi'_m, \psi'_n U_{nj}) &= \sum_{m,n} U_{mi}^* C_{mn} U_{nj} = C_i^D \delta_{ij}, \\ \psi_i &= \sum_n U_{ni}\psi'_n \rightarrow (\psi_i, \psi_j) = \delta_{ij} C_i^D. \end{aligned}$$

Daher können die Eigenfunktionen hermitescher Operatoren immer so gewählt werden, daß die Orthogonalitätsrelation (nach Normierung)

$$(\psi_m, \psi_n) = \delta_{mn}$$

gilt. Erfüllen die Eigenfunktionen der von uns betrachteten Operatoren auch die Vollständigkeitsrelation

$$\sum_n \psi_n^*(\mathbf{x}') \psi_n(\mathbf{x}) = \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x})$$

dann läßt sich jede Wellenfunktion eindeutig als Linearkombination der $\psi_n(\mathbf{x})$ darstellen. Nicht alle hermiteschen Operatoren besitzen ein vollständiges Orthonormalsystem von Eigenfunktionen, wohl aber die zur Darstellung von

physikalischen Größen geeigneten hermiteschen Operatoren. Solche Operatoren nennt man Observable. Die $\psi_n(\mathbf{x})$ bilden also ein vollständiges Orthonormalsystem, nach der ein allgemeiner Zustand $\psi(\mathbf{x})$ entwickelt werden kann.

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{x}) &= \int d^3x' \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}') = \int d^3x' \psi_n^*(\mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}') \psi_n(\mathbf{x}) \\ &= \sum_n \underbrace{(\psi_n, \psi)}_{C_n} \psi_n(\mathbf{x}) = \sum_n C_n \psi_n(\mathbf{x}).\end{aligned}$$

Die hier gemachten Aussagen gelten insbesondere auch für die Funktionen $\psi_E(\mathbf{x})$. Man kann also jede Lösung der Schrödingergleichung in der Form ($\psi_n(\mathbf{x}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \psi_{E_n}(\mathbf{x})$)

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \sum_n C_n e^{-i E_n t / \hbar} \psi_n(\mathbf{x}) = \sum_n \underbrace{(\psi_n(\mathbf{x}, t) \psi(\mathbf{x}, t))}_{C_n} e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \psi_{E_n}(\mathbf{x})$$

mit $C_n = (\psi_n, \psi(t=0))$ und $\hat{H} \psi_n = E_n \psi_n$ schreiben. Die C_n sind zeitunabhängig $\frac{\partial}{\partial t} C_n = \frac{i}{\hbar} [E_n (\psi_n(\mathbf{x}, t), \psi(\mathbf{x}, t)) - (\psi_n(\mathbf{x}, t), \hat{H} \psi(\mathbf{x}, t))]$.

- (iii) **Ist ein System in einem Eigenzustand ψ_n eines Operators \hat{A} , dann nimmt die Observable \hat{A} in diesem Zustand scharfe Werte an**

$$\Delta A^2 = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2 = (\psi_n, \hat{A}^2 \psi_n) - (\psi_n, \hat{A} \psi_n)^2 = A_n^2 - A_n^2 = 0.$$

Ansonsten gilt für stationäre Zustände mit $\psi(\mathbf{x}) = \sum_n C_n \psi_n(\mathbf{x})$

$$\langle \hat{A}^k \rangle = \sum_{n,m} C_n^* C_m (\psi_n, \hat{A}^k \psi_m) = \sum_n A_n^k |C_n|^2.$$

Insbesondere gilt für $\hat{A} = 1$ $\sum_n |C_n|^2 = 1$. $|C_n|^2$ ist die Wahrscheinlichkeit, den Eigenwert A_n zu messen.

- (iv) **Kommutieren zwei hermitesche Operatoren \hat{A} , \hat{B} , dann haben \hat{A} und \hat{B} ein gemeinsames System von Eigenfunktionen.**

Denn, sei:

- (a) ψ eine nicht entartete Eigenfunktion von \hat{A} zum Eigenwert A , $\hat{A} \psi = A \psi$, so folgt

$$\hat{A}(\hat{B} \psi) = \hat{B} \hat{A} \psi = A(\hat{B} \psi) \rightarrow \hat{A}(\hat{B} \psi) = A(\hat{B} \psi),$$

da ψ die einzige Eigenfunktion zu \hat{A} ist, muß $\hat{B} \psi \sim \psi$ und damit $\hat{B} \psi = B \psi$ sein.;

- (b) Der **Eigenwert A sei n -fach entartet.**

$$\hat{A} \psi_j = A \psi_j \quad j = 1, \dots, n, \quad (\psi_i, \psi_j) = \delta_{ij}$$

Es gilt $\hat{A}\hat{B}\psi_j = \hat{B}\hat{A}\psi_j = A\hat{B}\psi_j$, d.h. $\hat{B}\psi_j$ ist ebenfalls Eigenfunktion von \hat{A} zum Eigenwert A . Es folgt

$$\hat{B}\psi_j = \sum_k C_{jk}\psi_k, \quad C_{jk} = (\psi_k, \hat{B}\psi_j) = C_{kj}^* \quad \text{hermitesch.}$$

Die Matrix \underline{C} kann durch eine unitäre Transformation \underline{U} diagonalisiert werden.

$$\underline{U}^\dagger \underline{C} \underline{U} = \underline{C}_D, \quad \underline{U}^\dagger \underline{U} = \underline{U} \underline{U}^\dagger = \underline{1}, \quad \underline{U}^\dagger = \underline{U}^{-1}$$

Hieraus folgt $\underline{C} \underline{U} = \underline{U} \underline{C}_D$: $\sum_j C_{ij} U_{jk} = U_{ik} C_{D,k}$, $\sum_i U_{ir}^* C_{ik} = C_{D,r} U_{kr}$.

Der k -te Spaltenvektor der Matrix \underline{U} , $\begin{pmatrix} U_{1k} \\ \vdots \\ U_{nk} \end{pmatrix}$ ist Eigenvektor der Matrix \underline{C} mit dem Eigenwert $C_{D,k}$. Aus $\hat{B}\psi_j = \sum_k C_{jk}\psi_k$ folgt daher

$$\hat{B} \underbrace{\sum_j U_{jr}^* \psi_j}_{\varphi_r} = \sum_{j,k} U_{jr}^* C_{jk} \psi_k = C_{D,r} \underbrace{\sum_k U_{kr}^* \psi_k}_{\varphi_r}.$$

Die φ_r sind daher sowohl Eigenfunktionen von \hat{A} als auch von \hat{B} . Die Eigenwerte von B sind durch die Diagonalelemente $C_{D,r}$ der Diagonalmatrix C_D gegeben.

- (v) Sei ψ_n , $n = 1, 2, \dots$, ein vollständiges System von Eigenfunktionen zu den Operatoren \hat{A} und \hat{B} mit den Eigenwerten A_n , B_n . Dann kommutieren \hat{A} und \hat{B} .

Tatsächlich, mit $[\hat{A}, \hat{B}]\psi_n = (A_n B_n - B_n A_n)\psi_n = 0$ folgt für jedes $\psi = \sum_n C_n \psi_n$

$$[\hat{A}, \hat{B}]\psi = 0, \quad \text{i.e.} \quad [\hat{A}, \hat{B}] = 0.$$

Kapitel 3

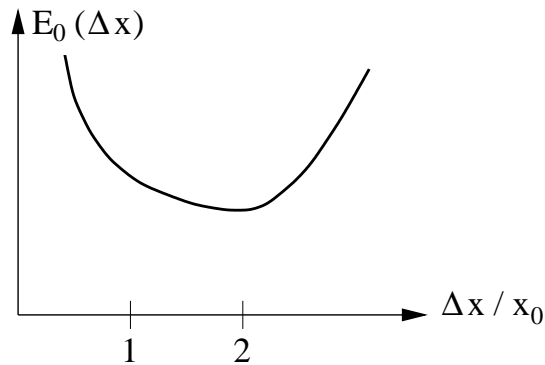
Eindimensionale Probleme

3.1 Der harmonische Oszillator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2$$
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 \right] \Phi(x) = E\Phi(x)$$

klassisch: tiefster Energiezustand $E = p = x = 0$.

quantenmechanisch: Heisenbergsche Unschärferelation erfordert $\Delta p \cdot \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$.



Wir schätzen die Grundzustandsenergie über den Erwartungswert von $\langle \hat{H} \rangle$ ab. Aus $\langle \hat{p}^2 \rangle = \langle \Delta \hat{p}^2 \rangle$ und $\langle \hat{x}^2 \rangle = \langle \Delta \hat{x}^2 \rangle$, denn es gilt $\langle \hat{x} \rangle = \langle \hat{p} \rangle = 0$, folgt

$$\langle \hat{H} \rangle = \frac{1}{2m} \langle \Delta \hat{p}^2 \rangle + \frac{m\omega^2}{2} \langle \Delta \hat{x}^2 \rangle \geq \left(\frac{\hbar}{2\Delta x} \right)^2 \frac{1}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \Delta x^2 = E_0(\Delta x)$$
$$\frac{\partial E}{\partial \Delta x} = 0 = -\frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{4\Delta x^3} + m\omega^2 \Delta x$$
$$\Delta x^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} \rightarrow \langle \hat{H} \rangle \geq E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$$

Offenbar ist $\sqrt{\hbar/(m\omega)} = x_0$ die **charakteristische Länge** des Problems. Dies folgt auch aus einer **Dimensionsanalyse**: \hbar, m und ω sind die drei vorhandenen

Parameter mit $[\hbar] = \text{ML}^2\text{t}^{-1}$, $[m] = \text{M}$, $[\omega] = \text{t}^{-1}$, $[x_0 = \hbar^\alpha m^\beta \omega^\gamma] = \text{L}$, $\alpha = -\beta = -\gamma = 1/2$. In der neuen Koordinate $\xi = x/x_0$ hat die Schrödingergleichung eine einfache Form (die Wellenfunktion hängt offenbar nur von $\xi = x/x_0$ ab). Die Schrödingergleichung nimmt jetzt die einfache Form

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{1}{2} \xi^2 \right] \psi(\xi) = \frac{E}{\hbar\omega} \psi(\xi); \quad \frac{1}{\sqrt{x_0}} \psi\left(\frac{x}{x_0}\right) = \Phi(x)$$

an. Dieses Eigenwertproblem läßt sich durch Suche nach den Eigenfunktionen mit dem Ansatz $\psi(\xi) = e^{-\xi^2/2} \chi(\xi)$ lösen (s. z.B. Landau–Lifschitz Bd. III).

Es gibt neben der Standardmethode, die Schrödingergleichung zu lösen, die sogenannte **algebraische Methode**, von der wir mehr lernen können und die wir hier benutzen werden. Dazu führen wir die **nicht**-hermiteschen Operatoren \hat{a} , \hat{a}^\dagger durch

$$\left. \begin{aligned} \hat{x} &= \frac{1}{\sqrt{2}} x_0 (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \\ \hat{p} &= -i \frac{\hbar}{\sqrt{2} x_0} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger) \end{aligned} \right\} \rightarrow \begin{aligned} \hat{a} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{x}}{x_0} + i \frac{\hat{p} x_0}{\hbar} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) \\ \hat{a}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{x}}{x_0} - i \frac{\hat{p} x_0}{\hbar} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right) \end{aligned}$$

ein. (Zeige, daß \hat{a}^\dagger wirklich der adjungierte Operator zu \hat{a} ist!) Es gilt offenbar

$$\begin{aligned} [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] &= 1, \quad [\hat{a}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger] = 0, \\ \hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2 = -\frac{\hbar^2}{4m x_0^2} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \frac{x_0^2}{2} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^2 = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right). \end{aligned}$$

Der Operator $\hat{a}^\dagger \hat{a} =: \hat{n}$ wird aus später klarwerdenden Gründen **Besetzungszahl-operator** genannt. Wir suchen jetzt Eigenfunktionen ψ_n zu $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{n} + \frac{1}{2})$. Dazu schreiben wir den Eigenwert E_n in der Form $\hbar\omega(n + \frac{1}{2})$, wobei n dann die Eigenwertgleichung

$$\hat{n} \psi_n = n \psi_n$$

befriedigen muß. Aus $(\psi_n, \hat{n} \psi_n) = n(\psi_n, \psi_n) = (\psi_n, \hat{a}^\dagger \hat{a} \psi_n) = (\hat{a} \psi_n, \hat{a} \psi_n) \geq 0 \rightarrow n \geq 0$. Der niedrigste mögliche Eigenwert zu \hat{n} ist $n = 0$ und damit folgt $E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega$ wie wir schon in unserer Abschätzung gesehen hatten. Für $n = 0$ folgt $(\hat{a} \psi_0, \hat{a} \psi_0) = 0$, i.e. $\hat{a} \psi_0 = 0$ und damit durch einfache Integration

$$\left(\frac{d}{d\xi} + \xi \right) \psi_0(\xi) = 0 \rightarrow \psi_0(\xi) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-(1/2)\xi^2}.$$

Normierung?

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\xi}{\sqrt{\pi}} e^{-\xi^2} = 1$$

Die übrigen Wellenfunktionen folgen aus der Tatsache, daß $\hat{a}^\dagger \psi_n$ Eigenfunktion zum Eigenwert $n + 1$ ist. Tatsächlich, unter Verwendung von $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] \equiv 1$ erhält man

$$\hat{n} \hat{a}^\dagger \psi_n = (\hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a}^\dagger) \psi_n = (\hat{a}^\dagger \hat{n} + \hat{a}^\dagger) \psi_n = (n + 1) (\hat{a}^\dagger \psi_n)$$

Wir wollen jetzt die Norm von $\hat{a}^\dagger\psi_n$ berechnen

$$(\hat{a}^\dagger\psi_n, \hat{a}^\dagger\psi_n) = (\psi_n, \hat{a}\hat{a}^\dagger\psi_n) = (\psi_n, (\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1)\psi_n) = (n+1)(\psi_n, \psi_n),$$

d.h. die normierten Eigenfunktion von \hat{n} zum Eigenwert $(n+1)$ folgt aus der Beziehung

$$\psi_{n+1} = \frac{1}{\sqrt{n+1}} \hat{a}^\dagger\psi_n.$$

Falls ψ_n auf 1 normiert ist, dann ist auch ψ_{n+1} auf 1 normiert. Umgekehrt gilt

$$\hat{a}\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{a}\hat{a}^\dagger\psi_{n-1} = \frac{1}{\sqrt{n}} (\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1)\psi_{n-1} = \frac{n-1+1}{\sqrt{n}} \psi_{n-1} = \sqrt{n}\psi_{n-1}$$

$$\frac{1}{\sqrt{n}} \hat{a}\psi_n = \psi_{n-1}.$$

ψ_{n-1} ist die Eigenfunktion zum Eigenwert $(n-1)\hbar\omega$.

$$\hat{n}\psi_{n-1} = \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{n}\hat{a}\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n}} (\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a})\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n}} (\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{a})\psi_n = \frac{\hat{a}}{\sqrt{n}} (n-1)\psi_n = (n-1)\psi_{n-1}$$

Wir erhalten also ein äquidistantes Anregungsspektrum mit Energieeigenwerten

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad n = 0, 1, \dots$$

\hat{a}, \hat{a}^\dagger werden Leiteroperatoren (Ab- und Aufsteiger) genannt.

Damit sind auch **alle** Energieeigenwerte gefunden worden. Denn aus Annahme, es gäbe einen Eigenwert $E = (n + \frac{1}{2} + \alpha)\hbar\omega$, $0 < \alpha < 1$, folgt für Eigenzustand (bis auf die Normierung ist $\hat{a}^n\psi_{n+\alpha}$ Eigenfunktion von \hat{n} mit dem Eigenwert α)

$$\begin{aligned} \hat{n}\psi_{n+\alpha} &= (n+\alpha)\psi_{n+\alpha}, & \hat{n}(\hat{a}^n\psi_{n+\alpha}) &= \alpha(\hat{a}^n\psi_{n+\alpha}), \\ \hat{n}(\hat{a}^{n+1}\psi_{n+\alpha}) &= (\alpha-1)(\hat{a}^{n+1}\psi_{n+\alpha}). \end{aligned}$$

Hieraus folgt

$$(\hat{a}^{n+1}\psi_{n+\alpha}, \hat{n}\hat{a}^{n+1}\psi_{n+\alpha}) = (\alpha-1)(\hat{a}^{n+1}\psi_{n+\alpha}, \hat{a}^{n+1}\psi_{n+\alpha}) = (\hat{a}^{n+2}\psi_{n+\alpha}, \hat{a}^{n+2}\psi_{n+\alpha}) > 0.$$

Da die Norm von $\hat{a}^{n+1}\psi_{n+\alpha}$ und $\hat{a}^{n+2}\psi_{n+\alpha}$ positiv ist, $\alpha-1$ aber negativ, liegt ein Widerspruch vor. Wir haben dabei angenommen, daß $(\hat{a}^{n+1}\psi_{n+\alpha})$ verschieden von Null ist. Dies ist der Fall. Denn gäbe die Anwendung von \hat{a} auf $(\hat{a}^n\psi_{n+\alpha})$ Null, so wäre die Funktion $(\hat{a}^n\psi_{n+\alpha}) \sim \psi_0$ und hätte damit den Eigenwert 0, im Widerspruch zur unserer Annahme

$$\hat{n}(\hat{a}^n\psi_{n+\alpha}) = \alpha(\hat{a}^n\psi_{n+\alpha}).$$

α kann also nur Null sein. Die ψ_n folgen nun durch Anwendung von \hat{a}^n auf ψ_0 :

$$\begin{aligned}\psi_n &= \frac{1}{(\sqrt{\pi} n! 2^n)^{1/2}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right)^n e^{-(1/2)\xi^2} \Big|_{\xi=(x/x_0)} \\ &= \frac{1}{(\sqrt{\pi} n! 2^n)^{1/2}} e^{-(1/2)\xi^2} H_n(\xi) \Big|_{\xi=(x/x_0)} \\ H_n(\xi) &= (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}\end{aligned}$$

sind die sogenannte **Hermiteischen Polynome**.

Tatsächlich: aus der ersten bzw. zweiten Gleichung folgt

$$H_n(\xi) = e^{(1/2)\xi^2} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right)^n e^{-(1/2)\xi^2} = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}.$$

Um diese Relation zu zeigen, schreibt man zunächst $\exp(\pm(1/2)\xi^2) = \exp(\pm\xi^2 \mp (1/2)\xi^2)$

und benutzt dann die Operatoridentität

$$\begin{aligned}e^{-\xi^2/2} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right)^n e^{\xi^2/2} &= \\ e^{-\xi^2/2} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right)^{n-1} (\xi - \xi) e^{\xi^2/2} - e^{-\xi^2} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right)^{n-1} e^{\xi^2/2} \left(-\frac{d}{d\xi} \right) &= (-1)^n \frac{d^n}{d\xi^n}\end{aligned}$$

Multipliziere jetzt von links mit e^{ξ^2} und von rechts mit $e^{-\xi^2}$.

$$H_0(\xi) = 1$$

$$H_1(\xi) = 2\xi$$

$$H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2$$

$$H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi$$

$$H_4(\xi) = 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12$$

$$H_5(\xi) = 32\xi^5 - 160\xi^3 + 120\xi$$

Es gelten die **Orthogonalitätsrelationen**

$$\frac{1}{\sqrt{\pi} 2^n n!} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-\xi^2} H_n(\xi) H_m(\xi) = \delta_{nm}$$

und die **Vollständigkeitsrelation**

$$\sum_{n=0}^{\infty} \psi_n(\xi) \psi_n(\xi') = \delta(\xi - \xi').$$

die wir hier nicht beweisen wollen

Klassifikation nach Paritätseigenschaften

Operation $x \rightarrow -x$ nennt man **Paritätsoperation**; dies ist **Spiegelung am Ursprung**. Der Paritätsoperation wird Operator \hat{P} zugeordnet:

$$\hat{P}\psi(x) \equiv \psi(-x).$$

\hat{P} ist hermitesch (zeige das!):

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x) \hat{P} \psi(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x) \psi(-x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi^*(-x') \psi(x') \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\hat{P} \psi(x) \right)^* \psi(x) \end{aligned}$$

Eigenwerte von P :

$$\begin{aligned} \hat{P} \psi_l &= \lambda_l \psi_l \\ \hat{P}^2 \psi_l &= \lambda_l \hat{P} \psi_l = \lambda_l^2 \psi_l = \psi_l \\ \rightarrow \lambda_l^2 &= 1 \rightarrow \lambda_l = \pm 1 \end{aligned}$$

Können Eigenzustände von $H(x)$ gleichzeitig Eigenzustände von \hat{P} sein?

$$\begin{aligned} \hat{H}(x) \psi_n(x) &= E_n \psi_n(x) \\ \hat{P} \hat{H}(x) \psi_n(x) &= E_n \hat{P} \psi_n(x) \end{aligned}$$

Allgemein gilt $\hat{P} \hat{H}(x) = \hat{H}(-x) \hat{P}$.

In dem Fall des harmonischen Oszillators ist $\hat{H}(x) = \hat{H}(-x)$

$$\rightarrow [\hat{P}, \hat{H}(x)] = 0.$$

Somit

$$\hat{P} \hat{H}(x) \psi_n(x) = \hat{H}(x) \left(\hat{P} \psi_n(x) \right) = E_n \left(\hat{P} \psi_n(x) \right).$$

Dies besagt: mit $\psi_n(x)$ ist auch $\hat{P} \psi_n(x)$ Eigenzustand zum selben Eigenwert E_n . Da in unserem Fall $\psi_n(x)$ nicht entartet ist, gilt $\hat{P} \psi_n(x) = \text{const.} \psi_n(x)$ und wie bereits gesehen, muß const. = ± 1 sein. Folgt $\hat{P} \psi_n(x) = \pm \psi_n(x)$, Zustände positiver und negativer Parität. Die Eigenzustände des eindimensionalen harmonischen Oszillators können somit nach Paritätseigenschaften klassifiziert werden.

Wir können jetzt noch einmal die Unschärfe in Ort- und Impuls ausrechnen

$\langle \hat{x} \rangle = \langle \hat{p} \rangle = 0$ aufgrund der Symmetrie und

$$\langle \Delta \hat{x}^2 \rangle = \langle \hat{x}^2 \rangle = x_0^2 \langle \hat{\xi}^2 \rangle = \frac{1}{2} x_0^2 \left(\psi_n, \underbrace{(\hat{a}^2 + \hat{a} \hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a}^{\dagger 2})}_{2(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2})} \psi_n \right) = \left(n + \frac{1}{2} \right) x_0^2,$$

wobei wir die Orthogonalität von ψ_n mit verschiedenen n benutzt haben. Analog folgt

$$\langle \Delta \hat{p}^2 \rangle = \langle \hat{p}^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{x_0^2} \left(n + \frac{1}{2} \right) = p_0^2 \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad p_0 = \frac{\hbar}{x_0} = \sqrt{m\omega\hbar}$$

und damit

$$\langle \Delta \hat{p}^2 \rangle \langle \Delta \hat{x}^2 \rangle = \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 \hbar^2,$$

d.h. die Orts- und Impulsunschärfe ist im Grundzustand minimal. ($H = \frac{\hbar\omega}{2} \left(\left(\frac{\hat{p}}{p_0} \right)^2 + \left(\frac{\hat{x}}{x_0} \right)^2 \right)$)

Vergleich mit dem klassischen Oszillator

Im Folgenden vergleichen wir den klassischen und den quantenmechanischen Oszillator. Ort und Energie des klassischen Oszillators sind durch

$$x = X \sin \omega t$$

$$E = E(X) = \frac{1}{2} m \omega^2 X^2 = \frac{1}{2} \omega \hbar \left(\frac{X}{x_0} \right)^2$$

gegeben. Die klassische Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Intervall $[x, x + dx]$ ist durch die Zeit dt (im Verhältnis zur Gesamtschwingungsdauer T) gegeben, die das Teilchen im Intervall $[x, x + dx]$ verbringt. $W_{\text{klass}}(x)dx = \frac{dt}{T} = \frac{1}{2\pi X(1-(x/X)^2)^{1/2}} dx$, denn

$$dt : \text{Aufenthaltsdauer in } dx, \quad T = 2\pi/\omega$$

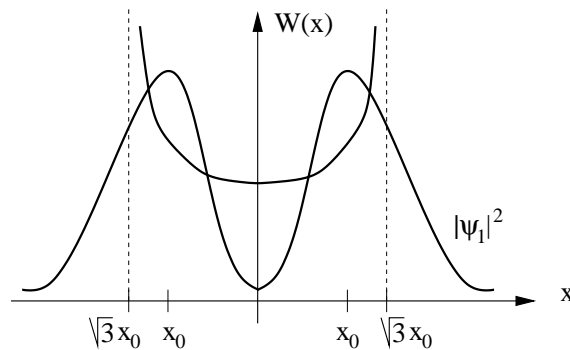
$$dx = X\omega \cos \omega t dt = X\omega \left(1 - (x/X)^2 \right)^{1/2} dt$$

Zum Vergleich setzen wir nun die Energie beider Oszillatoren gleich: $E(X) = E_n$.

Im 1. angeregten Zustand mit $E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega = \frac{1}{2}\hbar\omega(X/x_0)^2 \rightarrow X = \sqrt{3}x_0$. Folgt

$$W_{\text{klass}}(x) = \frac{1}{2\pi\sqrt{3}x_0 \left(1 - (x/\sqrt{3}x_0)^2 \right)^{1/2}}.$$

Diese klassische Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist nun mit $|\psi_1|^2 = \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2/x_0^2} \left(\frac{x}{x_0} \right)^2$ zu vergleichen (siehe Bild).



Im allgemeinen Fall $E_n/\hbar\omega = (n + \frac{1}{2}) = \frac{1}{2}(X/x_0)^2$ erhalten wir $X = x_0\sqrt{2n+1}$. Im n -ten Zustand hat die Wellenfunktion $(n-1)$ Nullstellen und deshalb ist für $n \gg 1$ der typische Abstand zwischen den Nullstellen von der Ordnung $X/n \sim x_0\sqrt{\frac{2}{n}}$.

Kohärente Zustände

Für alle stationäre Zustände verschwindet $\langle \hat{x} \rangle$. Wir bestimmen nun Lösungen der zeitabhängigen Schrödingergleichung, die eine periodische Bewegung darstellen. wir suchen dazu **Eigenzustände** ϕ des **Operators** \hat{a}

$$\hat{a}\varphi_a = a\varphi_a(x)$$

wobei a komplex ist (da \hat{a} nicht hermitesch ist). Es gilt mit $\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n\psi_0$

$$(\psi_n, \varphi_a) = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^{\dagger n} \psi_0, \varphi_a) = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\psi_0, \hat{a}^n \varphi_a) = \frac{a^n}{\sqrt{n!}} (\psi_0, \varphi_a).$$

Hieraus resultiert für die Entwicklung von φ_a (vergleiche Kap. 2.11 (ii))

$$\varphi_a(x) = \sum_{n=0}^{\infty} (\psi_n, \varphi_a) \psi_n = C \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^n}{\sqrt{n!}} \psi_n = C \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a \hat{a}^\dagger)^n}{n!} \psi_0 = e^{-|a|^2/2 + a \hat{a}^\dagger} \psi_0. \quad (3.1)$$

Die φ_a sind nicht mehr Eigenfunktionen von \hat{H} und damit keine **stationäre Lösungen**. Die Normierungskonstante $C = (\psi_0, \varphi_a)$ folgt aus

$$(\varphi_a, \varphi_a) = C^2 \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{a^n a^{*m}}{\sqrt{n!m!}} \underbrace{(\psi_m, \psi_n)}_{\delta_{mn}} = C^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|a|^{2n}}{n!} = e^{|a|^2} C^2,$$

d.h. $C = \exp(-|a|^2/2)$. Die Zeitentwicklung folgt mit $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ und $\varphi_a(x, t) = \sum_n (\psi_n, \varphi_a(t=0)) \exp(-\frac{i}{\hbar} E_n t) \psi_n(x)$

$$\begin{aligned} \varphi_a(x, t) &= e^{-|a|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^n}{\sqrt{n!}} \psi_n(x) e^{-i\omega(n+\frac{1}{2})t} \\ &= e^{-|a|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(ae^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}} \psi_n(x) e^{-i\omega t/2} =: \varphi_{a(t)}(x) e^{-i\omega t/2} \\ a(t) &= ae^{-i\omega t}. \end{aligned} \quad (3.2)$$

$\varphi_a(x, t)$ ist als Linearkombination von $\psi_n(x, t)$ **Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung**. Solche Zustände nennt man **kohärente Zustände**.

$$\begin{aligned} \langle \hat{x} \rangle &= \left(\varphi_{a(t)}(x), \hat{x} \varphi_{a(t)}(x) \right) = \frac{x_0}{\sqrt{2}} \left(\varphi_{a(t)}, (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \varphi_{a(t)} \right) \\ &= \frac{x_0}{\sqrt{2}} \left(a(t) + a^*(t) \right) = \sqrt{2} x_0 |a| \cos(\omega t - \delta) \\ a &= |a| e^{i\delta} \end{aligned}$$

$\rightarrow \langle \hat{x} \rangle$ hat die gleiche Zeitabhängigkeit wie die klassische Lösung.

Aus (3.1), (3.2) folgt

$$\begin{aligned} \varphi_a(x, t) &= e^{-i\omega t/2} e^{a(t)\hat{a}^\dagger - a^*(t)\hat{a}} \psi_0(x) \\ |\varphi_a(x, t)|^2 &= \frac{1}{\sqrt{\pi} x_0} \exp \left\{ - \frac{\left(x - x_0 \sqrt{2} |a| \cos(\omega t - \delta) \right)^2}{x_0^2} \right\}. \end{aligned}$$

Ein kohärenter Zustand ist ein Gaußsches Wellenpaket, das sich nicht verbreitert, weil alle Summanden in Phase sind. Kohärente Zustände spielen in der modernen Theorie der Phasenübergänge eine wichtige Rolle, auch in Lasertheorie.

Kohärente Zustände haben einige Besonderheiten:

- (i) da sie Eigenzustände eines nicht-hermiteschen Operators sind, sind sie nicht orthogonal zueinander.
- (ii) sie sind keine Eigenzustände des Operators \hat{a}^\dagger

In der Literatur ist es üblich, mit den nicht-normierten Eigenzustände $\tilde{\varphi}_a(x) = \hat{e}^{a\hat{a}^\dagger} \psi_0$ zu arbeiten. Dann gilt

$$(\tilde{\varphi}_a, \tilde{\varphi}_b) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{a^{*n}}{\sqrt{n!}} \frac{b^m}{\sqrt{m!}} \underbrace{\langle \psi_n, \psi_m \rangle}_{\delta_{nm}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^{*n} b^n}{n!} = e^{a^* b}.$$

\hat{a}^\dagger hat keine Eigenfunktionen: Wir nehmen das Gegenteil an und zeigen, daß dies auf einen Widerspruch führt. Sei $\tilde{\varphi}$ Eigenfunktion von \hat{a}^\dagger

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger \tilde{\varphi} &= \tilde{a} \tilde{\varphi} \\ (\psi_n, \hat{a}^\dagger \tilde{\varphi}) &= \tilde{a} (\psi_n, \tilde{\varphi}) \\ (\psi_0, \hat{a}^\dagger \tilde{\varphi}) &= (\hat{a} \psi_0, \tilde{\varphi}) = 0 = \tilde{a} (\psi_0, \tilde{\varphi}) \rightarrow (\psi_0, \tilde{\varphi}) = 0 \\ (\psi_{n-1}, \tilde{\varphi}) &= \left(\frac{1}{\sqrt{n}} \hat{a} \psi_n, \tilde{\varphi} \right) = \frac{1}{\sqrt{n}} \tilde{a} (\psi_n, \tilde{\varphi}) \rightarrow \text{alle } (\psi_n, \tilde{\varphi}) = 0 \rightarrow \tilde{\varphi} \equiv 0. \end{aligned}$$

Es gilt aber

$$\hat{a}^\dagger \tilde{\varphi}_a = \hat{a}^\dagger e^{a\hat{a}^\dagger} \psi_0 = \frac{\partial}{\partial a} \tilde{\varphi}_a.$$

Mehr dazu: Dawydow §32

Negele + Orland "Quantum Many-Particle Systems"

Mit Hilfe der kohärenten Zustände wird die Darstellung von Erwartungswerten sehr einfach:

$$\begin{aligned} (\varphi_a, \hat{x} \varphi_a) &= \frac{x_0}{\sqrt{2}} (\varphi_a | \hat{a}^\dagger + \hat{a} | \varphi_a) = \frac{x_0}{\sqrt{2}} \left[(\hat{a} \varphi_a | \varphi_a) + (\varphi_a, \hat{a} \varphi_a) \right] = \frac{x_0}{\sqrt{2}} (a^* + a) \\ (\varphi_a, \hat{p} \varphi_a) &= \dots = i\hbar p_0 (a^* - a) \\ (\varphi_a, \hat{H} \varphi_a) &= \hbar\omega \left(a^* a + \frac{1}{2} \right) \\ (\varphi_a, \hat{x}^2 \varphi_a) &= \frac{1}{2} x_0^2 \left[(a^* + a)^2 + 1 \right] \\ (\varphi_a, \Delta \hat{x}^2 \varphi_a) &= \frac{x_0^2}{2} \\ (\varphi_a, \Delta \hat{p}^2 \varphi_a) &= \frac{p_0^2}{2} \end{aligned}$$

Kohärente Zustände sind Zustände minimaler Unschärfe, es gilt $\Delta x \Delta p = \hbar/2$.

3.2 Freies Teilchen

Betrachte zeitunabhängige Schrödingergleichung.

$$\begin{aligned} V(x) &= 0 \\ -\frac{\hbar^2 d^2}{dx^2} \psi_n(x) &= E_n \psi_n(x) \end{aligned}$$

Lösungen sind offenbar ebene Wellen

$$\psi_n(x) \propto e^{\pm ik_n x}$$

($k_n = \sqrt{2mE_n/\hbar^2}$, $E_n = (\hbar^2 k_n^2)/2m$), E_n , ψ_n : Eigenwert, Eigenfunktion zum Operator \hat{H} , i.e. ist mehr als ein n möglich. $\psi_n(x)$ ist auch Eigenfunktion zum Impulsoperator

$$\begin{aligned} \hat{p}_x &= \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \\ \hat{p}_x \psi_n(x) &= \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} e^{\pm ik_n x} = \pm \hbar k_n \psi_n(x) \\ \rightarrow p_n &= \pm \hbar k_n \end{aligned}$$

$\psi_n(x)$ ist offenbar nicht quadratintegrabel, denn der Ansatz $\psi_n(x) = C e^{\pm ikx}$ führt zu $|\psi_n(x)|^2 = |C|^2$, damit divergiert die Norm. Eigenwerte ($E_n \geq 0$) sind kontinuierlich.

Man sagt: es liegen ein **kontinuierliches Eigenwertspektrum** und **Kontinuumseigenfunktionen** vor.

Orthonormiertheit: Betrachte die Funktionen $\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$ im Volumen $[-x_0, x_0]$.

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \int_{x_0}^{x_0} dx e^{-ik'x} e^{ikx} &= \frac{1}{2\pi} \frac{1}{i(k-k')} 2i \sin[(k-k')x_0] \\ &= \frac{1}{\pi} \frac{\sin[(k-k')x_0]}{(k-k')} \stackrel{x_0 \rightarrow \infty}{=} \delta(k-k'), \end{aligned}$$

wobei wir die Grenzwertdarstellung der δ -Funktion benutzt haben. Statt des Kronnecker-Deltas steht rechts jetzt die Diracsche δ -Funktion.

Vollständigkeit:

$$\sum_k \psi_k(x) \psi_k^*(x') \rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{ik(x-x')} = \delta(x-x').$$

Impulsdarstellung:

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}(p) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ipx/\hbar} \psi_k(x) = \frac{1}{2\pi\hbar^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{ix(k-\frac{p}{\hbar})} \\ &= \frac{1}{\hbar} \delta(k - \frac{p}{\hbar}) = \delta(p - \hbar k). \end{aligned}$$

Dies sind also **Zustände mit scharfen Impulsen** und **scharfer Energie**, es sind Idealisierungen von physikalisch realisierten Zuständen (Wellenpaketen), die quadratintegrabel sind.

Statt $\psi(x) = \sum_n \psi_n(x)$ hat man jetzt $\psi(x) = \int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} c(k) e^{ikx}$, früher haben wir für ein Wellenpaket $C(k) = \sqrt{2\pi} f(k)$ gefunden, siehe 2.1.1. Wir erhalten dann für die allgemeine Lösung der Schrödingergleichung

$$\psi(x, t) = \int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} c(k) e^{ikx - iE_k t/\hbar}, \quad E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

Ein **anderer Zugang** besteht darin, zunächst ein (i) **endliches Periodizitätsvolumen** $[-x_0, x_0]$ zu betrachten, dann wird das Spektrum diskret: $k_n = \frac{2\pi}{\lambda_n}$, $\frac{2x_0}{\lambda_n} = n = 0, \pm 1, \pm 2 \rightarrow k_n = \frac{2\pi n}{2x_0} = \frac{\pi n}{x_0}$, $\Delta k = \frac{\pi}{x_0}$: $\psi_n = \frac{c}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_n x}$. Im Periodizitätsvolumen gilt:

$$\int_{-x_0}^{x_0} \psi_n^* \psi_m dx = |c|^2 \int_{-x_0}^{x_0} \frac{dx}{2\pi} e^{ix(k_m - k_n)} = \begin{cases} |c|^2 \frac{\sin[(m-n)\pi \frac{x_0}{x_0}]}{(m-n)\pi} = 0, & m \neq n \\ |c|^2 \frac{2x_0}{2\pi} \rightarrow c = \sqrt{\frac{\pi}{x_0}} \end{cases}$$

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{2x_0}} e^{ik_n x}; \quad (\psi_n, \psi_m) = \delta_{n,m}$$

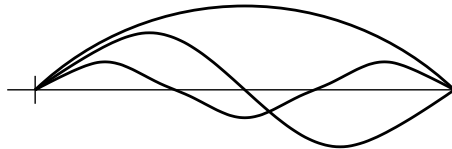
Im Limes eines divergierenden Volumens geht $\sqrt{x_0/\pi} \psi_n$ in ψ_k über, aus Kronecker-Deltas werden δ -Funktionen.

$$\frac{x_0}{\pi} (\psi_n, \psi_m) = \frac{x_0}{\pi} \delta_{n,m} \xrightarrow{x_0 \rightarrow \infty} \delta(k - k')$$

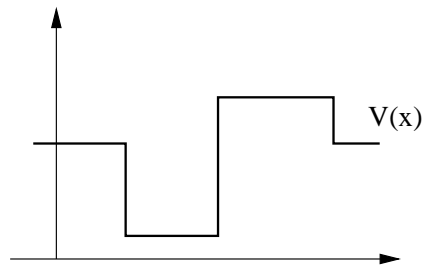
$$\sum_n \frac{x_0}{\pi} \delta_{n,m} = \frac{x_0}{\pi} \Rightarrow \int \frac{dk}{\Delta k} \delta(k - k') = \frac{x_0}{\pi}$$

Wir benutzen hier $\lim_{\Delta k \rightarrow 0} \sum_k = \int \frac{dk}{\Delta k}$.

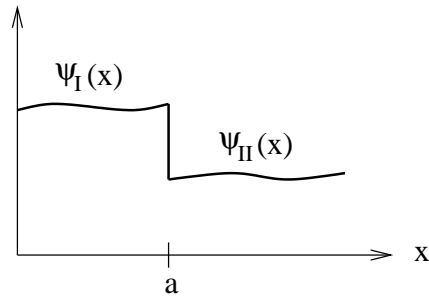
Alternativ hierzu kann man das Teilchen als (ii) in einem endlichen Kasten der Länge $2x_0$ eingesperrt betrachten. Außerhalb des Kastens ist $V = \infty$, d.h. ψ verschwindet an $x = \pm x_0$. Die erlaubten k -Werte sind jetzt durch $\frac{2x_0}{\lambda_n/2} = n = 0, 1, 2, 3, \dots$ und damit $k_n = \frac{2\pi}{\lambda_n} = \frac{\pi}{2x_0} n$ gegeben. Die Zahl der k -Vektoren in beiden Fällen ist gleich. Die k -Werte mit ungeradem n , $k_n = \frac{\pi}{2x_0} (2m+1)$ entsprechen im Fall periodischer Randbedingungen den negativen $k_m = \frac{2\pi}{2x_0} m$, $m < 0$.



3.3 Potentialstufen



Potentialstufen: treten häufig auf, betrachte einfache Stufe mit Unstetigkeitschwelle



$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi(x) \quad (*)$$

E , $V(x)$ sind **endlich**. $\psi(x)$, $\psi'(x)$ sind **stetig an Unstetigkeitsstelle**. Denn, falls ψ oder ψ' unstetig an a :

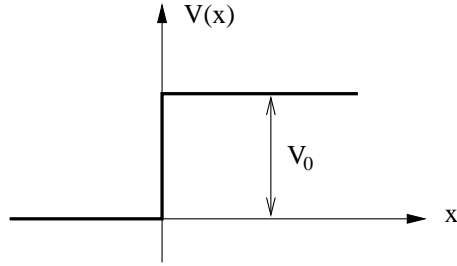
$$\psi \sim \Theta(x - a) \rightarrow \psi' \sim \delta(x - a), \psi'' \sim \delta'(x - a)$$

$$\psi' \sim \Theta(x - a) \rightarrow \psi'' \sim \delta(x - a)$$

rechte Seite hat jedoch höchstens endliche Unstetigkeit

$$\boxed{\begin{array}{l} \psi_I(a) = \psi_{II}(a) \\ \psi'_I(a) = \psi'_{II}(a) \end{array}} \rightarrow \boxed{\frac{\psi'_I(a)}{\psi_I(a)} = \frac{\psi'_{II}(a)}{\psi_{II}(a)}}$$

Beispiel: $V(x) = V_0\Theta(x)$



(a) $E > V_0$

$$\left. \begin{array}{l} I: \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi \quad k^2 = 2mE/\hbar^2 \quad \rightarrow \exp(\pm ikx) \\ II: \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = -q^2\psi \quad q^2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2 \quad \rightarrow \exp(\pm iqx) \end{array} \right\} \text{ sind Lösungen}$$

Annahme: Teilchen kommt von links, dann ist der Impuls positiv und das obere Vorzeichen ist zu wählen.

$$\begin{aligned} \psi_I &= e^{ikx} + Re^{-ikx} \\ \psi_{II} &= Te^{iqx} \\ \psi(x) &= \Theta(-x)\psi_I(x) + \Theta(x)\psi_{II}(x) \\ |\psi_I|^2 &= (e^{ikx} + Re^{-ikx})(e^{-ikx} + R^*e^{ikx}) = 1 + |R|^2 + Re^{-2ikx} + R^*e^{2ikx} \\ |\psi_{II}|^2 &= |T|^2 \end{aligned}$$

Die i.a. komplexen Amplituden R und T folgen aus den Stetigkeitsbedingungen bei $x = 0$

$$\begin{aligned} 1 + R &= T \\ ik(1 - R) &= iqT \end{aligned}$$

$$R = \frac{k - q}{k + q}, \quad T = \frac{2k}{k + q}$$

Strom:

$$\begin{aligned} j_I &= \text{Re}(\psi^* \frac{\hbar}{im} \nabla \psi) = \frac{\hbar}{2mi} [(e^{-ikx} + R^*e^{ikx}) ik (e^{ikx} - Re^{-ikx}) - \text{c.c.}] \\ &= \frac{\hbar}{2mi} [ik(1 - |R|^2 - Re^{-2ikx} + R^*e^{2ikx}) - \text{c.c.}] \\ &= \frac{\hbar k}{m} (1 - |R|^2) = j_{\text{ein}} - j_{\text{ref}} \\ j_{II} &= \frac{\hbar q}{m} |T|^2 = j_{\text{trans}} \end{aligned}$$

Reflexions- und Transmissionskoeffizient r, t :

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{j_{\text{ref}}}{j_{\text{ein}}} &= r = |R|^2 \\ \frac{j_{\text{trans}}}{j_{\text{ein}}} &= t = \frac{q}{k} |T|^2 \end{aligned}}$$

Bemerkungen:

(i) klassisch gäbe es keine Reflexion, das Teilchen würde sich lediglich mit vermindertem Impuls weiterbewegen (i.e. Reflexion ist Wellenphänomen analog Reflexion von Licht an den Trennflächen von Medien mit verschiedenen Brechungsindex).

(ii) $E \rightarrow \infty$: $q \rightarrow k$, $R \rightarrow 0$, $T \rightarrow 1$ (keine Reflexion).

$0 < E - V_0 \ll V_0$, $q \rightarrow 0$, $R \rightarrow 1$, $T \rightarrow 0$, $r \rightarrow 1$, $t \rightarrow 0$ (keine Transmission).

(iii) Es gilt Teilchenzahlerhaltung $j_I = j_{II}$ oder $j_{\text{ein}} = j_{\text{ref}} + j_{\text{trans}}$, $\boxed{r + t = 1}$.

$$j_{II} = \frac{\hbar k}{m} \left(1 - \frac{(k-q)^2}{(k+q)^2} \right) = 4 \frac{\hbar k^2 q}{m(k+q)^2}, \quad j_{II} = \frac{\hbar q}{m} \frac{4k^2}{(k+q)^2}$$

(b) $\mathbf{E} < \mathbf{V}_0$: ψ_{II} wie gehabt, $\psi''_{II} = \varkappa^2 \psi$ $\varkappa^2 = 2m(V_0 - E)/\hbar^2$.

$\psi_{II} = T \exp(-\varkappa x)$, d.h. Teilchen hält sich auch in dem klassisch verbotenen Gebiet auf (keine ansteigende Lösung für ψ_{II} möglich, da unphysikalisch). Rechnung wie unter (a), nur $q \rightarrow i\varkappa$

$$\begin{aligned} R &= \frac{k - i\varkappa}{k + i\varkappa} = \frac{k^2 - 2i\varkappa k - \varkappa^2}{k^2 + \varkappa^2}, & T &= \frac{2k}{k + i\varkappa} = \frac{2k(k - i\varkappa)}{k^2 + \varkappa^2}, \\ |R|^2 &= \frac{(k^2 - \varkappa^2)^2 + 4\varkappa^2 k^2}{(k^2 + \varkappa^2)^2} = 1, & |T|^2 &= \frac{4k^2 + 4k^2 \varkappa^2}{k^2 + \varkappa^2} = \frac{4k^2}{k^2 + \varkappa^2}. \end{aligned}$$

Bemerkungen:

(1) $|R|^2 = 1$, d.h. es tritt vollständige Reflexion auf.

(2) Wegen $T \neq 0$ dringen die Teilchen bis zu einer Tiefe \varkappa^{-1} in die Stufe ein. Es findet aber kein Teilchenfluß statt: $j_{II} = 0$ (statt iq erscheint nach der Differentiation jetzt \varkappa , dadurch hat aber $(\psi^* \frac{\hbar}{im} \psi)$ keinen Realteil mehr).

Die Wellenfunktion ist

$$\psi(x) = \frac{2}{1 + i\varkappa/k} \left\{ \left(\cos kx - \frac{\varkappa}{k} \sin kx \right) \Theta(-x) + e^{-\varkappa x} \Theta(x) \right\}.$$

Im Falle einer unendlich hohen Potentialstufe, $V_0 \rightarrow \infty$, wird $\varkappa \rightarrow \infty$, $T = 0$, $R = -1$, $\psi_I(x) = e^{ikx} - e^{-ikx}$, also $\psi_I(0) = 0$. $\psi_I(0) = 0$ ist die **Randbedingung an der unendlich hohen Potentialschwelle**. $\psi'_I(0-) = 2ik \neq 0$, $\psi'_I(0+) = 0$, d.h. die erste Ableitung springt hier. Dies widerspricht nicht unserem Argument am Anfang, denn V ist hier unendlich.

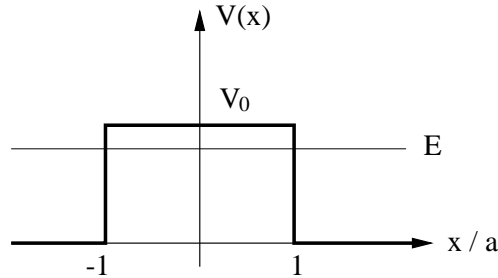
Analog können wir den Fall $V(x) = V_0\Theta(-x)$ betrachten. In diesem Fall müssen wir in den Formeln dieses Abschnitts $V_0 \rightarrow -V_0$ und $E \rightarrow E' = E + V_0$ ersetzen. Tatsächlich, durch $V_0 \rightarrow -V_0$ wird aus der in x -Richtung ansteigende Stufe eine abfallende, durch $E' = E + V_0$ wird aus $E = 0$, $E' = V_0$ und aus $E = -V_0$, $E' = 0$. Damit geht k in q und q in k über

$$R = \frac{q-k}{q+k}, \quad T = \frac{2q}{k+q}.$$

Wir wollen jetzt noch den Fall $0 < E - V_0 \ll V_0$ betrachten (d.h. die Energie liegt knapp über der Stufe). An der abfallenden Stufe ist $R \approx -1$, während $T \approx 0$ ist. Dabei ist zu berücksichtigen, daß in diesem Fall für die Stromdichte gilt $j_I \approx \frac{4\hbar}{m} \frac{q^2}{k} = j_{II}$. Der reflektierte Strom ist $j_{\text{ref}} = -\frac{\hbar q (q-k)^2}{m (q+k)^2} \approx -\frac{\hbar q}{m}$, d.h. der transmittierte Strom ist um den Faktor $\frac{q}{k}$ kleiner als der einfallende Strom.

3.4 Tunneleffekt, Potentialschwelle

$$V(x) = V_0\Theta(a - |x|), \quad \Theta(x) = \begin{cases} 1 & x \geq 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases}$$



$$\frac{x}{a} = \xi \rightarrow \hat{H} = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \left[-\frac{d^2}{d\xi^2} + \zeta^2 \Theta(1 - |\xi|) \right], \quad \zeta^2 = \frac{2V_0ma^2}{\hbar^2}$$

ζ ist ein dimensionsloses Maß für die Stärke des Potentials, a ist offenbar die intrinsische charakteristische Länge des Problems, im Gegensatz zum harmonischen Oszillator ist aber a i.A. makroskopisch.

(a) $E > V_0$ wie gehabt.

(b) $E < V_0$? klassisches Teilchen würde vollkommen an Schwelle reflektiert werden.

Ansatz:

$$\psi(\xi) = \begin{cases} A e^{ik\xi} + B e^{-ik\xi} & k^2 = 2mEa^2/\hbar^2 \quad (\text{dimensionslos}) \\ C e^{-\alpha\xi} + D e^{\alpha\xi} & \alpha^2 = \zeta^2 - k^2 = \frac{2ma^2}{\hbar^2}(V_0 - E) > 0 \\ F e^{ik\xi} + G e^{-ik\xi} \end{cases}$$

Anschlußbedingung bei ξ

$$\begin{aligned} A e^{ik\xi} + B e^{-ik\xi} &= C e^{-\alpha\xi} + D e^{\alpha\xi} \\ ik(A e^{ik\xi} - B e^{-ik\xi}) &= -\alpha(C e^{-\alpha\xi} - D e^{\alpha\xi}) \end{aligned}$$

Läßt sich als Matrix schreiben, nach etwas Umformung [zunächst beide Seiten als

$$\text{Matrixprodukt } \underline{\underline{M}}_1 \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \underline{\underline{M}}_2 \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \underline{\underline{M}}_1^{-1} \underline{\underline{M}}_2 \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}]$$

$$\underline{\underline{M}}_1 = \begin{pmatrix} e^{ik\xi} & e^{-ik\xi} \\ ik e^{ik\xi} & -ik e^{-ik\xi} \end{pmatrix}, \quad \underline{\underline{M}}_2 = \begin{pmatrix} e^{-\alpha\xi} & e^{\alpha\xi} \\ -\alpha e^{-\alpha\xi} & +\alpha e^{\alpha\xi} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \underline{\underline{M}}(-1) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}, \quad \underline{\underline{M}}(\xi) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \left(1 + (i\alpha/k)\right) e^{-\xi(\alpha+ik)} & \left(1 - (i\alpha/k)\right) e^{\xi(\alpha-ik)} \\ \left(1 - (i\alpha/k)\right) e^{-\xi(\alpha-ik)} & \left(1 + (i\alpha/k)\right) e^{\xi(\alpha+ik)} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = \underline{\underline{M}}(+1) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \underline{\underline{M}}(-1) \underline{\underline{M}}(+1)^{-1} \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\cosh 2\alpha + (i\varepsilon/2) \sinh 2\alpha) e^{2ik} & (i\eta/2) \sinh 2\alpha \\ -(i\eta/2) \sinh 2\alpha & (\cosh 2\alpha - (i\varepsilon/2) \sinh 2\alpha) e^{-2ik} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix},$$

wobei $\varepsilon = \frac{\alpha}{k} - \frac{k}{\alpha}$ und $\eta = \frac{\alpha}{k} + \frac{k}{\alpha}$.

Teilchen kommen von links $G = 0$, dann folgt durch Ausmultiplikation der Matrixgleichung

$$\begin{aligned} A &= F \left(\cosh 2\alpha + \frac{i\varepsilon}{2} \sinh 2\alpha \right) e^{2ik} \\ B &= F \left(-\frac{i\eta}{2} \right) \sinh 2\alpha \end{aligned}$$

$$\text{Transmissionsamplitude} \quad S(E) = \frac{F}{A} = \frac{e^{-2ik}}{\cosh 2\alpha + (i\varepsilon/2) \sinh 2\alpha}$$

$$\text{Durchlässigkeitskoeffizient} \quad |S(E)|^2 = \frac{1}{1 + (1 + \varepsilon^2/4) \sinh^2 2\alpha}$$

\sim der Wahrscheinlichkeit, daß Teilchen die Potentialschwelle durchdringt. Bei sehr hoher und breiter Barriere $\alpha \gg 1$, $\sinh 2\alpha \simeq (1/2) \exp 2\alpha \gg 1$. Nach einigen Umformungen

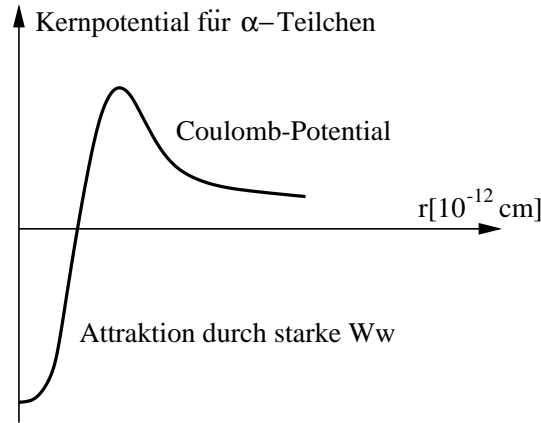
$$|S(E)|^2 \simeq e^{-4\sqrt{2m(V_0-E)}\frac{a}{\hbar}}.$$

Ein klassisches Teilchen würde von der Barriere reflektiert, ein quantenmechanisches Teilchen hat endliche Durchgangswahrscheinlichkeit. Dieser ist der Tunneleffekt.

Das Ergebnis für $|S(E)|^2$ läßt sich verallgemeinern (WKB-Methode)

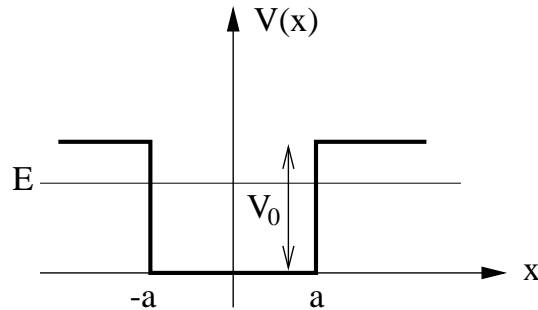
$$|S(E)|^2 = \exp \left\{ -2 \int_a^b \frac{\sqrt{2m(V(x) - E)}}{\hbar} dx \right\}.$$

Anwendung z.B. beim atomaren α -Zerfall.



3.5 Potentialtopf, Gebundene Zustände

$$V(x) = V_0 \Theta(|x| - a), \quad 0 < E < V_0$$



Minimale kinetische Energie: $\Delta p \cdot \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$, $\Delta x = 2a$, $\Delta p \geq \frac{\hbar}{4a}$,
 $E > \frac{1}{2m} \cdot \frac{\hbar^2}{4(2a)^2} = \frac{\hbar^2}{32a^2m}$.

Messe x in Einheiten von a $\xi = x/a$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{d^2}{d\xi^2} + V_0 \Theta(|\xi| - 1) = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \left\{ \underbrace{-\frac{d^2}{d\xi^2} + \zeta^2 \Theta(|\xi| - 1)}_{\hat{h}(\zeta)} \right\}$$

$$\zeta^2 = \frac{2V_0ma^2}{\hbar^2}, \quad q^2 = \frac{2ma^2E}{\hbar^2}, \quad \zeta^2 - q^2 = \kappa^2 = \frac{2ma^2}{\hbar^2}(V_0 - E) > 0$$

Suche Eigenfunktionen von \hat{h} :

außerhalb des Topfes: $-\psi''(\xi) = (q^2 - \zeta^2)\psi = -\kappa^2\psi$, $\psi = \pm c \exp(-\kappa|\xi|)$

im Topf: $-\psi''(\xi) = q^2\psi$, $\psi = \tilde{c} \cos(q\xi + \delta)$

\hat{H} vertauscht mit \hat{P} : Eigenfunktionen von \hat{P} sind auch die von \hat{H} (\hat{P} ist ein einfaches Beispiel für einen Operator, der Symmetrietransformationen bewirkt \rightarrow Gruppen-

theorie und Quantenmechanik). Die **Eigenfunktionen lassen sich also nach ihrer Parität klassifizieren.**

- (i) gerade : $\psi(\xi) = \psi(-\xi) \quad \cos(q\xi + \delta) = \cos(-q\xi + \delta) \rightarrow \delta = 0$
 + Vorzeichen von ψ für $|\xi| > 1$
- (ii) ungerade : $\psi(\xi) = -\psi(-\xi) \quad \cos(q\xi + \delta) = -\cos(q\xi + \delta) \rightarrow \delta = \frac{\pi}{2}$
 sign ξ – Vorzeichen von ψ für $|\xi| > 1$

Anschlußbedingungen:

$$\begin{aligned} \text{gerade Parität :} \quad & \tilde{c} \cos q = ce^{-\alpha}, \quad -\frac{\psi'}{\psi} = q \tan q = \alpha \\ \text{ungerade Parität :} \quad & -\tilde{c} \sin q = ce^{-\alpha}, \quad \frac{\psi'}{\psi} = q \cot q = -\alpha \\ & +\tilde{c} \sin q = -ce^{-\alpha} \end{aligned}$$

Man benutzt jetzt die Bedingung

$$\tan q = \frac{\sqrt{\zeta^2 - q^2}}{q}, \quad \cot q = -\frac{\sqrt{\zeta^2 - q^2}}{q}$$

um q und damit E zu finden. Versuchen Sie das selbst! (graphische Lösung) Insbesondere findet man immer Lösung mit gerader Parität $\tan q = \sqrt{\frac{\zeta^2}{q^2} - 1}$.

Wir betrachten hier nur den Limes $V_0, \zeta \rightarrow \infty$

$$\left. \begin{aligned} \tan q = \infty \quad & q = \frac{\pi}{2}(2k+1), \\ \cot q = -\infty \quad & q = \pi k = \frac{\pi}{2}(2k) \end{aligned} \right\} q = \frac{\pi}{2}(n+1) \rightarrow E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 (n+1)^2}{8ma^2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$\text{Grundzustand: } E_0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2}.$$

$$\text{Eigenfunktionen gerader Parität: } \psi(\xi) = \cos\left(\frac{\pi}{2}\xi(2k+1)\right) \Theta(1-|\xi|)$$

$$\text{Eigenfunktionen ungerader Parität: } \psi(\xi) = \sin(\pi k \xi) \Theta(1-|\xi|)$$

Knotenregel: der n -te Energiezustand hat n Knoten (wir beginnen mit $n = 0!$).

3.6 Potentialtopf, Resonanzen

Wir betrachten jetzt den Potentialtopf im Bereich $E > V_0$. Formal können wir die Lösungen unmittelbar aufschreiben, wenn wir in den Resultaten des Abschnitts 3.4 V_0 durch $-V_0$ und E durch $E = E' - V_0$ ersetzen. (Im ersten Schritt wird aus der Potentialschwelle ein Potentialtopf, im zweiten Schritt wird das Potentialrelief um V_0 angehoben, so wie dies in 3.5 angenommen worden war.)

Im Außenbereich des Potentialtopfes erhalten wir als Lösungen ebene Wellen mit Wellenvektor $k = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$, im Innern des Potentialtopfes ist $\kappa^2 = \frac{2ma^2}{\hbar^2}(V_0 - E)$ durch $\frac{2ma^2}{\hbar^2}(-V_0 - E' + V_0) = -\frac{2ma^2}{\hbar^2}E' = -q^2$ zu ersetzen. Im Intervall $|\xi| \leq 1$ erhalten wir daher als Lösung $\psi(\xi) = Ce^{-iq\xi} + De^{iq\xi}$. Die transmittierte Welle ist $\psi_{\text{trans}}(\xi) = Fe^{ik\xi} = AS(E)e^{ik\xi}$ mit ($\kappa \rightarrow iq$ in $S(E)$ in 3.5)

$$\frac{F}{A} = S(E) = \frac{e^{-2ik}}{\cos 2q - i/2\left(\frac{q}{k} + \frac{k}{q}\right) \sin 2q}.$$

Der Transmissionskoeffizient $|S(E)|^2$ ist dann (nach einigen Umformungen)

$$|S(E)|^2 = \left[1 + \frac{\sin^2 2q}{4\left(\frac{E}{V_0} - 1\right)\frac{E}{V_0}} \right]^{-1}.$$

Im Unterschied zur klassischen Mechanik ist $|S(E)|$ i.a. offenbar **kleiner als Eins**. Die reflektierte Welle hat die Amplitude $B = F\left(-\frac{iq}{2}\right) \sin 2q = AS(E)\frac{i}{2}\left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q}\right) \sin 2q$ mit $|B/A|^2 = 1 - |S(E)|^2$. Der Transmissionskoeffizient wird zu 1 für $V_0 \rightarrow 0$, wie zu erwarten ist. Für feste $E > V_0 > 1$ wird $|S(E)|^2 = 1$ für $2q = n\pi$, n ganz, dies entspricht Energieeigenwerten

$$E_R = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{8ma^2} \quad (> V_0!).$$

Für solche Energiewerte ist das Potential wegen destruktiver Interferenz der reflektierten Wellen völlig durchlässig, diese Energieeigenwerte entsprechen denen des unendlich tiefen Potentialtopfes. $|S(E)|^2$ wird **minimal** für $2q = [(2n+1)/2]\pi$. Für sehr tiefe Potentialtöpfe mit $\zeta^2 \gg 1$ und $0 < E - V_0 \ll V_0$ sind die Maxima und Minima stark ausgeprägt. Die Maxima des Transmissionskoeffizienten werden als **Resonanzen** bezeichnet.

Wir führen hier noch einige Eigenschaften von $S(E)$ in der komplexen E -Ebene (ohne Beweis) an:

- (i) Für $0 < E < V_0$ hat $S(E)$ Pole bei den Bindungszuständen des Potentialtopfes (\sim ohne eine einfallende Welle ist im Topf eine endliche Wellenfunktion vorhanden).
- (ii) In der Nähe der Resonanz E_R kann $S(E)$ in der Form

$$S(E) = (-1)^n e^{-2ik} \frac{i\Gamma/2}{E - E_R + i\Gamma/2}$$

geschrieben werden, wobei der Imaginärteil des Poles durch

$$\Gamma^{-1} = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{q}{k} + \frac{k}{q} \right) \frac{dq}{dE} \right]_{E_R}$$

gegeben ist. Die Transmissionsamplitude $S(E)$ hat also Pole bei $E = E_R - i\frac{\Gamma}{2}$. Damit läßt sich $|S(E)|^2$ in der Form einer Lorentz- oder Breit-Wigner Funktion

$$|S(E)|^2 = \frac{(\Gamma/2)^2}{(E - E_R)^2 + (\Gamma/2)^2}$$

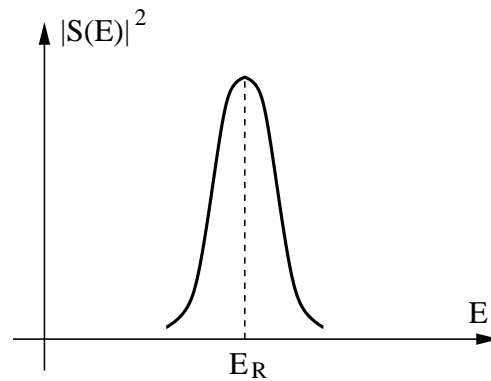
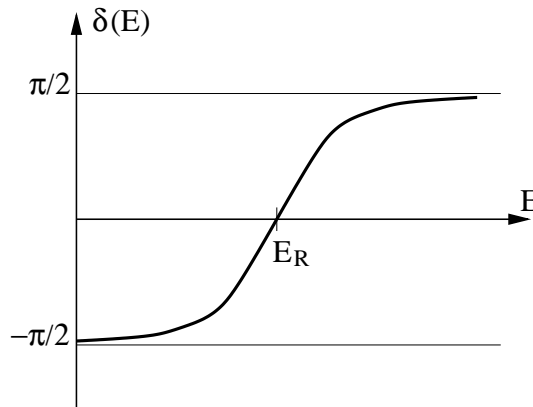
schreiben und damit wird

$$S(E) = |S(E)| e^{i\delta(E)-2ik},$$

$$\tan \delta(E) = \frac{\operatorname{Im}(S(E) e^{2ik})}{\operatorname{Re}(S(E) e^{2ik})} = \frac{1}{2} \left(\frac{q}{k} + \frac{k}{q} \right) \tan 2q \approx \frac{2}{\Gamma} (E - E_R).$$

$$\psi_{\text{trans}}(\xi) = A S(E) e^{ik\xi} = |S(E)| e^{i\delta(E)-2ik} \psi_{\text{ein}}(\xi)$$

$$\psi_{\text{trans}}(1) = \psi_{\text{ein}}(-1) |S(E)| e^{i\delta(E)}.$$



Kapitel 4

Der Drehimpuls

4.1 Drehimpuls und Drehgruppe

Wichtig bei Problemen, die Kugelsymmetrie besitzen (die Drehimpulsoperatoren sind die Generatoren der $SO(3)$ -Gruppe).

Der Bahndrehimpuls war schon definiert worden

$$\hat{\mathbf{l}} = \hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}} = \frac{\hbar}{i} \mathbf{x} \times \nabla, \quad \hat{l}_i = \varepsilon_{ijk} \hat{x}_j \hat{p}_k,$$

ε_{ijk} total antisymmetrischer Einheitstensor, es gilt $\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{ilm} = \delta_{jl}\delta_{km} - \delta_{jm}\delta_{kl}$.

Es gilt

$$\begin{aligned} [\hat{l}_i, \hat{l}_j] &= \varepsilon_{ilm} \varepsilon_{jpk} (\hat{x}_l \hat{p}_m \hat{x}_p \hat{p}_q - \hat{x}_p \hat{p}_q \hat{x}_l \hat{p}_m) \\ \hat{x}_p \hat{p}_q \hat{x}_l \hat{p}_m &= \hat{x}_l \hat{x}_p \hat{p}_m \hat{p}_q + \frac{\hbar}{i} \hat{x}_p \hat{p}_m \delta_{ql} \\ &= \hat{x}_l \hat{p}_m \hat{x}_p \hat{p}_q - \frac{\hbar}{i} [\hat{x}_l \hat{p}_q \delta_{mp} - \hat{x}_p \hat{p}_m \delta_{ql}] \Rightarrow \\ [\hat{l}_i, \hat{l}_j] &= \frac{\hbar}{i} \{ \varepsilon_{ilp} \varepsilon_{qjp} \hat{x}_l \hat{p}_q - \varepsilon_{iqm} \varepsilon_{pqj} \hat{x}_p \hat{p}_m \} \\ &= \frac{\hbar}{i} \{ \hat{x}_j \hat{p}_i - \delta_{ij} \hat{x}_l \hat{p}_l - \hat{x}_i \hat{p}_j + \delta_{ij} \hat{x}_p \hat{p}_p \} = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{l}_k \end{aligned}$$

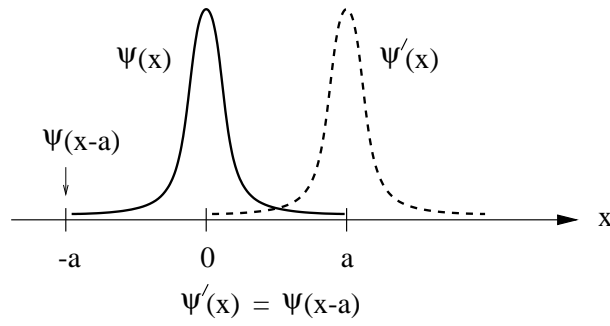
und ferner $[\hat{l}_i, \hat{x}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{x}_k$, $[\hat{l}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{p}_k$. \hat{l} ist der Erzeuger von Drehungen. Wir wollen dies etwas genauer verstehen und betrachten hierzu zunächst ganz allgemein Transformationen eines physikalischen Systems.

Transformationen physikalischer Systeme

Sei \hat{t} ein Operator, der eine gewisse Transformation des Systems im \mathbb{R}^3 bewirkt

$$\hat{t} \mathbf{x} = \mathbf{x}', \quad \mathbf{x} = \hat{t}^{-1} \mathbf{x}'.$$

Beispiele: $\hat{t} \mathbf{x} = \mathbf{x} + \mathbf{a}$ Translation
 $\hat{t} \mathbf{x} = \hat{R} \mathbf{x}$ Rotation
 $\hat{t} \mathbf{x} = \hat{P} \mathbf{x} = -\mathbf{x}$ Inversion



Nach dieser Transformation des Systems (i.e. Translation oder Rotation) geht die Ausgangswellenfunktion $\psi(\mathbf{x})$ in $\psi'(\mathbf{x})$ über, wobei

$$\psi'(\mathbf{x}') = \psi(\mathbf{x}) = \psi(\hat{t}^{-1}\mathbf{x}'),$$

d.h.

$$\psi'(\mathbf{x}) = \psi(\hat{t}^{-1}\mathbf{x}) = \hat{T}\psi(\mathbf{x})$$

gilt. Man nennt diese Transformation von $\psi(\mathbf{x})$ die durch \hat{t} **induzierte** Transformation. Wir betrachten jetzt die Anwendung eines Operators \hat{A} auf ψ . Mit $\hat{A}\psi = \varphi$ folgt

$$\hat{T}(\hat{A}\psi) = \hat{T}(\hat{A}\hat{T}^{-1}\hat{T}\psi) = \underbrace{\hat{T}\hat{A}\hat{T}^{-1}}_{\hat{A}'}\psi' = \varphi',$$

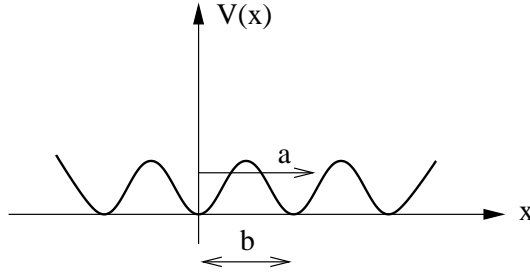
wobei der transformierte Operator \hat{A}' durch

$$\hat{A}' = \hat{T}\hat{A}\hat{T}^{-1}$$

definiert ist. Der Operator \hat{A}' transformiert ψ' in φ' . Kommutiert \hat{A} mit \hat{T} , $[\hat{A}, \hat{T}] = 0$, dann ist $\hat{A}' = \hat{A}$. Insbesondere folgt für $[\hat{\mathcal{H}}, \hat{T}] = 0$ und mit $\hat{\mathcal{H}}\psi_E = E\psi_E$, daß auch $\psi' = \hat{T}\psi_E$ Eigenfunktion zu $\hat{\mathcal{H}}$ zum selben Eigenwert ist. (I.a. ist die transformierte Funktion ψ' nicht mehr Eigenfunktion zu $\hat{\mathcal{H}}$!)

Beispiel: Periodisches Potential

$$V(x) = -V_0 \cos\left(2\pi \frac{x}{b}\right)$$



Betrachte beliebige **Translation** um a : $\hat{t}_a x = x + a$

$$\hat{T}_a \psi(x) = \psi(x-a) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-a)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial x^n} \psi(x) = \exp\left(-a \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi(x) = \exp\left(-\frac{ia\hat{p}_x}{\hbar}\right) \psi(x)$$

wobei wir hier den Impulsoperator $\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ eingeführt haben. Für die Transformationen des Hamiltonians folgt analog:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}' &= e^{-a \frac{\partial}{\partial x}} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{V_0}{2} \left(e^{2\pi i x/b} + e^{-2\pi i x/b} \right) \right) e^{a \frac{\partial}{\partial x}} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{V_0}{2} \left[e^{2\pi i (x-a)/b} + e^{-2\pi i (x-a)/b} \right] = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - V_0 \cos \frac{2\pi}{b} (x-a) \\ &\neq \hat{\mathcal{H}} \quad \text{für} \quad \frac{a}{b} \neq n, \end{aligned}$$

d.h. die neue Funktion ψ' genügt Schrödingergleichung mit dem neuen $\hat{\mathcal{H}}'$. Hier haben wir

$$\hat{T}_a V(x) \hat{T}_a^{-1} \psi(x) = \hat{T}_a (V(x) \psi(\hat{t}x)) = V(\hat{t}^{-1}x) \psi(\hat{t}^{-1}\hat{t}x) = V(\hat{t}^{-1}x) \psi(x)$$

benutzt. (Alternativ kann man die Baker–Hausdorff–Identität: $e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} = e^{\hat{B}} e^{\hat{A}} e^{[\hat{A}, \hat{B}]}$, $[-a \frac{\partial}{\partial x}, \pm \frac{2\pi i x}{b}] = \mp i \frac{2\pi}{b} a$ benutzen.)

In drei Dimensionen gilt $\hat{t}_{\mathbf{a}} \mathbf{x} = \mathbf{x} + \mathbf{a}$, wobei \mathbf{a} ein beliebiger Vektor im \mathbb{R}^3 ist.

Die Menge aller Translationen bildet eine (abelsche) Gruppe mit der Verknüpfungsregel $\hat{t}_{\mathbf{a}} \cdot \hat{t}_{\mathbf{b}} = \hat{t}_{\mathbf{a}+\mathbf{b}}$. Analog gilt für $\hat{T}_{\mathbf{a}} \cdot \hat{T}_{\mathbf{b}} = \hat{T}_{\mathbf{a}+\mathbf{b}}$,

$$\hat{T}_{\mathbf{a}} = \exp(-i\mathbf{a}\hat{\mathbf{p}}/\hbar)$$

ist ein unitärer Operator: $\hat{T}_{\mathbf{a}}^\dagger = \hat{T}_{\mathbf{a}}^{-1}$.

Für infinitesimale Transformationen $\delta\mathbf{a}$ gilt $\hat{T}_{\delta\mathbf{a}} = \exp(-\frac{i}{\hbar} \delta\mathbf{a}\hat{\mathbf{p}}) \approx (1 - \frac{i}{\hbar} \delta\mathbf{a}\hat{\mathbf{p}})$.

Die Operatoren $\hat{\mathbf{X}} = i\hat{\mathbf{p}}/\hbar$ sind die **Generatoren** der **Translationsgruppe** (abelsch).

Jede endliche Translation läßt sich aus infinitesimalen Transformationen aufbauen.

Zur Erinnerung: Gruppen

Die Menge aller Elemente (z.B. Transformationen) a, b, c, \dots bildet eine Gruppe \mathcal{G} , falls

- (i) Eine Verknüpfungsregel $a \cdot b = c$ existiert, so daß jedem Elementepaar $a, b \in \mathcal{G}$ ein Element $c \in \mathcal{G}$ zugeordnet ist.
- (ii) Ein Eins- (oder Neutral-)Element e mit $e \cdot a = a \cdot e = a \quad \forall a \in \mathcal{G}$ existiert.
- (iii) Zu jedem $a \in \mathcal{G}$ ein inverses Element $a^{-1} \in \mathcal{G}$ mit $a \cdot a^{-1} = a^{-1} \cdot a = e$ existiert.
- (iv) Das Assoziativgesetz $(a \cdot b) \cdot c = a \cdot (b \cdot c) = a \cdot b \cdot c$ gilt.

Für **abelsche** Gruppen gilt $a \cdot b = b \cdot a$.

Darstellungen von Gruppen sind Abbildungen von Gruppenelementen a, b, \dots auf Operatoren $\hat{T}(a), \hat{T}(b), \dots$, so daß $\hat{T}(a) \cdot \hat{T}(b) = \hat{T}(a \cdot b) = \hat{T}(c)$ gilt.

Im obigen Beispiel der Translationen haben wir - zur besseren Unterscheidung - die Operatoren, die im \mathbb{R}^3 wirken, mit \hat{t} und die Operatoren, die auf die Wellenfunktion wirken, mit \hat{T} bezeichnet. Im Sinne der hier diskutierten Gruppentheorie sind dies beides nur verschiedene Operator-Darstellungen der Gruppenelemente und wären daher mit \hat{T} zu bezeichnen.

Bei **kontinuierlichen** Gruppen sind die Darstellungen (lokal) durch die Operatoren für **infinitesimale** Transformationen \hat{X}_i (die sogenannten Generatoren), die den Vertauschungsregeln $[\hat{X}_i, \hat{X}_j] = C_{ijk} \hat{X}_k$ genügen, festgelegt (C_{ijk} sind die **Strukturkonstanten** der (Lie-)Gruppe).

Beispiel: Die **Symmetrische Gruppe** S_3 von 3 Objekten. Betrachtet wird die Transformation einer Wirkungsmenge $W = 1, 2, 3$

Gruppenelemente:

$$e = \downarrow \begin{array}{ccc} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{array}$$

$$a = \downarrow \begin{array}{ccc} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{array}$$

$$b = \downarrow \begin{array}{ccc} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{array}$$

$$c = \downarrow \begin{array}{ccc} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{array}$$

$$d = \downarrow \begin{array}{ccc} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{array}$$

$$f = \downarrow \begin{array}{ccc} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{array}$$

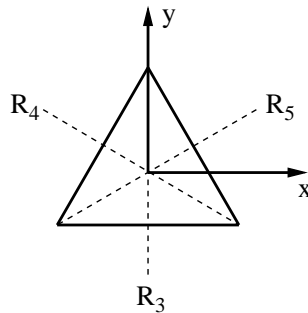
Verknüpfungsregeln:

$$\begin{array}{c}
 \begin{array}{ccc} & 1 & 2 & 3 \\ aa = \downarrow & 2 & 3 & 1 = b \quad \text{u.s.w.} \\ & \downarrow & 3 & 1 & 2 \end{array} \\
 ca = d, \quad ac = f \quad ca \neq ac \text{ nicht abelsch}
 \end{array}$$

Gruppentafel:

\nearrow	e	a	b	c	d	f
e	e	a	b	c	d	f
a	a	b	e	f	c	d
b	b	e	a	d	f	c
c	c	d	f	e	a	b
d	d	f	c	b	e	a
f	f	c	d	a	b	e
inverses Element	e	b	a	c	d	f

Betrachte weitere Gruppe der Transformationen, die ein Dreieck in sich überführen
 $D_3 = \{e, R_1, \dots, R_5\}$. Diese Gruppe ist **isomorph** zu S_3 .



R_1 : Drehung um $2\pi/3$ um z -Achse; R_2 : Drehung um $4\pi/3$ um z -Achse.

D_3 isomorph zu S_3 : $R_1 \leftrightarrow b$, $R_2 \leftrightarrow a$, $R_3 \leftrightarrow f$, $R_4 \leftrightarrow c$, $R_5 \leftrightarrow d$.

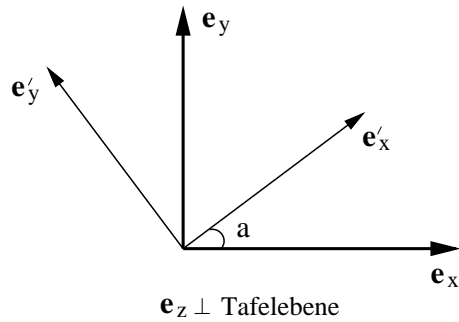
$$\begin{array}{l}
 R_1 \begin{array}{c} \triangle \\ 1 \\ 2 \quad 3 \end{array} = \begin{array}{c} \triangle \\ 3 \\ 1 \quad 2 \end{array} \\
 R_4 R_1 \begin{array}{c} \triangle \\ 1 \\ 2 \quad 3 \end{array} = R_4 \begin{array}{c} \triangle \\ 3 \\ 1 \quad 2 \end{array} = \begin{array}{c} \triangle \\ 1 \\ 3 \quad 2 \end{array} = R_3 \begin{array}{c} \triangle \\ 1 \\ 2 \quad 3 \end{array}
 \end{array}$$

	e	R_1	R_2	R_3	R_4	R_5
e	e	R_1	R_2	R_3	R_4	R_5
R_1	R_1	R_2	e	R_4	R_5	R_3
R_2	R_2	e	R_1	R_5	R_3	R_4
R_3	R_3	R_5	R_4	e	R_2	R_1
R_4	R_4	R_3	R_5	R_1	e	R_2
R_5	R_5	R_4	R_3	R_2	R_1	e
inverses Element	e	R_2	R_1	R_3	R_4	R_5

Darstellung der Gruppe D_3 im \mathbb{R}^3 :

$$\mathbf{e}'_x = \mathbf{e}_x \cos a + \mathbf{e}_y \sin a$$

$$\mathbf{e}'_y = \mathbf{e}_y \cos a - \mathbf{e}_x \sin a$$



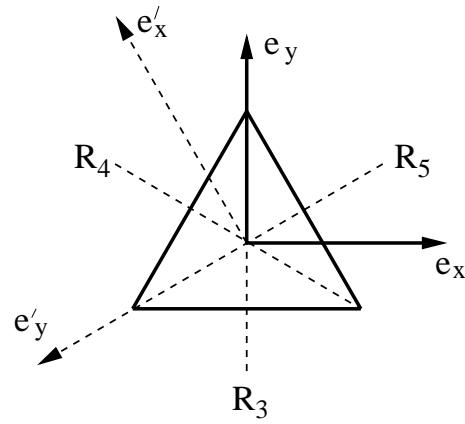
$$\cos \frac{2\pi}{3} = -\frac{1}{2}, \quad \sin \frac{2\pi}{3} = \frac{\sqrt{3}}{2}$$

$$\hat{T}(R_1)\mathbf{e}_x = \mathbf{e}'_x = -\frac{1}{2}\mathbf{e}_x + \frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{e}_y$$

$$\hat{T}(R_1)\mathbf{e}_y = \mathbf{e}'_y = -\frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{e}_x - \frac{1}{2}\mathbf{e}_y$$

$$\hat{T}(R_1)\mathbf{e}_z = \mathbf{e}'_z = \mathbf{e}_z$$

$$\underline{\underline{T}}(R_1) = \begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$



$$\begin{aligned} \underline{\underline{T}}(R_2) &= \begin{pmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/4 & 0 \\ -\sqrt{3}/4 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, & \underline{\underline{T}}(R_3) &= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \\ \underline{\underline{T}}(R_4) &= \begin{pmatrix} 1/2 & -\sqrt{3}/4 & 0 \\ -\sqrt{3}/4 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, & \underline{\underline{T}}(R_5) &= \begin{pmatrix} 1/2 & \sqrt{3}/4 & 0 \\ \sqrt{3}/4 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \\ \underline{\underline{T}}(E) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, & \underline{\underline{T}}(R_1) &= \begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/4 & 0 \\ \sqrt{3}/4 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Die Transformationsmatrizen erfüllen wieder die Verknüpfungsregeln der Gruppenelemente, z.B. gilt $\underline{\underline{T}}^2(R_1) = \underline{\underline{T}}(R_2)$ etc.

Konstruktion einer **Darstellung** der D_3 im Raum der Funktionen $x^2, y^2, z^2, yz, zx, xy$:

$$\begin{aligned} \psi_1 &= x^2 = (\mathbf{e}_x, \mathbf{r})^2 \\ \psi_2 &= y^2 = (\mathbf{e}_y, \mathbf{r})^2 \\ \psi_3 &= z^2 = (\mathbf{e}_z, \mathbf{r})^2 \\ \psi_4 &= yz = (\mathbf{e}_y, \mathbf{r})(\mathbf{e}_z, \mathbf{r}) \\ \psi_5 &= zx = (\mathbf{e}_z, \mathbf{r})(\mathbf{e}_x, \mathbf{r}) \\ \psi_6 &= xy = (\mathbf{e}_x, \mathbf{r})(\mathbf{e}_y, \mathbf{r}) \end{aligned}$$

ψ_i linear unabhängig, nicht orthogonal, invariant unter der Gruppe D_3 :

$$\hat{T}(R_1)\psi_1 = \frac{1}{4}\psi_1 - \frac{\sqrt{3}}{2}\psi_6 + \frac{3}{4}\psi_2$$

denn

$$\begin{aligned}
 \hat{T}(R_1)\psi_1 &= \psi_1(\hat{R}_1^{-1}\mathbf{r}) = (\mathbf{e}_x, \hat{R}_1^{-1}\mathbf{r})^2 = (\hat{R}_1\mathbf{e}_x, \mathbf{r})^2 \\
 &= (\mathbf{e}'_x, \mathbf{r})^2 = \left[\left(-\frac{1}{2}\mathbf{e}_x, \mathbf{r}\right) + \left(\frac{3}{4}\right)^{1/2} (\mathbf{e}_y, \mathbf{r}) \right]^2 \\
 &= \frac{1}{4}\psi_1 - \frac{\sqrt{3}}{2}\psi_6 + \frac{3}{4}\psi_2 \\
 (\mathbf{e}'_i, \mathbf{r}) &= (\hat{G}\mathbf{e}_i, \mathbf{r}) = (\mathbf{e}_i, \hat{G}^{-1}\mathbf{r})
 \end{aligned}$$

\hat{G} ist unitär (der Operator für Drehungen ist unitär).

Die resultierende Transformationsmatrix für R_1

$$\underline{\underline{T}}(R_1) = \begin{pmatrix} x^2 & y^2 & z^2 & yz & zx & xy \\ 1/4 & 3/4 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{3}/2 \\ 3/4 & 1/4 & 0 & 0 & 0 & -\sqrt{3}/2 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1/2 & \sqrt{3}/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ -\sqrt{3}/2 & \sqrt{3}/2 & 0 & 0 & 0 & -1/2 \end{pmatrix}$$

Durch Umordnung des Funktionensatzes kann man die Matrix auf Blockdiagonalgestalt bringen

$$\underline{\underline{T}}(R_1) = \begin{pmatrix} x^2 & y^2 & xy & z^2 & yz & zx \\ 1/4 & 3/4 & \sqrt{3}/2 & 0 & 0 & 0 \\ 3/4 & 1/4 & -\sqrt{3}/2 & 0 & 0 & 0 \\ -\sqrt{3}/2 & \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1/2 & \sqrt{3}/2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\sqrt{3}/2 & -1/2 \end{pmatrix}$$

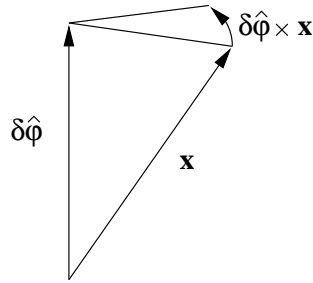
Ergänzung: multipliziert man eine Darstellung $\psi(\mathbf{r})$ mit einer skalaren Funktion $f(\mathbf{r}^2)$, dann ist auch $\psi(\mathbf{r}) \cdot f(\mathbf{r}^2)$ eine Darstellung:

$$\hat{T}(G_a)\psi(\mathbf{r})f(\mathbf{r}^2) = \psi(\hat{G}_a^{-1}\mathbf{r})f\left((\hat{G}_a^{-1}\mathbf{r})^2\right) = \psi(G_a^{-1}\mathbf{r})f(\mathbf{r}^2)$$

Fällt $f(\mathbf{r})$ hinreichend schnell ab, dann kann die Integration im Skalarprodukt über den ganzen Raum erstreckt werden. ψf könnte dann z.B. eine Wellenfunktion sein.

Wir betrachten jetzt speziell die **Rotation** eines Vektors im \mathbb{R}^3 und bezeichnen

den Operator \hat{t} mit $\hat{R}(\varphi)$, wobei $\mathbf{n} = \varphi/|\varphi|$ die Drehachse und $|\varphi|$ den Drehwinkel bezeichnet.



Es gilt nun (zeige das selbst).

$$\mathbf{x}' = \hat{R}(\varphi)\mathbf{x} = \mathbf{x} \cos \varphi + (1 - \cos \varphi)(\mathbf{x}\mathbf{n})\mathbf{n} + (\sin \varphi)\mathbf{n} \times \mathbf{x}.$$

Für **infinitesimale Drehungen** gilt insbesondere ($\delta\varphi \ll 1$)

$$\mathbf{x}' = \hat{R}(\delta\varphi)\mathbf{x} = \mathbf{x} + \delta\varphi \times \mathbf{x} = (\hat{1} + \delta\varphi \times)\mathbf{x}$$

oder in Komponentenform (über doppelt auftretende Indizes wird summiert)

$$x'_i = x_i + \varepsilon_{ijk} \delta\varphi_j x_k = \underbrace{(\delta_{ik} + \varepsilon_{ijk} \delta\varphi_j)}_{X_{ik}} x_k,$$

wobei die Matrix \underline{X} wie folgt zerlegt werden kann:

$$\begin{aligned} \underline{X} &= \underline{1} + \delta\varphi_1 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} + \delta\varphi_2 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \delta\varphi_3 \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \underline{1} + \sum_{i=1}^3 \delta\varphi_i \underline{X}_i. \end{aligned}$$

\underline{X}_i sind **Generatoren** der infinitesimalen Drehungen. Es gilt

$$[\underline{X}_i, \underline{X}_j] = \varepsilon_{ijk} \underline{X}_k.$$

ε_{ijk} ist der total antisymmetrischen Einheitstensor, der hier die Strukturkonstanten bestimmt. Die Matrizen $i\hbar \underline{X}_j =: \underline{l}_j$ zeigen also die **Kommutatorrelationen des Drehimpulses**

$$[\underline{l}_i, \underline{l}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \underline{l}_k.$$

Wir betrachten jetzt die Transformation von $\psi(\mathbf{x})$ zu $\psi'(\mathbf{x}) = \hat{T} \psi(\mathbf{x}) = \psi(\hat{t}^{-1}\mathbf{x})$.

Für infinitesimale Rotationen gilt

$$\begin{aligned} \psi'(\mathbf{x}) &\simeq \psi(\mathbf{x} - \delta\varphi \times \mathbf{x}) \simeq \left(1 - (\delta\varphi \times \mathbf{x})\nabla\right) \psi(\mathbf{x}) = \left(1 - \frac{i}{\hbar} \delta\varphi \left(\mathbf{x} \times \frac{\hbar}{i} \nabla\right)\right) \psi(\mathbf{x}) \\ &= \left(1 - \frac{i}{\hbar} \delta\varphi \hat{1}\right) \psi(\mathbf{x}) \\ &\equiv \hat{T}_{\delta\varphi} \psi(\mathbf{x}). \end{aligned}$$

d.h. $\hat{T}_{\delta\varphi} = (1 - \frac{i}{\hbar} \delta\varphi \cdot \hat{\mathbf{1}})$. Um den Operator \hat{T}_{φ} für die Drehung um einen endlichen Winkel φ zu erhalten, schreiben wir $\delta\varphi = \varphi/n$ und wenden $\hat{T}_{\delta\varphi}$ n -mal ($n \rightarrow \infty$) an. Dies gibt (wir benutzen hier $e^x = \lim_{n \rightarrow \infty} (\frac{x}{n} + 1)^n$)

$$\hat{T}_{\varphi} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{i}{\hbar} \frac{\varphi}{n} \cdot \hat{\mathbf{1}} \right)^n = e^{-\frac{i}{\hbar} \varphi \cdot \hat{\mathbf{1}}}.$$

Es gilt wieder $\hat{T}(\varphi)^\dagger = \hat{T}^{-1}$, i.e. die Transformation ist unitär.

Mann nennt die Matrizen $\underline{\underline{X}}_i$ bzw. $\frac{i}{\hbar} \hat{l}_i$ die “Generatoren” der Symmetriegruppe, die hier die **SO(3)–Gruppe** ist. Diese enthält alle **eigentlichen Drehungen** (ohne Spiegelungen) im \mathbb{R}^3 . Da die \hat{l}_i nicht vertauschen, ist **SO(3) nicht abelsch**.

Vertauscht \hat{H} mit \hat{l}_i , d.h. das Problem ist kugelsymmetrisch, dann sind die Eigenfunktionen von \hat{H} offenbar auch die von \hat{l}_i . Bevor wir uns daher speziellen kugelsymmetrischen Problemen zuwenden, betrachten wir zunächst die Eigenfunktionen der \hat{l}_i .

4.2 Eigenwerte und Eigenfunktionen von Drehimpulsoperatoren

Wir benutzen hier nur die algebraischen Eigenschaften (d.h. die Vertauschungseigenschaften) der \hat{l}_i . Es gilt

$$[\hat{\mathbf{I}}^2, \hat{l}_i] = 0 \quad \text{für } i = 1, 2, 3.$$

$\hat{\mathbf{I}}^2 = \hat{l}_1^2 + \hat{l}_2^2 + \hat{l}_3^2$ wird in der Gruppentheorie der **Casimir**–Operator genannt. Aufgrund der Vertauschungsrelation der \hat{l}_i können wir offenbar nur Eigenfunktionen finden, die gleichzeitig Eigenfunktionen von $\hat{\mathbf{I}}^2$ und **einem** der drei \hat{l}_i sind. Wir wählen hierfür $\hat{l}_3 = \hat{l}_z$ und definieren zwei neue **Leiteroperatoren**

$$\hat{l}_{\pm} = \hat{l}_x \pm i \hat{l}_y$$

für die gilt (wir verwenden hier der besseren Einprägsamkeit wegen $\hat{l}_x \equiv \hat{l}_1$, $\hat{l}_y \equiv \hat{l}_2$, $\hat{l}_z \equiv \hat{l}_3$)

- (a) $(\hat{l}_{\pm})^\dagger = \hat{l}_{\mp}$
- (b) $[\hat{l}_z, \hat{l}_{\pm}] = \pm \hbar \hat{l}_{\pm}$
- (c) $[\hat{l}_+, \hat{l}_-] = 2\hbar \hat{l}_z$
- (d) $[\hat{\mathbf{I}}^2, \hat{l}_{\pm}] = 0$
- (e) $\hat{l}_+ \hat{l}_- = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hbar \hat{l}_z$

$$(f) \hat{\mathbf{I}}^2 = \hat{l}_- \hat{l}_+ + \hat{l}_z^2 + \hbar \hat{l}_z = \hat{l}_+ \hat{l}_- + \hat{l}_z^2 - \hbar \hat{l}_z$$

Wir suchen jetzt Eigenfunktionen von \hat{l}_z und $\hat{\mathbf{I}}^2$. Da \hat{l}_i die Dimension einer Wirkung hat, schreiben wir den Eigenwert als $l_z = \hbar m$, dann ist m eine dimensionslose Zahl. Sei ψ_m Eigenfunktion von \hat{l}_z mit dem Eigenwert $\hbar m$

$$\hat{l}_z \psi_m = \hbar m \psi_m,$$

dann folgt mit (b)

$$\hat{l}_z \hat{l}_\pm \psi_m = \hat{l}_\pm l_z \psi_m \pm \hbar \hat{l}_\pm \psi_m = (l_z \pm \hbar) \hat{l}_\pm \psi_m.$$

D.h., wenn ψ_m Eigenfunktion von \hat{l}_z mit Eigenwerten $l_z = \hbar m$ ist, dann ist $\hat{l}_\pm \psi_m$ Eigenfunktion von \hat{l}_z mit Eigenwerten $l_z \pm \hbar = \hbar(m \pm 1)$.

Allgemein: durch Anwendung von \hat{l}_\pm^n können wir Eigenfunktionen mit immer größerem oder kleinerem Eigenwert $l_z = (m \pm n)\hbar$ erzeugen.

Wir wollen jetzt Eigenfunktion mit **endlichem** Eigenwert von $\hat{\mathbf{I}}^2$ suchen, wir nennen diesen Eigenwert $\hbar^2 \lambda$ (symbolisch). Wegen $\hat{\mathbf{I}}^2 - \hat{l}_z^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2$ gilt offenbar $\lambda - m^2 \geq 0$, dies begrenzt die möglichen Eigenwerte von \hat{l}_z .

$$\left(\psi_m, (\hat{\mathbf{I}}^2 - \hat{l}_z^2) \psi_m \right) = \hbar^2 (\lambda - m^2) = (\hat{l}_x \psi_m, \hat{l}_x \psi_m) + (\hat{l}_y \psi_m, \hat{l}_y \psi_m) \geq 0.$$

D.h. wir suchen solche Eigenfunktionen, für die es ein maximales m , $m_{\max} = l$, gilt, so daß

$$\begin{aligned} \hat{l}_z \psi_l &= \hbar l \psi_l \\ \hat{l}_+ \psi_l &= 0 \\ \hat{\mathbf{I}}^2 \psi_l &= (\hat{l}_- \hat{l}_+ + \hat{l}_z^2 + \hbar \hat{l}_z) \psi_l = \hbar^2 l(l+1) \psi_l \end{aligned}$$

gilt. D.h., die Eigenwerte von $\hat{\mathbf{I}}^2$ sind $\hbar^2 \lambda = \hbar^2 l(l+1)$. Andererseits können wir uns die $\psi_{m < l}$ durch Anwendung von \hat{l}_- erzeugen.

$$\begin{aligned} \psi_{l-1} &= A_{l-1} \hat{l}_- \psi_l, & A_{l-1} : \text{Normierung} \\ \psi_{l-2} &= A_{l-2} \hat{l}_- \psi_{l-1} & \text{etc.} \end{aligned}$$

bis hin zu einem niedrigsten Wert $m = l - t$, $\hat{l}_- \psi_{l-t} = 0$ (offenbar gilt auch $\lambda \geq (l-t)^2$). Um t zu bestimmen, betrachten wir

$$\hat{\mathbf{I}}^2 \psi_{l-t} = (\hat{l}_+ \hat{l}_- + \hat{l}_z^2 - \hbar \hat{l}_z) \psi_{l-t} = 0 + \hbar^2 (l-t)(l-t-1) \psi_{l-t}.$$

Andererseits gilt mit $[\hat{\mathbf{I}}^2, \hat{l}_-] = 0$

$$\hat{\mathbf{I}}^2 \psi_m = \hat{\mathbf{I}}^2 A_{l-1} A_{l-2} \dots A_m \hat{l}_-^{(l-m)} \psi_l = \hbar^2 l(l+1) \psi_m$$

d.h. alle ψ_m haben den gleichen Eigenwert $\hbar^2 l(l+1)$ für $\hat{\mathbf{I}}^2$. Hieraus folgt

$$(l-t)(l-t-1) = l^2 - 2tl + t^2 - l + t = l(l+1)$$

oder

$$(2l-t)(t+1) = 0$$

und damit $2l = t$. Die Zahl der erlaubten m -Werte ist daher $2l+1$. Da t ganz ist, folgt, daß l **halb- oder ganzzahlig ist**: $l = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots$. Für den **Bahndrehimpuls** folgt wegen der **Eindeutigkeit der Wellenfunktion**, daß m **ganze Werte** annimmt. Tatsächlich, in Kugelkoordinaten ($x = r \sin \theta \cos \varphi$, $y = r \sin \theta \sin \varphi$, $z = r \cos \theta$) erhalten wir

$$\hat{l}_z \psi_m = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi_m = \hbar m \psi_m \quad \rightarrow \quad \psi_m = e^{im\varphi} \Theta(r, \theta).$$

$\varphi \rightarrow \varphi + 2\pi$: $\exp(i2m\pi) = 1 \rightarrow m$ ganz!

Die halbzahligen Werte von l bzw. m sind aber in der Natur ebenfalls realisiert, diese beschreiben den inneren Drehimpuls der Teilchen, den sogenannten **Spin**.

Normierung: Betrachte

$$\begin{aligned} (\psi_{m-1}, \psi_{m-1}) &= |A_{m-1}|^2 (\hat{l}_- \psi_m, \hat{l}_- \psi_m) \\ &= |A_{m-1}|^2 (\psi_m, (\hat{\mathbf{I}}^2 - \hat{l}_z^2 + \hbar \hat{l}_z) \psi_m) \\ &= |A_{m-1}|^2 \hbar^2 (l(l+1) - m(m-1)) (\psi_m, \psi_m). \end{aligned}$$

Es galt: $\psi_m = A_m \hat{l}_- \psi_{m+1}$. Es folgt:

$$|A_m|^{-2} = \hbar^2 (l(l+1) - m(m+1)).$$

$\rightarrow \hat{l}_- \psi_m = A_{m-1}^{-1} \psi_{m-1} = \hbar (l(l+1) - m(m-1))^{1/2} \psi_m$. Anwendung von \hat{l}_+

$$\begin{aligned} \hat{l}_+ \psi_m &= \hat{l}_+ A_m \hat{l}_- \psi_{m+1} = A_m (\hat{\mathbf{I}}^2 - \hat{l}_z + \hbar \hat{l}_z) \psi_{m+1} \\ &= A_m \hbar^2 (l(l+1) - (m+1)^2 + (m+1)) \psi_{m+1} \\ &= A_m \hbar^2 (l(l+1) - (m+1)m) \psi_{m+1} \\ \hat{l}_+ \psi_m &= \hbar ((l+1)l - (m+1)m)^{1/2} \psi_{m+1} \end{aligned}$$

oder zusammen

$$\hat{l}_\pm \psi_m = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} \psi_{m \pm 1}.$$

$$\text{NR: } \hat{l}_+ \psi_m = A_m \hat{l}_+ \hat{l}_- \psi_{m+1} = A_m \hbar^2 [l(l+1) - m(m+1)] \psi_{m+1}.$$

ψ_{ml} wird von jetzt ab durch zwei Indizes m, l charakterisiert, die den Eigenwerten von \hat{l}_z und \hat{l}^2 entsprechen. Für normierte Eigenfunktion ψ_{lm} gilt

$$(1) (\psi_{lm}, \hat{l}_z \psi_{l'm'}) = \hbar m \delta_{ll'} \delta_{mm'}.$$

$$(2) (\psi_{lm}, \hat{l}^2 \psi_{l'm'}) = \hbar^2 l(l+1) \delta_{ll'} \delta_{mm'}.$$

Wir können jetzt auch die anderen Matrixelemente ausrechnen

$$\begin{aligned} (\psi_{lm}, \hat{l}_\pm \psi_{l'm'}) &= \delta_{ll'} \delta_{m, m' \pm 1} \hbar \sqrt{l(l+1) - m'(m' \pm 1)}, \\ (\psi_{lm}, \hat{l}_x \psi_{l'm'}) &= \frac{\hbar}{2} \left\{ \sqrt{l(l+1) - m'(m'+1)} \delta_{m, m'+1} + \sqrt{l(l+1) - m'(m'-1)} \delta_{m, m'-1} \right\} \delta_{ll'}, \\ (\psi_{lm}, \hat{l}_y \psi_{l'm'}) &= \frac{\hbar}{2i} \left\{ \sqrt{l(l+1) - m'(m'+1)} \delta_{m, m'+1} - \sqrt{l(l+1) - m'(m'-1)} \delta_{m, m'-1} \right\} \delta_{ll'}. \end{aligned}$$

Die hier angegebenen Matrizen der Erwartungswerten von l_x, l_y und l_z erfüllen die gleichen Vertauschungsregeln wie die entsprechenden Operatoren, sie sind die $(2l+1)$ -dimensionalen Darstellungen der Drehgruppe $SO(3)$. Hierbei haben wir die Tatsache benutzt, daß Eigenfunktionen zu verschiedenen Eigenwerten (l, m) orthogonal sind oder orthogonal gemacht werden können.

Die Funktionen ψ_{lm} nehmen eine besonders einfache Form in Kugelkoordinaten an.

$$\begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \varphi, & y &= r \sin \theta \sin \varphi, & z &= r \cos \theta \\ \nabla &= \mathbf{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \mathbf{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \mathbf{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{aligned}$$

$$\hat{l}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi},$$

$$\hat{l}_\pm = \hbar e^{\pm i\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right),$$

$$\hat{l}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right]$$

Wir hatten schon gesehen, daß $\psi_{lm} = \Theta(r, \theta) \exp(im\varphi)$ gilt. Da \hat{l}^2 nicht von r abhängt, folgt

$$\hat{l}^2 \psi_{lm} = -\hbar^2 \left[\frac{-m^2}{\sin^2 \theta} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right] \Theta_{lm}(\theta) e^{im\varphi} = \hbar^2 l(l+1) \Theta_{lm}(\theta) e^{im\varphi}$$

oder

$$\left[l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d}{d\theta} \right) \right] \Theta_{lm}(\theta) = 0.$$

Man kann mit der Substitution $\xi = \cos \theta$, $d\xi = -\sin \theta d\theta$ diese Gleichung in die Form

$$\left[l(l+1) - \frac{m^2}{1-\xi^2} + \frac{d}{d\xi} \left((1-\xi^2) \frac{d}{d\xi} \right) \right] \Theta_{lm}(\arccos \xi) = 0$$

schreiben. Lösungen dieser Gleichung sind die **zugeordneten Legendreschen Polynome** $P_{lm}(\cos \theta)$. Aus der Normierungsbedingung erhalten wir

$$\begin{aligned}\Theta_{lm}(\theta) &= (-1)^m i^l \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!}} P_{lm}(\cos \theta), \quad m \geq 1 \\ \Theta_{l,-|m|} &= (-1)^m \Theta_{l|m|} \\ P_{lm}(\xi) &= (1-\xi^2)^{m/2} \frac{d^m}{d\xi^m} P_l(\xi), \quad P_l(\xi) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{d\xi^l} (\xi^2-1)^l.\end{aligned}$$

$$P_0 = 1, \quad P_1 = \xi, \quad P_2 = \frac{1}{2}(3\xi^2 - 1), \quad P_3 = \frac{1}{2}(5\xi^2 - 3\xi)$$

Die Funktionen $P_l(\xi)$ sind die Legendreschen Polynome, dies sind Polynome l -ten Grades in ξ , die P_{lm} sind daher Polynome $(l-m)$ -ten Grades in ξ mit $(l-m)$ Nullstellen im Intervall $-1 < \xi < 1$. Sie erfüllen die Beziehungen

$$\begin{aligned}(l+1)P_{l+1}(\xi) &= (2l+1)\xi P_l(\xi) - lP_{l-1}(\xi) \\ \int_{-1}^1 d\xi P_{lm}(\xi) P_{l'm}(\xi) &= \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta_{ll'} \quad (m > 0).\end{aligned}$$

$\psi_{lm}(\theta, \varphi)$ sind daher die Kugelfunktionen $Y_{lm}(\theta, \varphi)$

$$\psi_{lm}(\theta, \varphi) = Y_{lm}(\theta, \varphi) \equiv (-1)^{(m+|m|)/2} P_{l|m|}(\cos \theta) e^{im\varphi} \left[\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} \right]^{1/2}$$

Hieraus folgen

(i) Orthogonalität:

$$\int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\varphi Y_{lm}(\theta, \varphi)^* Y_{l'm'}(\theta, \varphi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}.$$

(ii) Vollständigkeit:

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} Y_{lm}(\theta, \varphi) Y_{lm}(\theta', \varphi')^* = (\sin \theta)^{-1} \delta(\theta - \theta') \delta(\varphi - \varphi').$$

(iii) Additionstheorem:

$$\begin{aligned}\sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\theta, \varphi) Y_{lm}(\theta', \varphi')^* &= \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos \Theta) \\ Y_{l,-m}(\theta, \varphi) &= (-1)^m Y_{lm}(\theta, \varphi)^*.\end{aligned}$$

Einige Kugelfunktionen explizit:

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\varphi}.$$

Parität:

unter $\mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{x}$ geht $\hat{\mathbf{l}}$ in $\hat{\mathbf{l}}$ über, d.h. $[\hat{P}, \hat{l}_i] = 0$. Damit sind die Y_{lm} auch Eigenfunktionen von \hat{P} (mit dem Eigenwert ± 1). Der Vektor $-\mathbf{x}$ hat die Polarkoordinaten $\pi - \theta$, $\varphi + \pi$ wenn \mathbf{x} durch θ, φ bestimmt ist (siehe Bild). Mit $\cos(\pi - \theta) = -\cos \theta$ folgt

$$\hat{P} Y_{lm}(\theta, \varphi) = Y_{lm}(\pi - \theta, \varphi + \pi) = \underbrace{e^{im\pi} (-1)^{l+|m|}}_{(-1)^l} Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

Für geradzahliges l ist der Eigenwert λ von \hat{P} , $\lambda = +1$, für ungeradzahliges l , $\lambda = -1$. Die Y_{lm} bilden ein vollständiges orthonormales System von Eigenfunktionen. In diesen Zuständen haben $\hat{\mathbf{l}}^2$, \hat{l}_z und \hat{P} scharfe Eigenwerte, aber nicht \hat{l}_x und \hat{l}_y , deren Erwartungswerte verschwinden, es gilt

$$(\psi_{lm}, \hat{l}_x^2 \psi_{lm}) = \frac{1}{2} (\psi_{lm}, (\hat{\mathbf{l}}^2 - \hat{l}_z^2) \psi_{lm}) = \frac{\hbar^2}{2} (l(l+1) - m^2).$$

Zustände mit $l = 0, 1, 2, 3$ werden als s, p, d, f -Orbitale bezeichnet.

Von Bedeutung sind auch Linearkombinationen der Zustände Y_{lm} , so bezeichnet man

$$p_x = -\frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{1,1} - Y_{1,-1}) \quad \text{als } p_x \text{- Orbital}$$

$$p_y = -\frac{1}{\sqrt{2}i}(Y_{1,1} + Y_{1,-1}) \quad \text{als } p_y \text{- Orbital.}$$

Kapitel 5

Teilchen im Zentralpotential

In diesem Abschnitt behandeln wir das wichtige Problem der Bewegung eines Teilchens im Zentralfeld und verwandte Aufgaben.

5.1 Teilchen im kugelsymmetrischen Potential

Wir betrachten den Fall eines Potentials $V(\mathbf{x})$, bei dem V nur vom Betrag von \mathbf{x} abhängt. In Kugelkoordinaten ist also V nur von r abhängig.

Die kinetische Energie schreiben wir ebenfalls in Kugelkoordinaten. Hierzu benutzen wir die Tatsache, daß

$$\hat{\mathbf{I}}^2 = \sum_i \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{ilm} x_j p_k x_l p_m = \dots = \mathbf{x}^2 \hat{\mathbf{p}}^2 - (\mathbf{x} \cdot \hat{\mathbf{p}})^2 + i\hbar \mathbf{x} \cdot \hat{\mathbf{p}}$$

gilt. Mit $\mathbf{x}^2 = r^2$, $p_r = (\frac{\mathbf{x}}{r} \cdot \mathbf{p}) = \frac{1}{r} \frac{\hbar}{i} \mathbf{x} \cdot \nabla = \frac{1}{r} \frac{\hbar}{i} r \frac{\partial}{\partial r}$ wird

$$\hat{\mathbf{p}}^2 = \frac{\hat{\mathbf{I}}^2}{r^2} - \frac{\hbar^2}{r^2} \left[\left(r \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 + r \frac{\partial}{\partial r} \right] = \frac{1}{r^2} \left[\hat{\mathbf{I}}^2 - \hbar^2 \left(2r \frac{\partial}{\partial r} + r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right) \right].$$

Der volle Hamiltonian hat daher die Form

$$\hat{H} = \frac{1}{2mr^2} \left(\hat{\mathbf{I}}^2 - \hbar^2 \left(2r \frac{\partial}{\partial r} + r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right) \right) + V(r).$$

Offenbar gilt $[\hat{H}, \hat{\mathbf{I}}^2] = [\hat{H}, \hat{l}_z] = 0$, da $\hat{\mathbf{I}}^2$ und \hat{l}_z nicht von r abhängen. Wegen $[\hat{\mathbf{I}}^2, \hat{l}_z] = 0$ sind die Eigenfunktionen von $\hat{\mathbf{I}}^2$ und \hat{l}_z auch Eigenfunktionen von \hat{H} .

Wir machen einen **Separationsansatz** für die Wellenfunktion ψ in

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

in der Form

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

Dies gibt nach Einsetzen in die Schrödingergleichung

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] + V(r) \right\} R(r) = E R(r).$$

Es ist zweckmäßig, $R(r) = u(r)/r$ zu schreiben

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) R = \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \right)^2 \frac{u}{r} = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r \frac{u}{r} = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} u$$

und damit (nach Multiplikation mit r)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) + V(r) \right] u(r) = E u(r).$$

Dies ist die Schrödingergleichung für ein **eindimensionales Problem** mit dem **effektiven Potential**

$$\begin{aligned} V_{\text{eff}}(r) &= V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}, & r > 0 \\ V_{\text{eff}}(r) &= \infty, & r < 0. \end{aligned}$$

Der 2. Term kann als Potential der Zentrifugalkräfte aufgefaßt werden. Tatsächlich: für eine Bewegung einer Masse m auf einem Kreis mit dem Radius R und der Winkelgeschwindigkeit Ω folgt für den Drehimpuls $|\mathbf{l}| = |\mathbf{r} \times \mathbf{p}| = m r^2 \Omega$ und die kinetische Energie $E = m(r\Omega)^2/2 = l^2/(2mr^2)$. In der Quantenmechanik ist l^2 durch seinen Eigenwert $\hbar l(l+1)$ zu ersetzen.

Die Normierbarkeit von ψ erfordert

$$\int d^3x |\psi|^2 = S_\alpha \int_0^\infty \frac{r^2 dr}{r^2} |u(r)|^2 < \infty,$$

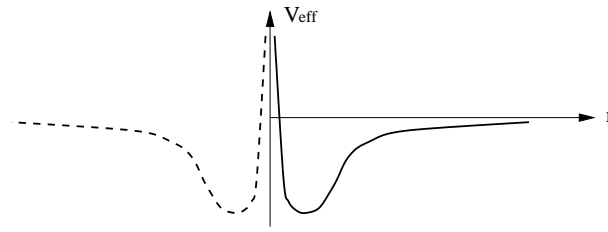
und daher muß für gebundene Zustände für große r

$$|u(r)| \leq \frac{a}{r^{1/2+\varepsilon}}, \quad \varepsilon > 0$$

gelten.

Wir betrachten noch kurz qualitativ ein attraktives Potential, bei dem $V_{\text{eff}}(r < 0) = \infty$ ist.

Für $l = 0$ verschwindet das Potential der Zentrifugalkräfte und $V_{\text{eff}}(r)$ stimmt mit $V(r)$ überein. An $r = 0$ springt $V_{\text{eff}}(r)$ von einem endlichen Wert auf ∞ . Die Wellenfunktion $u(r)$ muß deshalb bei $r = 0$ verschwinden. Wir können die Lösungen $u(r)$ daher aus **den** Lösungen für das **symmetrischen Potential** $V(r) = V(-r)$ bestimmen, die bei $r = 0$ einen Knoten haben, das sind die Lösungen ungerader



Parität. Bei der Diskussion gebundener Zustände in Potentialtöpfen in $d = 1$ hatten wir gesehen, daß es immer einen gebundenen Zustand gerader Parität gibt. Dies ist der Grundzustand. Damit es einen angeregten gebundenen Zustand mit ungerader Parität gibt, muß aber der Potentialtopf hinreichend tief sein. Dies ist der Zustand der Lösung für $u(r)$, $r > 0$. Das Potential muß also eine gewisse Stärke haben, damit ein gebundener Zustand entstehen kann.

Die Energieniveaus hängen offenbar von l ab. Bei gegebenem l **ordnen** wir diese **nach wachsender Energie** und indizieren sie mit der (**radialen**) **Quantenzahl** n_r , l heißt **azimutale**, m – **magnetische Quantenzahl**. Offenbar hängen die Energieeigenwerte nicht von m ab, da \hat{l}_z nicht in der Schrödingergleichung für $u(r)$ auftritt.

5.2 Coulomb-Potential

Wir betrachten jetzt ein Elektron im Potential $V(r)$ des Atomkerns, Wechselwirkungen mit anderen Elektronen werden vernachlässigt. Der Atomkern wird zunächst als unendlich schwer angenommen.

$$V(r) = -\frac{e^2 Z}{r}$$

Z – Zahl der Protonen im Kern, e – Elementarladung.

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{e^2 Z}{r}$$

Abschätzung der Energie des Grundzustands: Sei Elektron in Kugel mit Radius r_0 lokalisiert:

$$\begin{aligned} \langle \hat{p} \rangle &= 0, \quad \langle (\Delta \hat{\mathbf{p}}^2) \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4(2r_0)^2} \\ E &\geq \frac{\hbar^2}{32r_0^2 m} - \frac{e^2 Z}{r_0}, \quad \frac{\partial E}{\partial r_0} = 0 \rightarrow r_0 = \frac{\hbar^2}{16e^2 Z m} = \frac{a_0}{16} \\ E &\geq -\frac{8mZ^2 e^4}{\hbar^2} = -8E_0 \end{aligned}$$

Atomare Längenskala:

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{Ze^2m} = \frac{1}{Z} 0,529 \cdot 10^{-8} \text{ cm}$$

Atomare Energieskala:

$$E_0 = \frac{e^2Z}{a_0} = \frac{Z^2e^4m}{\hbar^2} = Z^2 \cdot 4,36 \cdot 10^{-11} \text{ erg} = Z^2 \cdot 27,21 \text{ eV}$$

Wir betrachten jetzt die Schrödingergleichung für $u(r)$:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] - \frac{e^2Z}{r} \right\} u(r) = E u(r)$$

Mit der Substitution $r = a_0\xi$, $E = \varepsilon E_0$ folgt ($\varepsilon < 0$)

$$\left\{ \frac{1}{2} \left[\frac{d^2}{d\xi^2} - \frac{l(l+1)}{\xi^2} \right] + \frac{1}{\xi} - |\varepsilon| \right\} u(\xi) = 0$$

Diese Form der Schrödingergleichung enthält als einzige Konstante l , $\varepsilon < 0$. Es ist jedoch zweckmäßig, noch einmal zu substituieren, nämlich

$$\frac{E}{E_0} = \varepsilon = -\frac{1}{2n^2}, \quad \frac{r}{a_0} = \xi = \frac{1}{2} \rho \frac{1}{\sqrt{-2\varepsilon}} = \frac{1}{2} \rho n.$$

Dies gibt

$$\left\{ \left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] + \frac{n}{\rho} - \frac{1}{4} \right\} u(\rho) = 0.$$

Für gebundene Zustände ist $n > 0$. Wir machen jetzt den **Lösungs-Ansatz**, der das Verhalten für kleine, große und mittlere ρ beschreibt.

$$u(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho/2} w(\rho).$$

Tatsächlich, für **große** ρ kann man die $\frac{1}{\rho}$, $\frac{1}{\rho^2}$ -Terme gegenüber $1/4$ vernachlässigen und erhält

$$u''(\rho) = \frac{1}{4}u$$

und damit $u \sim \exp(-\rho/2)$ (u muß im Unendlichen verschwinden). Für kleine ρ dominiert dagegen der Zentrifugalterm und man erhält

$$u''(\rho) = \frac{l(l+1)}{\rho^2}u$$

mit der Lösung $u(\rho) = A\rho^{l+1} + B\rho^{-l}$. Für $\rho \rightarrow 0$ gilt $u(0) = 0$, da sonst $\Delta\psi \sim \Delta\frac{u}{r} \sim \delta^3(\mathbf{x}) \cdot u(0)$ wäre, im Widerspruch zur Ausgangs-Schrödingergleichung. Daher muß $B = 0$ sein.

Die Gleichung für $w(\rho)$ lautet dann

$$\rho w'' + (2l + 2 - \rho)w' + (n - l - 1)w = 0$$

mit $w(0) < \infty$ und $w(r \rightarrow \infty) < r^k$. Die Lösung dieser Gleichung ist die **konfluente hypergeometrische Funktion**

$$w = F(-n + l + 1, 2l + 2, \rho).$$

Eine Lösung, die die Bedingung bei 0 erfüllt, erhält man nur für $n - l - 1 = \text{ganz} \geq 0 \rightarrow n \geq l + 1$ ($l = 0, 1, 2, \dots$).

$$E_n = -\frac{1}{2n^2}E_0 = -\frac{Z^2 e^4 m}{2n^2 \hbar^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Es gibt daher unendlich viele Energieniveaus zwischen E_1 und Null. Für $E_n \rightarrow 0$ liegen die Energieniveaus immer dichter, bis sie für $E = 0$ in ein kontinuierliches Spektrum übergehen. n heißt **Hauptquantenzahl**, diese hängt mit der radialen Quantenzahl über $n_r = n - l - 1$ zusammen. Für festes n kann l die Werte $l = 0, 1, \dots, n - 1$ annehmen, zu jedem Wert von l gehören $2l + 1$ m -Werte. Die **Entartung des Energieniveaus** E_n ist daher

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2.$$

Die konfluenten hypergeometrischen Funktionen stimmen bis auf einen Faktor mit den **verallgemeinerten Laguerreschen Polynomen** überein. Die Radialanteil der Wellenfunktion kann daher in der Form

$$R_{nl}(\rho) = \text{const } \rho^l e^{-\rho/2} L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$$

geschrieben werden, mit der Normierungsbedingung (Rücksubstitution $r = (1/2)\rho na_0!$)

$$\int_0^\infty dr r^2 R_{nl}^2(r) = 1.$$

Damit erhält man

$$R_{nl} = -\frac{2}{a_0^{3/2} n^2} \left(\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3} \right)^{1/2} e^{-r/na_0} \left(\frac{2r}{a_0 n} \right)^l L_{n+l}^{2l+1} \left(\frac{2r}{a_0 n} \right).$$

R_{nl} hat $(n-l-1)$ positive Nullstellen (Knoten), es hängt **nicht** von m ab. Explizit:

$$\begin{aligned} R_{10}(\xi) &= 2e^{-\xi} \\ R_{20}(\xi) &= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-\xi/2} \left(1 - \frac{\xi}{2}\right) \\ R_{21}(\xi) &= \frac{1}{2\sqrt{6}} e^{-\xi/2} \xi \\ R_{30}(\xi) &= \frac{2}{3\sqrt{3}} e^{-\xi/3} \left(1 - \frac{2}{3}\xi + \frac{2}{27}\xi^2\right) \\ R_{31}(\xi) &= \frac{8}{27\sqrt{6}} e^{-\xi/3} \xi \left(1 - \frac{\xi}{6}\right) \end{aligned}$$

Die explizite Form der **Laguerreschen Polynome** ist

$$L_r^s(x) = \sum_{k=0}^{r-s} (-1)^{k+s} \frac{(r!)^s}{k! (k+s)! (r-k-s)!} x^k.$$

Die **Gesamtwellenfunktion** ist

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

$|\psi_{nlm}|^2 r^2 dr d\Omega$ ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Teilchens im Raumvolumen $r^2 dr d\Omega$, $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$.

Energiedifferenzen zwischen zwei Energieniveaus n, m lassen sich in der Form

$$\hbar \omega_{nm} = E_m - E_n = \frac{E_0}{2} \left(-\frac{1}{m^2} + \frac{1}{n^2} \right) = 1\text{Ry} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

Dies ist die quantenmechanische Begründung des Ritzschen Kombinationsprinzips. Beim H-Atom werden die ω_{nm} zu **Spektralerien**, die ein gemeinsames n besitzen, zusammengefaßt: $n = 1$ (Lyman), $n = 2$ (Balmer), $n = 3$ (Paschen).

“Zufällige Entartung”:

Der hohe Entartungsgrad n^2 des n -ten Energieniveaus ist eigentlich erstaunlich: da \hat{l}^2 und \hat{l}_z mit \hat{H} vertauschen und $\hat{H} \hat{l}_z$ nicht explizit enthält, erwartet man aufgrund der Kugelsymmetrie eigentlich nur eine $2l+1$ -fache Entartung jedes Energieniveaus. Man spricht deshalb auch von “zufälliger Entartung” der Energieniveaus.

Tatsächlich ist die Entartung **nicht zufällig**. Es gibt nämlich noch einen Operator, der mit \hat{H} kommutiert, den **Lenz–Runge–Vektor** (erinnern Sie sich an die Mechanik–Vorlesung):

$$\hat{\mathbf{A}} = \frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{l}} - \hat{\mathbf{l}} \times \hat{\mathbf{p}}) - \frac{e^2 Z}{r} \mathbf{x}.$$

Wir benutzen hier wieder atomare Einheiten, d.h. wir messen \mathbf{x} in a_0 - und E in E_0 -Einheiten. In diesen Einheiten hat $\hat{h} = \hat{H}/E_0$ die Form

$$\hat{h} = -\frac{1}{2} \Delta_\xi - \frac{1}{\xi}.$$

Wir führen jetzt die dimensionslose Größe $\hat{\mathbf{a}} = \frac{\hat{\mathbf{A}}}{E_0 a_0}$ ein, die mit \hat{h} über (nach einigen Umformungen)

$$\hat{\mathbf{a}}^2 = 2\hat{h} \left(\frac{\hat{\mathbf{I}}^2}{\hat{h}^2} + 1 \right) + 1 \quad (5.1)$$

zusammenhängt. Man kann elementar folgende Relationen zeigen:

$$(i) \quad [\hat{\mathbf{a}}, \hat{h}] = 0$$

$$(ii) \quad \hat{\mathbf{I}} \cdot \hat{\mathbf{a}} = \hat{\mathbf{a}} \cdot \hat{\mathbf{I}} = 0$$

$$(iii) \quad [\hat{l}_i, \hat{l}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{l}_k$$

$$(iv) \quad [\hat{a}_i, \hat{l}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{a}_k$$

$$(v) \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_j] = -\frac{2i}{\hbar} \hat{h} \varepsilon_{ijk} \hat{l}_k$$

Da \hat{h} zeitunabhängig ist und mit $\hat{\mathbf{a}}$ und $\hat{\mathbf{I}}$ kommutiert, kann man sich bei der Anwendung der Operatoren auf **Eigenfunktionen von \hat{H}** (bzw. \hat{h}) beschränken. Wir können deshalb \hat{h} durch $-|\varepsilon|$ in (v) ersetzen. Mit $\hat{a}'_i = (\hbar/\sqrt{2|\varepsilon|})\hat{a}_i$ nimmt (v) die Form

$$(v') \quad [\hat{a}'_i, \hat{a}'_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{l}_k$$

an, (iv) bleibt unverändert (aber $\hat{\mathbf{a}}$ wird durch $\hat{\mathbf{a}}'$ ersetzt) und (5.1) bekommt die Form

$$\hat{\mathbf{a}}'^2 + \hat{\mathbf{I}}^2 = -\hbar^2 \left(1 + \frac{1}{2\varepsilon} \right) \quad (5.2)$$

Die sechs Operatoren \hat{l}_i , \hat{a}_i , $i = 1, 2, 3$ sind die sechs **Generatoren** der **SO(4)-Gruppe**, der Gruppe der eigentlichen Rotationen im \mathbb{R}^4 .

Die $SO(n)$ -Gruppe ist die Gruppe der reellen orthogonalen $n \times n$ -Matrizen mit der Determinante $+1$. Für orthogonale Matrizen mit den Matrixelementen a_{ij} gilt die Orthogonalitätsbedingung $\sum_{j=1}^n a_{ij} a_{lj} = \delta_{il}$. Dies liefert $n + n(n-1)/2$ Bedingungen, so dass nur $n^2 - n - n(n-1)/2 = n(n-1)/2$ Matrixelemente unabhängig voneinander sind. Die $SO(n)$ hat deshalb $n(n-1)/2$ Generatoren.

Man kann jedoch zur $SO(3)$ -Gruppe zurückkehren, indem man noch einmal transformiert, diesmal zu

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{I}} &= \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{I}} + \hat{\mathbf{a}}'), & \hat{\mathbf{K}} &= \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{I}} - \hat{\mathbf{a}}'), \\ \hat{\mathbf{I}}^2 &= \frac{1}{4}(\hat{\mathbf{I}}^2 + \hat{\mathbf{a}}'^2), & \hat{\mathbf{K}}^2 &= \frac{1}{4}(\hat{\mathbf{I}}^2 + \hat{\mathbf{a}}'^2). \end{aligned}$$

Die Kommutatoralgebren der \hat{I}_i und \hat{K}_i sind jetzt entkoppelt, da

$$[\hat{I}_i, \hat{K}_j] = 0, \quad [\hat{I}_i, \hat{I}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{I}_k, \quad [\hat{K}_i, \hat{K}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{K}_k.$$

Die \hat{L}_i und \hat{K}_i sind Generatoren jeweils einer Darstellung der $SO(3)$: Die $SO(4)$ -Gruppe kann (lokal) als das **direkte Produkt** zweier $SO(3)$ -Gruppen geschrieben werden $SO(4) = SO(3) \times SO(3)$. Außerdem gilt wegen (ii), daß die Eigenwerte von \hat{I}^2 , $\hbar^2 I(I+1)$ und \hat{K}^2 , $\hbar^2 K(K+1)$, gleich sind, d.h. es gilt $I = K$. Aus (5.2) folgt mit $(\hat{\mathbf{a}}^2 + \hat{\mathbf{I}}^2) = 2(\hat{\mathbf{I}}^2 + \hat{\mathbf{K}}^2)$ für die Eigenwerte

$$2 \cdot 2 \cdot I(I+1) = -1 - \frac{1}{2\varepsilon}$$

oder

$$\varepsilon = -\frac{1}{2(2I+1)^2}, \quad I = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots$$

Mit $(2I+1) = n = 1, 2, 3$ bekommen wir unser alter Ergebnis zurück, die Entartung ist offenbar $(2I+1)(2K+1) = (2I+1)^2 = n^2$. Der Bahndrehimpuls $\hat{\mathbf{I}} = \hat{\mathbf{I}} + \hat{\mathbf{K}}$ nimmt (bei gegebenen $I = (n-1)/2$) die Werte von $l_{\max} = I + K = (n-1)\hbar$ bis $l_{\min} = I - K = 0$ an.

5.3 Zweikörperproblem

Im vorangegangenen Kapitel hatten wir den Atomkern als räumlich fest im Ursprung des Koordinatensystems angenommen. Wir betrachten jetzt das volle Zweikörperproblem

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m_2} + V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2).$$

Wir führen Relativ- und Schwerpunktkoordinaten ein

$$\begin{aligned} \mathbf{x} &= \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2, & \mathbf{X} &= \frac{m_1 \mathbf{x}_1 + m_2 \mathbf{x}_2}{m_1 + m_2} \\ \hat{\mathbf{p}} &= m(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2) = \frac{m_2 \hat{\mathbf{p}}_1 - m_1 \hat{\mathbf{p}}_2}{m_1 + m_2}, & \hat{\mathbf{P}} &= \hat{\mathbf{p}}_1 + \hat{\mathbf{p}}_2 \end{aligned}$$

sowie die reduzierte und die Gesamt-Masse $m = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$, $M = m_1 + m_2$.

Es gilt nun $[x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij} = [X_i, P_j]$, alle anderen Kommutatoren verschwinden, hieraus folgt $\hat{\mathbf{p}} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}$, $\hat{\mathbf{P}} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{X}}$. Damit wird

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{x}).$$

Die Wellenfunktion kann man wieder als Produkt ansetzen

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) &= \tilde{\Psi}(\mathbf{x}, \mathbf{X}) = e^{i\mathbf{K}\mathbf{X}} \Phi(\mathbf{x}) \\ \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{x}) \right) \Phi(\mathbf{x}) &= \underbrace{\left(E - \frac{\mathbf{K}^2 \hbar^2}{2M} \right)}_{E'} \Phi(\mathbf{x}). \end{aligned}$$

Damit ist man wieder beim Einteilchenproblem. Beim H-Atom ist mit $m_1 = m_e$, $m_2 = m_p$, $m_p/m_e \simeq 2000$, $m = m_e m_p / (m_e + m_p) \simeq m_e$. Ruht das Atom, dann ist $\mathbf{K} = 0$ und $E' = E$, wir sind damit wieder beim Problem 5.2

Kapitel 6

Darstellungstheorie

6.1 Zustandsvektoren und Dirac–Schreibweise

Zentraler Begriff der Quantenmechanik ist der des **Zustands**. Der Zustand wurde dabei bisher meist durch die Wellenfunktion in **Ortsdarstellung** beschrieben.

Beispiel: Wellenpakete für freie Teilchen:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \int d^3k f(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{x} - \omega(\mathbf{k})t)}, \quad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}, \quad E = \hbar\omega(\mathbf{k}).$$

ψ wird hier nach ebenen Wellen entwickelt, die Gesamtheit der Koeffizienten $f(\mathbf{k})$ bestimmt den Zustand. Wir können diesen Zustand aber auch in der **Impulsdarstellung** angeben, die durch

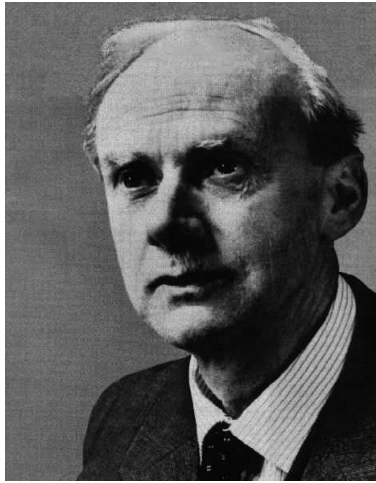
$$\tilde{\psi}(\mathbf{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3x e^{-i\mathbf{p}\mathbf{x}/\hbar} \psi(\mathbf{x}, t) = \left(\frac{2\pi}{\hbar}\right)^{3/2} f\left(\frac{\mathbf{p}}{\hbar}\right) e^{-i\omega(\mathbf{p}/\hbar)t}$$

gegeben ist. Spezialfall ist die ebene Welle mit $f(\mathbf{k}) = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)$, $\tilde{\psi}(\mathbf{p}, t) = (2\pi/\hbar)^{3/2} \delta((\mathbf{p} - \mathbf{p}_0)/\hbar)$. Wir hätten aber auch ein anderes vollständiges Orthornormalsystem zur Beschreibung des Wellenpakets wählen können, z.B. die Eigenfunktionen ψ_n des harmonischen Oszillators.

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \sum_n c_n \psi_n(\mathbf{x}, t), \quad c_n = (\psi_n, \psi)$$

wobei jetzt die $\{c_n\}$ den Zustand bestimmen, die wir allerdings erst ausrechnen müßten.

Wir wollen in diesem Kapitel, **Dirac** folgend, den **Zustand** a eines quantenmechanischen Systems **unabhängig von der konkreten Darstellung**, durch einen **“ket”–Vektor** $|a\rangle$ in einem **abstrakten unendlich–dimensionalen linearen Vektorraum** beschreiben.



Paul Dirac (1902–1984)

Mathematischer Einschub: Ein **linearer Vektorraum** \mathbb{L} ist durch folgende Eigenschaften definiert:

- (i) falls $|a\rangle, |b\rangle \in \mathbb{L}$, dann ist auch $|a\rangle + |b\rangle \in \mathbb{L}$.
- (ii) mit $|a\rangle \in \mathbb{L}$, $\lambda \in \mathbb{C}$ gilt $\lambda|a\rangle \in \mathbb{L}$. (\mathbb{C} ist die Menge der komplexen Zahlen.)
- (iii) es existiert das Nullelement o mit $|a\rangle + o = |a\rangle$.
- (iv) für jedes $|a\rangle \in \mathbb{L}$ existiert das inverse Element $|a'\rangle$ mit $|a'\rangle + |a\rangle = o$.
- (v) für $|a\rangle, |b\rangle, |c\rangle \in \mathbb{L}$ und $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ gelten das kommutative und das assoziative Gesetz der Addition und der Multiplikation

$$\begin{aligned}
 |a\rangle + |b\rangle &= |b\rangle + |a\rangle, & (|a\rangle + |b\rangle) + |c\rangle &= |a\rangle + (|b\rangle + |c\rangle) \\
 \alpha(\beta|a\rangle) &= (\alpha \cdot \beta)|a\rangle, & (\alpha + \beta)|a\rangle &= \alpha|a\rangle + \beta|a\rangle, & \alpha(|a\rangle + |b\rangle) &= \alpha|a\rangle + \alpha|b\rangle.
 \end{aligned}$$

Jedem ket-Vektor $|a\rangle$ kann man einen **dualen Zustandsvektor**, einen “bra”-Vektor $\langle a| = |a\rangle^\dagger$ zuordnen. Jeder quantenmechanische Zustand kann daher sowohl durch einen ket- als auch einen bra-Vektor beschrieben werden. **Die Menge aller bra-Vektoren bildet einen linearen Vektorraum, der zum Raum aller ket-Vektoren dual ist.**

Das **Skalarprodukt** zweier Zustände $|a\rangle, |b\rangle$ ist durch (hier schließen wir an das früher definierte Skalarprodukt an)

$$(\psi_a, \psi_b) = \langle a||b\rangle = \langle a|b\rangle$$

gegeben, man kann es auch als Produkt von $\langle a|, |b\rangle$ lesen. Es **stellt** eine **Abbildung** des **ket-Raumes auf den Raum der komplexen Zahlen dar**. Es gilt

(vi)

$$\langle a|b\rangle^* = \langle b|a\rangle$$

(vii)

$$\langle a|a\rangle \geq 0, \quad (= 0 \text{ nur dann wenn } |a\rangle = 0), \quad \|a\| = \sqrt{\langle a|a\rangle} \text{ (Norm)}$$

Aus (v)–(vii), folgt

$$|\langle a|b\rangle|^2 \leq \langle a|a\rangle \langle b|b\rangle, \quad \text{(Scharzsche Ungleichung).}$$

Dem ket-Vektor $\alpha|a\rangle + \beta|b\rangle$ ist der bra-Vektor $\alpha^*\langle a| + \beta^*\langle b|$ zugeordnet. Wir wollen im Weiteren **normierte Zustände** $\langle a|a\rangle = 1$ betrachten.

Operatoren wirken auf Zustände wie gehabt. Galt $\hat{A}\psi_a = \psi_b$, so schreiben wir jetzt

$$\hat{A}|a\rangle = |b\rangle.$$

Da zu $|a\rangle$ und $|b\rangle$ jeweils ein dualer Zustandsvektor $\langle a| = (|a\rangle)^\dagger$ bzw. $\langle b| = (|b\rangle)^\dagger$ gehört, können wir einen adjungierten Operator \hat{A}^\dagger über die Relation

$$\langle b| = \langle a|\hat{A}^\dagger \quad (= (|b\rangle)^\dagger = (\hat{A}|a\rangle)^\dagger = \langle a|\hat{A}^\dagger)$$

definieren, wobei \hat{A}^\dagger von rechts auf den ket-Vektor $\langle a|$ wirkt.

Sei $|f\rangle$ ein Eigenzustand eines **hermiteschen** Operators \hat{f} , $\hat{f}|f\rangle = f|f\rangle$, dann bildet die Gesamtheit der Zustände $|f\rangle = \{|f_l\rangle, l = 1, 2, \dots\}$ (wobei im allgemeinen mehrere $|f\rangle$ einen gemeinsamen Eigenwert F haben können) ein **vollständiges Orthonormalsystem** (im Weiteren werden wir Summen über die verschiedenen Zustände f_l einfach als Summen über f schreiben $\sum_{f_l} \Rightarrow \sum_f$)

$$\begin{aligned} \sum_f |f\rangle\langle f| &= \hat{1} && \text{(Vollständigkeitsrelation)} \\ \langle f|f'\rangle &= \delta_{ff'} && \text{(Orthogonalitätsrelation)} \end{aligned}$$

Liegen die Eigenwerte kontinuierlich, dann muß die Summation durch eine Integration über f ersetzt werden, das Kronecker-Delta wird durch die Delta-Funktion ersetzt.

Wir können nun einen beliebigen Zustand $|a\rangle$ nach $|f_l\rangle$ entwickeln:

$$|a\rangle = \sum_f |f\rangle\langle f|a\rangle = \sum_f \langle f|a\rangle |f\rangle,$$

dies ist die sogenannte “ f -Darstellung” des Zustands a .

Tatsächlich: die Entwicklung eines Zustandes $|a\rangle$ nach einem Vektorensystem $|f\rangle$, $|a\rangle = \sum_f \langle f|a\rangle |f\rangle$, ist vollständig, wenn $\langle a|a\rangle = 1 = \sum_{f,f'} \langle f'|a\rangle \langle f|a\rangle \langle f|f'\rangle = \sum_f \langle a|f\rangle \langle f|a\rangle$, d.h. wenn $\sum_f |f\rangle \langle f| = \hat{1}$.

$\hat{P}_f = |f\rangle \langle f|$ ist ein **Projektionsoperator**, da $|f\rangle \langle f| |a\rangle = \langle f|a\rangle |f\rangle$, d.h. durch Anwendung von \hat{P}_f auf $|a\rangle$ geht $|a\rangle$ in $\langle f|a\rangle |f\rangle$ über. Es gilt $\hat{P}_f^2 = |f\rangle \langle f| f \langle f| = \hat{P}_f$ und $\sum_f |f\rangle \langle f| = \hat{1}$, wenn $|f\rangle$ ein vollständiges Orthonormalsystem bildet.

Wir wollen jetzt den **Zusammenhang mit der bisherigen Darstellung** herstellen. Wir betrachten dazu einige spezielle Darstellungen und beginnen mit der **Ortsdarstellung**, für die gilt (q steht wieder für die Gesamtheit der Koordinaten: $q = (q_1, \dots, q_{3N})$)

$$\hat{q}_i |q\rangle = q_i |q\rangle$$

(oder bei einem Teilchen $\hat{x}_i |\mathbf{x}\rangle = x_i |\mathbf{x}\rangle$). Da die Ortskoordinaten kontinuierlich sind, gilt für die Orthogonalitäts- und Vollständigkeitsrelation:

$$\begin{aligned} \langle q|q'\rangle &= \delta(q - q') & \left(\langle \mathbf{x}|\mathbf{x}'\rangle &= \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \right) \\ \int dq |q\rangle \langle q| &= \hat{1} & \left(\int d^3x |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}'| &= \hat{1} \right). \end{aligned}$$

Wir betrachten jetzt das Skalarprodukt

$$\langle a|b\rangle = \langle a|\hat{1}|b\rangle = \int dq \langle a|q\rangle \langle q|b\rangle = (\psi_a, \psi_b) = \int dq \psi_a^*(q) \psi_b(q)$$

wobei wir im letzten Schritt das Skalarprodukt in der uns bereits bekannten Ortsdarstellung aufgeschrieben haben. Durch Vergleich finden wir

$$\psi_b(q) = \langle q|b\rangle \quad \text{und} \quad \psi_a^*(q) = \langle a|q\rangle$$

Die **Wellenfunktion in Ortsdarstellung zum Zustand a** , $\psi_a(q)$, ist also durch $\langle q|b\rangle$ gegeben. Gleiches gilt für die **Impulsdarstellung**, die aus den Formeln für die Ortsdarstellung durch die Substitution $\hat{q} \rightarrow \hat{p}$ etc. hervorgeht.

Der **Wechsel von einer Darstellung zur anderen** geschieht durch eine **unitäre Transformation**, denn es gilt

$$\psi_a(g) \equiv \langle g|a\rangle = \sum_f \langle g|f\rangle \langle f|a\rangle = \sum_f U_{gf} \psi_a(f) \quad (6.1)$$

und damit (um die adjungierte Matrix zu bilden, nehmen wir das konjugiert komplexe vom Matrixelement $\langle g|f\rangle \equiv U_{gf}$ und vertauschen dann Zeilen und Spalten, d.h. wir erhalten als Matrixelement $\langle f|g\rangle \equiv U_{fg}$.)

$$\underline{\underline{U}}\underline{\underline{U}}^\dagger = \sum_f \langle g|f\rangle \langle f|g'\rangle = \langle g|g'\rangle = \delta_{gg'}$$

wenn $|f\rangle$ und $|g\rangle$ ein vollständiges Orthonormalsystem bilden. Faßt man die $\psi_a(g)$ zu verschiedenen g als Komponenten eines Spaltenvektors $\underline{\psi}_a$ auf, dann läßt sich (6.1) auch als

$$\underline{\psi}_a(g) = \underline{\underline{U}}\underline{\psi}_a(f)$$

schreiben.

Wir wollen hier einen **anschaulichen Vergleich** zwischen der Darstellung eines Vektors $|a\rangle$ in \mathbb{L} und der eines Zustandsvektor \mathbf{a} im \mathbb{R}^n machen.

Ein Vektor \mathbf{a} im \mathbb{R}^n wird durch seine Projektionen a_i auf die Achsen des Koordinatensystem dargestellt, $\mathbf{a} = \sum_{i=1}^n a_i \mathbf{e}_i$, wobei die $\{\mathbf{e}_i\}$ ein kartesisches n -Bein bilden. Der Übergang von diesem Koordinatensystem zu einem neuen n -Bein $\{\mathbf{e}'_i\}$ geschieht über eine **orthogonale** Transformation $\mathbf{e}'_i = \sum_j (\mathbf{e}'_i \cdot \mathbf{e}_j) \cdot \mathbf{e}_j \equiv \sum_j D_{ij} \mathbf{e}_j$. Die Transformation ist tatsächlich orthogonal, da $\mathbf{e}'_i \cdot \mathbf{e}'_j = \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j = \delta_{ij}$

$$\delta_{ij} = \mathbf{e}'_i \cdot \mathbf{e}'_j = \sum_{l,m} D_{il} \mathbf{e}_l \cdot D_{jm} \mathbf{e}_m = \sum_l D_{il} D_{jl} (= \sum_l D_{li} D_{lj}),$$

oder in Matrixform $\underline{\underline{D}}\underline{\underline{D}}^T = \underline{\underline{1}}$, wobei $\underline{\underline{D}}^T$ die transponierte Matrix zu $\underline{\underline{D}}$ darstellt.

Im Hilbertraum wird \mathbf{a} durch $|a\rangle$, \mathbf{e}_i durch $|f\rangle$, $\mathbf{e}_i \mathbf{a} = a_i$ durch $\langle f|a\rangle = \psi_a(f)$ und $\underline{\underline{D}}$ durch die unitäre Matrix $\underline{\underline{U}}$ ersetzt, dies ist in folgender Tabelle zusammengefaßt.

\mathbb{R}^n	\mathbb{L}
$\mathbf{a} = \sum_{i=1}^n a_i \mathbf{e}_i$	$ a\rangle = \sum_f \langle f a\rangle f\rangle = \sum_f \psi_a(f) f\rangle$
\mathbf{e}_i	$ f\rangle$
$a_i = \mathbf{e}_i \mathbf{a}$	$\psi_a(f) = \langle f a\rangle$
$\mathbf{a} = \sum_{i=1}^n a'_i \mathbf{e}'_i$	$ a\rangle = \sum_g \langle g a\rangle g\rangle = \sum_g \psi_a(g) g\rangle$
\mathbf{e}'_i	$ g\rangle$
$a'_i = \mathbf{e}'_i \mathbf{a} = \sum_{j=1}^n \mathbf{e}'_i \cdot \mathbf{e}_j a_j = \sum_j D_{ij} a_j$	$\psi_a(g) = \langle g a\rangle = \sum_f \langle g f\rangle \langle f a\rangle = \sum_f U_{gf} \psi_a(f)$

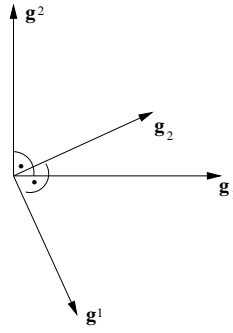
Die Analogie zwischen Vektoren \mathbf{a} im \mathbb{R}^n und Zustandsvektoren $|a\rangle$ in \mathbb{L} wird noch stärker, wenn wir zu **schiefwinkligen Koordinatensystemen** im \mathbb{R}^n übergehen. Hier muß man anstelle der kartesischen Einheitsvektoren zwei Arten von Grundvektoren einführen, die **kovarianten Basisvektoren** $\mathbf{g}_i \equiv \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial x_i}$ und die **kontravarianten Basisvektoren** $\mathbf{g}^i = \nabla x^i$. Der kovariante Basisvektor \mathbf{g}_i schmiegt sich an die Koordinatenlinie x^i an, der kontravariante Basisvektor \mathbf{g}^i steht senkrecht auf der Fläche $x^i = \text{const}$.

(Bei rechtwinkligen Koordinaten gilt $\mathbf{g}_i = \mathbf{g}^i$). Das **Skalarprodukt zwischen ko- und kontravarianten Basisvektoren** ist

$$\mathbf{g}_i \cdot \mathbf{g}^k = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial x_i} \cdot \nabla x^k = \frac{\partial x^k}{\partial x_i} = \delta_i^k = \begin{cases} 1 & \text{für } i = k \\ 0 & \text{für } i \neq k \end{cases}$$

Wir können jetzt $\mathbf{a} = \sum_i a_i \mathbf{g}^i = \sum_i a^i \mathbf{g}_i$ schreiben, wobei

$$a_i = \mathbf{g}_i \mathbf{a}, \quad a^i = \mathbf{g}^i \mathbf{a}, \quad \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \sum_i a_i b^i$$



gilt, und damit

$$a_i = \sum_j \mathbf{g}_i \cdot \mathbf{g}_j a^j = \sum_j g_{ij} a^j, \quad g_{ik} = \mathbf{g}_i \cdot \mathbf{g}_k$$

$$a^i = \sum_j \mathbf{g}^i \cdot \mathbf{g}^j a_j = \sum_j g^{ij} a_j, \quad g^{ik} = \mathbf{g}^i \cdot \mathbf{g}^k.$$

Die **Analogie zum Hilbertraum** ist nun folgende:

Die ket-Vektoren entsprechen der Darstellung eines Vektors im \mathbb{R}^n über die kovarianten Koordinaten, die bra-Vektoren der über kontravarianten Koordinaten (siehe Tabelle). Der Übergang von einem Koordinatensystem zum anderen erfolgt über

$$\mathbf{g}'_i = \sum_k (\mathbf{g}'_i \cdot \mathbf{g}^k) \mathbf{g}_k = \sum_k D_i^k \mathbf{g}_k \quad \text{und} \quad \mathbf{g}'^i = \sum_k (\mathbf{g}'^i \cdot \mathbf{g}_k) \mathbf{g}^k = \sum_k D_k^i \mathbf{g}^k$$

Diese Transformation ist wieder orthogonal, denn

$$\mathbf{g}'_i \mathbf{g}'^j = \delta_{ij} = \sum_{k,l} D_i^k D_l^j \mathbf{g}_k \cdot \mathbf{g}^l = \sum_k D_i^k D_k^j$$

\mathbb{R}^n	\mathbb{L}
$\mathbf{a} = a^i \mathbf{g}_i = a^{ij} \mathbf{g}'_i$	$ a\rangle = \sum_f \langle f a\rangle f\rangle = \sum_g \langle g a\rangle g\rangle$
$\mathbf{a} = a_i \mathbf{g}^i = a'_i \mathbf{g}'^i$	$\langle a = \sum_f \langle a f\rangle \langle f = \sum_g \langle a g\rangle \langle g $
$\mathbf{g}_i, \mathbf{g}'_i$	$ f\rangle, g\rangle$
$\mathbf{g}^i, \mathbf{g}'^i$	$\langle f , \langle g $
$a^i = \mathbf{g}^i \mathbf{a}$	$\langle f a\rangle = \psi_a(f)$
$a_i = \mathbf{g}_i \mathbf{a}$	$\langle a f\rangle = \psi_f(a)$
$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \sum_i a_i b^i = \sum_i a^i b_i$	$\langle a b\rangle = \sum_f \langle a f\rangle \langle f b\rangle = \sum_f \langle f a\rangle \langle b f\rangle$
$a'_i = \mathbf{g}'_i \mathbf{a} = \sum_{j=1}^n \mathbf{g}'_i \mathbf{g}^j a_j = \sum_j D_i^j a_j$	$\langle g a\rangle = \sum_f \langle g f\rangle \langle f a\rangle$

Um von der **Orts-** zur **Impulsdarstellung** überzugehen betrachten wir der Einfachheit halber zunächst ein Teilchen in drei Dimensionen. Dann gilt für die Wellenfunktion eines **freien** Teilchens mit dem festen Impuls \mathbf{p} in der Ortsdarstellung (vergleiche 3.2, $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$)

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle = \psi_p(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}/\hbar}$$

(eine zusätzliche Zeitabhängigkeit würde hier nur einen Phasenfaktor hinzufügen, den wir der Einfachheit halber weglassen, d.h. wir betrachten im Folgenden einen festen Zeitpunkt $t = 0$). Hieraus folgt

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle^* = \langle \mathbf{p} | \mathbf{x} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-i\mathbf{p}\mathbf{x}/\hbar}.$$

Die Wellenfunktion in Impulsdarstellung folgt aus der Ortsdarstellung nach der Beziehung

$$\psi_a(\mathbf{p}) \equiv \langle \mathbf{p} | a \rangle = \langle \mathbf{p} | \hat{1} | a \rangle = \int d^3x \langle \mathbf{p} | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | a \rangle = \int d^3x \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-i\mathbf{p}\mathbf{x}/\hbar} \psi_a(\mathbf{x}),$$

dies ist genau die Transformation, die wir früher (in Kapitel 2.4) betrachtet haben (damals hatten wir $\psi_a(\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x})$ und $\psi_a(\mathbf{p}) = \tilde{\psi}(\mathbf{p})$ bezeichnet). Die Verallgemeinerung auf mehrere Teilchen ist offensichtlich. Es gilt

$$\langle q | p \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3N/2}} e^{(i/\hbar) \sum_{i=1}^{3N} q_i p_i}.$$

Analog können wir zu anderen Darstellungen übergehen. Um zur **Energiedarstellung** zu kommen, betrachten wir die **Eigenfunktion von \hat{H}** zum Eigenwert E_n in **Ortsdarstellung** $\hat{H} | E_n \rangle = E_n | E_n \rangle$:

$$\langle q | E_n \rangle = \psi_n(q), \quad \psi_n^*(q) = \langle E_n | q \rangle$$

und damit folgt für einen allgemeinen Zustand $|q\rangle$ in der Energiedarstellung

$$\psi_a(E_n) \equiv \langle E_n | a \rangle = \int dq \langle E_n | q \rangle \langle q | a \rangle = \int dq \psi_n^*(q) \psi_a(q)$$

und invers

$$\psi_a(q) \equiv \langle q | a \rangle = \sum_n \langle q | E_n \rangle \langle E_n | a \rangle = \sum_n \psi_n(q) \psi_a(E_n) = \sum_n \psi_q^*(n) \psi_a(n).$$

Sind Eigenwerte E_n entartet, dann läuft n auch über die verschiedenen Zustände zum gleichen Energieeigenwert.

Wir gehen noch einige weitere Beispiele an.

Die Kugelfunktionen $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ sind die Ortsdarstellungen der Eigenzustände $|l, m\rangle$ von \hat{I}^2 und \hat{I}_z , $\hat{I}^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle$, $\hat{I}_z |l, m\rangle = \hbar l_z |l, m\rangle$:

$$Y_{lm}(\tilde{\theta}, \varphi) \equiv \langle \theta \varphi | lm \rangle = \left\langle \frac{\mathbf{x}}{|\mathbf{x}|} | lm \right\rangle.$$

Bei der **Besetzungszahldarstellung** des harmonischen Oszillators ist der Zustand durch $|n\rangle$ gegeben:

$$\hat{n} |n\rangle = n |n\rangle, \quad \langle \mathbf{x} | n \rangle = \psi_n(\mathbf{x})$$

Weitere Beispiele werden wir in den Übungen betrachten.

6.2 Verschiedene Darstellungen für Operatoren

So wie man $|a\rangle$ nach einem vollständigen Orthogonalsystem entwickeln kann

$$|a\rangle = \sum_f \langle f|a\rangle |f\rangle$$

kann man auch einen **beliebigen Operator** nach einem vollständigen System von Operatoren $|f\rangle\langle f'|$ entwickeln (f -Darstellung).

Wir beginnen mit der darstellungsfreien Relation

$$|b\rangle = \hat{A}|a\rangle,$$

die wir zunächst in “ f -Darstellung” betrachten.

$$\langle f|b\rangle = \psi_b(f) = \sum_{f'} \langle f|\hat{A}|f'\rangle \langle f'|a\rangle = \sum_{f'} A_{ff'} \psi_a(f').$$

Nach Multiplikation von links mit $|f\rangle$ und Summation über f folgt

$$\sum_f |f\rangle\langle f|b\rangle = \sum_{f,f'} |f\rangle\langle f|\hat{A}|f'\rangle \langle f'|a\rangle$$

oder (wegen $\sum_f |f\rangle\langle f| = \hat{1}$)

$$|b\rangle = \sum_{f,f'} |f\rangle A_{ff'} \langle f'|a\rangle = \hat{A}|a\rangle$$

und damit

$$\hat{A} = \sum_{m,n} A_{mn} |f_m\rangle\langle f_n| \equiv \sum_{f,f'} A_{ff'} |f\rangle\langle f'|, \quad A_{ff'} = \langle f|\hat{A}|f'\rangle.$$

Die **Gesamtheit der Matrizen $A_{ff'}$ stellt den Operator \hat{A} in f -Darstellung** dar.

Um von einer Darstellung zur anderen überzugehen müssen auch die Operatoren transformiert werden.

Die g -Darstellung des Operators \hat{A} folgt aus der f -Darstellung durch die Transformation (man schiebt einfach die Vollständigkeitsrelation zweimal ein)

$$A_{gg'} = \langle g|\hat{A}|g'\rangle = \sum_{f,f'} \langle g|f\rangle \langle f|\hat{A}|f'\rangle \langle f'|g'\rangle = \sum_{f,f'} \psi_g^*(f) A_{ff'} \psi_{g'}(f')$$

oder in Matrixform

$$\underline{\underline{A}}(g) = \underline{\underline{U}} \underline{\underline{A}}(f) \underline{\underline{U}}^\dagger$$

$$\begin{aligned} \underline{\underline{U}} &= \langle g|f \rangle = U_{gf} \\ \underline{\underline{U}}^\dagger &= \langle f|g \rangle = U_{fg}^* \end{aligned}$$

wobei der Darstellungswechsel durch die unitäre Transformation ($U_{gf} = \langle g|f \rangle$, $\underline{\underline{U}} \underline{\underline{U}}^\dagger = 1$)

$$\underline{\underline{\psi}}(g) = \underline{\underline{U}} \underline{\underline{\psi}}(f)$$

gegeben ist.

Der Wechsel von einer Darstellung zur anderen, bei der die unabhängigen Variablen gewechselt werden, entspricht einer **kanonischen Transformation**. Hierbei bleiben das **Skalarprodukt zweier Vektoren**,

$$\begin{aligned} \langle a|b \rangle &= \sum_f \langle a|f \rangle \langle f|b \rangle \\ &= \sum_{f,g,g'} \langle a|g \rangle \langle g|f \rangle \langle f|g' \rangle \langle g'|b \rangle = \sum_g \langle a|g \rangle \langle g|b \rangle = \langle a|b \rangle, \end{aligned}$$

die **algebraischen Beziehungen zwischen Vektoren und Operatoren**, sowie die **Spur** invariant (siehe Hausübungen).

Um zur **Darstellung der Operatoren** selbst zu kommen, beginnen wir mit den Operatoren, deren Eigenzustände Basiszustände der entsprechenden Darstellung sind.

Wir beginnen mit der **Ortsdarstellung**, deren Basiszustände Eigenzustände des Operators \hat{q}_i sind (\hat{x}_i für ein Teilchen in $d = 3$). Es gilt

$$\hat{q}_i |q\rangle = q_i |q\rangle$$

und damit für das Matrixelement ($q = (q_1, \dots, q_{3N})$) des Operators im Ortsdarstellung

$$\langle q|\hat{q}_i|q'\rangle = q_i \langle q|q'\rangle = q_i \delta(q - q').$$

Als nächstes betrachten wir den **Impulsoperator** in **Ortsdarstellung** und benutzen die Relation $\int dp |p\rangle \langle p| = \hat{1}$

$$\langle q|\hat{p}_i|q'\rangle = \int dp \langle q|\hat{p}_i|p\rangle \langle p|q'\rangle = \int dp \langle q|p\rangle p_i \langle p|q'\rangle.$$

$\langle q|p\rangle$ ist die Ortsdarstellung des Zustands freier Teilchen mit dem Impulsvektor $p = (p_1, \dots, p_{3N})$. Es gilt (Siehe Kapitel 2.9)

$$\psi_p(q) = \langle q|p\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{n/2}} e^{i \sum_{i=1}^n p_i q_i / \hbar}$$

und damit

$$p_i \langle q|p\rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_i} \langle q|p\rangle$$

$$\langle q|\hat{p}_i|q'\rangle = \int dp \langle p|q'\rangle \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_i} \langle q|p\rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_i} \delta(q - q').$$

Dies ist die **Ortsdarstellung des Impulsoperators**.

Wir betrachten jetzt noch einmal explizit die Relation $|b\rangle = \hat{p}_i|a\rangle$ in Ortsdarstellung. Dazu multiplizieren wir von links mit $\langle q|$ und fügen $\int dq' |q'\rangle \langle q'| = \hat{1}$ ein

$$\begin{aligned} \psi_b(q) \equiv \langle q|b\rangle &= \int dq' \langle q|\hat{p}_i|q'\rangle \langle q'|a\rangle = \int dq' \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_i} \delta(q - q') \psi_a(q') \\ &= -\frac{\hbar}{i} \int dq' \left(\frac{\partial}{\partial q'_i} \delta(q - q') \right) \psi_a(q') = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_i} \psi_a(q), \end{aligned}$$

dies ist das bekannte Resultat.

Geht man zu einer anderen Darstellung über, muß man die Operatoren transformieren. Als **Beispiel** berechnen wir Orts- und Impulsoperatoren in der Impulsdarstellung in $d = 3$ für ein Teilchen (wir hätten auch N Teilchen betrachten können, die Rechnung ist völlig analog). Wir beginnen mit dem Impulsoperator

$$\langle \mathbf{p}|\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{p}'\rangle = \mathbf{p} \langle \mathbf{p}|\mathbf{p}'\rangle = \mathbf{p} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'),$$

d.h. der Impulsoperator ist in der Impulsdarstellung eine kontinuierliche Diagonalmatrix. Analog erhält man aus

$$\langle \mathbf{p}|\hat{\mathbf{x}}|\mathbf{p}'\rangle = \int d^3x \langle \mathbf{p}|\hat{\mathbf{x}}|\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}|\mathbf{p}'\rangle$$

mit $\langle \mathbf{x}|\mathbf{p}\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp(i\mathbf{p}\mathbf{x}/\hbar)$ für die Ortsdarstellung eines freien Teilchens

$$\mathbf{x} \langle \mathbf{x}|\mathbf{p}'\rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}'} \langle \mathbf{x}|\mathbf{p}'\rangle$$

und damit

$$\langle \mathbf{p}|\hat{\mathbf{x}}|\mathbf{p}'\rangle = \frac{\hbar}{i} \int d^3x \langle \mathbf{p}|\mathbf{x}\rangle \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}'} \langle \mathbf{x}|\mathbf{p}'\rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}'} \langle \mathbf{p}|\mathbf{p}'\rangle = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}').$$

D.h. der Operator im Impulsdarstellung ist durch eine unendliche "kontinuierliche" Diagonalmatrix mit den Matrixelementen $-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}$ gegeben. Die explizite Gestalt der

Operatoren hängt also, wie wir schon früher gesehen haben, von der Darstellung ab. (Beachten Sie den Unterschied im Vorzeichen zum Impulsoperator in Ortsdarstellung.)

Wir betrachten hier noch die **Energiedarstellung**. Mit $\hat{H}|E_n\rangle = E_n|E_n\rangle$ folgt für die Matrixelemente von \hat{A}

$$A_{mn} = \langle E_m | \hat{A} | E_n \rangle = \int dq dq' \langle E_m | q \rangle \langle q | \hat{A} | q' \rangle \langle q' | E_n \rangle = \int dq dq' \psi_m^*(q) A_{qq'} \psi_n(q')$$

Die Gesamtheit aller Größen A_{mn} stellt den Operator in Energiedarstellung dar.

Vorsicht: bei Entartung charakterisiert jeder Index n, m mehrere Quantenzahlen!

Für hermitesche Operatoren gilt $A_{mn} = A_{nm}^*$. Im Spezialfall $\hat{A} = \hat{H}$ gilt $A_{mn} = E_n \delta_{nm}$.

Schreiben wir die Gesamtheit der $\langle E_n | a \rangle$ als **Spaltenvektor**, dann kann die Gleichung $|b\rangle = \hat{A}|a\rangle$ als

$$\begin{pmatrix} \langle E_1 | b \rangle \\ \langle E_2 | b \rangle \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} & \\ & A_{mn} \\ & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle E_1 | a \rangle \\ \langle E_2 | a \rangle \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}$$

geschrieben werden.

$$\begin{aligned} \hat{A} &= \sum_{f, f'} A_{ff'} |f\rangle \langle f'| \\ \hat{A}^\dagger &= \sum_{f, f'} A_{ff'} |f'\rangle \langle f| \end{aligned}$$

Wir schauen uns abschließend noch die Darstellung der Drehimpulsoperatoren $\hat{\mathbf{I}}, \hat{I}^2, \hat{I}_\pm$ in der $|l, m\rangle$ -Darstellung an

$$\begin{aligned} \hat{I}^2 |l, m\rangle &= \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle \\ \hat{I}_z |l, m\rangle &= \hbar m |l, m\rangle \\ (\hat{I}^2)_{lml'm'} &= \hbar^2 l(l+1) \delta_{ll'} \delta_{mm'} \\ (\hat{I}_z)_{lml'm'} &= \hbar m \delta_{ll'} \delta_{mm'} \end{aligned}$$

etc., das sind genau die Matrizen, die wir in Kapitel 4.2 ausgerechnet haben.

6.3 Unitäre Transformationen, Heisenberg– und Dirac–Bild

Die bisher betrachtete Matrix \underline{U} stellt **keinen Operator** dar, da die Darstellungsmatrix eines Operator innerhalb einer bestimmten Darstellung definiert ist, während die Transformationsmatrix auf zwei Darstellungen beruht ($(\underline{U})_{gf} = \langle g|f\rangle$), i.a. ist die Matrix \underline{U} **nicht quadratisch**.

Es gibt aber einen wichtigen Sonderfall, in dem ein eindeutiger Zusammenhang zwischen den Basisvektoren der ersten und zweiten Darstellung besteht, nennen wir sie $|f\rangle$, $|\bar{f}\rangle$ und sei \hat{U} der durch $(|f\rangle = \{|f_l\rangle, l = 1, 2, \dots\}, |\bar{f}\rangle = \{|\bar{f}_l\rangle, l = 1, 2, \dots\})$

$$|f_l\rangle = \hat{U}|\bar{f}_l\rangle, \quad \langle \bar{f}_l|\hat{U}^\dagger = \langle f_l|$$

definierte lineare Operator. Es gilt nun

$$\hat{U} = \hat{U} \sum_l |\bar{f}_l\rangle\langle \bar{f}_l| = \sum_l |f_l\rangle\langle f_l|.$$

Mit der Vollständigkeitsrelation gilt $\sum_l |\bar{f}_l\rangle\langle \bar{f}_l|\hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger = \sum_l |\bar{f}_l\rangle\langle f_l|$ und damit

$$\begin{aligned} \hat{U}^\dagger\hat{U} &= \sum_l \sum_k |\bar{f}_l\rangle\langle f_l|f_k\rangle\langle \bar{f}_k| = \sum_l |\bar{f}_l\rangle\langle \bar{f}_l| = \hat{1} \\ \hat{U}\hat{U}^\dagger &= \sum_l \sum_{f_k} |f_l\rangle\langle \bar{f}_l|\bar{f}_k\rangle\langle f_k| = \hat{1}. \end{aligned}$$

Also ist \hat{U} ein **unitärer Operator**. Man kann jetzt, statt ein neues Basissystem einzuführen (von $|f\rangle$ zu $|\bar{f}\rangle = \hat{U}^\dagger|f\rangle$), auch die **Vektoren** und **Operatoren des Raumes selbst** transformieren:

$$\begin{aligned} |a'\rangle &= \hat{U}|a\rangle = \sum_l |f_l\rangle\langle \bar{f}_l|a\rangle, \quad |a\rangle = \hat{U}^\dagger|a'\rangle = \sum_l |\bar{f}_l\rangle\langle f_l|a'\rangle \\ \hat{A}' &= \hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger. \end{aligned}$$

Ist $|b\rangle = \hat{A}|a\rangle$, dann folgt $|b'\rangle = \hat{U}|b\rangle = \hat{U}\hat{A}|a\rangle = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger\hat{U}|a\rangle = \hat{A}'|a'\rangle$, d.h. die so transformierten Vektoren $|a'\rangle$, $|b'\rangle$ etc. werden durch die transformierten Operatoren \hat{A}' ineinander überführt.

Man kann leicht zeigen, daß bei **unitären Transformationen** $\hat{F}' = \hat{U}\hat{F}\hat{U}^\dagger$ **folgende Eigenschaften der Operatoren erhalten** bleiben (wir zeigen das in den Übungen)

- (i) die Linearität und Hermitezität;
- (ii) die Vertauschungsregeln (wenn $[\hat{F}, \hat{K}] = i\hat{M}$, dann folgt $[\hat{F}', \hat{K}'] = i\hat{M}'$);

- (iii) das Eigenwertsspektrum, d.h. mit $\hat{F}|\psi\rangle = F|\psi\rangle$ folgt $\hat{F}'|\psi'\rangle = F|\psi'\rangle$ wenn $|\psi'\rangle = \hat{U}|\psi\rangle$;
- (iv) algebraische Beziehungen zwischen den Operatoren, z.B. $\hat{F} = \hat{K} + \hat{M}$ oder $\hat{F} = \hat{K}\hat{M}$;
- (v) die Matrixelemente der Operatoren

$$\langle a|\hat{F}|b\rangle = \underbrace{\langle a|\hat{U}^\dagger}_{\langle a'|} \underbrace{\hat{U}\hat{F}\hat{U}^\dagger}_{\hat{F}'} \underbrace{\hat{U}|b\rangle}_{|b'\rangle} = \langle a'|\hat{F}'|b'\rangle$$

Eine weitere Gruppe von unitären Transformationen, bei denen die unabhängigen Variablen nicht gewechselt werden, sind **Phasen–Transformationen** von der Form $\hat{U} = \exp(i\hat{\alpha})$, wobei $\hat{\alpha}$ ein hermitescher Operator ist. (Solche Transformationen hatten wir schon kennengelernt, als wir Translationen und Rotationen betrachtet haben.)

Bisher haben wir unitäre Transformationen betrachtet, die die Zeit nicht explizit enthalten. Durch die unitäre Transformationen bleibt der Zustand des Systems unverändert.

Wir zeigen jetzt, **daß** auch die **zeitliche Änderung von Zuständen durch unitäre Transformationen ausgedrückt wird**. Im bisher betrachteten **Schrödingerbild** galt

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

wobei $|\psi(t)\rangle$ der Zustandsvektor des quantenmechanischen Systems zur Zeit t ist, ($\langle q|\psi(t)\rangle = \psi(q, t)$). Wir schreiben jetzt

$$|\psi(t)\rangle = \hat{S}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$$

mit $\hat{S}(t_0, t_0) = 1$. Wegen der Erhaltung der Norm gilt $\boxed{\hat{S}^\dagger(t, t_0) \hat{S}(t, t_0) = 1}$. Tatsächlich

$$\langle \hat{S}\psi | \hat{S}\psi \rangle = \langle \psi | \hat{S}^\dagger \hat{S} \psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle.$$

Nach Einsetzen in die Schrödingergleichung folgt

$$\left(i\hbar \frac{d\hat{S}(t, t_0)}{dt} - \hat{H}(t) \hat{S}(t, t_0) \right) |\psi(t_0)\rangle = 0 \rightarrow \boxed{i\hbar \frac{d\hat{S}(t, t_0)}{dt} = \hat{H}(t) \hat{S}(t, t_0)} \quad (6.2)$$

Falls \hat{H} nicht explizit von der Zeit abhängt, folgt als Lösung

$$\boxed{\hat{S}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)}}.$$

Hängt \hat{H} von t ab, kann man die Gleichung (6.2) für infinitesimale Zeitdifferenzen lösen, man erhält dann $\hat{S}(t + dt, t) \approx \exp(-\frac{i}{\hbar} H(t) dt)$ und schreibt dann $\hat{S}(t, t_0)$ als das Produkt solcher Terme.

Für zwei nicht-kommutierende Operatoren gilt $e^{\hat{A}} \cdot e^{\hat{B}} \neq e^{\hat{A} + \hat{B}}$. Wenn wir die Lösung für $S(t, t_0)$ als unendliches Produkt

$$\begin{aligned} S(t, t_0) &= \hat{S}(t, t - dt) \hat{S}(t - dt, t - 2dt) \dots \hat{S}(t - (n-1)dt, t - ndt) \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-dt)dt} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-2dt)dt} \dots e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-ndt)dt} \\ &= \prod_{l=1}^n e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-lt)dt}, \quad t - ndt = t_0 \end{aligned}$$

aufschreiben, so können wir zunächst deshalb **nicht** die Terme im Exponenten einfach addieren. Wir führen jetzt für **zeitabhängige Operatoren** den **Dysonischen Zeitordnungsoperator** \hat{T}_t ein, der die Terme rechts von ihm nach links aufsteigenden Zeiten ordnet

$$\hat{T}_t \hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2) = \begin{cases} \hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2) & \text{falls } t_1 > t_2 \\ \hat{B}(t_2) \hat{A}(t_1) & \text{falls } t_2 > t_1 \end{cases}.$$

Wir können deshalb $e^{\hat{A}(t_1)} e^{\hat{B}(t_2)}$ als

$$e^{\hat{A}(t_1)} e^{\hat{B}(t_2)} = T_t e^{\hat{A}(t_1) + \hat{B}(t_2)}, \quad t_1 > t_2$$

schreiben, denn

$$\begin{aligned} T_t \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} (\hat{A}(t_1) + \hat{B}(t_2))^k &= T_t \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \sum_{l=0}^k \binom{k}{l} \hat{A}^l(t_1) \hat{B}^{k-l}(t_2) \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{l=0}^k \frac{1}{l!} \hat{A}^l(t_1) \frac{1}{(k-l)!} \hat{B}^{k-l}(t_2) \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{l!} \hat{A}^l(t_1) \frac{1}{m!} \hat{B}^m(t_2) \\ &= e^{\hat{A}(t_1)} e^{\hat{B}(t_2)}. \end{aligned}$$

Kompakt läßt sich daher $\hat{S}(t, t_0)$ in der Form

$$\hat{S}(t, t_0) = \hat{T}_t e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}(t') dt'}$$

schreiben.

$\hat{S}(t, t_0)$ (bzw. die zugehörige Matrix $\langle f | \hat{S} | f' \rangle$, $\langle f | \psi(t) \rangle = \sum_{f'} \langle f | \hat{S}(t) | f' \rangle \langle f' | \psi(0) \rangle$) wird als “**S**”- oder “**Streu**”-**Matrix** bezeichnet, diese ist wieder **unitär**. Man nennt die bisher gebrauchte Darstellung, bei der die **Operatoren zeitunabhängig**

(falls keine äußere Zeitabhängigkeit vorliegt) und die **Zustände zeitabhängig** waren, das sogenannte **Schrödingerbild**.

Wir machen jetzt mit $\hat{S}(t, 0)$ eine unitäre Transformation

$$|\psi_{\text{H}}\rangle = \hat{S}^\dagger(t, 0)|\psi_{\text{S}}(t)\rangle = |\psi_{\text{S}}(0)\rangle,$$

wobei $|\psi_{\text{S}}(t)\rangle$ der Zustand im Schrödingerbild ist. Entsprechend müssen die Operatoren transponiert werden, wir benutzen hier die allgemeinen Transformationsgesetze für Operatoren:

$$\hat{F}_{\text{H}}(t) = \hat{S}^\dagger(t, 0) \hat{F}_{\text{S}} \hat{S}(t, 0).$$

$|\psi_{\text{H}}\rangle$ und $\hat{F}_{\text{H}}(t)$ sind die Zustände und die Operatoren in **Heisenberg–Bild**. Im Heisenberg–Bild sind die **Zustände zeitunabhängig**, die **Operatoren zeitabhängig**.

Man erhält also das Heisenberg–Bild, in dem man den Vektorraum des Schrödingerbilds als Ganzes so bewegt, daß der Zustand des Quantensystems durch einen unveränderlichen Vektor $|\psi_{\text{H}}\rangle$ beschrieben wird. Dagegen werden die verschiedenen physikalischen Größen durch zeitabhängige Operatoren (Observable) dargestellt.

Es gilt

$$\frac{d\hat{F}_{\text{H}}(t)}{dt} = \left(\frac{\partial \hat{S}^\dagger}{\partial t} \hat{F}_{\text{S}} \hat{S} + \hat{S}^\dagger \frac{\partial \hat{F}_{\text{S}}}{\partial t} \hat{S} + \hat{S}^\dagger \hat{F}_{\text{S}} \frac{\partial \hat{S}}{\partial t} \right).$$

$\hat{S}^\dagger \frac{\partial \hat{F}_{\text{S}}}{\partial t} \hat{S} \equiv \frac{\partial}{\partial t} \hat{F}_{\text{H}}(t)$ und damit bekommen wir die **Heisenberg–Gleichung**

$$\frac{d\hat{F}_{\text{H}}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}_{\text{H}}(t)] + \frac{\partial}{\partial t} \hat{F}_{\text{H}}(t).$$

Diese Operator–Gleichung sieht wie die Operatorform des Ehrenfestschen Satzes aus, hat aber einen etwas anderen Sinn. Beim Ehrenfestschen Satz stand auf der linken Seite der Operator \hat{F} zur physikalischen Größe \dot{F} , während hier auf der linken Seite die Zeitableitung des Operators der Größe F selbst steht.

Betrachten wir allerdings die Änderung des Erwartungswerts $\frac{d}{dt} \langle \hat{F} \rangle$, dann folgt im Heisenberg–Bild (in dem die Zustandsvektoren zeitunabhängig sind) aus der Heisenberg–Gleichung sofort

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{F} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{F}, \hat{H}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \right\rangle$$

und dies ist wieder die Beschreibung der zeitlichen Änderung eines Mittelwerts.

Neben dem Schrödinger– und Heisenberg–Bild spielt noch das **Wechselwirkungs–Bild** (Dirac–Darstellung) eine wichtige Rolle, insbesondere bei Problemen, die mit Störungstheorie zu behandeln sind. Wir schreiben

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1(t)$$

und betrachten die unitäre Transformationen

$$\begin{aligned} |\psi_D(t)\rangle &= e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} |\psi_S(t)\rangle \\ \hat{F}_D(t) &= e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{F}_S(t) e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}. \end{aligned}$$

Diese genügen den Bewegungsgleichungen

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_D(t)\rangle &= \hat{H}_{1,D}(t) |\psi_D(t)\rangle \\ \frac{d}{dt} \hat{F}_D(t) &= \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_0, \hat{F}_D(t)] + \frac{\partial}{\partial t} \hat{F}_D(t). \end{aligned}$$

Diese Darstellung nimmt also eine gewisse Zwischenstellung zwischen Schrödinger- und Heisenberg-Bild ein, und spielt in der Vielteilchenphysik eine große Rolle. Die Zustände bewegen sich aufgrund der Störanteile von \hat{H} , die Operatoren aufgrund des freien Teils.

6.4 Axiome der Quantenphysik, Dichtematrix

Unsere bisher angestellten Untersuchungen lassen uns die Grundlagen der Quantenmechanik in folgenden Axiome zusammenfassen:

- I. Der Zustand eines Systems wird durch einen Zustandsvektor $|\psi\rangle$ im Hilbertraum \mathbb{L} beschrieben.
- II. Die Observablen werden durch hermitesche Operatoren \hat{A} dargestellt.
- III. Mittelwerte von Observablen sind durch $\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$ gegeben.
- IV. Die Zeitentwicklung eines Zustands wird durch die Schrödingergleichung

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

bestimmt.

- V. Bei der Messung von A an einem System im Zustand $|\psi\rangle = \sum_n C_n |n\rangle$ mit $\hat{A}|n\rangle = A_n|n\rangle$, geht das System in den Zustand $|n\rangle$ über falls A_n gemessen wurde (Reduktion des Zustands), d.h. vor und nach Messung ist die Wellenfunktion verschieden. Die Änderung der Wellenfunktion ist nicht kausal (verschiedene Ergebnisse möglich).

Wenn der Zustandsvektor nach einer Messung genau bekannt ist, nennt man dies eine ideale Messung. Nach einer idealen Messung befindet sich das System in einem Eigenzustand zum Operator der gemessenen Größe.

Wir wollen im folgenden die quantenmechanische Beschreibung noch etwas verallgemeinern. Diese Verallgemeinerung wird insbesondere in der **Statistischen Physik** eine zentrale Rolle spielen.

Wir beginnen mit einer etwas modifizierten Darstellung des Erwartungswerts eines quantenmechanischen Systems im Zustand $|\psi\rangle = \sum_n C_n |\psi_n\rangle$, $\hat{A}|\psi_n\rangle = A_n |\psi_n\rangle$, und schreiben den Erwartungswert $\langle \hat{F} \rangle$ als

$$\langle \hat{F} \rangle = \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle = \text{Sp}(\hat{\rho}_0 \hat{F}),$$

wobei der **Dichteoperator** $\hat{\rho}_0$ des **“reinen” Zustands** $|\psi\rangle$ durch

$$(a) \quad \hat{\rho}_0 = |\psi\rangle\langle\psi| = \sum_{n,m} C_n C_m^* |\psi_n\rangle\langle\psi_m|$$

gegeben ist. Die Operation $\text{Sp} \equiv \text{Spur}$ ist durch $\text{Sp} \hat{A} = \sum_f \langle f | \hat{A} | f \rangle$ erklärt, wobei die Gesamtheit der $|f\rangle$ ein vollständiges Orthonormalsystem bilden, $\sum_f |f\rangle\langle f| = 1$. Die Spur ist aber unabhängig von der Wahl des VONS, mit der sie gebildet wird. Tatsächlich,

$$\text{Sp} \hat{A} = \sum_f \langle f | \hat{A} | g \rangle = \sum_{f,g} \langle f | \hat{A} | g \rangle \langle g | f \rangle = \sum_{f,g} \langle g | f \rangle \langle f | \hat{A} | g \rangle = \sum_g \langle g | \hat{A} | g \rangle.$$

Daher gilt

$$\begin{aligned} \text{Sp}(\hat{\rho}_0 \hat{F}) &= \sum_f \langle f | \hat{\rho}_0 \hat{F} | f \rangle = \sum_f \langle f | \psi \rangle \langle \psi | \hat{F} | f \rangle \\ &= \sum_f \langle \psi | \hat{F} | f \rangle \langle f | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle \quad \text{q.e.d.} \end{aligned}$$

$\hat{\rho}_0$ fällt offenbar mit dem früher eingeführten Projektionsoperator \hat{P}_ψ auf den Zustand $|\psi\rangle$ zusammen. Ein reiner Zustand ist dadurch charakterisiert, daß

$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$$

erfüllt ist.

Wir wollen als nächstes annehmen, daß das System aus **2 Teilsystemen** 1,2 besteht, mit orthonormierten Zuständen $|1, f\rangle$, $|2, g\rangle$. Ein allgemeiner Zustand kann in der Form

$$|\psi\rangle = \sum_{f,g} C_{f,g} |1, f\rangle |2, g\rangle$$

beschrieben werden, wobei $C_{f,g}$ komplexe Zahlen sind, die den Zustand $|\psi\rangle$ festlegen (insgesamt $2N_1N_2 - 1$). $C_{f,g} = \langle 2, g | \langle 1, f | \psi \rangle$. Wir haben es hier ja mit zwei

Zustandsräumen \mathbb{L}_1 , \mathbb{L}_2 zu tun, die von den Vektoren $|1, f\rangle$ bzw. $|2, g\rangle$ aufgespannt werden und die, bei endlicher Dimensionalität die Dimension N_1 und N_2 haben mögen. Die Vektoren des **direkten Produkts** $|1, f\rangle|2, g\rangle$ spannen dann einen $N_1 \cdot N_2$ -dimensionalen Raum $\mathbb{L}_1 \times \mathbb{L}_2 = \mathbb{L}$ auf. Die Dichtematrix für den reinen Zustand $|\psi\rangle$ nimmt jetzt die Form

$$\hat{\rho}_0 = |\psi\rangle\langle\psi| = \sum_{f, f', g, g'} C_{f, g} C_{f', g'}^* |1, f\rangle |2, g\rangle \langle 2, g'| \langle 1, f'|$$

an, wobei aus der Normierungsbedingung für $|\psi\rangle$ $\sum_{f, g} |C_{f, g}|^2 = 1$ folgt.

Wir wollen weiter annehmen, daß wir nur Erwartungswerte von Observablen berechnen, die zum Subsystem 1 gehören (die entsprechenden Operatoren werden nur über Koordinaten des Subsystems 1 ausgedrückt und wirken deshalb auf die Zustände $|1, f\rangle$).

Wir können dann $\langle \hat{F}(1) \rangle$ wieder in die Form

$$\langle \hat{F} \rangle = \text{Sp } \hat{\rho}_0 \hat{F}(1) = \text{Sp}_1 [(\text{Sp}_2 \hat{\rho}_0) \hat{F}(1)] \equiv \text{Sp}_1 (\hat{\rho} \hat{F}(1))$$

umschreiben, indem wir die Spur über das Subsystem 2 ausführen. Hier ist (wir führen die Spur mit einem beliebigen VONS des Subsystems 2 aus)

$$\hat{\rho} \equiv \text{Sp}_2 \hat{\rho}_0 = \sum_{f, f', g, g', g''} C_{f, g} C_{f', g'}^* \langle 2, g'' | 2, g \rangle |1, f\rangle \langle 1, f'| \langle 2, g' | 2, g'' \rangle$$

der Dichteoperator des Systems 1:

$$(b) \quad \hat{\rho} = \sum_{f, f', g} C_{f, g} C_{f', g}^* |1, f\rangle \langle 1, f'| = \sum_{f, f'} \rho_{f, f'} |1, f\rangle \langle 1, f'|.$$

Dieser hat aber **nicht mehr** die Struktur von $\hat{\rho}_0$, da die Koeffizienten über g summiert werden, dadurch ist ein Teil der Information über Subsystem 2 verloren gegangen. Tatsächlich: stellt man sich die $C_{f, g}$ als Komponenten von komplexen Vektoren \mathbf{C}_f vor, dann sind die verbleibenden $\rho_{f, f'}$ gerade deren Skalarprodukte $\rho_{f, f'} = \mathbf{C}_f \mathbf{C}_{f'}^*$, diese hängen nur von der relativen Orientierung der Vektoren zueinander ab, nicht mehr von ihrer absoluten Orientierung im Raum.

Schließlich betrachten wir den Fall eines **Ensembles** von $\mathcal{N} \gg 1$ **identischen Systemen**, von dem sich jeweils n_i Repräsentanten im Zustand $|\psi_i\rangle$ befinden, mit $\sum_i n_i = \mathcal{N}$. Solche Ensemble spielen in der **Statistischen Mechanik** eine zentrale Rolle. Da $p_i = n_i/\mathcal{N}$ (reell) die Wahrscheinlichkeit dafür ist, einen Repräsentanten im Zustand $|\psi_i\rangle$ zu finden, erhält man für den Ensemble-Mittelwert der Größe F

$$\langle \hat{F} \rangle = \sum_i p_i \langle \psi_i | \hat{F} | \psi_i \rangle = \text{Sp} (\hat{\rho} \hat{F})$$

mit dem Dichteoperator für das Ensemble ($\sum_i p_i = 1$)

(c)

$$\hat{\rho} = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|.$$

Die $|\psi_i\rangle$ sollen normiert sein, sind aber nicht notwendig orthogonal. Eine weitere Interpretation für (c) ist der Fall eines einzelnen Systems, über das eine unvollständige Kenntnis vorliegt, d.h. es ist nur die Wahrscheinlichkeit p_i bekannt, mit der sich das System im Zustand $|\psi_i\rangle$ befindet.

In den Fällen (b), (c) läßt sich das System nicht mehr durch einen einzelnen Zustandsvektor ($|\psi\rangle = \sum_i C_i |\psi_i\rangle$) beschreiben, sondern durch ein **statistisches Gemisch von Zuständen**. Man sagt auch, das System ist in einem **„gemischten Zustand“**.

In allen drei Fällen läßt sich der Erwartungswert in der Form

$$\langle\hat{F}\rangle = \text{Sp}(\hat{\rho}\hat{F})$$

schreiben. Die Charakterisierung eines Systems mittels des Dichteoperators $\hat{\rho}$ ist die **allgemeinste Form der quantenmechanischen Beschreibung**. Die Matrixelemente des Dichteoperators bilden die **Dichtematrix** $\langle f'|\hat{\rho}|f\rangle$. Der Dichteoperator ist 1927 von **Landau** und **von Neumann** in die Quantenmechanik eingeführt worden.



L. D. Landau, als Gefangener des NKWD (1908–1968)

Wir betrachten jetzt einige **allgemeine Eigenschaften des Dichteoperators**.

Offenbar muß der Dichteoperator folgende Eigenschaften erfüllen:

(i)

$$\text{Sp} \hat{\rho} = \text{Sp}(\hat{\rho}\hat{1}) = 1.$$

- (ii) Damit die Erwartungswerte eines hermiteschen Operators reell sind, muß der Dichteoperator hermitesch sein:

$$\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}.$$

Denn $\langle \hat{F} \rangle^* = \sum_f \langle f | \hat{\rho} \hat{F} | f \rangle^* = \sum_f \langle f | \hat{F}^\dagger \hat{\rho}^\dagger | f \rangle = \langle \hat{F} \rangle$ und mit $\hat{F} = \hat{F}^\dagger$ und $\text{Sp } \hat{\rho} \hat{F} = \text{Sp } \hat{F} \hat{\rho}$ folgt $\hat{\rho} = \hat{\rho}^\dagger$.

- (iii) Der Dichteoperator muß weiterhin positiv definiert sein, d.h. für beliebiges $|f\rangle$ gilt $\langle f | \hat{\rho} | f \rangle \geq 0$.

Der Dichteoperator ist also ein positiv definierter hermitescher Operator mit der Spur Eins. Umgekehrt kann jeder positiv definierte hermitesche Operator mit Spur Eins als Dichteoperator angesehen werden.

- (iv) Es gilt ferner

$$\text{Sp } \hat{\rho}^2 \leq 1,$$

wobei das Gleichheitszeichen nur für reine Zustände gilt.

Die Eigenschaften (i)–(iii) lassen sich für die drei Fälle (a), (b), (c) leicht zeigen.

Relation (iv) schauen wir für (a), (b), (c) separat an:

Im Fall (a) des reinen Zustands $|\psi\rangle$ gilt

$$\hat{\rho}_0^2 = |\psi\rangle\langle\psi| \psi\rangle\langle\psi| = \hat{\rho}_0$$

und damit

$$\text{Sp } \hat{\rho}_0^2 = \text{Sp } \hat{\rho}_0 = \sum_n \langle n | \psi \rangle \langle \psi | n \rangle = \langle \psi | \psi \rangle = 1.$$

Im Fall (b) folgt

$$\begin{aligned} \hat{\rho}^2 &= \sum_{f,f',g} \sum_{f'',f''',g'} C_{f,g} C_{f',g}^* C_{f'',g'} C_{f''',g'}^* |1,f\rangle \underbrace{\langle 1,f' | 1,f'' \rangle}_{\delta_{f',f''}} \langle 1,f''' | \\ &= \sum_{f,f',f''} \left(\sum_g C_{f,g} C_{f',g}^* \right) \left(\sum_{g'} C_{f',g'} C_{f'',g'}^* \right) |1,f\rangle \langle 1,f''| \neq \hat{\rho}. \end{aligned}$$

Die letzte Zeile hat zwar die Gestalt (b), ist aber verschieden von $\hat{\rho}$. Es gilt

$$\text{Sp } \hat{\rho}^2 = \sum_{f,f'} \left[\sum_g C_{f,g} C_{f',g}^* \right]^2 < \sum_{f,f'} \left[\sum_g C_{f,g} C_{f',g}^* \sum_{g'} C_{f',g'} C_{f',g'}^* \right] = 1,$$

wobei wir die Schwarzsche Ungleichung $((\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})^2 < \mathbf{a}^2 \cdot \mathbf{b}^2)$ benutzt haben. $\mathbf{a} = C_f$, $\mathbf{b} = C_{f'}^*$. $(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})^2 = (C_f C_{f'}^*)^2$, $\mathbf{a}^2 = C_f C_f$.

Läßt sich der reine Zustand des Gesamtsystems als **Produkt** der Zustände der Teilsysteme schreiben, d.h. $C_{fg} = a_f \cdot b_g$ oder

$$|\psi\rangle = \sum_{f,g} a_f |1, f\rangle b_g |2, g\rangle$$

mit $\sum_f |a_f|^2 = \sum_g |b_g|^2 = 1$, dann ist für den Fall (b)

$$\hat{\rho} = \sum_{f,f'} a_f a_{f'}^* |1, f\rangle \langle 1, f'|$$

und es gilt wieder $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$ und $\text{Sp } \hat{\rho}^2 = 1$. Im allgemeinen läßt sich aber dem Teil (hier Subsystem 1) eines Gesamtsystems keine Wellenfunktion zuordnen und es gilt $\hat{\rho}^2 \neq \hat{\rho}$ und $\text{Sp } \hat{\rho}^2 < 1$.

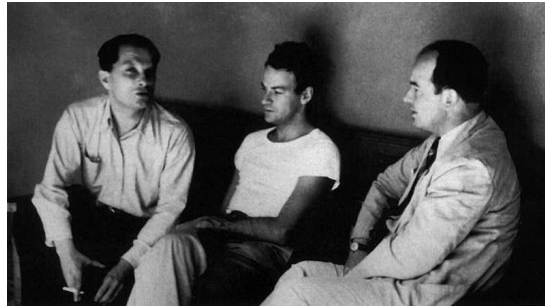
Im Fall (c) erhalten wir analog

$$\hat{\rho}^2 = \sum_{ij} p_i p_j |\psi_i\rangle \langle \psi_i | \psi_j\rangle \langle \psi_j| \neq \hat{\rho}$$

($\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$ nur falls $p_i = \delta_{ii}$) und

$$\begin{aligned} \text{Sp } \hat{\rho}^2 &= \sum_f \sum_{ij} p_i p_j \langle \psi_i | \psi_j\rangle \langle f | \psi_i\rangle \langle \psi_j | f\rangle \\ &= \sum_{ij} p_i p_j \left| \langle \psi_i | \psi_j\rangle \right|^2 < \sum_i p_i \left| \langle \psi_i | \psi_i\rangle \right| \left| \sum_j p_j \left| \langle \psi_j | \psi_j\rangle \right| \right| = 1 \end{aligned}$$

wobei wir $|\psi_i\rangle \neq \lambda |\psi_j\rangle$ angenommen haben.



Ulam, Feynman, von Neumann (1903–1957)

Aus der Bewegungsgleichung der Zustände läßt sich leicht die Bewegungsgleichung für den Dichteoperator, die **von-Neumann-Gleichung** herleiten

$$\frac{d}{dt} \hat{\rho} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}].$$

Die von-Neumann-Gleichung beschreibt die zeitliche Entwicklung gemischter Zustände (analog der Schrödingergleichung für reine Zustände). Das **klassische Analogon**

der von–Neumann–Gleichung ist die **Liouville–Gleichung** der klassischen statistischen Physik.

Beweis:

$$\begin{aligned}
 \hat{\rho} &= \sum_{f,f'} \rho_{ff'} |f\rangle\langle f'| \\
 \frac{d\hat{\rho}}{dt} &= \sum_{f,f'} \rho_{ff'} \left(\left(\frac{d}{dt} |f\rangle \right) \langle f'| + |f\rangle \left(\frac{d}{dt} \langle f'| \right) \right) \\
 &= \sum_{f,f'} \rho_{ff'} (i\hbar)^{-1} \hat{H} |f\rangle\langle f'| - (i\hbar)^{-1} |f\rangle\langle f'| \hat{H} \\
 i\hbar &= \hat{H}\hat{\rho} - \hat{\rho}\hat{H}.
 \end{aligned}$$

Kapitel 7

Bewegung im Magnetfeld, Spin

7.1 Der normale Zeeman-Effekt

Wir beginnen mit der in 2.8 hergeleiteten Schrödingergleichung für ein geladenes Teilchen im Magnetfeld, wobei wir die Coulomb-Eichung $\nabla \mathbf{A} = 0$ verwenden. Dies ergibt nach dem Ausschreiben von $\frac{1}{2m}(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\hat{\mathbf{A}})^2$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + \frac{i\hbar e}{mc} \mathbf{A} \cdot \nabla \psi + \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2 \psi + V \psi.$$

Für ein **homogenes Magnetfeld** \mathbf{B} kann man $\mathbf{A} = -\frac{1}{2}(\mathbf{x} \times \mathbf{B})$ schreiben und man erhält für den 2. Term rechts

$$\frac{i\hbar e}{mc} \mathbf{A} \cdot \nabla \psi = -\frac{i\hbar e}{2mc} (\mathbf{x} \times \mathbf{B})(\nabla \psi) = \frac{i\hbar e}{2mc} \mathbf{B}(\mathbf{x} \times (\nabla \psi)) = -\frac{e}{2mc} \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{I}} \psi = -\mathbf{B} \hat{\boldsymbol{\mu}} \psi,$$

wobei $\hat{\mathbf{I}}$ der Bahndrehimpulsoperator und $\hat{\boldsymbol{\mu}} = \frac{e}{2mc} \hat{\mathbf{I}}$ der Operator für das **magnetische Bahnmoment** des Teilchens ist.

Der 3. Term rechts kann (elementar) in der Form

$$\frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2 \psi = \frac{e^2}{8mc^2} (\mathbf{x} \times \mathbf{B})^2 \psi = \frac{e^2}{8mc^2} (\mathbf{x}^2 \mathbf{B}^2 - (\mathbf{x} \cdot \mathbf{B})^2) \psi$$

geschrieben werden. Der Hamiltonian wird daher

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m} \left[-\nabla^2 - \frac{e}{c\hbar^2} \hat{\mathbf{I}} \cdot \mathbf{B} + \left(\frac{e}{2\hbar c} \right)^2 (\mathbf{x}^2 \mathbf{B}^2 - (\mathbf{x} \cdot \mathbf{B})^2) \right] + V(\mathbf{x}).$$

Wir machen nun eine **Dimensionsanalyse**: alle Terme in der eckigen Klammer müssen die gleiche Dimension, nämlich $1/L^2$ haben. Um konkret zu sein, betrachten wir ein Elektron mit der Ladung $e = -e_0$, e_0 ist die Elementarladung. Da $\hat{\mathbf{I}}$ die Dimension \hbar hat, folgt eine charakteristische **magnetische Länge** $\mathbf{a}_\mathbf{B}$ aus der Relation

$$a_B = \sqrt{\frac{c\hbar}{e_0 B}} = \sqrt{\frac{\phi_0}{2\pi B}}, \quad \phi_0 = \frac{hc}{e_0} = 4,14 \cdot 10^{-7} \text{G} \cdot \text{cm}^2$$

wobei ϕ_0 das **Flußquantum** ist. Damit wird ($\mathbf{n}_B = \mathbf{B}/|\mathbf{B}|$)

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m} \left[-\nabla^2 + a_B^{-2} \left(\frac{\hat{\mathbf{l}}}{\hbar} \right) \cdot \mathbf{n}_B + \frac{1}{4} a_B^{-4} (\mathbf{x}^2 - (\mathbf{x} \cdot \mathbf{n}_B)^2) \right] + V(\mathbf{x}),$$

$$\mathbf{x}^2 - (\mathbf{x} \cdot \mathbf{n}_B)^2 := \mathbf{x}_\perp^2.$$

Betrachten wir insbesondere den Fall eines an den Atomkern gebundenen Elektrons, wobei $V(\mathbf{x}) = -\frac{e_0^2 Z}{|\mathbf{x}|}$, dann ist es zweckmäßig atomaren Einheiten $a_0 = \frac{\hbar^2}{Ze_0^2 m} = \frac{1}{Z} 0,529 \cdot 10^{-8} \text{cm}$ und $E_0 = \frac{e_0^2 Z}{a_0} = Z^2 \cdot 27,2 \text{eV}$ zu benutzen. Mit

$$\hat{H} = E_0 \hat{h}_0 \quad \text{und} \quad \mathbf{x} = a_0 \boldsymbol{\xi}$$

folgt für den Hamiltonian (typische Werte von ξ sind damit von $O(1)$)

$$\frac{\hat{H}}{E_0} = \hat{h} = -\frac{1}{2} \Delta_{\boldsymbol{\xi}} - \frac{1}{|\boldsymbol{\xi}|} + \frac{1}{2} \left(\frac{a_0}{a_B} \right)^2 \left(\frac{\hat{\mathbf{l}} \cdot \mathbf{n}_B}{\hbar} \right) + \frac{1}{4} \left(\frac{a_0}{a_B} \right)^4 (\boldsymbol{\xi}^2 - (\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{n}_B)^2). \quad (7.1)$$

Da der Drehimpuls \mathbf{l} von der Größenordnung \hbar ist, sind der vorletzte und der letzte Term in (7.1) um den Faktor $\left(\frac{a_0}{a_B}\right)^2$ bzw. $\left(\frac{a_0}{a_B}\right)^4$ kleiner als die ersten beiden Terme.

$$\left(\frac{a_0}{a_B} \right)^2 = \frac{e^2}{\hbar c} \frac{B}{e/a_0^2} \approx 4 \cdot 10^{-10} \frac{B(\text{Gauss})}{Z}.$$

Experimentell sind Felder bis zu 10^6 Gauß im Labor und bis zu 10^{12} Gauß auf der Oberfläche von Neutronensternen erreichbar. Damit ist (auf der Erde) der letzte Term in \hat{h} klein und gegenüber dem vorletzten vernachlässigbar, falls $l \neq 0$ ist. Da der vorletzte Term zum **Paramagnetismus** beiträgt (das magnetische Bahnmoment $\boldsymbol{\mu}$ wird sich wegen des negativen Vorzeichens parallel zum Feld einstellen), der letzte aber zum **Diamagnetismus**, sind diamagnetische Effekte gewöhnlich kleiner als paramagnetische. Es existieren aber wichtige Ausnahmen (freie Elektronen, Supraleiter).

Wir nehmen im Weiteren (o.B.d.A.) an, daß \mathbf{B} in z -Richtung zeigt und vernachlässigen den letzten Term in (7.1). Da die früher gefundenen Eigenfunktionen ψ_{nlm_l} auch Eigenfunktionen des Operators $\hat{l}_z = (\hat{\mathbf{l}} \cdot \mathbf{n}_B)$ mit dem Eigenwert $\hbar m_l$ waren, folgt

$$\hat{h} \psi_{nlm_l} = -\frac{1}{2} \left(\frac{1}{n^2} + \left(\frac{a_0}{a_B} \right)^2 m_l \right) \psi_{nlm_l},$$

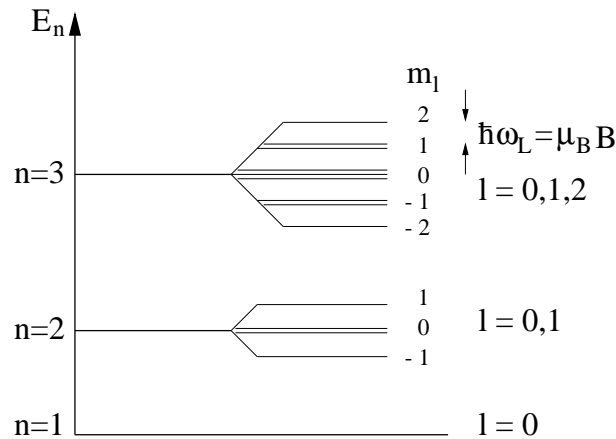
wobei m_l hier die magnetische Quantenzahl ist (zur Erinnerung $-\frac{1}{2n^2}$ war der Eigenwert von $\hat{h}_0 = -\frac{1}{2} \Delta_{\boldsymbol{\xi}} - \frac{1}{|\boldsymbol{\xi}|}$, siehe 5.2). D.h. das Magnetfeld hebt die $(2l+1)$ -fache Entartung des Energieniveaus n mit festem l auf, die früher gefundenen Eigenfunktionen ψ_{nlm_l} sind aber auch Eigenfunktionen im Fall eines äußeren Magnetfeldes.

$$E(n, l, m_l) = -\frac{E_0}{2} \left(\frac{1}{n^2} - \left(\frac{a_0}{a_B} \right)^2 m_l \right) = -\frac{E}{2n^2} + \hbar\omega_L m_l$$

mit

$$\omega_L = -\frac{eB}{2mc} = \frac{e_0 B}{2mc}$$

für die Larmorfrequenz.



Für ein festes l sollte also ein Energieniveau in $(2l + 1)$ Zeeman-Niveaus symmetrisch um $m_l = 0$ aufgespalten werden, der Abstand der Niveaus sollte unabhängig vom Atom (Z) sein. Experimentell findet man allerdings, daß bei Atomen mit ungeradzahligem Z die Multipletts alle geradzahlig sind, so als ob l halbzahlig wäre. Außerdem ist der Abstand benachbarter Niveaus im Multiplett $g\mu_B B$, wobei der Landé-Faktor g von einem Multiplett zum anderen schwankt. μ_B ist das Bohrsche Magneton $\mu_B = \frac{e_0 \hbar}{2mc} = 0,927 \cdot 10^{-20} \text{erg/Gauß}$.

Noch einige Bemerkungen zu den auftretenden Längen (im weiteren betrachten wir $Z = 1$): Wir beginnen mit dem **1.Bohrschen Radius** $a_0 = \frac{\hbar^2}{e_0^2 m_e}$. Multiplizieren wir diesen mit der **Feinstrukturkonstante** $\alpha = \frac{e_0^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$, dann erhalten wir die **Comptonwellenlänge** $\lambda_c = \frac{\hbar}{m_e c} = 3,86 \cdot 10^{-11} \text{cm}$. Multiplizieren wir diese mit α , erhalten wir den **klassischen Elektronenradius** $r_e = e^2/(mc^2) = 2,8 \cdot 10^{-13} \text{cm}$. Teilen wir a_0 durch α , erhalten wir die $\lambda_{E_0} = \frac{\hbar c}{e^4} \frac{\hbar^2}{m_e} = \frac{\hbar c}{E_0} = \frac{\lambda_{\text{Rydberg}}}{4\pi} \approx 7,2 \cdot 10^{-7} \text{cm}$. (Die Energie $E_0 = 2\text{Ry}$ entspricht einem Photon der Wellenlänge λ_{E_0} : $E_0 = cp = c \frac{\hbar}{\lambda_{E_0}}$, d.h. $2\pi \lambda_{E_0} \approx 4,5 \cdot 10^{-6} \text{cm}$ ist eine typische Skala für die Wellenlänge der von Atomen emittierten Photonen.) Und schließlich ist $\lambda_{E_0}/\alpha = 0,993 \cdot 10^{-4} \text{cm} \approx 1\mu\text{m}$.

$$1\mu\text{m} \approx \lambda_{E_0}/\alpha = a_0/\alpha^2 = \lambda_c/\alpha^3 = r_e/\alpha^4.$$

Das elektrische Feld auf der ersten Bohrschen Bahn ist von der Stärke

$$|\mathbf{E}_0| = \frac{e_0}{a_0^2} = 0,51 \cdot 10^{10} \text{ V/cm} \hat{=} 1,68 \cdot 10^7 \text{ Gauss}.$$

Die ‘‘Umlaufzeit’’ des Elektrons ist von der Ordnung $2\pi t_0$ mit

$$t_0 = \frac{1}{\omega_0} = \frac{\hbar}{e_0^2/a_0} \approx 2,4 \cdot 10^{-17} \text{ sec},$$

es hat dabei eine ‘‘Geschwindigkeit’’ der Ordnung

$$v_0 = a_0/t_0 = e_0^2/\hbar \approx 2,2 \cdot 10^8 \text{ cm}.$$

Damit ein Magnetfeld die Bahn eines freien Elektrons mit Geschwindigkeit v_B zum Bohrschen Radius a_0 krümmt (wir setzen klassisch $(e/c)v_0 B = m\omega_0^2 a_0$) muß es die Stärke

$$|\mathbf{B}_0| = \frac{|\mathbf{E}_0|}{\alpha} = \frac{m^2 e_0^3 c}{\hbar^3} \hat{=} 2,3 \cdot 10^9 \text{ Gauss}$$

haben, dann ist auch $a_B = a_0$. Die elektrischen Effekte sind wegen der andersartigen Ankopplung des elektrischen Felds an das Teilchen immer um den Faktor $1/\alpha$ stärker als die magnetischen Effekte.

7.2 Freie Elektronen im Magnetfeld

Wir betrachten freie Elektronen in einem homogenen Magnetfeld $\mathbf{B} \parallel z$ und verwenden die Landau Eichung $\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{p}_x + \frac{eB}{c} \hat{y} \right)^2 + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m}.$$

Als Ansatz für die Wellenfunktion in Ortsdarstellung benutzen wir

$$\psi(x_1, x_2, x_3) = e^{i/\hbar(p_x x + p_z z)} \chi(y).$$

Mit diesem Ansatz folgt

$$\frac{1}{2m} \left[\hbar^2 k_x^2 + 2k_x \frac{eB}{c} y + \left(\frac{eB}{c} \right)^2 y^2 \right] \chi - \frac{\hbar^2}{2m} \chi''(y) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \chi = E \chi$$

und damit

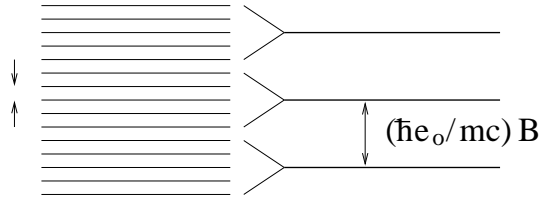
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \chi''(y) + \frac{m}{2} \omega_c^2 (y - y_0)^2 \chi + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \chi = E \chi;$$

$$\omega_c = \frac{|e|B}{mc}, \quad y_0 = -\frac{c\hbar k_x}{eB}$$

Die ersten beiden Terme bilden offenbar den Hamiltonian eines harmonischen Oszillators mit der Masse $m = 1/\omega_c$, den wir schon in 3.1 betrachtet haben. Die Energieeigenwerte sind also (wir brauchen wieder nur die Kommutatorrelationen um die Energieeigenwerte zu bestimmen, $p_3 = \hbar k_3$)

$$E(n, p_3) = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{p_3^2}{2m}.$$

Die Quantenzahl n numeriert die sogenannten **Landau-Niveaus**, die in der Festkörperphysik und insbesondere auch beim **Quantenhall-Effekt** eine wichtige Rolle spielen. Das Magnetfeld führt also zu einer drastischen Änderung des Spektrums: für $B = 0$ ist das Spektrum kontinuierlich während für endliches B das Spektrum (k_3 sei fest) diskret wird. Allerdings haben wir noch nicht geklärt, wie hoch die **Entartung** \tilde{g} eines **Landau-Niveaus** ist.



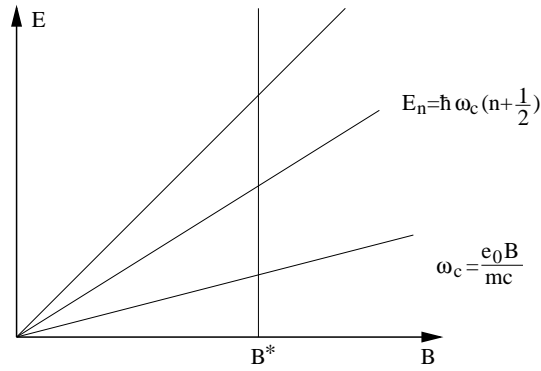
Wir geben hier noch ohne Herleitung (die aber einfach ist) das Resultat für die Eigenzustände von \hat{H} an:

$$y_0 = -k_1 a_B^2, \quad \phi(x_1, x_2) = e^{ik_x x} e^{-\frac{1}{2} \frac{(y-y_0)^2}{a_B^2}} H_n \left(\frac{y-y_0}{a_B} \right) e^{ik_z z} \frac{1}{\pi^{1/4}} \frac{1}{\sqrt{a_B}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}$$

mit $y_0 = -k_1 a_B^2$. Im unendlich ausgedehnten System können k_1 und k_3 alle Werte zwischen $-\infty$ und $+\infty$ annehmen. $H_n(\xi)$ sind die Hermiteschen Polynome. Andere Lösungen lassen sich aus Linearkombinationen dieser $\phi(x_1, x_2)$ zusammensetzen. Die Entartung der Landau-Niveaus lässt sich wie folgt bestimmen: offenbar muss sich der Ursprung des Oszillators im System befinden, d.h.

$$0 \leq y_0 < L_y, \quad y_0 = \frac{c\hbar k_x}{|e_0|B}$$

woraus $0 \leq k_x < \frac{|e_0|B}{c\hbar} L_y$ folgt. In x -Richtung gelten periodische Randbedingungen, d.h. $\Delta k_x = \frac{2\pi}{L_x}$. Die Gesamtzahl der Zustände in einem Landau-Niveau ist deshalb durch $(k_x)_{\max} / \Delta k_x = \frac{|e_0|B}{c\hbar} \frac{L_y L_x}{2\pi} = \phi / \phi_0$ gegeben, ϕ_0 ist das Flussquantum $\phi_0 = \frac{c\hbar}{|e_0|}$.



7.3 Quasiklassische Approximation

Wir wollen die Landau-Niveaus noch einmal im Rahmen der **quasiklassischen Näherung** betrachten, bei der wir, wie in Kapitel 2.10 diskutiert, die Phase $S(\mathbf{x}, t)/\hbar$ der Wellenfunktion durch ihren klassischen Limes $S_0(\mathbf{x}, t)$ ersetzen. $S_0(\mathbf{x}, t)$ ist die **klassische Wirkung** eines Systems, **berechnet für wirkliche klassische Bahnen** als Funktion des Endpunktes $\mathbf{x}(t)$ bei festgehaltenen Anfangspunkt $\mathbf{x}(0) = x_0$. Bei **stationären Zuständen** läßt sich $S_0(\mathbf{x}, t) = -Et + \sigma_0(\mathbf{x}, E)$ schreiben. Mit $\sigma_0(\mathbf{x}, E) = \int_{x_0}^x \nabla S_0(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_{x_0}^x \mathbf{p}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$ folgt für die **Wellenfunktion in quasiklassischer Näherung**

$$\psi(\mathbf{x}, t) \simeq A e^{-\frac{i}{\hbar} E t + \frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x \mathbf{p}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}} .$$

$\mathbf{p}(\mathbf{x})$ ist der kanonische Impuls entlang der klassischen Trajektorie. Bei (im Phasenraum) geschlossenen Trajektorien muß für das Integral wegen der Eindeutigkeit der Wellenfunktion

$$\frac{1}{\hbar} \oint \mathbf{p}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = 2\pi n$$

gelten, dies ist die **Bohr-Sommerfeld-Quantisierungsbedingung**.

Diese Formel läßt sich leicht auf ein **System mit n Freiheitsgraden** $\mathbf{x} \rightarrow q = (q_1, \dots, q_n)$ erweitern. Dann wird

$$\sigma(q_1, \dots, q_n, E) = \int_{q_0}^q \sum_{i=1}^n p_i dq_i$$

mit $\frac{\partial \sigma}{\partial q_i} = p_i$, und $p = (p_1, \dots, p_n)$ etc..

Ist das klassische System **integrabel**, d.h., existieren n Konstanten der Bewegung, die eindeutige und differenzierbare Funktionen der $q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n$ sind, dann verläuft die klassische Trajektorie auf einem n -**Torus**. Daher kann die Bewegung durch n (mit 2π) zyklische **Winkelkoordinaten** $\mathcal{W} = (\mathcal{W}_1, \dots, \mathcal{W}_n)$ beschrieben werden, zu denen konjugierte, zeitlich konstante **Wirkungsvariable** $I =$

(I_1, \dots, I_n) existieren. Aus $H(q, p)$ folgt über eine geeignet gewählte **kanonische** Transformation (vergleiche z.B. Landau–Lifschitz, Bd I, §45)

$$\mathcal{W}_i = \mathcal{W}_i(q, p, t), \quad I_i = I_i(q, p, t)$$

die neue Hamiltonfunktion $H'(\mathcal{W}, I)$ mit der Eigenschaft

$$\dot{\mathcal{W}}_i = \frac{\partial H'}{\partial I_i} = \omega_i = \text{const.}, \quad \dot{I}_i = -\frac{\partial H'}{\partial \mathcal{W}_i} = 0,$$

d.h. die Hamiltonfunktion H' hängt tatsächlich nur von den I_i ab. Wir betrachten jetzt eine geschlossene Kurve \mathcal{C}_i im Phasenraum (p, q) , bei deren Durchlaufen sich **nur eine** Winkelvariable von 0 auf 2π ändert.

$$\oint_{\mathcal{C}_i} p \, dq \equiv \oint_{\mathcal{C}_i} \sum_{j=1}^n p_j \, dq_j = \oint_{\mathcal{C}_i} I_i \, d\mathcal{W}_i = 2\pi I_i.$$

Betrachten wir nun die Phase der quasiklassische Wellenfunktion, dann kann sich diese entlang der geschlossenen Kurve \mathcal{C}_i gerade um ein Vielfaches von 2π ändern, d.h.

$$\oint_{\mathcal{C}_i} p \, dq = 2\pi n_i \hbar = 2\pi I_i \quad \text{oder} \quad \boxed{I_i = n_i \hbar}.$$

Dies ist **Einsteins Herleitung** (1917) der Bohr–Sommerfeldschen Quantisierungsbedingung. Sie ist nur bei vollständig integrablen Systemen anwendbar.

Als Beispiel betrachten wir jetzt noch einmal ein **freies Teilchen** im **homogenen Magnetfeld** $\mathbf{B} \parallel z$. Wir benutzen die symmetrische Eichung $A_x = -(B/2)y$, $A_y = (B/2)x$, dann wird die Lagrangefunktion

$$\boxed{L = \frac{m}{2} (\dot{x}^2 + \dot{y}^2) - \frac{eB}{2c} (xy - yx) + \frac{m}{2} \dot{z}^2 = \frac{m}{2} \dot{\mathbf{x}}^2 + \frac{e}{c} \mathbf{A} \dot{\mathbf{x}}}$$

$$H = \mathbf{p} \dot{\mathbf{x}} - L = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} &= p_x = m\dot{x} + \frac{e}{c} A_x \\ \frac{\partial L}{\partial \dot{y}} &= p_y = m\dot{y} + \frac{e}{c} A_y \end{aligned}$$

zweckmäßigerweise in Zylinderkoordinaten geschrieben (vergleiche 2.2.1): $x = \rho \cos \varphi$, $y = \rho \sin \varphi$, woraus

$$L = \frac{m}{2} (\dot{\rho}^2 + \rho^2 \dot{\varphi}^2) + \frac{e}{2c} B \rho^2 \dot{\varphi} + \frac{m}{2} \dot{z}^2$$

folgt. Mit

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\rho}} = p_\rho = m\dot{\rho}, \quad \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = p_\varphi = \rho^2 \left(m\dot{\varphi} + \frac{e}{2c} B \right), \quad \frac{\partial L}{\partial \dot{z}} = p_z = m\dot{z}$$

kann man jetzt zur Hamiltonfunktion

$$H' = \dot{\rho}p_\rho + \dot{\varphi}p_\varphi + \dot{z}p_z - L$$

übergehen:

$$H' = \frac{1}{2m} (p_\rho^2 + p_z^2) + \frac{1}{2m} \left(\frac{p_\varphi}{\rho} - \frac{e}{2c} B \rho \right)^2.$$

Diese hängt nicht mehr von z und φ ab. $\varphi \equiv \mathcal{W}_1$ ist offenbar eine der Winkelvariablen, die dazu gehörende Wirkungsvariable ist daher $p_\varphi \equiv I_1$. Wir betrachten jetzt eine geschlossene Kontur \mathcal{C} , entlang der $p_\rho = p_z = 0$ ist. Dann erhalten wir mit $\dot{p}_\rho = -\frac{\partial H'}{\partial \rho} = 0$, d.h. $p_\varphi = -\frac{e}{2c} B \rho^2$ und mit der Bohr–Sommerfeld–Einstein–Bedingung

$$p_\varphi = -\frac{eB}{2c} \rho^2 = n\hbar.$$

Der von der Bahn des Teilchens eingeschlossene Fluß ($e = -e_0$)

$$\phi = \pi \rho^2 B = n \frac{\hbar c}{e_0} = n\phi_0, \quad n \text{ ganz}$$

ist offenbar in Einheiten von $\phi_0 = \frac{\hbar c}{e_0}$ quantisiert.

Man kann dieses Ergebnis auch schneller erhalten, wenn man von der klassischen Bewegungsgleichung startet

$$m \frac{d\dot{\mathbf{x}}}{dt} = \frac{e}{c} \dot{\mathbf{x}} \times \mathbf{B}.$$

Aus dieser folgt

$$m\dot{\mathbf{x}} = \frac{e}{c} \mathbf{x} \times \mathbf{B} + \mathbf{C}.$$

Wir setzen im weiteren $\mathbf{C} = p_3 \cdot \mathbf{n}_z$, so daß das Zentrum der Kreisbahn in Ebene senkrecht zu \mathbf{B} ruht. Für die Bewegung in der Ebene senkrecht zu \mathbf{B} folgt daher

$$\begin{aligned} \oint (p_x dx + p_y dy) &= \oint p_\varphi d\varphi = \oint d\mathbf{x} \left(m\dot{\mathbf{x}} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) = \frac{e}{c} \oint d\mathbf{x} (\mathbf{x} \times \mathbf{B} + \mathbf{A}) \\ &= -\frac{e}{c} \mathbf{B} \cdot \oint (\mathbf{x} \times d\mathbf{x}) + \frac{e}{c} \iint \mathbf{B} d\mathbf{f} = -\frac{e}{c} \phi = n\hbar \end{aligned}$$

wobei wir $\iint \mathbf{B} d\mathbf{f} = \phi$ für den Fluß und $\oint \mathbf{x} \times d\mathbf{x} = 2 \iint d\mathbf{f}$ benutzt haben. Der von der Bahn eingeschlossene Magnetfluß ϕ ist daher quantisiert ($e = -e_0$)

$$\phi = n \frac{\hbar c}{e_0} \equiv n\phi_0, \quad n \text{ ganz}.$$

Der Radius der Kreisbahn folgt daher aus

$$\rho_n^2 = \frac{n\phi_0}{\pi B} = 2na_B^2,$$

wobei a_B die früher eingeführte magnetische Länge ist. Die Energie ergibt sich dann aus

$$E(n, p_3 = 0) = \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{x}}^2 = \frac{1}{2m} \frac{e^2}{c^2} \rho_n^2 B^2 = \hbar \omega_c n,$$

in Übereinstimmung mit den früher erhaltenen Resultat (mit Ausnahme des Summanden $\hbar\omega_c/2$).

Die quasiklassische Näherung gilt nur, wenn die de Broglie-Wellenlänge klein gegenüber den anderen charakteristischen Skalen des Systems sind. Dies bedeutet hier

$$\lambda_{\text{de Broglie}} = \frac{h}{m|\dot{\mathbf{x}}|} = \frac{ch}{eB\rho_n} \ll \rho_n,$$

d.h. $\pi \ll n$. In diesem Fall ist der Summand $\hbar\omega_c/2$ in der Energie tatsächlich zu vernachlässigen.

Man kann die quasiklassische Näherung auch benutzen, um die Quantisierung der Energieniveaus, die die Bewegung in z -Richtung beschreiben, aufzufinden. Hierzu nehmen wir an, daß das System in z -Richtung die Länge L hat. Ein klassisches Teilchen wird ($p_\varphi = p_\rho = 0$) sich mit konstantem Impuls p_z von $z = 0$ bis $z = L$ bewegen, dort ideal reflektiert werden und dann mit Impuls $-p_z$ wieder nach $z = 0$ zurückkehren. Offenbar ist die Periode in $z = L$, $w_z = 2\pi\frac{z}{L}$ und $I_z dw_z = p_z dz$, d.h. $I_z = p_z L / 2\pi = n\hbar$, in Übereinstimmung mit unserer früher gefundenen Quantisierungsregel (i) (vergleiche 3.2, $2x_0 = L$)

$$p_{z,n} = \hbar k_n = \frac{\hbar 2\pi n}{L}$$

für periodischen Randbedingungen. Wählt man dagegen einen Kasten mit unendlichem Potential außerhalb, dann ist das Pärizitätsvolumen $2L$, $w_z = 2\pi z / 2L$ und $I_z = p_z L / \pi = n\hbar$, d.h. $p_{z,n} = \hbar\pi n / L$, wieder in Übereinstimmung mit (ii).

Teilen wir die von der im **Phasenraum** geschlossenen klassischen Phasenbahn des Teilchens eingeschlossene Fläche

$$\oint p_i dq_i = nh$$

in **Zellen** der Fläche h ein, erhalten wir insgesamt n Zellen. n ist aber die Zahl der quantenmechanischen Zustände mit Energien, die nicht größer sind als die der betrachteten Phasenbahn. Man kann daher sagen, daß im quasiklassischen Limes jedem Zustand eine Zelle im Phasenraum mit der Fläche h entspricht. Die **Zahl der Zustände** im **Volumenelement** $\Delta p_i \Delta q_i$ ist daher $\Delta p_i \Delta q_i / h$.

Wir wollen jetzt noch die **Entartung** der **Landau-Niveaus** berechnen. Hierzu benutzen wir wieder den quasiklassischen Zugang. **Quasiklassisch** ergibt sich die **Zustandsdichte** $\rho(E)$, d.h. die Zahl $\rho(E) \Delta E$ der Zustände in einem Energieintervall aus der einleuchtenden Beziehung ($q = (q_1, \dots, q_n)$, $p = (p_1, \dots, p_n)$)

$$\rho(E) \Delta E = \int \frac{dp dq}{h^n} [\Theta(E + \Delta E - H(p, q)) - \Theta(H(p, q) - E)]$$

und damit

$$\rho(E) = \int \frac{dq dp}{h^n} \delta(E - H(q, p)) \quad (7.2)$$

Wir wollen dies zunächst für ein freies Teilchen testen. Für diese existiert die Relation $E = \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{k}^2$. Die Zustandsdichte ist deshalb streng quantenmechanisch durch

$$\rho(E) = \sum_{\mathbf{k}} \delta\left(E - \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{k}^2\right) \approx \int \frac{d^3k}{(\Delta k)^3} \delta\left(E - \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{k}^2\right) = \frac{m^{3/2} \sqrt{E}}{\sqrt{2\pi^2 \hbar^3}} L^3$$

gegeben, wobei wir $\Delta k = \frac{2\pi}{L}$ gesetzt haben (vergleiche 3.2!). Formel (7.2) gibt

$$\rho(E) = L^3 \frac{1}{h^3} \int d^3p \delta\left(E - \frac{p^2}{2m}\right) = \frac{m^{3/2} \sqrt{E}}{\sqrt{2\pi^2 \hbar^3}} L^3,$$

d.h. das gleiche Resultat.

Wir kommen jetzt zum Fall mit äußeren Magnetfeld. Dann wird nach (7.2) und mit $A_1 = -\frac{1}{2}yB$, $A_2 = \frac{1}{2}xB$

$$\rho(E) = \frac{1}{h^3} \int dp_x dp_y dp_z dx dy dz \delta\left(E - \frac{1}{2m} \left[\left(p_x + \frac{e}{2c}yB\right)^2 + \left(p_y - \frac{e}{2c}xB\right)^2 + p_z^2 \right]\right).$$

Wir führen jetzt neue Impuls $p'_x = p_x + \frac{e}{2c}yB$, $p'_y = p_y - \frac{e}{2c}xB$ ein und integrieren wieder \mathbf{p} von $-\infty$ bis $+\infty$. Das Resultat entspricht dem ohne Feld.

Wir betrachten jetzt noch den für den Quantenhalleffekt wichtigen Fall der Bewegung eines Elektrons in einer 2-dimensionalen Fläche, zu der das Magnetfeld senkrecht steht. Die Zustandsdichte in $d = 2$ Dimensionen ist durch

$$\rho(E) = \int \frac{d^2k}{(\Delta k)^2} \delta\left(E - \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{k}^2\right) = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 \int \pi d\mathbf{k}^2 \delta\left(E - \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{k}^2\right) = 2\pi m \left(\frac{L}{\hbar}\right)^2$$

gegeben, sie ist offenbar unabhängig von E . Die Zahl der Zustände auf einem Landau-Niveau ist daher

$$\rho(E) \cdot \hbar\omega_c = \frac{\phi}{\phi_0}.$$

7.4 Der Aharonov-Bohm-Effekt

Wir wollen die quasiklassische Näherung jetzt benutzen, um den Aharonov-Bohm-Effekt zu erklären.

Zunächst führen wir den Begriff des **Propagators** ein. In Abschnitt 6.3 haben wir die zeitliche Entwicklung eines quantenmechanischen System über den \hat{S} -Operator ausgedrückt (wir sind im Schrödingerbild)

$$|\psi(t)\rangle = \hat{S}(t, t_0) |\psi(0)\rangle.$$

Hieraus folgt

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{x}, t) = \langle \mathbf{x} | \psi(t) \rangle &= \int d^3x' \langle \mathbf{x} | \hat{S}(t, t_0) | \mathbf{x}' \rangle \langle \mathbf{x}' | \psi(t_0) \rangle \\ &= \int d^3x' K(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t_0) \psi(\mathbf{x}', t_0)\end{aligned}$$

wobei wir den **Propagator** ($t > t_0$)

$$K(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t_0) = \langle \mathbf{x} | \hat{S}(t, t_0) | \mathbf{x}' \rangle = \langle \mathbf{x} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} | \mathbf{x}' \rangle$$

eingeführt haben (der Einfachheit halber betrachten wir hier zeitunabhängige Hamiltonoperatoren). Offenbar gilt für $t = t_{0+}$ (wir benutzen die Orthogonalitätsrelation für $|x\rangle$)

$$\lim_{t \rightarrow t_{0+}} K(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t_0) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}').$$

Der Propagator $K(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0)$ entspricht der Wellenfunktion $\psi(\mathbf{x}, t)$ eines Teilchens, das zur Zeit t_0 an \mathbf{x}' konzentriert war. Tatsächlich ist $\langle \mathbf{x}' | \mathbf{x}_0 \rangle = \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}_0)$ die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{x}', t_0)$ zum Zeitpunkt t_0 , dann folgt $\psi(\mathbf{x}, t) = K(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0)$. Für $t < t_0$ setzen wir $K = 0$. Damit wird

$$\begin{aligned}K(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t_0) &= \Theta(t - t_0) \langle \mathbf{x} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} | \mathbf{x}' \rangle. \\ \Theta(t) &= \begin{cases} 1, & t \geq 0 \\ 0, & t < 0 \end{cases}\end{aligned}$$

Außerdem genügt K für $t > t_0$ der Schrödingergleichung in der Ortsdarstellung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} K(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t_0) = \int d^3x'' \langle \mathbf{x} | \hat{H} | \mathbf{x}'' \rangle K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0) + \delta(t - t_0) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0).$$

Offenbar hat der Propagator die **wichtige Kompositionseigenschaft**

$$K(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0) = \int d^3x' K(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t_1) K(\mathbf{x}', t_1; \mathbf{x}_0, t_0),$$

denn

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{x} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} | \mathbf{x}' \rangle \Theta(t - t_0) &= \langle \mathbf{x} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_1)} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_1-t_0)} | \mathbf{x}' \rangle \Theta(t - t_1) \Theta(t_1 - t_0) \\ &= \int d^3x'' \langle \mathbf{x} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_1)} | \mathbf{x}'' \rangle \Theta(t - t_1) \langle \mathbf{x}'' | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_1-t_0)} | \mathbf{x}' \rangle \Theta(t_1 - t_0).\end{aligned}$$

Wir können K weiter in der Form

$$K(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t_0) = \Theta(t - t_0) \langle \mathbf{x}, t | \mathbf{x}', t_0 \rangle$$

schreiben, wobei wir die zeitabhängigen bra- und ket-Zustände

$$|\mathbf{x}, t\rangle = e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} |\mathbf{x}\rangle, \quad \langle \mathbf{x}, t| = \langle \mathbf{x}| e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}$$

eingeführt haben. Diese sind **Eigenzustände** des **Orts-Operators im Heisenbergbild**. Tatsächlich gilt

$$\hat{\mathbf{x}}(t) |\mathbf{x}, t\rangle = e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \hat{\mathbf{x}} e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} |\mathbf{x}\rangle = \mathbf{x} |\mathbf{x}, t\rangle.$$

Es ist an dieser Stelle daran zu erinnern, daß im Schrödingerbild die Zustandskets sich zeitlich ändern, **nicht aber** die Basiskets, die Eigenzustände zeitunabhängiger Operatoren sind. Im Heisenbergbild ist es umgekehrt: die Zustandskets ändern sich zeitlich nicht, wohl aber die Basiskets als Eigenzustände zeitabhängiger Operatoren. $K(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t_0)$ ist daher die **Wahrscheinlichkeitsamplitude** für den Übergang eines Teilchens, das zum Zeitpunkt t_0 am Ort \mathbf{x}' war und zum späteren Zeitpunkt t am Ort \mathbf{x} gefunden wird. Tatsächlich, ist das Teilchen zur Zeit t_0 an \mathbf{x}_0 lokalisiert, dann ist $\psi(\mathbf{x}', t_0) = \langle \mathbf{x}' | \mathbf{x}_0 \rangle = \delta(\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}')$ und damit

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \int d^3x' K(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t_0) \delta(\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}') = K(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0).$$

Die Wahrscheinlichkeit für diesen Übergang ist

$$W(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t_0) = |K(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t_0)|^2$$

wie man aus

$$|\psi(\mathbf{x}, t)|^2 = \int d^3x' d^3x'' K(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t_0) K^*(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}'', t_0) \psi(\mathbf{x}', t_0) \psi^*(\mathbf{x}'', t_0)$$

mit $\psi(\mathbf{x}', t_0) = \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}_0)$ ersieht.

Wir leiten jetzt kurz die Pfadintegraldarstellung für den Propagator eines Teilchens

$$\langle \mathbf{x} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} | \mathbf{x}' \rangle = ? \quad \hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$$

$$e^{\hat{A}} = (e^{\hat{A}/N})^N, \quad \lambda = it/\hbar, \quad t > 0$$

Nun gilt

$$K(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0) = \langle \mathbf{x} | e^{-\lambda(\hat{T}+\hat{V})} | \mathbf{x}_0 \rangle = \langle \mathbf{x} | e^{-\frac{\lambda}{N}(\hat{T}+\hat{V})} \dots e^{-\frac{\lambda}{N}(\hat{T}+\hat{V})} | \mathbf{x}_0 \rangle$$

da \hat{H} mit \hat{H} kommutiert. Wir benutzen ferner $e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} e^{\frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}] + \dots}$

$$e^{-\frac{\lambda}{N}(\hat{T}+\hat{V})} = e^{-\frac{\lambda}{N}\hat{T}} e^{-\frac{\lambda}{N}\hat{V}} e^{-\frac{\lambda^2}{2N^2}[\hat{T}, \hat{V}]} \approx e^{-\frac{\lambda}{N}\hat{T} - \frac{\lambda}{N}\hat{V}} \left(1 - \frac{\lambda^2}{2N^2}[\hat{T}, \hat{V}] \right).$$

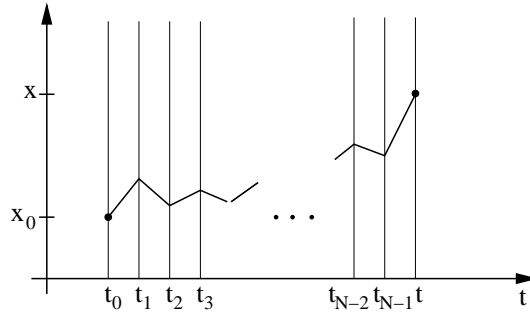
Damit wird

$$K(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \mathbf{x} | (e^{-\lambda\hat{T}/N} e^{-\lambda\hat{V}/N} + O(1/N^2))^N | \mathbf{x}_0 \rangle,$$

wobei wir im Weiteren die $O(1/N^2)$ -Terme vernachlässigen. Wir schreiben jetzt $(N-1)$ vollständige Sätze $\int dx_j |x_j\rangle \langle x_j|$, $j = 1, \dots, N-1$ ein. Dies ergibt

$$K(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int d^3\mathbf{x}_1 \dots d^3\mathbf{x}_{N-1} \prod_{j=0}^{N-1} \langle \mathbf{x}_{j+1} | e^{-\frac{\lambda}{N}\hat{T} - \frac{\lambda}{N}\hat{V}} | \mathbf{x}_j \rangle.$$

$$K(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \mathbf{x} | e^{-\frac{\lambda}{N} \hat{T}} e^{-\frac{\lambda}{N} \hat{V}} | \int d^3 x_1 | \mathbf{x}_1 \rangle \langle \mathbf{x}_1 | e^{-\frac{\lambda}{N} \hat{T}} e^{-\frac{\lambda}{N} \hat{V}} | \int d^3 x_2 | \mathbf{x}_2 \rangle \langle \mathbf{x}_2 | \dots \\ \dots e^{-\frac{\lambda}{N} \hat{T}} \dots e^{-\frac{\lambda}{N} \hat{V}} | \int d^3 x_{N-1} | \mathbf{x}_{N-1} \rangle \langle \mathbf{x}_{N-1} | e^{-\frac{\lambda}{N} \hat{T}} e^{-\frac{\lambda}{N} \hat{V}} | \mathbf{x}_0 \rangle$$



Weiter gilt

$$\begin{aligned} e^{-\lambda \hat{V}/N} | \mathbf{x}_j \rangle &= | \mathbf{x}_j \rangle e^{-\lambda V(\mathbf{x}_j)} \\ \langle \mathbf{x}_{j+1} | e^{-\frac{\lambda}{N} \hat{T}} | \mathbf{x}_j \rangle &= \int d^3 \mathbf{p} \langle \mathbf{x}_{j+1} | e^{-\frac{\lambda}{N} \hat{T}} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \mathbf{x}_j \rangle \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d^3 \mathbf{p} e^{-\frac{\lambda}{N} \frac{\mathbf{p}^2}{2m}} e^{i\mathbf{p}(\mathbf{x}_{j+1}-\mathbf{x}_j)/\hbar} \\ &= \left(\frac{mN}{2\pi\lambda\hbar^2} \right)^{3/2} e^{-\frac{mN}{2\lambda\hbar^2} (\mathbf{x}_{j+1}-\mathbf{x}_j)^2} \end{aligned}$$

$$K(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int d^3 x_1 \dots d^3 x_{N-1} \left(\frac{mN}{2\pi\lambda\hbar^2} \right)^{3N/2} \prod_{j=0}^{N-1} e^{-\left[\frac{m(\mathbf{x}_{j+1}-\mathbf{x}_j)^2}{2\lambda\hbar^2} + \frac{\lambda}{N} V(\mathbf{x}_j) \right]}.$$

Sei $\varepsilon = t/N = \hbar\lambda/iN$, $\frac{\lambda}{N} = \varepsilon i/\hbar$

$$K(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int d^3 x_1 \dots d^3 x_{N-1} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{3N/2} e^{\frac{i\varepsilon}{\hbar} \sum_{j=0}^{N-1} \left[\frac{m}{2} \frac{(\mathbf{x}_{j+1}-\mathbf{x}_j)^2}{\varepsilon^2} - V(\mathbf{x}_j) \right]}.$$

Schließlich gehen wir im Limes $N \rightarrow \infty$, ($\varepsilon \rightarrow 0$) von der Summe im Exponenten zum Integral über und erhalten

$$K(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0) = \int \mathcal{D}x(t) e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t \left[\frac{m}{2} \dot{\mathbf{x}}^2(t') - V(\mathbf{x}(t')) \right] dt'}.$$

Damit haben wir die Pfadintegraldarstellung von K gefunden. Der Exponent ist die Wirkung

$$S = \int_0^t \left[\frac{m}{2} \dot{\mathbf{x}}^2(t') - V(\mathbf{x}(t')) \right] dt'.$$

Für das Beispiel freier Teilchen, das wir jetzt angeben wollen, braucht man tatsächlich keine Trotterformel, da $V = 0$ gilt und T mit sich kommutiert. Wir können daher

in den obigen Formeln $N = 1$ und $\varepsilon = t - t_0$ setzen und erhalten .

$$K_0(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar (t - t_0)} \right)^{3/2} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^2}{t - t_0}}.$$

Schließlich betrachten wir noch eine weitere Darstellung des Propagators, bei der wir Eigenzustände $|a\rangle$ einer Observablen \hat{A} verwenden, die mit \hat{H} kommutiert:

$$\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle, \quad \hat{H}|a\rangle = E_a|a\rangle.$$

Dann wird

$$\begin{aligned} K(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t_0) &= \sum_a \langle \mathbf{x} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} | a \rangle \langle a | e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t_0} | \mathbf{x}' \rangle \Theta(t - t_0) \\ &= \sum_a \langle \mathbf{x} | a \rangle \langle a | \mathbf{x}' \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_a (t - t_0)} \Theta(t - t_0) \\ &= \sum_a \psi_a(\mathbf{x}) \psi_a^*(\mathbf{x}') e^{-\frac{i}{\hbar} E_a (t - t_0)} \Theta(t - t_0). \end{aligned}$$

Wir wollen jetzt den Propagator im Rahmen der **quasiklassische Näherung** berechnen, analog der quasiklassischen Näherung für die Wellenfunktion. Da für $t > t_0$ K ebenfalls der Schrödingergleichung genügt, folgt als **quasiklassische Näherung** für den **Propagator**

$$K_0(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t_0) = A(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t_0) e^{\frac{i}{\hbar} S_0(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t_0)}$$

mit

$$S_0(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t_0) = \int_{t_0, \mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}'}^{t, \mathbf{x}(t) = \mathbf{x}'} dt L(\mathbf{x}(t), \dot{\mathbf{x}}(t), t)$$

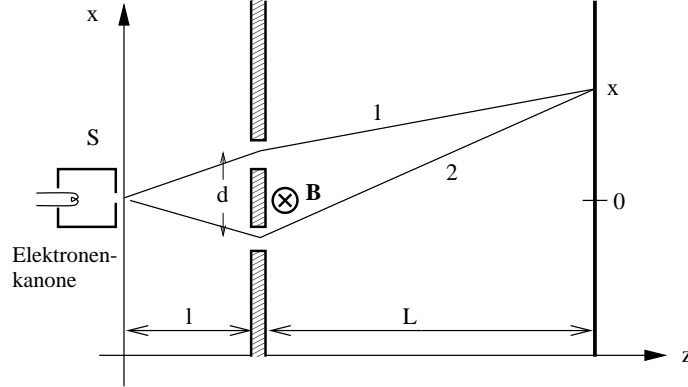
wobei L die Lagrangefunktion ist. Die reelle Amplitude A kann auf verschiedene Weise berechnet werden. Wir wollen dies hier nicht tun, sondern nur ein qualitatives Argument geben:

Die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen zur Zeit t am Ort \mathbf{x} zu finden, wenn es zur Zeit $t_0 < t$ am Ort \mathbf{x}' war, ist durch

$$|K(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t_0)|^2 = A^2(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t_0)$$

gegeben. In der quasiklassischen Approximation ist A^2 , wie im 2.10 diskutiert, die Dichte einer Ensemble-Flüssigkeit, deren einzelne Teilchen sich nach den Gesetzen der klassischen Mechanik bewegen. Diese waren zum Zeitpunkt t_0 bei $\mathbf{x} = \mathbf{x}'$ versammelt, infolge verschiedener Anfangsimpulse sind sie zum späteren Zeitpunkt t aber an verschiedenen Orten \mathbf{x} zu finden. Für räumlich schwach varierende Potentiale sind die Amplituden $A(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t_0)$ daher nur schwach von \mathbf{x} abhängig. A hängt nur von Feld $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ ab, nicht vom Vektorpotential \mathbf{A} direkt.

Wir berechnen jetzt den Propagator $K(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t_0)$ für das **Doppelspaltexperiment** aus Kapitel 1.2 mit einem zusätzlichen **eng lokalisiertem Magnetfeld**, wie im folgenden Bild dargestellt. Die Spaltbreite b sei vernachlässigbar klein, d.h. kleiner als alle anderen relevanten Längenskalen im Problem.



Wir wollen uns hierbei auf die quasiklassische Näherung beschränken. Dabei müssen wir beachten, daß zwei “klassische” Trajektorien 1,2 zum Propagator beitragen. Nach der Kompositionsregel gilt (der Vorfaktor b rechts resultiert von der Integration über die Blende, die y Komponente von \mathbf{x} ist immer Null und wird daher weggelassen)

$$K_0(x, L+l, t; 0, 0, t_0) \approx b K_0(x, L+l, t; \frac{d}{2}, l, t_1) K_0(\frac{d}{2}, l, t_1; 0, 0, t_0) \\ + b K_0(x, L+l, t; -\frac{d}{2}, l, t_1) K_0(-\frac{d}{2}, l, t_1; 0, 0, t_0).$$

Für ein freies Teilchen ohne Feld folgt mit $L = (m/2)(\dot{x}^2 + \dot{z}^2)$

$$S_0(x, z, t; x', z', t_0) = \int_{t_0}^t \frac{m}{2} (\dot{x}^2 + \dot{z}^2) dt = m \frac{(x-x')^2 + (z-z')^2}{2(t-t_0)},$$

die Amplituden A_i unterscheiden sich für die beiden Trajektorien praktisch nicht, solange $x \ll L$ gilt. Damit wird

$$K_0(x, L+l, t; 0, 0, t_0) \approx \\ A_l A_L b e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \left(\frac{l^2 + d^2/4}{t_1 - t_0} \right)} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{L^2}{t - t_1}} \left[e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(x-d/2)^2}{t - t_1}} + e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(x+d/2)^2}{t - t_1}} \right].$$

A_l bzw. A_L sind die Amplituden für die Pfade zwischen Quelle und Blende bzw. Blende und Schirm, diese werden in der quasiklassischen Näherung nur von \mathbf{B} beeinflusst, das aber hier entlang der Trajektorien Null ist.

Der Übergangswahrscheinlichkeit ist nun

$$\begin{aligned} W(x, L+l, t; 0, 0, t_0) &\approx A_I^2 A_L^2 b^2 \left(2 \cos \frac{mxd}{2(t-t_1)\hbar} \right)^2 \\ &= 2A_I^2 A_L^2 b^2 \left(1 + \cos \frac{mxd}{(t-t_1)\hbar} \right). \end{aligned}$$

Haben die Teilchen in z -Richtung einen Impuls $p = mv_z = m \frac{L}{t-t_1} = \frac{h}{\lambda_z}$ (λ_z ist die de Broglie-Wellenlänge), dann ergeben sich Maxima des Interferenzmusters bei $\frac{mxd}{(t-t_1)\hbar} = \frac{xd2\pi}{\lambda_z L} = 2\pi n$, i.e.

$$x_{\max} = n \frac{L\lambda_z}{d}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Als nächstes betrachten wir ein lokalisiertes Magnetfeld $\mathbf{B} \parallel y$ mit der Ausdehnung $R \ll d$ im Mittelpunkt zwischen beiden Schlitzen direkt hinter der Blende. Die Wirkung erhält jetzt einen Zusatzbeitrag

$$\Delta S_i = \frac{e}{c} \int_{t_0}^t (A_x \dot{x} + A_z \dot{z}) dt = \frac{e}{c} \int_{\text{Trajektorie } i} (A_x dx + A_z dz).$$

Analog erhält K_0 Zusatzfaktoren (die Vorfaktoren werden vom Vektorpotential \mathbf{A} nicht beeinflusst)

$$K_0 \rightarrow K_{\mathbf{A}}(x, L+l, t; 0, 0, t_0) \approx A_I A_L b e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \left[\left(\frac{L^2 + d^2/4}{t_1 - t_0} \right) + \left(\frac{L^2 + (x-d/2)^2}{t-t_1} \right) \right]} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{e}{c} \int_1 \mathbf{dr} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r})} \left[1 + e^{\frac{i}{\hbar} \left[\frac{mxd}{t-t_1} + \frac{e}{c} \int_2 \mathbf{dr} \cdot \mathbf{A} - \frac{e}{c} \int_1 \mathbf{dr} \cdot \mathbf{A} \right]} \right].$$

Nun ist

$$\int_2 \mathbf{dr} \cdot \mathbf{A} - \int_1 \mathbf{dr} \cdot \mathbf{A} = \oint \mathbf{dr} \cdot \mathbf{A} = \iint d\mathbf{f} \cdot (\nabla \times \mathbf{A}) = \phi$$

wobei ϕ der von den Trajektorien eingeschlossene Fluß ist und damit wird

$$W(x, L+l, t; 0, 0, t_0) \approx 2A_I^2 A_L^2 b^2 \left(1 + \cos \left[\frac{mxd}{\hbar(t-t_1)} + \frac{e}{c\hbar} \phi \right] \right).$$

Die Maxima von W ergeben sich daher für

$$\frac{2\pi xd}{\lambda_z L} + \frac{e}{c\hbar} \phi = 2\pi n,$$

d.h.

$$x_n = \frac{\lambda_z L}{d} \left(n + \frac{\phi}{\phi_0} \right), \quad \phi_0 = \frac{hc}{e_0}.$$

Die Verschiebung der Maxima hängt nur von ϕ/ϕ_0 ab und tritt auch dann auf, wenn die klassische Trajektorien nur in der Region $B = 0$ liegen. Dies ist der **Aharonov-Bohm-Effekt**.

Die Vollständigkeit halber erwähnen wir hier noch, daß der volle Propagator sich als Funktionalintegral der Form

$$K(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0) = \int_{\mathbf{x}_0}^{\mathbf{x}} D\mathbf{x}(t) e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t L(\mathbf{x}(t), \dot{\mathbf{x}}(t), t)} , \quad t > t_0$$

schreiben läßt, wobei jetzt über alle Pfade $\mathbf{x}(t)$ zwischen $\mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0$, $\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}$ summiert wird. Der klassische Pfad gibt nur einen Beitrag hierzu, der allerdings für klassische Phänomene dominiert, weil sich die Beiträge anderer Pfade wegen der schnellen Oszillationen von $\exp(iS/\hbar)$ herausheben (siehe Kapitel 13.2).

7.5 Der Spin des Elektrons

In 7.2 hatten wir den normalen Zeemann-Effekt untersucht, der zu einer Aufspaltung der Energieniveaus im Magnetfeld führt. Allerdings sind die experimentell beobachteten Aufspaltungen nicht mit der Vorhersage von 7.2 in Übereinstimmung, insbesondere ist die Größe der Aufspaltung für verschiedene Niveaus verschieden. Daneben existiert das bereits in Kapitel 1. beschriebene Experiment von Stern und Gerlach. Pauli, Compton und Uhlenbeck und Goudsmit kamen aufgrund verschiedener Tatbestände auf die Schlußfolgerung, daß das Elektron einen inneren Drehimpuls (Drall oder Spin) $\hbar/2$ haben muß.

Wir hatten außerdem schon gesehen, daß es Darstellungen des Drehimpulsoperators mit halbzahligen Wert von l gibt, die vom Bahndrehimpuls nicht realisiert werden können. Wir führen daher, in Anlehnung an den Bahndrehimpuls \hat{L} ein Spinoperator $\hat{S} = (\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z)$ mit

$$[\hat{s}_i, \hat{s}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{s}_k$$

ein. Die Eigenwerte von \hat{s}_z und \hat{s}^2 sind $\pm\hbar s$ und $\hbar^2 s(s+1) = \hbar^2 3/4$, dies folgt, wie im Kapitel 4, schon aus den Kommutatorbeziehungen. Die Eigenzustände werden durch die ket-Vektoren $|+\rangle = |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$ und $|-\rangle = |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$ dargestellt. Sie entsprechen den in Kapitel 4. betrachteten (aber damals noch nicht so geschriebenen Vektoren $|l, m\rangle$ mit $l = 1/2$ und $m = \pm 1/2$. Die Matrixdarstellung der Operatoren $\hat{s}_{\pm} = \hat{s}_x + i\hat{s}_y$, \hat{s}_z , \hat{s}_y , etc. ist uns daher schon bekannt (s.S.70). Die Matrixdarstellung von \hat{s}_x , \hat{s}_y , \hat{s}_z ist daher durch die auf S.70 unten betrachteten Matrixelemente mit $l = 1/2$, $m = \pm 1/2$ und $\hat{l}_i \rightarrow \hat{s}_i$, $\underline{s}_i = \langle \frac{1}{2}, m | \hat{s}_i | \frac{1}{2}, m' \rangle$:

$$\underline{s}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \underline{\sigma}_x, \quad \underline{s}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \underline{\sigma}_y, \quad \underline{s}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \underline{\sigma}_z$$

gegeben. $\underline{\sigma}_i$ sind die **Pauli-Matrizen**. Da $\underline{s}_x^2 = \underline{s}_y^2 = \underline{s}_z^2 = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ ist, folgt offenbar $\hat{s}_x^2 = \hat{s}_y^2 = \hat{s}_z^2 = \frac{\hbar^2}{4} \hat{1}$. Außerdem gilt wegen $s = 1/2$ $\hat{s}_+^2 = \hat{s}_-^2 = 0$,

dies impliziert $\hat{s}_x \hat{s}_y = -\hat{s}_y \hat{s}_x = (i\hbar/2)\hat{s}_z$, d.h. \hat{s}_x, \hat{s}_y (und \hat{s}_z) **antikommutieren** paarweise. (Wir haben hier $\hat{s}_+^2 = (\hat{s}_x + i\hat{s}_y)^2 = (\hat{s}_x^2 - \hat{s}_y^2) + i(\hat{s}_x \hat{s}_y + \hat{s}_y \hat{s}_x) = 0$ benutzt.)

Weiter gilt $\underline{\underline{\sigma}}_x \underline{\underline{\sigma}}_y \underline{\underline{\sigma}}_z = i\underline{\underline{1}}$ sowie $\text{Sp} \underline{\underline{\sigma}}_i = 0$ und $\text{Det} \underline{\underline{\sigma}}_i = -1$, $i = x, y, z$.

Ein allgemeiner Spinzustand kann in der Form $|\chi\rangle = \alpha_+|+\rangle + \alpha_-|-\rangle$ mit komplexen Koeffizienten α_{\pm} geschrieben werden, $|\alpha_+|^2 + |\alpha_-|^2 = 1$. Dieser Zustand kann auch durch den Spaltenvektor ($\alpha_+ = \langle +|\chi\rangle$, $\alpha_- = \langle -|\chi\rangle$)

$$\chi = \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix},$$

den man als **Spinor** bezeichnet, beschrieben werden. Die Basisspinoren, die den Zuständen $|\chi\rangle = |+\rangle$ bzw. $|\chi\rangle = |-\rangle$ entsprechen, sind

$$\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Ähnlich dem Bahndrehimpuls ist mit dem inneren Drehimpuls ein magnetisches Moment

$$\boldsymbol{\mu}_{\text{Spin}} = g \frac{e}{2mc} \mathbf{s}$$

verknüpft. g ist der gyromagnetische Faktor, $g \approx 2,0023$.

Der Spin ist ein zusätzlicher Freiheitsgrad, unabhängig von den räumlichen Freiheitsgraden, und kommutiert daher mit den räumlichen Freiheitsgraden:

$$[\hat{s}_i, \hat{x}_j] = [\hat{s}_i, \hat{p}_j] = [\hat{s}_i, \hat{l}_j] = 0 \quad \forall i, j.$$

Der Gesamtzustand wird aus dem **direkten Produkt** von **Orts- und Spinzuständen** aufgebaut. Z.B. kann man als Basiszustände $|\mathbf{x}\rangle|+\rangle$ bzw. $|\mathbf{x}\rangle|-\rangle$ wählen, der Gesamtzustand $|\Psi\rangle$ ist dann eine Linearkombination dieser Zustände

$$|\Psi\rangle = \int d^3x \{ \psi_+(\mathbf{x}) |\mathbf{x}\rangle|+\rangle + \psi_-(\mathbf{x}) |\mathbf{x}\rangle|-\rangle \}.$$

In der Orts- und s_z -Darstellung ist dieser Zustand durch

$$\begin{aligned} \langle +|\langle \mathbf{x}|\Psi\rangle &= \psi_+(\mathbf{x}) \\ \langle -|\langle \mathbf{x}|\Psi\rangle &= \psi_-(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

gegeben, mit der Normierungsbedingung $\langle \Psi|\Psi\rangle = \int d^3x [|\psi_+|^2 + |\psi_-|^2] = 1$. Wir können $\psi_{\pm}(\mathbf{x})$ zu einem (**2er**) **Spinor**

$$\Psi(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{x}) \\ \psi_-(\mathbf{x}) \end{pmatrix}$$

zusammenfassen. Der Hamiltonian des Elektrons lautet daher ($\mu_B = \frac{e_0 \hbar}{2mc} = 0,927 \cdot 10^{-20}$ erg/G ist das Bohrsche Magneton)

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + V(\mathbf{x}) + g\mu_B \hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{B}/\hbar$$

und die Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi\rangle = \hat{H} |\Psi\rangle$$

lautet in Komponentenform (wir multiplizieren die Schrödingergleichung von links mit $\langle s_z | \langle \mathbf{x} | = \langle \pm | \langle \mathbf{x} |$ und benutzen $\langle \pm | \langle \mathbf{x} | \Psi \rangle = \psi_{\pm}(\mathbf{x})$ sowie $\langle s_z | \hat{s}_i | s'_z \rangle = \frac{\hbar}{2} \underline{\underline{\sigma}}_i$).

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{x}, t) \\ \psi_-(\mathbf{x}, t) \end{pmatrix} = \left[\left(\frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \right)^2 + V(\mathbf{x}) \right) \underline{\underline{1}} + \frac{g}{2} \mu_B \sum_i \underline{\underline{\sigma}}_i \mathbf{B}_i \right] \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{x}, t) \\ \psi_-(\mathbf{x}, t) \end{pmatrix}.$$

Diese nicht-relativistische Gleichung (und ihre Derivate) nennt man **Pauli-Gleichung**.



W. Pauli (1900–1958)

Kapitel 8

Störungstheorie

8.1 Zeitunabhängige Störungen

Die wenigsten quantenmechanischen Probleme lassen sich exakt lösen. Häufig läßt sich aber der Hamiltonoperator in der Form

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1$$

schreiben, wobei $\lambda \hat{H}_1$ eine kleine Störung gegenüber \hat{H}_0 darstellt, und im Weiteren soll angenommen werden, daß die Lösung für \hat{H}_0 bekannt ist:

$$\hat{H}_0 |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle.$$

Wir suchen jetzt die Eigenwerte E_n und die Eigenzustände $|n\rangle$ des vollen Problems

$$\hat{H} |n\rangle = E_n |n\rangle$$

indem wir einen Potenzreihenansatz machen

$$\begin{aligned} E_n &= E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \\ |n\rangle &= |n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |n^{(2)}\rangle + \dots \end{aligned}$$

Diese Methode funktioniert nicht immer, ist z.B. der Energieeigenwert von der Form $E_n \sim \exp(-c/\lambda)$, dann verschwinden alle Terme einer Taylorentwicklung um $\lambda = 0$. Auch kann es sein, daß die Reihe nicht konvergiert. Bei sogenannten asymptotischen Reihen muß man dann eine geeignete Abbruchsbedingung finden.

Wir beginnen mit dem einfachsten Fall und nehmen an, daß die Zustände $|n^{(0)}\rangle$ **nicht entartet** sind. Wir setzen dann den Reihenansatz in die zeitunabhängige Form der Schrödingergleichung ein

$$\begin{aligned} (\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1) \left(|n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |n^{(2)}\rangle + \dots \right) = \\ \left(E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \right) \left(|n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |n^{(2)}\rangle + \dots \right) \end{aligned}$$

und vergleichen die Koeffizienten für λ^k

$$\hat{H}_0|n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|n^{(0)}\rangle \quad (8.1)$$

$$\hat{H}_0|n^{(1)}\rangle + \hat{H}_1|n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)}|n^{(0)}\rangle \quad (8.2)$$

$$\hat{H}_0|n^{(2)}\rangle + \hat{H}_1|n^{(1)}\rangle = E_n^{(0)}|n^{(2)}\rangle + E_n^{(1)}|n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)}|n^{(0)}\rangle \quad (8.3)$$

etc..

Legt man die Normierung von $|n\rangle$ durch $\langle n^{(0)}|n\rangle = 1$ fest, dann folgt unmittelbar aus dem Reihenansatz

$$\langle n^{(0)}|n^{(1)}\rangle = \langle n^{(0)}|n^{(2)}\rangle = \dots = 0.$$

Aus (8.2) folgt nach Multiplikation von links mit $\langle n_0|$

$$\langle n^{(0)}|\hat{H}_0|n^{(1)}\rangle + \langle n^{(0)}|\hat{H}_1|n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} \cdot 0 + \langle n^{(0)}|\hat{H}_1|n^{(0)}\rangle = E_n^{(1)},$$

i.e.

$$E_n^{(1)} = \langle n^{(0)}|\hat{H}_1|n^{(0)}\rangle.$$

Um $|n^{(1)}\rangle$ zu finden entwickeln wir

$$|n^{(1)}\rangle = \sum_m |m^{(0)}\rangle \cdot \langle m^{(0)}|n^{(1)}\rangle = \sum_m c_m |m^{(0)}\rangle$$

und multiplizieren dann (8.2) von links mit $\langle m^{(0)}|$ ($\neq \langle n^{(0)}|$). Dies ergibt

$$\begin{aligned} \langle m^{(0)}|\hat{H}_0|n^{(1)}\rangle + \langle m^{(0)}|\hat{H}_1|n^{(0)}\rangle &= E_m^{(0)}c_m + \langle m^{(0)}|\hat{H}_1|n^{(0)}\rangle \\ &= E_n^{(0)}c_m + E_n^{(1)} \underbrace{\langle m^{(0)}|n^{(0)}\rangle}_0. \end{aligned}$$

Damit folgt für die Entwicklungskoeffizienten

$$c_m = \frac{\langle m^{(0)}|\hat{H}_1|n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

und

$$|n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} c_m |m^{(0)}\rangle.$$

Analog erhält man in zweiter Ordnung in der Störungstheorie nach Multiplikation von (8.3) mit $\langle n^{(0)} |$

$$\begin{aligned} \langle n^{(0)} | \hat{H}_0 | n^{(2)} \rangle + \langle n^{(0)} | \hat{H}_1 | n^{(1)} \rangle &= E_n^{(0)} \underbrace{\langle n^{(0)} | n^{(2)} \rangle}_0 + \langle n^{(0)} | \hat{H}_1 | \sum_{m \neq n} c_m | m^{(0)} \rangle \\ &= E_n^{(0)} \underbrace{\langle n^{(0)} | n^{(2)} \rangle}_0 + E_n^{(1)} \underbrace{\langle n^{(0)} | n^{(1)} \rangle}_0 + E_n^{(2)}, \end{aligned}$$

d.h.

$$\boxed{E_n^{(2)} = \langle n^{(0)} | \hat{H}_1 | n^{(1)} \rangle = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle n^{(0)} | \hat{H}_1 | m^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}.} \quad (8.4)$$

Wichtig zu (be-)merken ist, daß für den **Grundzustand** $E_0^{(0)}$ die **2. Ordnung** in der Störungstheorie immer zu einer **Energieabsenkung** führt. Da in vielen Fällen $E_n^{(2)}$ aufgrund der Symmetrie von \hat{H}_1 verschwindet, bedeutet dies dann eine tatsächliche Energieabsenkung.

Wir betrachten jetzt den Fall, in dem **nur zwei Zustände** $|1^{(0)}\rangle$ und $|2^{(0)}\rangle$ existieren. In 2. Ordnung der Störungstheorie erhält man

$$\begin{aligned} E_1 &= E_1^{(0)} + \lambda \langle 1^{(0)} | \hat{H}_1 | 1^{(0)} \rangle - \lambda^2 \frac{|\langle 1^{(0)} | \hat{H}_1 | 2^{(0)} \rangle|^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} \\ E_2 &= E_2^{(0)} + \lambda \langle 2^{(0)} | \hat{H}_1 | 2^{(0)} \rangle + \lambda^2 \frac{|\langle 1^{(0)} | \hat{H}_1 | 2^{(0)} \rangle|^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}}. \end{aligned}$$

Die λ^2 -Terme sind daher betragsmäßig gleich, haben aber unterschiedliches Vorzeichen. Das Niveau E_1 ($E_1^{(0)} < E_2^{(0)}$) wird abgesenkt, das Niveau E_2 angehoben. Man spricht daher von einer **Abstoßung der Niveaus (Level-Repulsion)**. Im Prinzip existiert dieses Phänomen auch bei mehreren Niveaus, allerdings kann sich hier die Abstoßung zwischen den Nachbarniveaus teilweise kompensieren.

Im Fall eines kontinuierlichen Spektrums ist in (8.4) die Summe durch ein Integral zu ersetzen.

Wir kommen jetzt zu dem Fall, daß ein **Energieniveau** $E_n^{(0)}$ (auf das wir uns jetzt beschränken) **k-fach entartet** ist. Es gilt also

$$\hat{H}_0 | n_i^{(0)} \rangle = E_n^{(0)} | n_i^{(0)} \rangle, \quad i = 1, \dots, k.$$

In der bisher betrachteten Störungsreihe würden in den Nennern von c_m und $E_n^{(2)}$ Differenzen des gleichen Energiewerts auftreten, die Reihe würde also nicht mehr

wohl definiert sein. Um dies zu vermeiden müssen wir – ähnlich wie im 2.11 – zu einem neuen Basissystem $|n_\alpha^{(0)}\rangle$, $\alpha = 1 \dots k$ übergehen, so daß

$$\langle n_\alpha^{(0)} | \hat{H}_1 | n_\beta^{(0)} \rangle = H_1^{(\alpha)} \delta_{\alpha\beta}$$

für $\alpha \neq \beta$ verschwindet. Die Ausgangsmatrixelemente der Störungstheorie

$$H_{1,ij} = \langle n_i^{(0)} | \hat{H}_1 | n_j^{(0)} \rangle$$

bilden die **hermitesche Matrix** \underline{H}_1 . Diese kann, wie in 2.11 gezeigt, durch eine unitäre Transformation diagonalisiert werden. Die neuen Zustände lassen sich dann in der Form

$$|n_\alpha^{(0)}\rangle = \sum_i U_{i\alpha} |n_i^{(0)}\rangle$$

schreiben, wobei die Koeffizienten $U_{i\alpha}$ die Relation

$$\sum_{i,j} U_{i\alpha}^* H_{1,ij} U_{j\beta} = H_1^{(\alpha)} \delta_{\alpha\beta}$$

erfüllen. Wegen der Unitarität gilt $\underline{U}\underline{U}^\dagger = 1$ oder

$$\sum_i U_{i\alpha}^* U_{i\beta} = \delta_{\alpha\beta}, \quad \sum_\alpha U_{i\alpha} U_{j\alpha}^* = \delta_{ij}.$$

Damit folgt

$$\sum_j \left(H_{1,ij} - \delta_{ij} H_1^{(\beta)} \right) U_{j\beta} = 0,$$

aus der **Säkulargleichung** (diese Bezeichnung stammt aus der Himmelsmechanik)

$$\boxed{|H_{1,ij} - H_1^{(\beta)} \delta_{ij}| = 0}$$

folgen die **Eigenwerte** $H_1^{(\beta)}$. Mit diesen können die Eigenvektoren $(U_{1,\beta}, \dots, U_{k,\beta})$ und damit die neuen Zustände $|n_\alpha^{(0)}\rangle$ bestimmt werden. Da \hat{H}_1 in der Basis $|n_\alpha^{(0)}\rangle$ diagonal ist, gilt nun $\langle n_\beta^{(0)} | n_\alpha^{(1)} \rangle = 0$ für $\beta \neq \alpha$ und $|n_\alpha^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} \langle m^{(0)} | n_\alpha^{(1)} \rangle |m^{(0)}\rangle$.

Die Energieeigenwerte folgen dann aus den bekannten Formeln

$$E_{n,\alpha} = E_n^{(0)} + \lambda \langle n_\alpha^{(0)} | \hat{H}_1 | n_\alpha^{(0)} \rangle + \lambda^2 \sum_{m \neq n} \frac{|\langle n_\alpha^{(0)} | \hat{H}_1 | m^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}.$$

Die Störung \hat{H}_1 hebt also im allgemeinen die k -fache Entartung des Energieniveaus $E_n^{(0)}$ auf.

8.2 Das Ritzsche Variationsprinzip

Für einen Hamiltonoperator \hat{H} mit Basis $|n\rangle$ gilt

$$\begin{aligned}\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle &= \sum_n \langle\psi|n\rangle\langle n|\hat{H}|\psi\rangle = \sum_n E_n |\langle\psi|n\rangle|^2 \\ &\geq E_0 \sum_n |\langle\psi|n\rangle|^2 = E_0 \langle\psi|\psi\rangle\end{aligned}$$

und damit

$$E_0 \leq \frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}.$$

Beim Ritzschen Variationsprinzip wird $|\psi\rangle$ als Funktion eines oder mehrerer Parameter μ gewählt und dann μ aus der Minimumsbedingung für $E(\mu) = \langle\psi(\mu)|\hat{H}|\psi(\mu)\rangle / \langle\psi(\mu)|\psi(\mu)\rangle$ bestimmt.

Wir setzen jetzt $|\psi\rangle = |n\rangle + |\varepsilon\rangle$, mit $\langle n|\varepsilon\rangle = 0$ folgt

$$\frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{E_n + \langle\varepsilon|\hat{H}|\varepsilon\rangle}{\langle n|n\rangle + \langle\varepsilon|\varepsilon\rangle} = E_n + O(\varepsilon^2),$$

d.h. ein Fehler der Ordnung ε in der Wellenfunktion gegenüber der wahren Eigenfunktion $|n\rangle$ äußert sich in der Energie erst in quadratischer Ordnung in ε .

8.3 Zeitabhängige Störungstheorie

Wir wollen jetzt den Fall betrachten, daß die Störung $\lambda\hat{H}_1(t)$ explizit zeitabhängig ist. In diesem Fall gibt es keine stationären Zustände. $\lambda\hat{H}_1(t)$ soll aber wieder klein gegenüber \hat{H}_0 sein und außerdem für $t \leq t_0$ verschwinden. Für $t \leq t_0$ wird das System durch die Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi^{(0)}(t)\rangle = \hat{H}_0 |\psi^{(0)}(t)\rangle$$

beschrieben. Für $t > t_0$ gilt dann

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = (\hat{H}_0 + \lambda\hat{H}_1(t)) |\psi(t)\rangle$$

mit der Anfangsbedingung $|\psi(t)\rangle = |\psi^{(0)}(t)\rangle$ für $t \leq t_0$.

Wir gehen jetzt zur Wechselwirkungsdarstellung (siehe Kapitel 6.3) über:

$$|\psi_D(t)\rangle = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} |\psi(t)\rangle,$$

wobei $|\psi_D(t)\rangle$ die Bewegungsgleichung (siehe Abschnitt 6.3)

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_D(t)\rangle = \lambda\hat{H}_{1,D}(t) |\psi_D(t)\rangle$$

mit

$$\hat{H}_{1,D}(t) = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{H}_1(t) e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}$$

erfüllt. Die Zeitintegration ergibt

$$|\psi_D(t)\rangle = |\psi_D(t_0)\rangle + \frac{\lambda}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}_{1,D}(t') |\psi_D(t')\rangle.$$

Setzt man die linke Seite wiederholt rechts ein, ergibt sich eine Störungsreihe nach λ . In erster Ordnung erhält man

$$|\psi_D(t)\rangle \approx \left(1 + \frac{\lambda}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}_{1,D}(t') \right) |\psi_D(t_0)\rangle.$$

Die volle Lösung kann wieder mit dem Zeitordnungsoperator in der Form

$$|\psi_D(t)\rangle = \hat{T}_t e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \lambda \hat{H}_{1,D}(t') dt'} |\psi_D(t_0)\rangle$$

geschrieben werden.

Als **Beispiel** betrachten wir den Fall, in dem das System anfangs ($t = 0$) im Eigenzustand $|m\rangle$ des Hamiltonians \hat{H}_0 war

$$|m(t)\rangle = e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} |m\rangle = e^{-iE_m t/\hbar} |m\rangle.$$

Durch die Wirkung von \hat{H}_1 geht das System in andere Zustände über. Zur Zeit t ist das System im Zustand $|\psi_m(t)\rangle = \sum_n \langle n(t) | \psi_m(t) \rangle |n(t)\rangle$. Gefragt ist die Übergangswahrscheinlichkeit vom Zustand $|m\rangle$ in den Zustand $|n(t)\rangle$. Die Wahrscheinlichkeitsamplitude für den Übergang vom Zustand $|m\rangle$ in den Zustand $|n(t)\rangle$, ist durch

$$\langle n(t) | \psi_m(t) \rangle = \langle n | e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} | \psi_m(t) \rangle = \langle n | \psi_{m,D}(t) \rangle$$

gegeben. Mit dem Anfangszustand $|\psi_{m,D}^0(t)\rangle = \exp(i\hat{H}_0 t/\hbar) |m(t)\rangle = |m\rangle$ folgt in erster Ordnung in λ

$$|\psi_{m,D}(t)\rangle = |m\rangle + \frac{\lambda}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}_{1,D}(t') |m\rangle \quad (8.5)$$

und damit für das Skalarprodukt

$$\begin{aligned} \langle n(t) | \psi_m(t) \rangle &= \langle n | e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \cdot e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} | \psi_{m,D}(t) \rangle \\ &= \langle n | \psi_{m,D}(t) \rangle = \delta_{n,m} + \frac{\lambda}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' e^{i(E_n - E_m)t'/\hbar} \langle n | \hat{H}_1(t') | m \rangle, \end{aligned}$$

wobei wir (8.5) benutzt haben. Die Übergangswahrscheinlichkeit vom Zustand $|m\rangle$ in dem Zustand $|n\rangle$ ist dann durch

$$P_{mn}(t) = |\langle n(t)|\psi_m(t)\rangle|^2 = \left| \frac{1}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' e^{i(E_n - E_m)t'/\hbar} \langle n|H_1(t')|m\rangle \right|^2$$

gegeben.

Man kann jetzt diesen Ausdruck auf Übergänge in ein kontinuierliches Spektrum von Endzuständen anwenden. Wir betrachten zunächst den Fall $H_1(t) = V\Theta(t)$. Dann wird

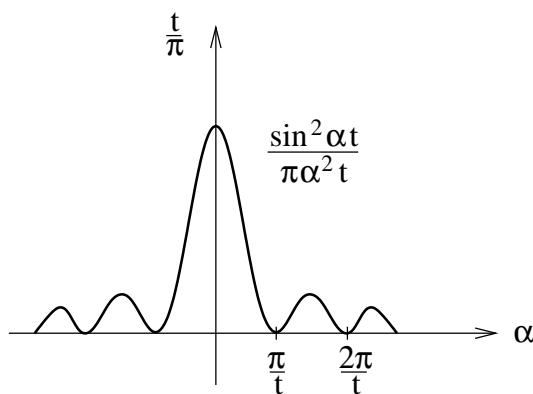
$$\begin{aligned} P_{mn}(t) &= \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t dt' e^{i(E_n - E_m)t'/\hbar} \langle n|V|m\rangle \right|^2 \\ &= \frac{1}{\hbar^2} \left| \frac{e^{i\omega_{nm}t} - 1}{\omega_{nm}} \langle n|V|m\rangle \right|^2 \\ &= \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\sin(\omega_{nm}t/2)}{\omega_{nm}/2} \right)^2 |\langle n|V|m\rangle|^2. \end{aligned}$$

$\omega_{nm} = (E_n - E_m)/\hbar$. Für $t \rightarrow \infty$ ist $\frac{\sin^2 \alpha t}{\pi \alpha^2 t}$ eine Darstellung der δ -Funktion $\delta(\alpha)$, d.h. für große Zeiten gilt ($\alpha = \omega_{nm}/2$)

$$P_{nm}(t) \approx \frac{2\pi}{\hbar} t \delta(E_n - E_m) |\langle n|V|m\rangle|^2.$$

Nebenrechnung:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\alpha \frac{\sin^2 \alpha t}{\pi \alpha^2 t} = 2 \int_0^{\infty} d\alpha t \frac{\sin^2 \alpha t}{\pi \alpha^2 t^2} = 1 \quad (t > 0)$$



Die **Übergangsrate**, d.h. die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheiten ist durch

$$\Gamma_{mn} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_n - E_m) |\langle n|\hat{V}|m\rangle|^2$$

gegeben. Liegen die Zustände E_n kontinuierlich (oder praktisch kontinuierlich), und ist das Matrixelement $\langle n|\hat{V}|m\rangle$ nur schwach von n abhängig, dann folgt mit der Zustandsdichte $\rho(E)$

$$\sum_n \Gamma_{mn} = \int dE_n \rho(E_n) \Gamma_{mn} = \rho(E_m) \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n|\hat{V}|m\rangle|^2$$

Diese Relationen (Pauli (1928)) werden als **“Goldene Regel”** bezeichnet.

Bei periodischen Störungen ist

$$\hat{H}_1(t) = \Theta(t) \left(\hat{F} e^{-i\omega t} + \hat{F}^\dagger e^{i\omega t} \right),$$

wobei \hat{F} ein Operator ist. Dann wird

$$\langle n(t)|\psi(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' \left[e^{i(\omega_{nm}-\omega)t'} \langle n|\hat{F}|m\rangle + e^{i(\omega_{nm}+\omega)t'} \langle n|\hat{F}^\dagger|m\rangle \right]$$

und damit

$$\left| \langle n(t)|\psi(t)\rangle \right|^2 = t \frac{2\pi}{\hbar^2} \left[\delta(\omega_{nm} - \omega) \left| \langle n|\hat{F}|m\rangle \right|^2 + \delta(\omega_{nm} + \omega) \left| \langle n|\hat{F}^\dagger|m\rangle \right|^2 \right],$$

wobei die gemischten Terme wegen der sich ausschließenden δ -Funktionen keinen Beitrag liefern

$$\Gamma_{mn} = \frac{2\pi}{\hbar} \left[\delta(E_n - E_m - \hbar\omega) \left| \langle n|\hat{F}|m\rangle \right|^2 + \delta(E_n - E_m + \hbar\omega) \left| \langle n|\hat{F}^\dagger|m\rangle \right|^2 \right].$$

Kapitel 9

Addition von Drehimpulsen

9.1 Addition von Bahndrehimpulsen

In 4.1 hatten wir gesehen, daß in isotropen Systemen \hat{H} mit dem Operator für infinitesimale Drehungen $\hat{X}_i = -\frac{i}{\hbar}\hat{l}_i$, $i = x, y, z$ kommutiert, der Drehimpuls ist dann erhalten.

Wir wollen dies jetzt auf den Fall mehrerer spinlosen Teilchen $\alpha = 1, \dots, n$ verallgemeinern. Zunächst bestimmen wir den Operator $\hat{T}_{\delta\varphi}$ für eine Drehung des Systems um $\delta\varphi$ (vergleiche 4.1):

$$\begin{aligned}\hat{T}_{\delta\varphi}\psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) &= \psi'(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) = \psi(\mathbf{x}_1 - \delta\varphi \times \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n - \delta\varphi \times \mathbf{x}_n) \\ &\approx \left(1 - \sum_{\alpha=1}^n (\delta\varphi \times \mathbf{x}_\alpha) \cdot \nabla_{\mathbf{x}_\alpha}\right) \psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) \\ &= \left(1 - \sum_{\alpha=1}^n \frac{i}{\hbar} \delta\varphi (\mathbf{x}_\alpha \times \hat{\mathbf{p}}_\alpha)\right) \psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) \\ &= \left(1 - \frac{i}{\hbar} \delta\varphi \sum_{\alpha=1}^n \hat{\mathbf{l}}_\alpha\right) \psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n).\end{aligned}$$

Damit wird wie auf S.67 durch wiederholte Anwendung von $\hat{T}_{\delta\varphi}$:

$$\hat{T}_{\varphi} = e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi\hat{\mathbf{L}}},$$

wobei

$$\hat{\mathbf{L}} = \sum_{\alpha=1}^n \hat{\mathbf{l}}_\alpha$$

die **Gesamt-Bahndrehimpuls** des Systems ist. Ist das System **isotrop**, dann kommutiert \hat{H} mit \hat{T}_{φ} und der **Gesamtdrehimpuls** $\hat{\mathbf{L}}$ ist **erhalten**. Wir können dann wieder Eigenfunktionen des Schrödingerproblems suchen, die auch Eigenfunktionen von $\hat{\mathbf{L}}^2$ und \hat{L}_z sind. Da Operatoren, die auf verschiedene Teilchen wirken

miteinander kommutieren

$$[\hat{l}_{i\alpha}, \hat{l}_{j\beta}] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{l}_k \delta_{\alpha\beta},$$

folgt

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{L}_k.$$

Die **Drehimpulse** der **einzelnen Teilchen** sind aber **i.a. nicht mehr erhalten**.

Als **Beispiel** betrachten wir ein System aus zwei Teilchen

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_{12},$$

wobei \hat{H}_1, \hat{H}_2 nur die Koordinaten des Teilchens 1 bzw. 2 enthält, \hat{H}_{12} beschreibt eine abstandsabhängige Wechselwirkung zwischen den Teilchen: $\hat{H}_{12} = v(|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|)$.

Wir wollen jetzt annehmen, daß

$$\hat{H}_\alpha = -\frac{\hbar^2}{2m_\alpha} \Delta_\alpha + V(|\mathbf{x}_\alpha|), \quad \alpha = 1, 2$$

gilt, V ist also ein Zentralpotential. Aus 5.1 wissen wir, daß

$$[\hat{H}_\alpha, \hat{l}_{\beta,z}^2] = [\hat{H}_\alpha, \hat{l}_{\beta,z}] = 0$$

gilt. Für $\alpha = \beta$ folgt dies aus der Isotropie des Potentials, für $\alpha \neq \beta$ ist dies trivial, da \hat{H}_α und $\hat{l}_{\beta,z}$ auf verschiedene Koordinaten wirken. Allerdings kommutieren \hat{l}_1, \hat{l}_2 nicht mit \hat{H}_{12} :

$$[\hat{l}_1, \hat{H}_{12}] = [\hat{l}_1, v(|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|)] \neq 0$$

z.B.

$$\begin{aligned} [\hat{l}_{1,z}, v(|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|)] &= \frac{\hbar}{i} \left(x_1 \frac{\partial v}{\partial y_1} - y_1 \frac{\partial v}{\partial x_1} \right) = \frac{\hbar}{i} v'(|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|) \frac{x_1(y_1 - y_2) - y_1(x_1 - x_2)}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} \\ &= \frac{\hbar}{i} v'(|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|) \frac{y_1 x_2 - x_1 y_2}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} \end{aligned}$$

und analog

$$[\hat{l}_{2,z}, v(|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|)] = \frac{\hbar}{i} v'(|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|) \frac{x_1 y_2 - y_1 x_2}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|}.$$

\hat{l}_1, \hat{l}_2 sind also nicht mehr Erhaltungsgrößen. Wohl aber der Gesamtdrehimpuls $\hat{\mathbf{L}} = \hat{l}_1 + \hat{l}_2$. Z.B. folgt für $\hat{L}_z = \hat{l}_{1,z} + \hat{l}_{2,z}$

$$[\hat{L}_z, v(|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|)] = 0.$$

$\hat{\mathbf{L}}$ kommutiert auch mit \hat{l}_1 und \hat{l}_2 .

Als **Basiszustände** für die Beschreibung eines Zustandsvektors im Zwei-Teilchen-Hilbertraum können wir die **Eigenzustände** $|l_1, m_1\rangle$ bzw. $|l_2, m_2\rangle$ benutzen ($\alpha = 1, 2$)

$$\hat{\mathbf{I}}_\alpha^2 |l_\alpha, m_\alpha\rangle = \hbar^2 l_\alpha(l_\alpha + 1) |l_\alpha, m_\alpha\rangle, \quad \hat{I}_{\alpha,z} |l_\alpha, m_\alpha\rangle = \hbar m_\alpha |l_\alpha, m_\alpha\rangle.$$

Die Zustände $|l_\alpha, m_\alpha\rangle$, $\alpha = 1, 2$ spannen je einen Zustandsraum \mathbb{L}_1 bzw. \mathbb{L}_2 auf. Die Zustände des direkten Produkts $|l_1, m_1\rangle |l_2, m_2\rangle$ spannen dann den Zwei-Teilchen-Hilbertraum $\mathbb{L} = \mathbb{L}_1 \times \mathbb{L}_2$ auf, dessen Basisvektoren

$$|l_1, l_2, m_1, m_2\rangle = |l_1, m_1\rangle |l_2, m_2\rangle$$

sind (man kann auch ein \times zwischen $|l_1, m_1\rangle \times |l_2, m_2\rangle$ machen). Obwohl diese Basis vollständig ist, und jeder Vektor Eigenzustand von $\hat{\mathbf{I}}_\alpha^2$ und $\hat{I}_{\alpha,z}$ ($\alpha = 1, 2$) ist, sind die Basisvektoren i.a. **nicht mehr Eigenzustände von $\hat{\mathbf{L}}^2$ bzw. \hat{L}_z** , da z.B.

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{I}_{1,z}] &= [\hat{\mathbf{I}}_1^2 + \hat{\mathbf{I}}_2^2 + 2\hat{\mathbf{I}}_1\hat{\mathbf{I}}_2, \hat{I}_{1,z}] = 2[\hat{\mathbf{I}}_1\hat{\mathbf{I}}_2, \hat{I}_{1,z}] \\ &= 2[\hat{I}_{1x}\hat{I}_{2x} + \hat{I}_{1y}\hat{I}_{2y} + \hat{I}_{1z}\hat{I}_{2z}, \hat{I}_{1,z}] \\ &= 2i\hbar(-\hat{I}_{1y}\hat{I}_{2x} + \hat{I}_{1x}\hat{I}_{2y}) \end{aligned}$$

gilt. Da alle Komponenten des Gesamtdrehimpulses $\hat{\mathbf{L}}$ aber erhalten sind, ist es zweckmäßig, zu einer Basis überzugehen, die aus Eigenzustände von $\hat{\mathbf{L}}^2$ und \hat{L}_z besteht. Da weiter $\hat{\mathbf{L}}^2$ und \hat{L}_z mit $\hat{\mathbf{I}}_1^2$ und $\hat{\mathbf{I}}_2^2$ vertauschen:

$$\begin{aligned} [\hat{L}_z, \hat{\mathbf{I}}_1^2] &= [\hat{I}_{1,z} + \hat{I}_{2,z}, \hat{\mathbf{I}}_1^2] = [\hat{I}_{1,z}, \hat{\mathbf{I}}_1^2] = 0 \\ [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{I}}_1^2] &= [\hat{\mathbf{I}}_1^2 + \hat{\mathbf{I}}_2^2 + 2\hat{\mathbf{I}}_1\hat{\mathbf{I}}_2, \hat{\mathbf{I}}_1^2] = 2[\hat{I}_{1,x}\hat{I}_{2,x} + \hat{I}_{1,y}\hat{I}_{2,y} + \hat{I}_{1,z}\hat{I}_{2,z}, \hat{\mathbf{I}}_1^2] = 0 \end{aligned}$$

bietet es sich an, als **Basis Eigenzustände** $|L, M, l_1, l_2\rangle$ **von $\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z, \hat{\mathbf{I}}_1^2$ und $\hat{\mathbf{I}}_2^2$** zu wählen

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{L}}^2 |L, M, l_1, l_2\rangle &= \hbar^2 L(L+1) |L, M, l_1, l_2\rangle \\ \hat{L}_z |L, M, l_1, l_2\rangle &= \hbar M |L, M, l_1, l_2\rangle \\ \hat{\mathbf{I}}_1^2 |L, M, l_1, l_2\rangle &= \hbar^2 l_1(l_1+1) |L, M, l_1, l_2\rangle \\ \hat{\mathbf{I}}_2^2 |L, M, l_1, l_2\rangle &= \hbar^2 l_2(l_2+1) |L, M, l_1, l_2\rangle. \end{aligned}$$

Die Eigenwerte folgen allein schon aus der Kommutatoralgebra der $\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z, \hat{\mathbf{I}}_1^2$ und $\hat{\mathbf{I}}_2^2$.

Die $|L, M, l_1, l_2\rangle$ bilden ein vollständiges Orthonormalsystem, das wir nach $|l_1, l_2, m_1, m_2\rangle$ entwickeln wollen.

$$|L, M, l_1, l_2\rangle = \sum_{\substack{l'_1, l'_2 \\ m_1, m_2}} \langle l'_1, l'_2, m_1, m_2 | L, M, l_1, l_2 \rangle |l'_1, l'_2, m_1, m_2\rangle$$

Aus

$$\begin{aligned}\langle l'_1, l'_2, m_1, m_2 | \hat{I}_\alpha^2 | L, M, l_1, l_2 \rangle &= \langle l'_1, l'_2, m_1, m_2 | L, M, l_1, l_2 \rangle \hbar^2 l_\alpha (l_\alpha + 1) \\ &= \langle l'_1, l'_2, m_1, m_2 | L, M, l_1, l_2 \rangle \hbar^2 l'_\alpha (l'_\alpha + 1)\end{aligned}$$

(bei Anwendung von \hat{I}_α^2 nach rechts bzw. links) folgt $l'_\alpha = l_\alpha$ ($\alpha = 1, 2$), alle andere Matrixelemente verschwinden.

Weiter folgt analog

$$\begin{aligned}\langle l_1, l_2, m_1, m_2 | \hat{L}_z | L, M, l_1, l_2 \rangle &= \hbar(m_1 + m_2) \langle l_1, l_2, m_1, m_2 | L, M, l_1, l_2 \rangle \\ &= \hbar M \langle l_1, l_2, m_1, m_2 | L, M, l_1, l_2 \rangle,\end{aligned}$$

d.h. $M = m_1 + m_2$. Die Entwicklung läßt sich jetzt in der Form

$$|L, M, l_1, l_2\rangle = \sum_{m_1, m_2} \delta_{M, m_1 + m_2} \langle l_1, l_2, m_1, m_2 | L, M, l_1, l_2 \rangle |l_1, l_2, m_1, m_2\rangle$$

schreiben. Die Koeffizienten $\langle l_1, l_2, m_1, m_2 | L, M, l_1, l_2 \rangle$ heißen **Clebsch–Gordon–Koeffizienten**.

Wir wollen jetzt die möglichen Werte von L bei gegebenen l_1 und l_2 bestimmen.

1. *Schritt:* Für die Ausgangsbasis gilt bei vorgegebenen l_1, l_2

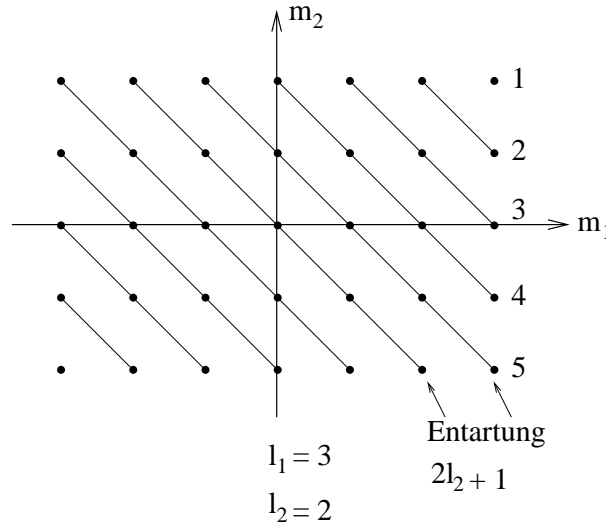
$$\begin{aligned}m_1 &= l_1, l_1 - 1, \dots, -l_1, & m_2 &= l_2, l_2 - 1, \dots, -l_2 \\ m_1 + m_2 &= M.\end{aligned}$$

2. *Schritt:* Aus den Werten von m_1, m_2 folgt M .

Die Werte von M und L lassen sich in folgender Tabelle übersichtlich darstellen (sei $l_1 \geq l_2$ o.B.d.A.)

M	(m_1, m_2)	Entartung von M
$l_1 + l_2$	(l_1, l_2)	1
$l_1 + l_2 - 1$	$(l_1 - 1, l_2), (l_1, l_2 - 1)$	2
$l_1 + l_2 - 2$	$(l_1 - 2, l_2), (l_1 - 1, l_2 - 1), (l_1, l_2 - 2)$	3
\vdots	\vdots	\vdots
$l_1 - l_2$	$(l_1 - 2l_2, l_2), \dots, (l_1, l_2 - 2l_2)$	$2l_2 + 1$
$l_1 - l_2 - 1$	$(l_1 - 2l_2 - 1, l_2), \dots, (l_1 - 1, -l_2)$	$2l_2 + 1$
\vdots	\vdots	\vdots
$-(l_1 - l_2)$	$(-l_1, l_2), \dots, (-l_1 + 2l_2, -l_2)$	$2l_2 + 1$
$-(l_1 - l_2) - 1$	$(-l_1, l_2 - 1), \dots, (-l_1 + 2l_2 - 1, -l_2)$	$2l_2$
\vdots	\vdots	\vdots
$-(l_1 + l_2)$	$(-l_1, -l_2)$	1

Die möglichen L -Werte folgen aus den maximal ausgerichteten Zuständen. Da $l_1 + l_2 = \text{Max}(M)$ ist auch $l_1 + l_2$ der größte Wert für den Gesamtdrehimpuls L



L	M
$l_1 + l_2$	$l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 1, \dots, -l_1 - l_2$
$l_1 + l_2 - 1$	$l_1 + l_2 - 1, \dots, -(l_1 + l_2 - 1)$
\vdots	\vdots
$ l_1 - l_2 $	$ l_1 - l_2 , \dots, - l_1 - l_2 $

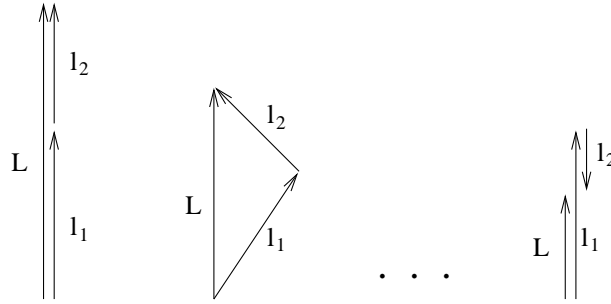
Der höchste Wert von M , $l_1 + l_2$, tritt nur einmal auf. Der zweithöchste Wert $l_1 + l_2 - 1$ tritt zweimal auf. Einmal erscheint als zweitgrößter M -Wert von $L = l_1 + l_2$, einmal als größter M -Wert von $L = l_1 + l_2 - 1$, usw. Die Gesamtzahl N der Zustände $|L, M, l_1, l_2\rangle$ und $|l_1, l_2, m_1, m_2\rangle$ bei festgehaltenem l_1 und l_2 ist gleich, nämlich $(2l_1 + 1)(2l_2 + 1)$. Tatsächlich

$$\begin{aligned} \sum_{l=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2} (2l+1) &= \sum_{k=0}^{2l_2} (2(l_1-l_2+k)+1) \\ &= (2(l_1-l_2)+1)(2l_2+1) - 2l_2(2l_2+1) = (2l_1+1)(2l_2+1), \quad \text{q.e.d.} \end{aligned}$$

Durch den Übergang zur neuen Basis $|L, M, l_1, l_2\rangle$ ist im allgemeinen das Schrödingersche Eigenwertproblem noch nicht gelöst: die Matrixelemente $\langle L, M, l_1, l_2 | \hat{H} | L', M', l'_1, l'_2 \rangle$ können (bei einem $\text{SO}(3)$ -symmetrischen Gesamtsystem) immer noch nichtdiagonale Terme bezüglich l_1, l'_1 und l_2, l'_2 haben, lediglich bezüglich L, L' und M, M' sind diese diagonal, da $[\hat{H}, \hat{\mathbf{L}}^2] = [\hat{H}, \hat{L}_z] = 0$ ist. Trotzdem ist die weitere Diagonalisierung leichter durchzuführen als mit dem ursprünglichen Basissystem $|l_1, l_2, m_1, m_2\rangle$.

Ist die Wechselwirkung zwischen den Teilsystemen so schwach, daß man diese de facto vernachlässigen kann, dann sind die l_α , $\alpha = 1, 2$ auch noch “gute Quantenzahlen”, und das obige Schema sagt uns, wie die Drehimpulse der Teilsysteme zum Gesamtdrehimpuls addiert werden können.

Die Addition der Drehimpulse läßt sich durch folgende Vektoraddition anschaulich machen



Man kann dieses Verfahren fortsetzen und ein drittes Teilchen hinzunehmen. Man geht z.B. zunächst von den Zuständen $|l_1, m_1\rangle|l_2, m_2\rangle$ zu Zuständen $|L_{1,2}, M_{1,2}, l_1, l_2\rangle$ wie bisher beschrieben über ($L_{1,2}, M_{1,2}$ ersetzen die bisher benutzte Notation L, M , d.h. $\hat{\mathbf{L}}_{1,2} = \hat{\mathbf{I}}_1 + \hat{\mathbf{I}}_2$). Dann geht man in einem zweiten Schritt durch Drehimpulsaddition zu den Zuständen $|L, M, l_1, l_2, l_3, L_{1,2}\rangle$ mit $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{I}}_3 + \hat{\mathbf{L}}_{1,2}$ über. Dieses Verfahren läßt natürlich zwei weitere Varianten zu, die zu Zuständen $|L, M, l_1, l_2, l_3, L_{1,3}\rangle$ und $|L, M, l_1, l_2, l_3, L_{2,3}\rangle$ führen. Diese sind aber durch unitäre Transformationen miteinander verbunden (Vergleich Dawydov “Quantenmechanik”).

9.2 Addition von Spin- und Bahndrehimpuls

Alles bisher gesagte war unabhängig davon, ob l_α ganz- oder halbzahlig war. Wir können also für ein System aus zwei Spins \hat{s}_1, \hat{s}_2 einen Gesamtspin $\hat{\mathbf{S}} = \hat{s}_1 + \hat{s}_2$ einführen. Neben den Eigenzuständen $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; m_1, m_2\rangle = |\frac{1}{2}, m_1\rangle \cdot |\frac{1}{2}, m_2\rangle$ der Operatoren $\hat{s}_1^2, \hat{s}_2^2, \hat{s}_{1,z}, \hat{s}_{2,z}$ kann man auch die Eigenzustände $|S, M, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$ von $\hat{\mathbf{S}}^2, \hat{S}_z, \hat{s}_1^2, \hat{s}_2^2$ betrachten. Der Gesamtspin S kann dann die Werte $S = 0, 1$ annehmen. Der Zustand mit $S = 1$ hat die S_z -Projektionen 1, 0, -1. Bezeichnen wir die vier Eigenzustände $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, m_1, m_2\rangle$ durch das Vorzeichen der $m_{1,2}$: $|+, +\rangle, |+, -\rangle, |-, +\rangle, |-, -\rangle$ und die Eigenzustände $|S, M, s_1, s_2\rangle$ durch die Werte von S und M

$|1, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle, |0, 0\rangle$ ($s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$ liegt fest), dann ist

$$\begin{aligned} |1, 1\rangle &= |+, +\rangle \\ |1, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|+, -\rangle + |-, +\rangle) \quad (\text{Triplett}) \\ |1, -1\rangle &= |-, -\rangle \end{aligned}$$

und

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+, -\rangle - |-, +\rangle) \quad (\text{Singulett}).$$

Für letzteren gilt

$$\begin{aligned} \hat{S}_z |0, 0\rangle &= (\hat{s}_{1,z} + \hat{s}_{2,z}) \frac{1}{\sqrt{2}} (|+, -\rangle - |-, +\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{2} |+, -\rangle + \frac{1}{2} |-, +\rangle - \frac{1}{2} |+, -\rangle - \frac{1}{2} |-, +\rangle \right) = 0 \\ \hat{S}^2 |0, 0\rangle &= (\hat{s}_1^2 + \hat{s}_2^2 + 2\mathbf{s}_1 \hat{s}_2) |0, 0\rangle \\ &= \left(\frac{3}{2} \hbar^2 + 2\hat{s}_{1,z} \hat{s}_{2,z} + \hat{s}_{1+} \hat{s}_{2-} + \hat{s}_{1-} \hat{s}_{2+} \right) |0, 0\rangle = 0. \end{aligned}$$

Hierbei haben wir $2\mathbf{s}_1 \hat{s}_2 = 2\hat{s}_{1,z} \hat{s}_{2,z} + \hat{s}_{1+} \hat{s}_{2-} + \hat{s}_{1-} \hat{s}_{2+}$ benutzt, was sich mit $\hat{s}_{\alpha,\pm} = \hat{s}_{\alpha,x} \pm i\hat{s}_{\alpha,y}$ leicht nachrechnen lässt.

Weiter haben wir aus den allgemeinen Resultaten für die Operatoren l_{\pm} des Kapitels 4 die Relationen $\hat{s}_+ |+\rangle = \hat{s}_- |-\rangle = 0$, $\hat{s}_+ |-\rangle = \hbar |+\rangle$ und $\hat{s}_- |+\rangle = \hbar |-\rangle$ deduziert, die uns $\hat{s}_{1+} \hat{s}_{2-} |0, 0\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} \hbar^2 |+\rangle |-\rangle$ und $\hat{s}_{1-} \hat{s}_{2+} |0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \hbar^2 |-\rangle |+\rangle$ und damit $(\hat{s}_{1-} \hat{s}_{2+} + \hat{s}_{1+} \hat{s}_{2-}) |0, 0\rangle = -\hbar^2 |0, 0\rangle$ liefert. Dies gibt mit $2\hat{s}_{1,z} \hat{s}_{2,z} |0, 0\rangle = -\frac{1}{2} \hbar^2 |0, 0\rangle$ das angegebene Resultat.

Es ist gelegentlich nützlich (z.B. bei Näherungen), die **Projektionsoperatoren**

$$\begin{aligned} \hat{P}_1 &= \frac{3}{4} + \frac{1}{\hbar^2} \hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2 \\ \hat{P}_0 &= 1 - \hat{P}_1 \end{aligned}$$

einzuführen, die auf den Triplett- bzw. Singulett-Unterraum projizieren: $\hat{P}_1 |1, M\rangle = |1, M\rangle$, $\hat{P}_1 |0, 0\rangle = 0$.

In Kapitel 7.5 haben wir bei der Behandlung der Pauli-Gleichung den Zustand eines Elektrons mit Spin durch einen **Spinor** dargestellt, dessen Komponenten durch $\langle \pm | \langle \mathbf{x} | \psi \rangle = \psi_{\pm}(\mathbf{x})$ gegeben sind: $\Psi = \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{x}) \\ \psi_-(\mathbf{x}) \end{pmatrix}$. Wir wollen jetzt untersuchen, wie sich der Spinor unter einer Rotation \hat{T}_{φ} um den Winkel φ transformiert (wir ignorieren im Moment alle Zeitabhängigkeiten)

$$\Psi'(\mathbf{x}) = \hat{T}_{\varphi} \Psi(\mathbf{x}).$$

Zunächst ist klar, das wegen der Normerhaltung unter der Drehung \hat{T}_φ wieder **unitär** sein muß. Weiter ist $\Psi^\dagger \Psi = \psi_+^* \psi_+ + \psi_-^* \psi_-$ ein **Skalar**, in dem über die Spinfreiheitsgrade absummiert worden ist. Von diesen wissen wir daß

$$\begin{aligned} \hat{T}_\varphi \Psi^\dagger(\mathbf{x}) \Psi(\mathbf{x}) &= \Psi^{\dagger'}(\mathbf{x}) \Psi'(\mathbf{x}) = \Psi^\dagger(\hat{R}_\varphi^{-1} \mathbf{x}) \Psi(\hat{R}_\varphi^{-1} \mathbf{x}) \\ &= \psi_+^*(\hat{R}_\varphi^{-1} \mathbf{x}) \psi_+(\hat{R}_\varphi^{-1} \mathbf{x}) + \psi_-^*(\hat{R}_\varphi^{-1} \mathbf{x}) \psi_-(\hat{R}_\varphi^{-1} \mathbf{x}) \\ &= \left(e^{-\frac{i}{\hbar} \varphi \hat{\mathbf{l}} \psi_+(\mathbf{x})} \right)^* \left(e^{-\frac{i}{\hbar} \varphi \hat{\mathbf{l}} \psi_+(\mathbf{x})} \right) + \left(e^{-\frac{i}{\hbar} \varphi \hat{\mathbf{l}} \psi_-(\mathbf{x})} \right)^* \left(e^{-\frac{i}{\hbar} \varphi \hat{\mathbf{l}} \psi_-(\mathbf{x})} \right) \\ &= \left[\hat{T}_\varphi^{(l)} \Psi(\mathbf{x}) \right]^* \left[\hat{T}_\varphi^{(l)} \Psi(\mathbf{x}) \right] \end{aligned}$$

mit $\hat{T}_\varphi^{(l)} = \exp(-\frac{i}{\hbar} \varphi \hat{\mathbf{l}})$. Der volle Operator \hat{T}_φ wird also die Gestalt $\hat{T}_\varphi = \hat{T}_\varphi^{(l)} \cdot \hat{T}_\varphi^{(s)}$ haben, wobei $\hat{T}_\varphi^{(s)}$ der Anteil von \hat{T}_φ ist, der **nicht** auf die Ortskoordinaten wirkt. $\hat{T}_\varphi^{(s)}$ muß **ebenfalls unitär** sein, wir setzen deshalb an

$$\hat{T}_\varphi^{(s)} = e^{-\frac{i}{\hbar} \varphi \hat{\mathbf{A}}}$$

wobei $\hat{\mathbf{A}}$ ein **hermitescher Vektoroperator** ist.

Um $\hat{\mathbf{A}}$ zu berechnen bemerken wir zunächst, daß der transformierte Spin-Operator $\hat{\mathbf{s}}$ sich wie ein Vektor transformieren soll

$$\hat{\mathbf{s}}' \equiv \hat{T}_\varphi^{(s)} \hat{\mathbf{s}} \hat{T}_\varphi^{(s)-1} = \underline{\underline{R}}_\varphi \cdot \hat{\mathbf{s}},$$

wobei $\underline{\underline{R}}_\varphi$ die Matrix ist, die einen Vektor um φ dreht.

Für **infinitesimale Drehungen** gilt

$$\begin{aligned} R_{ij} &= \delta_{ij} + \varepsilon_{ijk} \delta\varphi_m \\ \hat{T}_{\delta\varphi}^{(s)} &= \hat{\mathbf{1}} - \frac{i}{\hbar} \delta\varphi_m \hat{A}_m. \end{aligned}$$

Durch direkten Vergleich der beiden Darstellungen von $\hat{\mathbf{s}}'$, einmal über R_{ij} und einmal über $\hat{T}_{\delta\varphi}^{(s)}$ folgt die Bedingung $[\hat{A}_i, \hat{s}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{s}_k$, die durch $\hat{A}_i = \hat{s}_i$ erfüllt wird und damit

$$\hat{T}_\varphi^{(s)} = e^{-\frac{i}{\hbar} \varphi \hat{\mathbf{s}}}.$$

Die Gesamtdrehung wird also durch $\hat{T}_\varphi = \exp(-\frac{i}{\hbar} \varphi (\hat{\mathbf{s}} + \hat{\mathbf{l}}))$ bewirkt. Ist das System isotrop, dann kommutiert \hat{T}_φ mit \hat{H} , damit ist der **Gesamtdrehimpuls**

$$\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{s}} + \hat{\mathbf{l}}$$

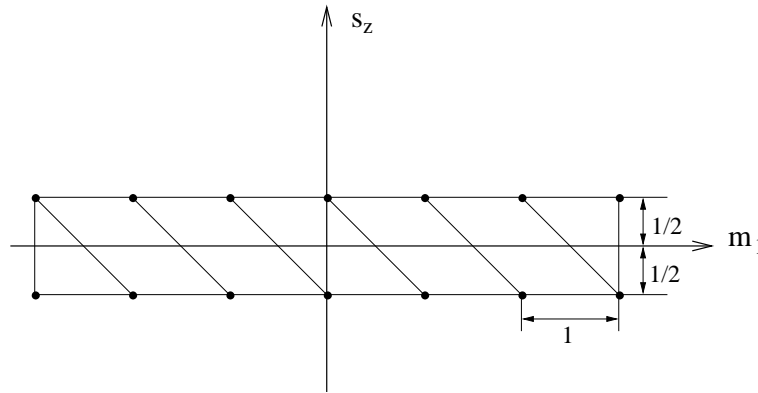
eine Erhaltungsgröße, i.a. aber **nicht mehr** der Bahndrehimpuls allein.

Ein **Beispiel** ist ein System mit **Spin-Bahn-Kopplung**. Für das H-Atom gilt

$$\hat{H}_{\text{SB}} = \frac{Ze^2}{2m^2 c^2 r^3} \hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{l}}.$$

Die Größenordnung dieser Störung ist durch $\frac{Ze^2\hbar^2}{m^2c^2r^3} \approx \frac{Ze^2\hbar^2}{m^2c^2a_0^3} = E_0(Z)Z^2 \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 = E_0(1)Z^4\alpha^2$ gegeben, $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \simeq \frac{1}{137}$ ist die Feinstrukturkonstante.

$[\hat{H}_{\text{SB}}, \hat{l}]$ und $[\hat{H}_{\text{SB}}, \hat{s}]$ verschwinden nicht, jedoch $[\hat{H}_{\text{SB}}, \hat{j}]$. Auch hier kann man wieder von den Basiszuständen für $\hat{\mathbf{l}}$ und $\hat{\mathbf{s}}$ $|l, m_l\rangle|+\rangle$ bzw. $|l, m_l\rangle|-\rangle$ zu einer Basis $|j, m_j, l\rangle$ übergehen, die Eigenfunktionen von $\hat{\mathbf{j}}^2$, \hat{j}_z , $\hat{\mathbf{s}}^2$ und \hat{s}_z sind, die Regeln sind die gleichen wie bei der Addition der Bahndrehimpulse, nur daß jetzt halbzahlige Werte für j und m_j auftreten.



$$m_j = s_z + m_l$$

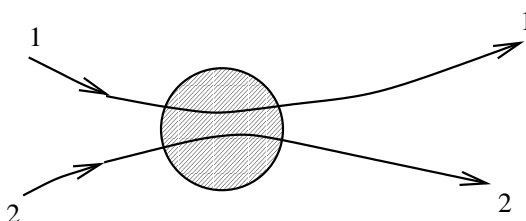
Im Unterschied zum Bahndrehimpuls ist der Betrag des Spins einzelnen Teilchens **immer** eine gute Quantenzahl (d.h. erhaltene Größe). Dies impliziert gewisse Einschränkungen für den Hamiltonian, da dann $\hat{\mathbf{s}}^2$ mit \hat{H} kommutieren muß. Für die Spin-Bahn-Kopplung ist dies erfüllt, da man $\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{l}} = \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{j}}^2 - \hat{\mathbf{l}}^2 - \hat{\mathbf{s}}^2)$ schreiben kann, \hat{H}_{SB} kommutiert also mit $\hat{\mathbf{j}}^2$, \hat{j}_z , $\hat{\mathbf{l}}^2$, $\hat{\mathbf{s}}^2$. Gleiches gilt für die Spin-Spin-Wechselwirkung.

Kapitel 10

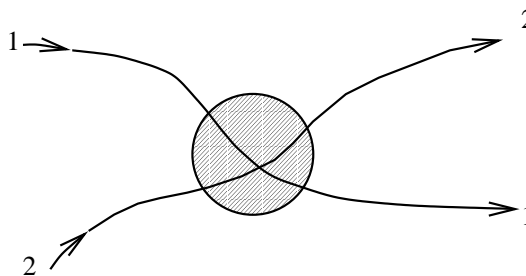
Identische Teilchen

10.1 Bosonen und Fermionen

In der klassischen Physik kann man die Bahn eines einzelnen Teilchens verfolgen, etwa bei folgendem Streuprozess



Quantenmechanisch ist das jedoch nicht mehr möglich. Man kann z.B. obigen Prozess nicht mehr von folgendem unterscheiden



Damit eine Unterscheidung möglich wäre, müßten wir entlang der Trajektorie ständig Ortsmessung der Teilchen durchführen, was aufgrund der Heisenbergschen Unschärferelation aber zu einer Störung des Teilchenimpulses $\Delta p \geq \hbar/\Delta x$ führen würde. Wir können also einen Zustand

$$|n\rangle^{(1)}|m\rangle^{(2)} = |n, m\rangle$$

bei dem Teilchen 1 im Zustand $|n\rangle$ und Teilchen 2 im Zustand $|m\rangle$ ist, nicht von dem Zustand $|m\rangle^{(1)}|n\rangle^{(2)} = |m, n\rangle$ unterscheiden. Trotzdem sind beide ket-Zustände

mathematisch voneinander unterschieden. Für $n \neq m$ sind die Zustände tatsächlich orthogonal. Bei einem Experiment können wir aber nur Observable messen, die aussagen, daß ein Teilchen im Zustand $|n\rangle$ und ein Teilchen im Zustand $|m\rangle$ ist, aber nicht welches Teilchen im welchen Zustand ist. Der Zustand

$$\alpha|n\rangle^{(1)}|m\rangle^{(2)} + \beta|m\rangle^{(1)}|n\rangle^{(2)}$$

ist daher nur bis auf α und β mit $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ festgelegt. Für Zustände mit verschiedenen α und β erhalten wir die gleichen Observablenwerte. Diese Entartung der Zustände nennt man **Austausch-Entartung**.

Der Hamiltonian eines Systems von N identischen Teilchen hat die Form

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{x}}_1, \dots, \hat{\mathbf{x}}_N) + \text{spin-abhängiger Anteil}.$$

Bezeichnen wir mit \hat{P}_α den Permutationsoperator der die Teilchenkoordinaten austauscht, dann gilt für identische Teilchen z.B.

$$\hat{P}_\alpha V(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = V(x_{i_1}, \dots, x_{i_N}) = V(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N).$$

Der Index α an \hat{P} steht für die Permutation $\alpha = \{1 \rightarrow i_1, 2 \rightarrow i_2, \dots, N \rightarrow i_N\}$. Die gleiche Invarianz bezüglich des Austausches der Teilchen gilt für die kinetische Energie und für den spinabhängigen Anteil von \hat{H} , d.h. $[\hat{P}_\alpha, \hat{H}] = 0$.

Im Weiteren werden wir die ξ -Darstellung des Zustands $|\psi\rangle$ benutzen, wobei ξ die Gesamtheit der Teilchenkoordinaten beschreibt $|\xi\rangle = |\mathbf{x}\rangle|s_z\rangle$ (oder auch $|\xi\rangle = |\mathbf{p}\rangle|s_z\rangle$). Für ein N -Teilchensystem gilt entsprechend

$$|\xi_1, \dots, \xi_N\rangle = |\mathbf{x}_1\rangle|s_{z,1}\rangle|\mathbf{x}_2\rangle|s_{z,2}\rangle \dots |\mathbf{x}_N\rangle|s_{z,N}\rangle.$$

Der Zustand $|\psi\rangle$ in der ξ -Darstellung ist dann durch

$$\langle \xi_1, \dots, \xi_N | \psi \rangle = \psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N)$$

gegeben. (Verschiedenen Zustände können durch die Einführung eines Index Q an der Wellenfunktion unterschieden werden.)

Wie bereits festgestellt kommt in der Quantenmechanik identischen Teilchen keinerlei Individualität zu, d.h. der Zustand, der durch den Austausch zweier Teilchen entsteht ist von dem Ausgangszustand physikalisch nicht zu unterscheiden. Dann kann sich die Wellenfunktion nur durch einen Phasenfaktor ändern. Vertauschen wir z.B. die Teilchen l und n , dann gilt

$$\psi(\xi_1, \dots, \xi_l, \dots, \xi_n, \dots, \xi_N) = \psi(\xi_1, \dots, \xi_n, \dots, \xi_l, \dots, \xi_N)e^{i\alpha}.$$

Da die nochmalige Vertauschung der gleichen Teilchen wieder den Ausgangszustand herstellt gilt $e^{2i\alpha} = 1$ und damit $e^{i\alpha} = \pm 1$.

Die Erfahrung sagt nun, dass für Teilchen **einer Sorte** dieser Faktor **immer** entweder $+1$ oder -1 ist. Alle Teilchen mit **ganzzahligem** Spin (die sogenannten Bosonen) geben bei Vertauschung immer einen Faktor $e^{i\alpha} = 1$, alle Teilchen mit **halbzahligem** Spin (die sogenannten Fermionen) dagegen immer einen Faktor $e^{i\alpha} = -1$. Die Frage ist nun, wie man diese Eigenschaft der Wellenfunktion sichern kann. Beginnen wir mit einer Wellenfunktion $\psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N)$, die Lösung der Schrödinger-Gleichung ist (ψ hängt dann auch von t ab, aber diese Abhängigkeit ist im Moment irrelevant).

Die Behauptung ist dann, dass sich eine vollständig, d.h. in alle Teilchenpaaren, **symmetrische** Wellenfunktion durch Anwendung des Operators $\hat{J}_+ = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \hat{P}_{\alpha}$ auf ψ erhalten läßt

$$\psi^{(+)}(\xi_1, \dots, \xi_N) = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \hat{P}_{\alpha} \psi(\xi_1, \dots, \xi_N).$$

\hat{P}_{α} ist der Permutationsoperator, der die $\{\xi_i, i = 1, \dots, N\}$ untereinander vertauscht, α nummeriert die $N!$ Permutationen der ξ_i .

Wir wollen nun testen, ob $\psi^{(+)}(\xi_1, \dots, \xi_N)$ tatsächlich vollständig symmetrisch ist. Dazu muss die Anwendung eines beliebigen Operators \hat{P}_{α} auf $\psi^{(+)}$ wieder $\psi^{(+)}$ reproduzieren, da \hat{P}_{α} sich ja als Produkt von Vertauschungen von jeweils zwei Teilchen schreiben läßt. Dies gilt tatsächlich, denn

$$\begin{aligned} \hat{P}_{\alpha} \psi^{(+)}(\xi_1, \dots, \xi_N) &= \frac{1}{N!} \sum_{\beta} \underbrace{\hat{P}_{\alpha} \hat{P}_{\beta}}_{\hat{P}_{\gamma}} \psi(\xi_1, \dots, \xi_N) \\ &= \frac{1}{N!} \sum_{\gamma} \hat{P}_{\gamma} \psi(\xi_1, \dots, \xi_N) = \psi^{(+)}(\xi_1, \dots, \xi_N). \end{aligned}$$

Analog erhält man eine vollständig **antisymmetrische** Wellenfunktion durch die Anwendung des Operators $\hat{J}_- = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} \hat{P}_{\alpha}$, $\varepsilon_{\alpha} = \pm 1$ für eine gerade bzw. ungerade Permutation. Hier folgt ($\varepsilon_{\alpha} \varepsilon_{\beta} = \varepsilon_{\gamma}$)

$$\begin{aligned} \hat{P}_{\alpha} \psi^{(-)}(\xi_1, \dots, \xi_N) &= \sum_{\beta} \hat{P}_{\alpha} \varepsilon_{\alpha}^2 \frac{1}{N!} \hat{P}_{\beta} \varepsilon_{\beta} \psi(\xi_1, \dots, \xi_N) \\ &= \varepsilon_{\alpha} \frac{1}{N!} \sum_{\gamma} \varepsilon_{\gamma} \hat{P}_{\gamma} \psi(\xi_1, \dots, \xi_N) = \varepsilon_{\alpha} \psi^{(-)}(\xi_1, \dots, \xi_N). \end{aligned}$$

In einem System ohne Wechselwirkung kann $\psi(\xi_1, \dots, \xi_N)$ als Produkt von Einteilchenwellenfunktionen $\phi_i(\xi)$ geschrieben werden, der Index i nummeriert die Einteilchenzustände, von denen es auch unendlich viele geben kann. Es ist dann

$$\psi_{\{i_1, \dots, i_N\}} = \phi_{i_1}(\xi_1) \phi_{i_2}(\xi_2) \dots \phi_{i_N}(\xi_N).$$

Im Falle von Fermionen lässt sich $\psi^{(-)}(\xi_1, \dots, \xi_N)$ in Form einer **Slaterdeterminante** schreiben

$$\psi^{(-)}(\xi_1, \dots, \xi_N) = \frac{1}{N!} \begin{vmatrix} \phi_{i_1}(\xi_1) & \cdots & \phi_{i_1}(\xi_N) \\ \vdots & & \vdots \\ \phi_{i_N}(\xi_1) & \cdots & \phi_{i_N}(\xi_N) \end{vmatrix}.$$

Sind zwei Zustände gleich, dann sind auch zwei Zeilen gleich und die Determinante verschwindet. Dies ist Ausdruck des Pauliprinzips, das besagt, dass nicht zwei Fermionen im gleichen Einteilchenzustand sein können.

Betrachte zwei wechselwirkungsfreie Teilchen mit den Einteilchenzuständen $\phi_a(\xi)$ und $\phi_b(\xi)$. Ohne Berücksichtigung der Symmetrie gegenüber Teilchenvertauschung existieren vier Zweiteilchenzustände

$$\begin{aligned} \psi_1(\xi_1, \xi_2) &= \phi_a(\xi_1)\phi_a(\xi_2) \\ \psi_2(\xi_1, \xi_2) &= \phi_b(\xi_1)\phi_b(\xi_2) \\ \psi_3(\xi_1, \xi_2) &= \phi_a(\xi_1)\phi_b(\xi_2) \\ \psi_4(\xi_1, \xi_2) &= \phi_b(\xi_1)\phi_a(\xi_2). \end{aligned}$$

Bei deren Berücksichtigung folgt für Bosonen

$$\begin{aligned} \psi_1(\xi_1, \xi_2) &= \phi_a(\xi_1)\phi_a(\xi_2) \\ \psi_2(\xi_1, \xi_2) &= \phi_b(\xi_1)\phi_b(\xi_2) \\ \psi_3(\xi_1, \xi_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_a(\xi_1)\phi_b(\xi_2) + \phi_b(\xi_1)\phi_a(\xi_2)), \end{aligned}$$

und für Fermionen

$$\psi_1(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_a(\xi_1)\phi_b(\xi_2) - \phi_b(\xi_1)\phi_a(\xi_2)).$$

Nehme jetzt an, dass alle Zustände gleiche Energie haben und damit gleich wahrscheinlich besetzt sind (Wechselwirkung mit einer Wärmebad - stelle mir viele solche Zweiteilchen-Systeme vor). Bei Bosonen ist die Gleichbesetzung von zwei Zuständen wahrscheinlicher als nach klass. Überlegung. Bei Fermionen ist Doppelbesetzung ausgeschlossen.

Man führt zweckmäßigerweise einen **Permutationsoperator** \hat{P}_{21} ein, der durch

$$\hat{P}_{21}|n\rangle^{(1)}|m\rangle^{(2)} = |m\rangle^{(1)}|n\rangle^{(2)}$$

definiert ist. Es gilt $\hat{P}_{21}^\dagger = \hat{P}_{21} = \hat{P}_{21}^{-1}$ und $(\hat{P}_{21})^2 = 1$. Die Hermitizität von \hat{P}_{21} folgt aus $\langle n', m' | \hat{P}_{21} | n, m \rangle = \delta_{n'm} \delta_{m'n}$ und $(\hat{P}_{21} | n, m \rangle)^\dagger = \langle m, n | = \langle n, m | \hat{P}_{21}^\dagger$, $\langle n', m' | \hat{P}_{21}^\dagger | n, m \rangle = \langle m', n' | n, m \rangle = \delta_{nm'} \delta_{n'm}$. Da die Matrixelemente von \hat{P}_{21}^\dagger und \hat{P}_{21} gleich sind, folgert man $\hat{P}_{21}^\dagger = \hat{P}_{21} = \hat{P}_{21}^{-1}$, q.e.d.. Offenbar tauscht \hat{P}_{21} die Teilchen 1 und 2 aus.

Wir betrachten als **Beispiel** ein System aus zwei Spin 1/2-Teilchen mit dem Bahndrehimpuls $\mathbf{l}_\alpha = 0$. Es gilt

$$\begin{aligned}\hat{s}_{1,z}|\frac{1}{2}, m\rangle^{(1)}|\frac{1}{2}, m'\rangle^{(2)} &= m|\frac{1}{2}, m\rangle^{(1)}|\frac{1}{2}, m'\rangle^{(2)} \\ \hat{s}_{2,z}|\frac{1}{2}, m\rangle^{(1)}|\frac{1}{2}, m'\rangle^{(2)} &= m'|\frac{1}{2}, m\rangle^{(1)}|\frac{1}{2}, m'\rangle^{(2)}.\end{aligned}$$

Wendet man \hat{P}_{21} auf die erste Zeile an, folgt

$$\begin{aligned}\hat{P}_{21}\hat{s}_{1,z}\hat{P}_{21}^{-1}\hat{P}_{21}|m\rangle^{(1)}|m'\rangle^{(2)} &= m\hat{P}_{21}|m\rangle^{(1)}|m'\rangle^{(2)} = m|m'\rangle^{(1)}|m\rangle^{(2)} \\ &= \hat{P}_{21}\hat{s}_{1,z}\hat{P}_{21}^{-1}|m'\rangle^{(1)}|m\rangle^{(2)}\end{aligned}$$

d.h. $\hat{s}_{2,z} = \hat{P}_{21}\hat{s}_{1,z}\hat{P}_{21}^{-1}$ oder für eine Observable ganz allgemein

$$\hat{A}_2 = \hat{P}_{21}\hat{A}_1\hat{P}_{21}^{-1}$$

Für einen **Hamiltonian** aus zwei **identischen Teilchen**

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{\mathbf{p}}_1^2 + \hat{\mathbf{p}}_2^2) + V(\mathbf{x}_1) + V(\mathbf{x}_2) + V_{12}(|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|)$$

gilt offenbar $\hat{P}_{21}\hat{H}\hat{P}_{21}^{-1} = \hat{H}$, d.h.

$$[\hat{H}, \hat{P}_{21}] = 0.$$

\hat{P}_{21} ist also eine Erhaltungsgröße. Da $\hat{P}_{21}^2 = 1$ ist, sind die **erlaubten Eigenwerte** von \hat{P}_{21} , $p_{21} = \pm 1$. Suchen wir Eigenzustände von \hat{P}_{21} , so erhalten wir

$$|n, m\rangle_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}(|n\rangle^{(1)}|m\rangle^{(2)} \pm |m\rangle^{(1)}|n\rangle^{(2)})$$

die die Eigenwerte ± 1 realisieren. Die **Symmetrisierungs-** bzw. **Antisymmetrisierungsoperatoren** \hat{J}_\pm sind über (manchmal werden \hat{J}_\pm mit $\hat{J}_+ = \hat{S}$ und $\hat{J}_- = \hat{A}$ bezeichnet)

$$\hat{J}_\pm \equiv \frac{1}{2}(1 \pm \hat{P}_{21})$$

definiert. Wendet man \hat{J}_+ bzw. \hat{J}_- auf einen beliebigen Vektor $\alpha|n\rangle + \beta|m\rangle$ an, dann ist der resultierende Vektor symmetrisch bzw. antisymmetrisch.

$$J_\pm(\alpha|n\rangle|m\rangle + \beta|m\rangle|n\rangle) = \frac{\alpha \pm \beta}{2}(|n\rangle|m\rangle \pm |m\rangle|n\rangle).$$

Das heißt, daß \hat{J}_\pm aus einem beliebigen Vektor $(\alpha|n\rangle|m\rangle + \beta|m\rangle|n\rangle)$, der Austauschentartung zeigt, auf einen einzigen Vektor $|n, m\rangle_\pm$ projiziert. Damit ist die Austauschentartung aufgehoben.

Es gilt weiter $\hat{J}_\pm^2 = \hat{J}_\pm$ und $\hat{J}_+\hat{J}_- = \hat{J}_-\hat{J}_+ = 0$, d.h. die \hat{J}_\pm sind **Projektionsoperatoren** auf die Zustände mit Eigenwert $p_{21} = \pm 1$.

Man kann diese Betrachtungen jetzt auf N **Teilchen** verallgemeinern. Der Operator $\hat{P}_{i_1, \dots, i_N}$, wobei i_1, \dots, i_N eine Permutation der Zahlen $1, \dots, N$ ist, ist durch

$$\hat{P}_{i_1, \dots, i_N}|\nu_1\rangle^{(1)}|\nu_2\rangle^{(2)} \dots |\nu_N\rangle^{(N)} = |\nu_1\rangle^{(i_1)}|\nu_2\rangle^{(i_2)} \dots |\nu_j\rangle^{(i_j)} \dots |\nu_N\rangle^{(i_N)}$$

definiert, $\hat{P}_{1, 2, \dots, N} = \hat{1}$. Wir haben hier als Zustandsvektor des Gesamtsystems einen Produktzustand aus Einteilchenzuständen gewählt. Tatsächlich können wir **jeden** Vielteilchenzustand (auch für wechselwirkende Systeme) $|\psi\rangle = |\psi(\mathbf{1}, \mathbf{2}, \dots, \mathbf{N})\rangle$ nach diesen Basiszuständen entwickeln. Es gilt dann $P_{i_1, i_2, \dots, i_N}|\psi\rangle = |\psi(\mathbf{i}_1, \mathbf{i}_2, \dots, \mathbf{i}_N)\rangle$, \mathbf{i} steht hier für die Gesamtheit der Koordinaten eines Teilchens. Die **Permutationsoperatoren bilden** offenbar eine **nicht-abelsche Gruppe** ((i) es existiert das **Einselement**, (ii) das **Produkt** zweier Permutationsoperatoren ist wieder ein Permutationsoperator, (iii) zu jedem Permutationsoperator existiert ein **inverser Operator**, i.a. vertauschen zwei Permutationsoperatoren nicht). Permutationsoperatoren sind **unitär**, jedoch **nicht notwendig hermitesch**. Die Unitarität von \hat{P}_α folgt aus der Tatsache, daß die Anwendung von \hat{P} auf ein vollständigen Satz von Basisvektoren $|\psi_i\rangle$, $\hat{P}|\psi_i\rangle = |\tilde{\psi}_i\rangle$, einen neuen vollständigen Basissatz $|\tilde{\psi}_i\rangle$ schafft, dieser Zusammenhang ist umkehrbar eindeutig und wird deshalb durch einen linearen unitären Operator, hier \hat{P}_α , bewirkt. Die Unitarität von \hat{P}_α kann auch aus der Unitarität der Transpositionsoperatoren gezeigt werden, aus denen \hat{P}_α aufgebaut ist. (Das Produkt 2er unitärer Operatoren ist wieder ein unitärer Operator.)

Observable, die vollständig symmetrisch in bezug auf den Austausch der Teilchenindizes sind, $\hat{A}(\mathbf{1}, \mathbf{2}, \dots, \mathbf{N})$, $\mathbf{i} := (\mathbf{x}_i, \mathbf{s}_i)$, kommutieren mit $\hat{P}_\alpha \forall \alpha$: $[\hat{A}, \hat{P}_\alpha] = 0$.

Da die \hat{P}_α (α sei eine beliebige Permutation der Zahlen $1, \dots, N$) für $N > 2$ **nicht** vertauschen, kann man **kein** gemeinsames System von Eigenfunktionen für diese Operatoren finden. Das heißt, wir können nicht wie für 2 Teilchen die Eigenzustände der \hat{P}_α benutzen um die Austauschentartung aufzuheben. Jeder Permutationsoperator \hat{P}_α läßt sich (nicht eindeutig) als Produkt von **Transpositionen** beschreiben, eine Transposition ist eine Permutation, bei der nur zwei Teilchen vertauscht werden. Transpositionsoperatoren sind hermitesch und unitär (Beweis wie für $N = 2$). Die Parität der Anzahl der Transpositionen, die nötig sind, um eine Permutation zu erreichen, ist immer gleich.

Ein Vektor $|\psi_+\rangle$ ist **total symmetrisch**, wenn

$$\hat{P}_\alpha |\psi_+\rangle = |\psi_+\rangle \quad \forall \alpha$$

gilt. Ein Vektor $|\psi_-\rangle$ ist **total antisymmetrisch**, wenn

$$\hat{P}_\alpha |\psi_-\rangle = \varepsilon_\alpha |\psi_-\rangle \quad \forall \alpha$$

gilt, mit $\varepsilon_\alpha = \pm 1$ für eine gerade bzw. ungerade Permutation (d.h. $\varepsilon_\alpha = (\pm 1)$).

Wir führen jetzt die **Symmetrisierungs-** bzw. **Antisymmetrisierungsoperatoren**, wir zeigen unten, daß diese das Problem der Austauschentartung kurieren.

$$\begin{aligned} \hat{J}_+ &= \frac{1}{N!} \sum_\alpha \hat{P}_\alpha \\ \hat{J}_- &= \frac{1}{N!} \sum_\alpha \varepsilon_\alpha \hat{P}_\alpha \end{aligned}$$

ein. Die \hat{J}_\pm sind **hermitesch**. Denn aus der Unitarität $\hat{P}_\alpha^\dagger = \hat{P}_\alpha^{-1}$ ist, folgt $\hat{J}_\pm^\dagger = \frac{1}{N!} \sum_\alpha \varepsilon_\alpha \hat{P}_\alpha^{-1}$ und da $\hat{P}_\alpha^{-1} = \hat{P}_\beta, \varepsilon_\alpha = \varepsilon_\beta$ folgt $\hat{J}_\pm^\dagger = \hat{J}_\pm$. Außerdem gilt

$$\begin{aligned} \hat{J}_\pm^2 &= \frac{1}{N!} \sum_\alpha \frac{1}{N!} \sum_\beta \hat{P}_\alpha \hat{P}_\beta \varepsilon_\alpha \varepsilon_\beta = \hat{J}_\pm \\ \hat{J}_- \hat{J}_+ &= \frac{1}{N!} \sum_\alpha \varepsilon_\alpha \hat{P}_\alpha \hat{J}_+ = \frac{1}{N!} \hat{J}_+ \sum_\alpha \varepsilon_\alpha = 0 \\ \hat{J}_+ \hat{J}_- &= \frac{1}{N!^2} \sum_{\alpha, \beta} \hat{P}_\alpha \varepsilon_\beta \hat{P}_\beta = \frac{1}{N!} \hat{J}_+ \sum_\beta \varepsilon_\beta = 0, \end{aligned}$$

d.h. die Operatoren \hat{J}_\pm sind **Projektoren**, und zwar auf die **Unterräume** des N -**Teilchen Hilbertraum**, die den **total symmetrischen** bzw. **antisymmetrischen Zuständen** entsprechen. Man kann total symmetrische bzw. antisymmetrische Zustände durch

$$|\psi_\pm\rangle = \hat{J}_\pm |\psi\rangle$$

erzeugen, wobei $|\psi\rangle$ einen Zustand von N identischen Teilchen beschreibt. Durch diese Projektion wird die Austauschentartung aufgehoben:

Tatsächlich: mit $|\psi\rangle$ sollte auch $\hat{P}_\alpha |\psi\rangle$ die gleichen Observablenwerte liefern. Insgesamt sind dies i.a. $N!$ verschiedenen Zustände sowie deren Linearkombinationen. Die maximale Austauschentartung ist also $N!$. Wenden wir nun \hat{J}_\pm auf $\hat{P}_\alpha |\psi\rangle$ an, so ergibt sich

$$\hat{J}_\pm \hat{P}_\alpha |\psi\rangle = \varepsilon_\alpha^2 \hat{J}_\pm \hat{P}_\alpha |\psi\rangle = \varepsilon_\alpha \hat{J}_\pm |\psi\rangle = \varepsilon_\alpha |\psi_\pm\rangle,$$

d.h. alle auf diese Weise erzeugten Zustände sind kollinear. Damit ist die Austauschentartung durch die Anwendung der \hat{J}_\pm aufgehoben, dieses Problem ist gelöst. Die **Natur** zeichnet bei Systemen identischer Teilchen nun die **total symmetrischen** und die **total antisymmetrischen Zustände** aus, indem sie nur diese realisiert.

Nach dem **Spin-Statistik-Theorem** werden Teilchen mit **halbzahligem Spin** $s = 1/2, 3/2, 5/2, \dots$, die sogenannten **Fermionen**, durch **total antisymmetrische** Ket-Vektoren beschrieben, Teilchen mit **ganzzahligem Spin** $s = 0, 1, 2, \dots$, die sogenannten **Bosonen**, durch **total symmetrische** Ket-Vektoren beschrieben:

$$\begin{aligned}\hat{P}_{ij}|N \text{ identische Fermionen}\rangle &= -|N \text{ identische Fermionen}\rangle \\ \hat{P}_{ij}|N \text{ identische Bosonen}\rangle &= |N \text{ identische Bosonen}\rangle.\end{aligned}$$

Zustände mit gemischter Symmetrie werden nicht realisiert!

Unter den **fundamentalen Teilchen** bilden die Teilchen mit halbzahligem Spin die **Konstituenten** der uns schon bekannten **Elektronen** und **Hadronen** (p , n , Mesonen etc.)

Die (im Standard-Modell) auftretenden Basis-Teilchen (alle mit Spin $1/2!$) sind die

Leptonen: e : Elektron
 ν_e : Elektron-Neutrino
 μ : Myon
 ν_μ : Myon-Neutrino
 τ : Tau
 τ_μ : Tau-Neutrino

plus deren Antiteilchen, sowie die

Quarks: u : up
 d : down
 c : charm
 s : strange
 t : top
 b : bottom

Die Teilchen, die die **Wechselwirkung** zwischen den Konstituenten bewirken, sind **Bosonen**.

Die **elektroschwache Wechselwirkung** wird durch das **Photon**, die W^\pm - und die Z^0 -**Bosonen** vermittelt, die **starke Wirkung** durch die **Gluonen**, beide Bosonengruppen haben **Spin 1**, Photon und Gluon sind masselos. Die **Gravitation** wird durch ein **Spin-2** Teilchen (**Graviton**) mit Masse Null vermittelt.

Zusammengesetzte Teilchen verhalten sich gemäß ihres Gesamtspins. Um zu sehen, ob ein H-Atom sich wie ein Fermion oder Boson verhält, betrachten wir den Zustandsvektor $|p_1, e_1^-, p_2, e_2^-\rangle$ **zweier** H-Atome. Da p und e Fermionen sind, folgt

$$|p_1, e_1^-, p_2, e_2^-\rangle = -|p_2, e_1^-, p_1, e_2^-\rangle = |p_2, e_2^-, p_1, e_1^-\rangle,$$

d.h. H-Atome sind Bosonen.

Allgemein gilt: Wenn die Zahl der Fermionen in einem zusammengesetzten Teilchen ungerade (gerade) ist, so ist dies ein Fermion (Boson). Baryonen bestehen aus drei Quarks und sind deshalb Fermionen, Mesonen bestehen aus zwei Quarks und sind deshalb Bosonen. So ist ${}^3\text{He}$ ein Fermion, da sein Kern aus zwei Protonen und einen Neutron zusammengesetzt ist ($s = 1/2$). ${}^4\text{He} = 2p + 2n$ ist ein Boson ($s = 0$).

Eine unmittelbare Folge des Spin-Statistik-Theorems ist das **Paulische Ausschließungsprinzip**, das aussagt, daß sich nicht zwei Fermionen im gleichen Zustand befinden können. Ein Zustand $|n\rangle^{(1)}|n\rangle^{(2)}$ ist **nicht** antisymmetrisch und kann daher kein Fermion beschreiben. So können sich z.B. nicht zwei Elektronen mit gleichem Spin am gleichen Platz befinden.

Wir wollen den fundamentalen Unterschied zwischen **klassischen Teilchen, Bosonen** und **Fermionen** noch einmal an einem Beispiel deutlich machen. Hierzu betrachten wir zwei Teilchen, die nur zwei Zustände $|a\rangle$, $|b\rangle$ einnehmen können, dies mit gleicher Wahrscheinlichkeit. Dies ist z.B. für ein System in einem Wärmebad der Temperatur $T \gg E/k_B$ realisiert, in dem $|a\rangle$, $|b\rangle$ Zustände gleicher Energie E sind.

Klassisch existieren vier Zustände, die je mit den Wahrscheinlichkeiten $W = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2}$ auftreten.

$$\left. \begin{array}{ll} |a\rangle|a\rangle & W = 1/4 \\ |b\rangle|b\rangle & W = 1/4 \\ |a\rangle|b\rangle & W = 1/4 \\ |b\rangle|a\rangle & W = 1/4 \end{array} \right\} W = 1/2.$$

Die Wahrscheinlichkeit, daß ein Teilchen in $|a\rangle$, das andere in $|b\rangle$ ist, ist $W = \frac{2}{4} = \frac{1}{2}$. Sind die Teilchen **Bosonen**, dann existieren nur noch drei Zustände, die ebenfalls mit gleicher Wahrscheinlichkeit realisiert werden

$$\begin{array}{ll} |a\rangle|a\rangle & W = 1/3 \\ |b\rangle|b\rangle & W = 1/3 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (|a\rangle|b\rangle + |b\rangle|a\rangle) & W = 1/3, \end{array}$$

d.h. die jeweils die Wahrscheinlichkeit $1/3$ haben. D.h. die Wahrscheinlichkeit, daß zwei Teilchen im **gleichen Zustand** sind, ist im Bosefall mit $1/3$ größer, als im klassischen Fall, d.h. die Quantennatur der Bosonen erleichtert die Doppelbesetzung von Zuständen. Sind die Teilchen dagegen **Fermionen**, so existiert nur der Zustand

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|a\rangle|b\rangle - |b\rangle|a\rangle) \quad W = 1.$$

Doppelbesetzung von Zuständen ist daher ausgeschlossen. Neben den Zuständen $|\psi_{\pm}\rangle$ treten für $N > 2$ noch Zustände auf, die weder total symmetrisch noch total antisymmetrisch sind.

Bisher Zusammengefaßt: der Zustandsraum \mathbb{L}_{\pm} eines Systems identischer Teilchen ist nicht das direkte Produkt der Zustandsräume der einzelnen Teilchen $\mathbb{L} = \mathbb{L}_1 \times \mathbb{L}_2 \times \dots \times \mathbb{L}_N$, sondern ein Unterraum hiervon.

Wir wollen jetzt als erste Anwendung ein System **wechselwirkungsfreier identischer Teilchen** mit Einteilchenzuständen $|\nu_i\rangle^{(\alpha)}$ betrachten. Die $|\nu_i\rangle$ stellt die Gesamtheit der Einteilchenzustände dar.

Beispiel: freie Teilchen mit dem Impuls $\mathbf{k}_i = \frac{\pi}{L}(m_1, m_2, m_3)$, $m_i = 0, \pm 1, \dots, \pm L/a$. Das Zahlen-Tripel $\nu = (m_1, m_2, m_3)$ legt jetzt einen Einteilchen-Zustand eindeutig fest. Wir können dann $\nu_1 = (0, 0, 0)$, $\nu_2 = (1, 0, 0)$, $\nu_3 = (2, 0, 0) \dots$ etc. festlegen. $|\nu_i\rangle$ ist also einer dieser Zustände, die durch den Impuls des einzelnen Teilchens festgelegt ist.

Ein Zustandsvektor in \mathbb{L}_{ψ} wäre

$$|\psi\rangle = |\nu_{i_1}\rangle^{(1)} |\nu_{i_2}\rangle^{(2)} \dots |\nu_{i_N}\rangle^{(N)}.$$

Für Bosonen ist der physikalisch realisierte Zustand dann

$$|\psi_+\rangle = \hat{J}_+ |\psi\rangle = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \hat{P}_{\alpha} |\psi\rangle.$$

Dieser Zustand ist allerdings noch nicht normiert. Um die Normierung zu bestimmen schreiben wir zunächst

$$|\psi_+\rangle = n_{\nu_1}! n_{\nu_2}! \dots n_{\nu_N}! \sum'_{\alpha} \hat{P}_{\alpha} |\psi\rangle \frac{1}{N!}$$

wobei wir nur über Permutationen summieren, die Teilchen in verschiedenen Einteilchen–Zuständen vertauschen. Die Zahl der gleichen Einteilchen–Zustände ν_i ist n_i (“Besetzungszahl”). Die Summe rechts enthält nur noch Summanden, die zueinander orthogonal sind.

Die normierte Wellenfunktion ist $|\tilde{\psi}_+\rangle = c|\psi_+\rangle$

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\psi}_+ | \tilde{\psi}_+ \rangle &= c^2 (n_{\nu_1}! n_{\nu_2}! \dots n_{\nu_N}!)^2 \sum'_{\alpha, \beta} \langle \psi | \hat{P}_\alpha^\dagger \hat{P}_\beta | \psi \rangle \frac{1}{N!^2} \\ &= c^2 (n_{\nu_1}! n_{\nu_2}! \dots n_{\nu_N}!)^2 \frac{1}{N!^2} \sum'_\alpha \langle \psi | \hat{P}_\alpha^\dagger \hat{P}_\alpha | \psi \rangle \\ &= c^2 (n_{\nu_1}! n_{\nu_2}! \dots n_{\nu_N}!)^2 \frac{1}{N!^2} \sum_\alpha \frac{1}{n_{\nu_1}! n_{\nu_2}! \dots n_{\nu_N}!} = c^2 \frac{n_{\nu_1}! n_{\nu_2}! \dots n_{\nu_N}!}{N!} \end{aligned}$$

Damit erhalten wir

$$|\tilde{\psi}_+\rangle = \sqrt{\frac{N!}{n_{\nu_1}! n_{\nu_2}! \dots n_{\nu_N}!}} \hat{J}_+ |\psi\rangle.$$

Wir können diesen Zustand auch durch den ket–Vektor der Besetzungszahlen

$$|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle$$

darstellen.

Für Fermionen

$$|\psi_-\rangle = J_- |\psi\rangle = \frac{1}{N!} \begin{vmatrix} |\nu_{i_1}\rangle^{(1)} & |\nu_{i_2}\rangle^{(1)} & \dots & |\nu_{i_N}\rangle^{(1)} \\ |\nu_{i_1}\rangle^{(2)} & |\nu_{i_2}\rangle^{(2)} & \dots & |\nu_{i_N}\rangle^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ |\nu_{i_1}\rangle^{(N)} & |\nu_{i_2}\rangle^{(N)} & \dots & |\nu_{i_N}\rangle^{(N)} \end{vmatrix}$$

wobei wir rechts die sogenannte **Slater–Determinante** eingeführt haben. $|\psi_-\rangle$ ist offenbar Null, wenn zwei Einzelzustände $|\nu_{i_l}\rangle$, $|\nu_{i_k}\rangle$ gleich sind, dann sind nämlich zwei Spalten in der Determinante gleich. Dies ist also wieder eine Folge des Paulischen Ausschließprinzips.

Wir stellen weiter fest, daß $|\psi_-\rangle$ noch nicht normiert sind. Mann erhält normierte Zustände $|\tilde{\psi}_-\rangle = \sqrt{N!} |\psi_-\rangle$. Wegen der Unmöglichkeit festzustellen, welches Teilchen sich in welchem Zustand befindet, ist der Zustand auch hier **eindeutig** durch die Angabe der **Besetzungszahlen** n_i der Einteilchenzustände gegeben. Diese können bei Fermionen nur Null oder 1 sein.

10.2 Helium

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{p}}_1^2 + \hat{\mathbf{p}}_2^2) - 2e^2 \left(\frac{1}{|\mathbf{x}_1|} + \frac{1}{|\mathbf{x}_2|} \right) + \frac{e^2}{|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1|} + \dots \\ &= \hat{H}(1) + \hat{H}(2) + V(1-2) \end{aligned}$$

Zunächst **vernachlässigen** wir die Elektron–Elektron–Wechselwirkung. Dann ist der Ortsanteil der Wellenfunktion durch

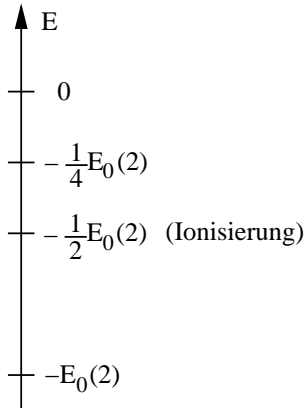
$$|\phi\rangle = |n_1, l_1, m_1\rangle^{(1)} |n_2, l_2, m_2\rangle^{(2)}$$

gegeben, wobei $|n_i, l_i, m_i\rangle$ die Eigenzustände des H-Atoms mit $Z = 2$ sind.

$$E_n^{(0)} = E_{n_1}^{(H)} + E_{n_2}^{(H)}, \quad E_n^{(H)} = -\frac{1}{2n^2}E_0(Z=2) \quad (\text{S.75}).$$

Die Ionisierungsenergie ist $E_{\text{ion}}^{(0)} = E_\infty - E_1 = \frac{E_0}{2}$

Energiezustände	n_1	n_2	$E_n^{(2H)}$
	1	1	$-E_0(2)$
	1	2	$-(5/8)E_0(2)$
	1	3	
	\vdots	\vdots	
	1	∞	$-(1/2)E_0(2)$
	2	2	$-(1/4)E_0(2)$



Damit liegt der $(n_1 = 2, n_2 = 2)$ Zustand höher als der einfach ionisierte Zustand und ist wie alle weiteren kein Bindungszustand. **Ein** Elektron hat im gebundenen Zustand also immer $n = 1$. Die Gesamtwellenfunktion muß antisymmetrisch sein, wir schreiben diese deshalb als Produkt aus Orts- und Spinanteil:

$$|\psi\rangle = |\phi\rangle|\chi\rangle$$

Der Spinzustand $|\chi\rangle = |S, M_S\rangle$ ist durch den Gesamtspin und seine Projektion auf eine Achse (hier z) festgelegt. (Es existieren auch noch weitere Möglichkeiten für $|\chi\rangle$, s.u..)

Der Ausgangspunkt zur Konstruktion von $|\chi\rangle$ sind die Zustandsvektoren $|\pm\rangle^{(1)}$ und $|\pm\rangle^{(2)}$ für den Spin des Teilchens 1 bzw. 2.

$$s_{z,i}|\pm\rangle^{(i)} = \pm\frac{\hbar}{2}|\pm\rangle^{(i)} \quad (m_i = \pm 1/2).$$

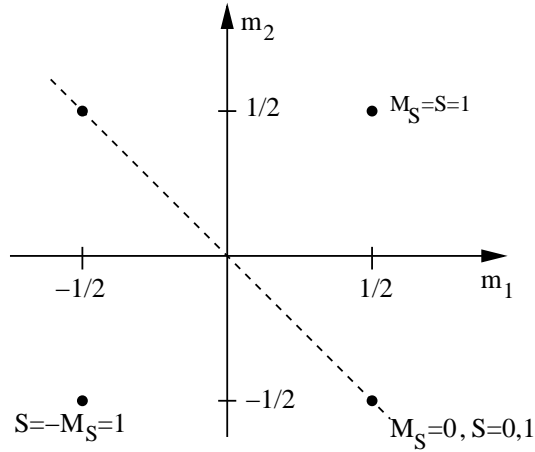
Aus diesen lassen sich die Produktzustände $|+\rangle^{(1)}|-\rangle^{(2)} = |+, -\rangle$ u.s.w. und das **Spin-Singlett**

$$|\chi\rangle_S = |S = 0, M_S = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+, -\rangle - |-, +\rangle)$$

sowie das **Spin-Triplett**

$$|\chi\rangle_T = \begin{cases} |S=1, M_S=1\rangle = |+, +\rangle \\ |S=1, M_S=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+, -\rangle - |-, +\rangle) \\ |S=1, M_S=-1\rangle = |-, -\rangle \end{cases}$$

aufbauen. Diese vier Zustände sind Eigenzustände des Gesamtspins $\hat{S} = \hat{s}_1 + \hat{s}_2$, sowie dessen z -Komponente \hat{s}_z .



Der Zustand mit **symmetrischer Ortsfunktion** und **Spin-Singulett** wird **Parahelium** genannt. Der Grundzustand ist

$$|0\rangle = |100\rangle^{(1)}|100\rangle^{(2)}|0,0\rangle, \quad (1s)^2,$$

wobei sich die ersten beiden kets auf den Ortsanteil und der letzte auf den Spinanteil beziehen. Der erste angeregte Zustand des Paraheliums ist

$$|1\rangle_P = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|100\rangle^{(1)}|2lm\rangle^{(2)} + |2lm\rangle^{(1)}|100\rangle^{(2)} \right) |0,0\rangle \quad (10.1)$$

Der Zustand mit **antisymmetrischer Ortsfunktion** und **Spin-Triplett** wird **Orthohelium** genannt. Da die Antisymmetrisierung von $|100\rangle|100\rangle$ Null ergibt, ist der niedrigste Spintriplettzustand

$$|1\rangle_O = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|100\rangle^{(1)}|2lm\rangle^{(2)} - |2lm\rangle^{(1)}|100\rangle^{(2)} \right) |1, M_S\rangle. \quad (10.2)$$

Auch die Zustände, die sich aus der Slaterdeterminante der Einteilchenzustände ergeben

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|100\rangle^{(1)}|2lm\rangle^{(2)}|+, -\rangle - |2lm\rangle^{(1)}|100\rangle^{(2)}|-, +\rangle \right) \\ & \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|100\rangle^{(1)}|2lm\rangle^{(2)}|-, +\rangle - |2lm\rangle^{(1)}|100\rangle^{(2)}|+, -\rangle \right) \end{aligned}$$

sind antisymmetrisch und erfüllen daher das Pauli-Prinzip, sie sind aber **nicht** Eigenfunktionen des Gesamtspins, das Matrixelement der Coulomb-Wechselwirkung sind bezüge beider Zustände nicht diagonal, die nicht-diagonalen Matrixelemente verschwinden aber für (10.1) und (10.2).

Man kann jetzt die **Coulomb–Wechselwirkung** der Elektronen **als Störung** hinzunehmen. In **niedrigster Ordnung der Störungstheorie** ist

$$E_{n=1} = E_{n=1}^{(0)} + \langle 0 | \frac{e^2}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} | 0 \rangle = -E_0(Z=2) \left(1 - \frac{5}{8Z} \right)$$

mit

$$\langle \mathbf{x}_1 \mathbf{x}_2 | 0 \rangle \equiv \langle \mathbf{x} | 0 \rangle = \frac{1}{\pi} \frac{1}{a_0^3} e^{-\frac{|\mathbf{x}_1| + |\mathbf{x}_2|}{a_0}}, \quad a_0 = a_0(Z=2)$$

Wir betrachten jetzt den **ersten angeregten** Zustand des Heliumatoms $(1s)^1(2s)^1$. Ohne Elektron-Elektron-Wechselwirkung ist dieser zweifach entartet. Diese Entartung verschwindet, wenn man die Coulomb–Wechselwirkung störungstheoretisch berücksichtigt: die Energie des Parazustands ist dann etwas höher als die des Orthozustands. Wir schreiben das Resultat der Störungstheorie niedriger Ordnung in $e^2/|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|$ jetzt explizit auf.

Parazustand (Spin–Singulett)

$$\begin{aligned} E_{n=2}^{(\text{Para})} &= E_1^{(H)} + E_2^{(H)} + \langle 1 | \frac{e^2}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} | 1 \rangle_{\text{Para}} \\ &= E_2^{(0)} + \frac{1}{2} \left({}^{(1)}\langle 100 | {}^{(2)}\langle 2lm | + {}^{(1)}\langle 2lm | {}^{(2)}\langle 100 | \right) \frac{e^2}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} \times \\ &\quad \times \left(|100\rangle^{(1)} |2lm\rangle^{(2)} + |2lm\rangle^{(1)} |100\rangle^{(2)} \right) \\ &= E_2^{(0)} + C + A \\ C &= {}^{(1)}\langle 100 | {}^{(2)}\langle 2lm | \frac{e^2}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} |100\rangle^{(1)} |2lm\rangle^{(2)} \left(\frac{1}{2} \cdot 2 \right) \quad \text{“Coulomb – Integral”} \\ A &= {}^{(1)}\langle 100 | {}^{(2)}\langle 2lm | \frac{e^2}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} |2lm\rangle^{(1)} |100\rangle^{(2)} \quad \text{“Austausch – Integral”} \end{aligned}$$

Der Austauschterm ist zutiefst quantenmechanischer Natur und hat, im Gegensatz zu C , **kein** klassisches Analogon (klassisch würden wir Terme der Form

$\int d^3x_1 d^3x_2 n(\mathbf{x}_1) n(\mathbf{x}_2) \frac{e^2}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|}$ bekommen). Die nichtdiagonalen Matrixelemente ${}_P \langle 1 | \frac{e^2}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} | 1 \rangle_O$ verschwinden.

Für den **Orthozustand** findet man

$$E_{n=2}^{(\text{Ortho})} = E_2^{(0)} + \langle 1 | \frac{e^2}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} | 1 \rangle_{\text{Ortho}} = E_2^{(0)} + C - A.$$

Man beachte das unterschiedliche Vorzeichen von A in Para- und im Orthozustand! Man kann jetzt C und A mit den Wellenfunktionen des Wasserstoffproblems berechnen, C und A sind von der Ordnung $E_0(Z)/Z$ und **positiv**.

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}_i | 100 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{\pi} a_0^{3/2}} e^{-\frac{|\mathbf{x}_i|}{a_0}} \\ \langle \mathbf{x}_i | 200 \rangle &= \frac{1}{4\sqrt{2\pi} a_0^{3/2}} \left(2 - \frac{|\mathbf{x}_i|}{a} \right) e^{-|\mathbf{x}_i|/2a_0} \quad a_0 = a_0(Z=2). \end{aligned}$$

Man kann die beiden Resultate für $E_n^{(\text{Ortho/Para})}$ zusammenfassen, wenn man für die Spins $\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2$ $\hat{\mathbf{s}}_1 \hat{\mathbf{s}}_2 = \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{S}}^2 - \hat{\mathbf{s}}_1^2 - \hat{\mathbf{s}}_2^2)$ schreibt. Angewandt auf den Spin–ket $|S, M_S\rangle$ ergibt das die Eigenwerte $\frac{1}{2}\hbar^2 S(S+1) - \frac{3}{8}2\hbar^2$.

$$\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2 |S, M_S\rangle = \begin{cases} -(3/4)\hbar^2 |0, 0\rangle & \text{Singulett} \\ +(1/4)\hbar^2 |1, M_S\rangle & \text{Triplet} \end{cases}.$$

Als Spin-Zustände existieren der **Singulett**-Zustand $|0, 0\rangle$ und die **Triplet**-Zustände $|1, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle$.

Man kann die Matrixelemente von \hat{H} mit $|1\rangle_O$ und $|1\rangle_P$ und damit die Energieeigenwerte im ersten angegebenen Zustand auch als Matrixelemente von $(\hat{s} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma})$

$$\hat{\mathcal{H}} = E_2^{(0)} + C - \frac{1}{2}(1 + \hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2)A \quad (10.3)$$

mit den Kets $|S, M_S\rangle$ schreiben. Wir haben hier also den Hamiltonian über die Spin-Operatoren ausgedrückt. Da $A > 0$ ist wird die Parallelstellung der Spins favorisiert, dies hat aber **nichts** mit einer magnetischen Wechselwirkung und überlebt den Limes $c \rightarrow \infty$.

Qualitativ versteht man dies wie folgt. Wenn beide Elektronen am gleichen Platz sind, ist $|1\rangle_O$ Null, $|1\rangle_P$ nimmt seinen größten Wert an:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}, 1 \rangle_O &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\langle \mathbf{x}_1 | 100 \rangle \langle \mathbf{x}_2 | 2lm \rangle - \langle \mathbf{x}_1 | 2lm \rangle \langle \mathbf{x}_2 | 100 \rangle \right) \Big|_{\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_2} = 0 \\ \langle \mathbf{x}, 1 \rangle_P &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\langle \mathbf{x}_1 | 100 \rangle \langle \mathbf{x}_2 | 2lm \rangle + \langle \mathbf{x}_1 | 2lm \rangle \langle \mathbf{x}_2 | 100 \rangle \right) \Big|_{\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_2} \\ &= \sqrt{2} \langle \mathbf{x}_1 | 100 \rangle \langle \mathbf{x}_1 | 2lm \rangle \end{aligned}$$

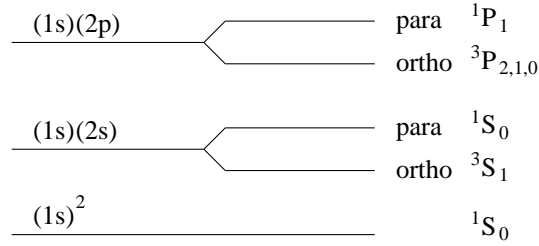
Im Orthozustand sind also die Elektronen im Mittel weiter voneinander entfernt als im Parazustand (im beiden Zuständen sind die Ortskets normiert), deshalb ist die Coulomb-Wechselwirkung der Elektronen im Orthozustand im Mittel etwas schwächer als im Parazustand.

Obwohl der Ausgangshamiltonian die Elektronenspins nicht enthält, kann man die ersten angeregten Zustände durch einen effektiven Spinhamiltonian beschreiben, dessen Eigenwerte sind offenbar die Eigenwerte $E_{n=2}^{(\text{Para/Ortho})}$. Formel (10.3) enthält schon den Kern der Theorie des Magnetismus, sie stellt den **Heisenberg-Hamiltonian** für zwei Spins dar. Der Magnetismus basiert also auf der Coulomb-Wechselwirkung der Elektronen, nicht auf der magnetischen Wechselwirkung der Spins. Letztere ist von der Ordnung

$$\frac{\mu_{\text{spin}}^2}{a_0^3} \sim \frac{e^2 \hbar^2}{m^2 c^2 a_0^3} \sim \frac{e^2}{a_0} \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right)^2 \sim \alpha^2 E_0,$$

d.h. um den Faktor $\alpha^2 = (e^2/\hbar c)^2$ kleiner als die Austauschwechselwirkung, die von der Ordnung E_0 ist.

Schematische Energieniveaus von He:



10.3 Thomas–Fermi–Näherung

Es gibt verschiedene Methode, um über die Störungstheorie hinauszugehen, die für die Behandlung der Coulombwechselwirkung ja nicht besonders gut geeignet ist, da $\frac{e^2}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} \sim O(E_0(Z)/Z)$. Zu diesen Näherungsmethode gehört das Ritzsche Variationsverfahren und die wichtige **Hartree**– bzw. **Hartree–Fock–Näherung**. Wir wollen hier ein anderes Verfahren, die sogenannte **Thomas–Fermi–Näherung** kurz betrachten, die besonders einfach ist. Sie funktioniert dann besonders gut, wenn wie in komplizierten Atomen viele Elektronen relativ große Hauptquantenzahlen haben. Dann ist die **quasiklassische Näherung** anwendbar.

Das Phasenvolumen für Elektronen mit Impuls $|\mathbf{p}|$ im Volumenelement dV ist $\frac{4}{3}\pi p^3 dV$. Zu diesem Volumen gehören $\frac{4\pi}{3}p^3 dV/h^3$ Zellen, d.h. mögliche Zustände. In diesen Zellen können nicht mehr als $\frac{8\pi}{3}p^3 dV/h^3$ Elektronen (beider Spinrichtungen) untergebracht sein. Im Grundzustand müssen in dV alle Zustände bis hin zu einem maximalen Impuls p_0 , der von der Dichte und damit von \mathbf{x} abhängt, besetzt sein. Schreiben wir die Zahl der Elektronen in dV als ndV , dann folgt ($n(\mathbf{x})$ ist die Elektronendichte)

$$\begin{aligned} \frac{8\pi}{3}p_0^3 dV \frac{1}{h^3} &= n dV \\ \frac{8\pi}{3}p_0^3 &= h^3 n \end{aligned}$$

oder

$$\frac{1}{2m}p_0^2 = h^2 n^{2/3} \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{2/3} \frac{1}{2m}.$$

Sei $\phi(\mathbf{x})$ ferner das elektrostatische Potential, das auf die Elektronen wirkt, und das im Unendlichen verschwindet. Die Gesamtenergie ($e = -e_0$, e_0 Elementarladung)

$$\frac{1}{2m}\mathbf{p}_0^2 + e\phi(\mathbf{x}) = +e\phi_0 \leq 0$$

des Elektrons muß negativ sein, ansonsten würde das Elektron das Atom verlassen und im Unendlichen verschwinden, ϕ_0 ist eine Konstante:

$$\frac{1}{2m}p_0^2 = e(-\phi(\mathbf{x}) + \phi_0) = h^2 n^{2/3} \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{2/3} \frac{1}{2m}.$$

Auf diese Weise haben wir einen Zusammenhang zwischen dem **Potential** ϕ und der **Elektronendichte** n hergestellt. Es gilt

$$n = 0 \quad \text{für} \quad \phi < \phi_0,$$

$\phi(\mathbf{x}) = \phi_0$ bestimmt den Rand des Atoms. Da die Ladungsverteilung im Mittel kugelsymmetrisch ist und die Gesamtladung verschwindet, muß am Rand des neutralen Atoms $\phi = 0$ sein, damit ist aber auch $\phi_0 = 0$. Es gilt nun die Poisson-Gleichung

$$\Delta\phi = -4\pi e n(\mathbf{x}) + 4\pi Ze \delta(\mathbf{x}).$$

Nach Einsetzen von $n = (-e\phi)^{3/2} \left(\frac{8\pi}{3}\right) h^{-3}(2m)^{3/2}$ ergibt sich

$$\frac{1}{4\pi e} \Delta\phi = -(-e\phi)^{3/2} \left(\frac{8\pi}{3}\right) h^{-3}(2m)^{3/2} + Z \delta(\mathbf{x}).$$

Es ist zweckmäßig, wie früher zu atomaren Einheiten überzugehen: $\mathbf{x} = \boldsymbol{\xi} a_0$, $a_0 = \frac{\hbar^2}{Ze^2 m}$, und $\phi(\mathbf{x}) = -(eZ/a_0)(1/\xi)\chi$, dies ergibt (χ beschreibt offenbar die Abweichung des Potentials $\phi(\mathbf{x})$ von dem des Kerns $-eZ/a_0\xi$):

$$\frac{1}{4\pi} \Delta_{\boldsymbol{\xi}} \left(\frac{1}{\xi} \chi \right) = C \frac{1}{Z} \left(\frac{\chi}{\xi} \right)^{3/2} - \delta(\boldsymbol{\xi})$$

$C = \frac{2^{3/2}}{3\pi^2}$. Für $\xi \ll 1$ hat diese Gleichung die Lösung $\chi \sim +1$. Es ist hier aber offenbar günstig, $\xi = Z^{2/3}\xi_1$ zu schreiben, dann erhalten wir:

$$\frac{1}{4\pi} \Delta_{\boldsymbol{\xi}_1} \left(\frac{\chi}{\xi_1} \right) = C \left(\frac{\chi}{\xi_1} \right)^{3/2} - \delta(\boldsymbol{\xi}_1).$$

Nach Übergang zu Kugelkoordinaten erhält man mit

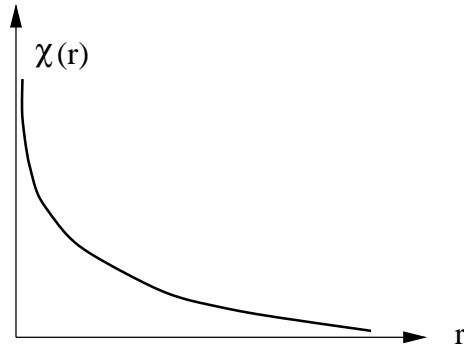
$$\Delta_{\xi_1}(\chi/\xi_1) = \left(\frac{\partial^2}{\partial \xi_1^2} + \frac{2}{\xi_1} \frac{\partial}{\partial \xi_1} \right) \frac{\chi}{\xi_1} = \left(\frac{1}{\xi_1} \frac{\partial}{\partial \xi_1} \xi_1 \right)^2 \frac{\chi}{\xi_1} = \frac{1}{\xi_1} \frac{\partial^2}{\partial \xi_1^2} \chi$$

für $\xi_1 \neq 0$

$$\frac{\partial^2}{\partial \xi_1^2} \chi = c \xi_1^{-1/2} \chi^{3/2}.$$

Diese Gleichung kann man mit den Randbedingungen $\chi(0) = 1$, $\chi(\infty) = 0$ numerisch lösen. Für $\xi_1 \rightarrow \infty$ erhält man analytisch $\chi \sim \frac{1}{\xi_1^3}$. Die Elektronendichte folgt dann aus

$$n(r) \sim \phi^{3/2}(r) \sim \frac{1}{r} \chi(r).$$



Für kleine Abstände gilt

$$\phi(r) = -\frac{Ze}{r} + 1.8Z^{4/3}\frac{e}{a_0(Z=1)}.$$

Die Ausdehnung des Atoms ist unendlich, was unphysikalisch ist. Die typische Längenskala ist $\xi_1 \approx 1$, d.h. $\frac{r}{a_0(Z)} = Z^{2/3}$ oder $r \approx a_0(Z=1)Z^{-1/3}$. Numerisch läßt sich zeigen, daß die Hälfte aller Elektronen innerhalb des Radius $1.33a_0(Z=1)Z^{-1/3}$ sich befindet. Dieser Radius wird auch als Thomas-Fermi-Länge bezeichnet.

Wann ist die Thomas-Fermi-Näherung vernünftig? Mit $E_{\text{pot}} \approx Z^{4/3}\frac{e^2}{a_0(Z=1)} \approx \frac{h^2}{2m\lambda^2}$ oder $\lambda^2 \approx \frac{h^2 a_0(Z=1)}{me^2 Z^{4/3}}$. Die charakteristische Skala, über die sich das Potential ändert, ist $a_0(Z=1)Z^{-1/3}$ (d.h. die typische Längenskala). Die quasiklassische Näherung gilt, falls

$$\lambda \ll a_0(Z=1)Z^{-1/3}$$

d.h. $Z \gg 1$ erfüllt ist.

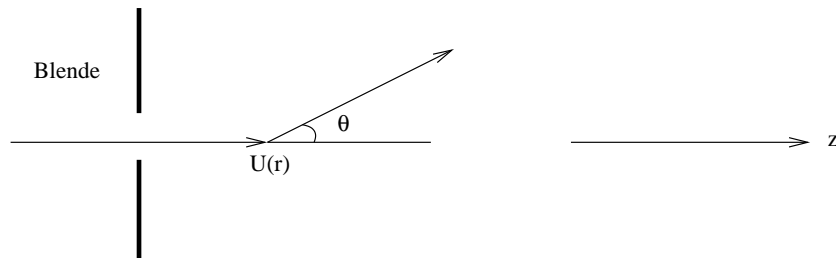
Natürlich hat die Thomas-Fermi-Methode diverse Schwächen, sie ist dort ungenau, wo die Variation des Potentials stark wird, bei großen Abständen, da dort die Wellenlängen nicht mehr klein sind und sie enthält keine Austausch-Effekte (die man nachträglich einbauen kann). Sie ist ein gutes Beispiel für eine Näherung des "mittleren Feldes", wie sie oft in der Physik angewandt wird.

Kapitel 11

Streutheorie

11.1 Allgemeine Theorie der elastischen Stöße

Wir betrachten die **elastische** Streuung zweier Teilchen in einem Koordinatensystem, in dem der Schwerpunkt beider Teilchen **ruht** (siehe 5.3). (Bei einem elastischen Prozeß geht **nicht** ein Teil der kinetischen Energie durch Anregung innerer Freiheitsgrade verloren (letzteres wird als **inelastische** Streuung bezeichnet). Auf diese Weise erhalten wir das Problem der Streuung eines Teilchens mit reduzierter Masse $m = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ und fester Energie E im Potential $U(\mathbf{x})$ eines festen Kraftzentrums, $\mathbf{x} = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$. Den Streuwinkel bezeichnen wir mit θ (offenbar ist das Problem rotationssymmetrisch um die z -Achse).



Die einfallende Teilchen, das sich in z -Richtung bewegen soll, wird durch eine **ebene Welle** $\psi_{\text{ein}} = e^{ikz}$ beschrieben. Wir haben hier bereits die Zeitabhängigkeit der Wellenfunktion in der Form $e^{-itE/\hbar}$ absepariert. Weit entfernt vom Streuzentrum muß die auslaufende Welle durch eine Kugelwelle der Form $\psi_{\text{aus}} = f(\theta)e^{ikr}/r$ beschreibbar sein. $f(\theta)$ ist die sogenannte **Streuamplitude**. Damit gilt für die Gesamtwellenfunktion

$$\langle \mathbf{x} | \psi \rangle = \psi(\mathbf{x}) \simeq e^{ikz} + \frac{f(\theta)}{r} e^{ikr}.$$

Die Wahrscheinlichkeit, daß das gestreute Teilchen in der Zeiteinheit durch das Oberflächenelement $dS = r^2 d\Omega$ ($d\Omega$ ist das Raumwinkelelement) geht, ist (die Blende ist so beschaffen, dass die auslaufende Welle nur aus dem gestreuten Anteil besteht)

$$j_{\text{aus}} dS = \frac{\hbar k}{m} r^{-2} |f|^2 dS = \frac{\hbar k}{m} |f|^2 d\Omega.$$

Ihr Verhältnis zur einfallenden Stromdichte ist der **effektive Streuquerschnitt** (er hat die Dimension einer Fläche!)

$$\frac{j_{\text{aus}}}{j_{\text{ein}}} dS \equiv d\sigma = |f(\theta)|^2 d\Omega.$$

Zur Erklärung: die einfallende Stromdichte ist $\mathbf{j}_{\text{ein}} = \frac{\hbar}{m} k \hat{n}_z$, die auslaufende Stromdichte ist $\mathbf{j}_{\text{aus}} = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left(\frac{f^*}{r} e^{-ikr} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{f}{r} \right) e^{ikr} \right) = \frac{\hbar k}{m} |f|^2 \frac{1}{r^2}$. Der **totale Streuquerschnitt** ist

$$\sigma = \int d\Omega |f(\theta)|^2 = \int d\sigma.$$

Es bleibt also jetzt die Aufgabe, die Streuamplituden zu berechnen. Wir wollen dies hier unter der Voraussetzung machen, daß das Streupotential $\lambda U(r)$ eine **kleine** Störung ($\lambda \ll 1$) zur freien Bewegung des Teilchens darstellt. Wir können dann die Störungstheorie anwenden. Wir suchen daher Lösungen der Form $\psi = \psi^{(0)} + \lambda \psi^{(1)} + \lambda^2 \psi^{(2)} + \dots$, mit $\psi^{(0)} = e^{ikz}$ für die Wellenfunktion des einfallenden Teilchens. Diese genügt der Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi^{(0)} = E \psi^{(0)}, \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

$\psi^{(1)}$ folgt dann aus

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi^{(1)} + E \psi^{(1)} = U \psi^{(0)}. \quad (11.1)$$

Die Lösung dieser Gleichung ist aus der Elektrodynamik bekannt und hat die Form

$$\psi^{(1)}(\mathbf{x}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3x' \frac{e^{ikr}}{r} U(\mathbf{x}') e^{ikz}, \quad r = |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|.$$

Zur Erklärung: in der Elektrodynamik war die **inhomogene Wellengleichung**

$$\Delta \phi - \frac{1}{c^2} \partial_t^2 \phi = -4\pi \rho(\mathbf{x}, t) \quad (11.2)$$

zu lösen, deren retardierte Lösungen die Form

$$\phi(\mathbf{x}, t) = \int d^3x' \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \rho(\mathbf{x}', t - \frac{1}{c} |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|).$$

haben. Mit $-4\pi\rho \equiv \frac{2m}{\hbar^2} U e^{ickt} \psi^{(0)}$ können wir den Ansatz $\phi(\mathbf{x}, t) = e^{ickt} \psi^{(1)}(\mathbf{x})$ machen, in diesem Fall erhält man aus (11.2) (dividiere (11.1) durch $2m/\hbar$)

$$\Delta \psi^{(1)} + k^2 \psi^{(1)} = \frac{2m}{\hbar^2} U(\mathbf{x}) \psi^{(0)},$$

d.h. die von uns zu lösende Gleichung. Damit folgt (der Faktor e^{ickt} hebt sich weg)

$$\boxed{\psi^{(1)}(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2\pi} \int d^3x' \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \frac{m}{\hbar^2} U(\mathbf{x}') e^{i|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|k} e^{ikz'}} \quad (11.3)$$

d.h. unsere schon oben angegebene Lösung. Diese Lösung ist vernünftig, solange $\lambda \psi^{(1)} \ll \psi^{(0)}$ gilt. Falls $\lambda U(r)$ nur in einem Gebiet der linearen Ausdehnung a merklich von Null verschieden ist, und $ak \lesssim 1$ ist, ist im Integral (11.3) der exponentielle Faktor bei der Integration vernachlässigbar. Man erhält dann $\psi^{(1)}(\mathbf{x}) \sim \frac{m}{2\pi\hbar^2} U a^2 \psi^{(0)}$, was auf die Bedingung

$$\lambda |U| \ll \frac{\hbar^2}{ma^2} \quad (ka \lesssim 1)$$

für die Anwendbarkeit der Störungstheorie führt. Zur weiteren Auswertung setzen wir das Streuzentrum in den Koordinatenursprung, dann wird für $|\mathbf{x}| \gg |\mathbf{x}'|$, $|\mathbf{x} -$

$\mathbf{x}' = ((\mathbf{x} - \mathbf{x}')^2)^{1/2} \approx |\mathbf{x}| - 2 \cdot \frac{1}{2} \frac{\mathbf{x} \cdot \mathbf{x}'}{|\mathbf{x}|} + \dots$, $|\mathbf{x}| = r$, $\mathbf{k}' = k \frac{\mathbf{x}}{|\mathbf{x}|}$, $\mathbf{k} = (0, 0, k_z)$ ($U(|\mathbf{x}'|)$ ist nur für kleine $|\mathbf{x}'|$ von Null verschieden!)

$$\psi^{(1)}(\mathbf{x}) \simeq -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int d^3x' U(\mathbf{x}') e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{x}'}$$

Nebenrechnung:

$$\begin{aligned} kz' &\equiv \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}' \\ e^{ikz' + i|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|k} &\approx e^{ikz' + i|\mathbf{x}|k - \frac{\mathbf{x}\mathbf{x}'}{|\mathbf{x}|}k} \\ &= e^{i|\mathbf{x}|k - \mathbf{k}'\mathbf{x}' + ikz'} = e^{ikr} e^{i\mathbf{x}'(\mathbf{k}-\mathbf{k}')} \end{aligned}$$

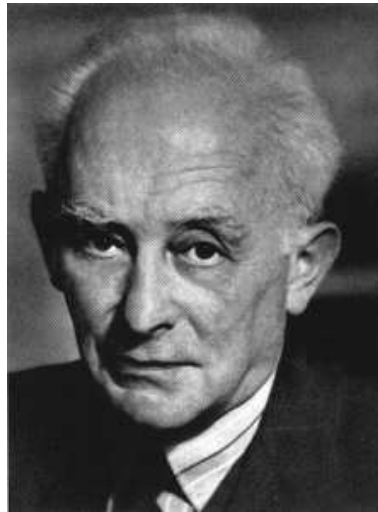
Durch Vergleich mit dem Ausdruck für die Streuamplitude (ganz am Anfang) folgt

$$f(\theta) = -\frac{m\lambda}{2\pi\hbar^2} \int d^3x U(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}}$$

mit $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$, $q = 2k \sin \frac{\theta}{2}$. Für den effektiven Streuquerschnitt erhalten wir demnach $d\sigma = |f(\theta)|^2 d\Omega$ mit

$$d\sigma = \left(\frac{m\lambda}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \left| \int U(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}} d^3x \right|^2 d\Omega.$$

(Vergleiche Übungsaufgabe $\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{dE}{d\Omega dS}$!) Dies ist die sogenannte **Bornsche Näherung**.



Max Born (1882–1970)

Zur Berechnung des Integrals im Falle eines kugelsymmetrischen Potentials $U(\mathbf{x}) = U(r)$ verwenden wir Kugelkoordinaten mit der Polarachse in Richtung des Vektors

q

$$\begin{aligned}
 I = \int U(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}} d^3x &= \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \int r^2 dr U(r) e^{-iqr \cos\theta} \\
 &= 2\pi \int r^2 dr U(r) \int_0^\pi (-d \cos\theta) e^{-iqr \cos\theta} \\
 &= 2\pi \int dr U(r) \frac{1}{iq} (e^{iqr} - e^{-iqr}) \\
 &= 4\pi \int r dr U(r) \frac{1}{q} \sin qr.
 \end{aligned}$$

Wir betrachten jetzt den Spezialfall.

Für ein einfaches Potential

$$\lambda U = \begin{cases} -U_0 & \text{für } r < a \\ 0 & \text{für } r > 0 \end{cases},$$

folgt dann nach elementarer Rechnung

$$\begin{aligned}
 I = 4\pi \int_0^a r dr (-U_0) \frac{1}{q} \sin qr &= -4\pi U \frac{1}{q} \left[\frac{\sin qr}{q^2} - \frac{r \cos qr}{q} \right]_0^a \\
 &= -4\pi U \frac{1}{q^3} (\sin qa - (aq) \cos qa)
 \end{aligned}$$

$$d\sigma = \left(\frac{mU_0 a^2}{\hbar^2} \right)^2 4 \frac{a^2}{(qa)^6} (\sin qa - (aq) \cos qa)^2 d\Omega$$

$$\sin qa - aq \cos qa \approx qa - \frac{1}{3!} (qa)^3 - aq \left(1 - \frac{1}{2} (qa)^2 \right) = \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{6} \right) (qa)^3$$

$qa \ll 1$

$$d\sigma = \frac{4}{9} \left(\frac{mU_0 a^2}{\hbar^2} \right)^2 a^2 d\Omega \quad \rightarrow \quad \sigma = \frac{16\pi}{9} a^2 \left(\frac{mU_0 a^2}{\hbar^2} \right)^2.$$

Dieses Ergebnis folgt, bis auf den Vorfaktor, auch aus linear Dimensionsanalyse und der Tatsache, dass $\sigma \sim |U_0|^2$ (Bornsche Näherung).

$$\sigma \approx 2\pi a^2 \left(\frac{mU_0 a^2}{\hbar^2} \right)^2 \begin{cases} \frac{8}{9} & \text{für } ka \ll 1 \\ \frac{1}{(ak)^2} & \text{für } ka \gg 1 \end{cases}.$$

Für große Teilchenenergie fällt der Streuquerschnitt offenbar wie $1/E$ ab. Der Faktor πa^2 stellt die Fläche für den einfallenden Teilchenstrahl dar, in der das Potential von Null verschieden ist. Der zweite Faktor $(U_0/(\hbar^2/ma^2))^2$ ist das Quadrat des Verhältnisses der Potentialstärke zur kinetischen Energie eines Teilchens, das im Volumen a^3 lokalisiert ist.

Wir haben hier $d\sigma$ über $|f(\theta)|^2$ ausgedrückt, dies ist die uns experimentell zugängliche Größe. Häufig möchte man aus dem Streuexperiment auf das Streupotential Rückschlüsse ziehen, was wegen des verschiedenen Phasenfaktors in $|f(\theta)|^2$ nicht vollständig möglich ist. Wenn allerdings $U(\mathbf{x}) = U(-\mathbf{x})$ ist, ist $f(\theta)$ reell (in Bornscher Näherung). Falls $f(\theta)$ nicht genähert berechnet wird, ist $f(\theta)$ **nicht reell**.

Der allgemeinere Zugang zur Berechnung des Streuquerschnitts besteht in der Zerlegung von $f(\theta)$ nach **Partialwellen**. Wegen der Rotationsinvarianz kann man $f(\theta)$ nach Legendreschen Polynomen $P_l(\cos \theta)$ entwickeln

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l P_l(\cos \theta).$$

Die Entwicklungskoeffizienten f_l heißen **Partialwellenamplituden** oder **partielle Streuamplituden** (gelegentlich wird die Definition der f_l durch Wahl eines anderen Vorfaktors etwas abgeändert). Die stationäre Wellenfunktion kann man dann in der Form

$$\psi(\mathbf{x}) = c \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) R_l(r) P_l(\cos \theta) \quad (11.4)$$

schreiben, dies ist die Überlagerung der Lösungen, die wir bereits in 5.1 gefunden haben.

Tatsächlich, die Lösungen des kugelsymmetrischen Schrödingerproblems in den Kapiteln 4 und 5 hatten die Form einer Überlagerung von $R_l(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$ mit verschiedenen l und m . Da die Lösung hier aber aus Symmetriegründen nicht von φ abhängt, muß $m = 0$ sein. Aus $Y_{lm}(\theta, \varphi) = \Theta_{lm} e^{im\varphi}$ folgt

$$Y_{l,0}(\theta) = \Theta_{l,m=0}(\theta) = i^l \sqrt{\frac{2l+1}{2}} P_l(\cos \theta).$$

Dies rechtfertigt die obige Form der Wellenfunktion.

Der Radialanteil der Wellenfunktion genügt der Gleichung ($E = \hbar^2 k^2 / 2m$)

$$\left[\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} U(r) \right] R_l(r) = 0.$$

Wir werden noch zeigen, daß die asymptotische Form von $R_l(r \rightarrow \infty)$ durch

$$R_l(r) \approx \frac{a_l}{r} \sin \left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l \right)$$

gegeben ist. a_l und δ_l sind Konstanten, die Phase $\delta_l(k)$ wird durch die Randbedingungen festgelegt, hierzu muß die Schrödingergleichung gelöst werden. Wir können dann ψ in der Form

$$\psi \simeq \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) A_l P_l(\cos \theta) \frac{1}{kr} \sin \left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l \right)$$

oder

$$\psi \simeq \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) A_l P_l(\cos \theta) \frac{i}{2kr} \left[e^{-i(kr - \pi l/2 + \delta_l)} - e^{i(kr - \pi l/2 + \delta_l)} \right]$$

schreiben. Die Koeffizienten A_l müssen dann so gewählt werden, daß die Funktion ψ für große r die Gestalt $e^{ikz} + \frac{f(\theta)}{r^2} e^{ikr}$ hat. Zunächst ist es zweckmäßig, e^{ikz} nach **Kugelwellen** zu entwickeln (aus Zeitgründen hier ohne Beweis, den man z.B. in Landau-Lifschitz Bd.III, §34 findet).

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta} \approx \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) P_l(\cos \theta) \frac{i}{2kr} \underbrace{\left[e^{-i(kr - \pi l/2)} - e^{i(kr - \pi l/2)} \right]}_{-2i \sin(kr - \pi l/2)}$$

$\psi(\mathbf{x}) - \exp(ikz)$ muß eine auslaufende Welle darstellen, d.h. aus ihr müssen alle Terme herausfallen, die $\exp(-ikr)$ enthalten. Dazu setzt man $A_l = i^l e^{i\delta_l}$, dann gilt mit $S_l = e^{2i\delta_l}$ und obiger Darstellung von e^{ikz}

$$\begin{aligned}\psi &\approx \frac{i}{2kr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos\theta) \left[(-1)^l e^{-ikr} - S_l e^{ikr} \right] \\ &= e^{ikz} - \frac{i}{2kr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos\theta) [S_l - 1] e^{ikr}.\end{aligned}$$

Durch Vergleich mit (11.2) folgt jetzt

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(S_l - 1) P_l(\cos\theta)$$

sowie

$$f_l = \frac{1}{2ik} (S_l - 1) = \frac{1}{2ik} (e^{2i\delta_l} - 1).$$

Damit ist das Problem, die Streuamplitude $f(\theta)$ zu finden, auf das Problem, die Streuphase zu finden, zurückgeführt worden. Die Vollständigkeit halber führen wir hier noch den **partiellen Streuquerschnitt** $\sigma_l = 4\pi(2l+1)|f_l|^2$ ein. Der l -te Term trägt zu Streuung bei, wenn einfallendes und gestreutes Teilchen ein System mit Drehimpuls $l\hbar$ bilden. Es gilt weiter $P_l(\cos 0) = 1$

$$f(\theta=0) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(S_l - 1) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(\cos 2\delta_l + i \sin 2\delta_l - 1).$$

Im $f(0) = \frac{1}{2k} \sum_l (2l+1)(1 - \cos 2\delta_l) = \frac{1}{k} \sum_l (2l+1) \sin^2 \delta_l$. Dies ist zu vergleichen mit dem differentiellen Streuquerschnitt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \frac{1}{4k^2} \sum_{l,l'} (2l+1)(2l'+1)(S_l - 1)(S_{l'}^{-1} - 1) P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta).$$

Nach Integration über $d\Omega$ und unter Benutzung von

$$\int P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta) d\Omega = \frac{4\pi}{2l+1} \delta_{ll'}$$

folgt für den **totalen Streuquerschnitt**

$$\sigma = \int d\Omega |f(\theta)|^2 = \frac{1}{4k^2} \sum_l 4\pi(2l+1) \underbrace{(2 - e^{2i\delta_l} - e^{-2i\delta_l})}_{2(1 - \cos 2\delta_l) = 4 \sin^2 \delta_l}$$

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \sin^2 \delta_l = 4\pi \operatorname{Im} f(0) \quad (11.5)$$

Dies ist das sogenannte **Optische Theorem** von Bohr, Peierls und Placke.

Bei einem exakt gelösten Streuproblem ist σ Null, wenn $f(0)$ reell ist.

Wir wollen abschließend ohne Beweis die **Streuung** an einer **harten Kugel** mit dem Radius a bei hohen Energien $ka \gg 1$ betrachten. Hier erhält man für die Phasenverschiebung $\delta_l = -ka + l\pi/2$ (wir hatten für $l=0$ dieses Ergebnis in Kapitel 3.4 bei der Betrachtung der Transmissionsamplitude erhalten). D.h. für $l=0$ ist

die Phasenverschiebung negativ. Setzt man dieses Resultat in (11.5) ein, erhält man nach einigen Umformungen

$$\sigma = 2\pi a^2,$$

d.h. der quantenmechanischen Streuquerschnitt ist **doppelt so groß** wie der klassischen Streuquerschnitt.

Kapitel 12

Atomaufbau und Hundzsche Regeln

1. Bisherige Prototypen: H-Atom - exakt lösbar
He-Atom - Wechselwirkung der Elektronen über Störungstheorie.

2. Nicht behandelt: Berücksichtigung der Wechselwirkung von mehr als zwei Elektronen:

→ Hartree- und Hartree-Fock-Approximation,

→ Thomas-Fermi-Näherung.

→ gibt kugelsymmetrisches effektives Potential (durch die anderen Elektronen abgeschirmtes) Potential, aber i.A. nicht $1/r$.

3. → Ein-Elektronenwellenfunktion (nur der Radialanteil ist gegenüber $1/r$ -Potential verändert)

$$\varphi_i = R_{nl}(r)Y_{lm_l}(\theta, \varphi)\chi(m_s)$$

R_{nl} - Radialanteil, Y_{lm_l} -Winkelanteil, $\chi(m_s)$ - Spinanteil. $n: l = 0, \dots, n - 1$. Bei festen n und $l: (2s + 1)(2l + 1) = 2(2l + 1)$ -fache Entartung.

Alle Zustände mit dem gleichen n und l (das sind $2(2l + 1)$) bilden eine Schale. Die Werte der Drehimpulsquantenzahl werden auch durch Buchstaben wiedergegeben:

l	0	1	2	3
	s	p	d	f

Die $(n =)1s$ -Schale hat 2 Zustände (H und He)

$(n =)2s$ -Schale hat 2 Zustände

2p-Schale hat 6 Zustände

$(n =)3s$ -Schale hat 2 Zustände

3p-Schale hat 6 Zustände

3d-Schale hat 10 Zustände u.s.w..

Durch sukzessives Auffüllen der Schalen kann man die Atom-Hüllen der Atome des Periodensystems aufbauen (wir betrachten jetzt immer den Grundzustand).

H :	1s	$n = 1, l = 0$, einfach besetzt
He :	(1s) ²	$n = 1, l = 0$, zweifach besetzt
Li :	(1s) ² 2s	$n = 1, l = 0$, zweifach, $n = 2, l = 0$ einfach besetzt
Be :	(1s) ² (2s) ²	
B :	(1s) ² (2s) ² 2p	

Man kann jetzt fragen, warum für $n = 2$ zunächst die s und dann die p-Orbitale aufgefüllt werden?

Antwort: je kleiner l , umso größer ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte am Kern, desto schwächer die Abschirmung, desto tiefer das Kernpotential und desto niedriger die Energie (siehe Folie).

Bei Atomen mit größerem Z gibt man die inneren gefüllten Schalen nicht mehr an (s. Folie ab dem Bor)!

- Bis Neon: 2p-Schale ist abgeschlossen (1s)²(2s)²(2p)⁶
- Vom Natrium bis Argon: 3s und 3p-Schale werden abgeschlossen (2+6=8)
- Bei $Z = 19$: Kalium wurde man erwarten, dass die 3d Schale besetzt wird. Dies ist nicht der Fall, statt dessen ($E_{4s} \approx E_{3d}$)

$${}^{19}\text{K} \dots 4s, \quad {}^{20}\text{Ca} (4s)^2, \quad | \quad {}^{21}\text{Sc} (4s)^2 3d, \quad {}^{22}\text{Ti} (4s)^2 (3d)^2, \dots, \quad {}^{30}\text{Zn} (4s)^2 (3d)^{10},$$

damit ist die 3d-Schale aufgefüllt, dies sind die Übergangsmetalle der IV Reihe des Periodensystems.

Elemente, bei denen d- oder f-Schalen besetzt werden, nennt man Übergangsmetalle. Das chemische Verhalten der Übergangsmetalle wird durch die äußersten s-Elektronen bestimmt \rightarrow enge Verwandtschaft der Elemente.

Wir bestimmen noch die Quantenzahl L des Gesamtbahndrehimpulses und des Gesamtspins.

$$\hat{\mathbf{L}} = \sum_i \hat{\mathbf{l}}_i$$

$$\hat{\mathbf{S}} = \sum_i \hat{\mathbf{s}}_i.$$

Bei nicht voll gefüllter Schale sind mehrere Werte von \mathbf{S} und \mathbf{L} möglich. Vernachlässigt man die Wechselwirkung zwischen Spin- und Bahndrehimpuls (Spin-orbit-Kopplung), dann ist nicht nur $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$, sondern auch \mathbf{L} und \mathbf{S} erhalten, d.h. gute Quantenzahlen.

Die Energie hängt dann nicht von L_z ab, wohl aber von S , da je größer S umso antisymmetrischer ist die Ortsfunktion (vergl. Helium) und umso kleiner die Coulomb-Abstoßung der Elektronen. \rightarrow Große S werden bevorzugt.

Nimmt man jetzt die Spin-Bahn-Wechselwirkung (relativistischen Ursprungs, siehe Dirac-Gleichung) hinzu, dann sind die Quantenzahlen

$$J, L, S, J_z \quad \mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$$

(vergleiche $l_1 \rightarrow L, l_2 \rightarrow s, \mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2 = \mathbf{L} \rightarrow \mathbf{J}$).

$J = L + S \dots |L - S| : 2S + 1$ Werte für $L > S \rightarrow$ Vielfachheit der Energieterme mit Bahndrehimpuls L
 $2L + 1$ Werte für $L < S$.

Hundsche Regel: Unter Beachtung des Pauli-Prinzips werden die Zustände so besetzt, dass

1. S maximal \rightarrow Ortsfunktion antisymmetrisch \rightarrow Reduktion der Coulomb-Wechselwirkung da dort, wo die Coulomb-Wechselwirkung am stärksten wäre die Wellenfunktion verschwindet.
2. L maximal \rightarrow damit sind Elektronen weiter vom Zentrum und deshalb auch weiter von einander entfernt.
3. Für nicht mehr als halbgefüllten Schalen ${}^{2S+1}L_{J=|L-S|}$ und nicht mehr als halbgefüllten Schalen ${}^{2S+1}L_{J=L+S}$ reduziert die Spin-Bahn-Wechselwirkung.

Anwendung der Hundschen Regeln

He: $(1s)^2$ Grundzustand, Ortsfunktion symmetrisch, Spinfunktion antisymmetrisch $\rightarrow S = 0$.

$$L = 0, S = 0, 2S + 1 = 1, J = L + S \quad \boxed{{}^{2S+1}L_J = {}^1S_0}$$

H: $1s \quad L = 0, S = 1/2, J = |L - S| = 1/2, {}^2S_{1/2}$.

B: $(1s)^2(2s)^2(2p) \quad 1s, 2s$ Schale sind voll $\rightarrow J = L = S = 0$

$$2p \quad \rightarrow s = 1/2, L = 1$$

Es gibt zwei Möglichkeiten:

$$J = 3/2 \quad {}^2P_{3/2}$$

$$J = 1/2 \quad {}^2P_{1/2}$$

da die P-Schale weniger als halbvoll $J = 1/2$.

C: $(1s)^2(2s)^2(2p)^2 \quad S \rightarrow 1$ (1. Hundsche Regel)

$$L = 2? \quad l_1 + l_2 = 2 \rightarrow m_1 + m_2 = 2 \text{ beide El. im gl. Zustand} \rightarrow \text{geht nicht}$$

$$L = 1 \quad m_1 = 1, m_2 = 0 \text{ oder umgekehrt}$$

$$L = 0 \quad m_1 = m_2 = 0 \text{ geht nicht}$$

$$L = 1, J = |L - S| \rightarrow J = 0, \rightarrow {}^3P_0$$

n	l	
1	0(s)	H \rightarrow ${}^2\text{He}$
2	0(s)	${}^3\text{Li} \rightarrow {}^4\text{Be}$
	1(p)	${}^5\text{B} \rightarrow {}^6\text{C} \rightarrow {}^7\text{N} \rightarrow {}^8\text{O} \rightarrow {}^9\text{F} \rightarrow {}^{10}\text{Ne}$
3	0(s)	${}^{11}\text{Na} \rightarrow {}^{12}\text{Mg}$
	1(p)	${}^{13}\text{Al} \rightarrow \text{Si} \rightarrow \text{P} \rightarrow \text{S} \rightarrow \text{Cl} \rightarrow {}^{18}\text{Ar} \xrightarrow{1}$
	2(d)	$\xrightarrow{2} {}^{21}\text{Sc} \rightarrow \text{Ti} \rightarrow \text{V} \rightarrow \text{Cr} \rightarrow \text{Mn} \rightarrow \text{Fe} \rightarrow \text{Co} \rightarrow \text{Ni} \rightarrow \text{Cu} \rightarrow {}^{30}\text{Zn}$ "Übergangsmetalle"
4	0(s)	$\xrightarrow{1} {}^{19}\text{K} \rightarrow {}^{20}\text{Ca} \xrightarrow{2}$
	1(p)	${}^{31}\text{Ga} \rightarrow \text{Ge} \rightarrow \text{As} \rightarrow \text{Se} \rightarrow \text{Br} \rightarrow {}^{36}\text{Kr} \xrightarrow{3}$
	2(d)	$\xrightarrow{4} {}^{39}\text{Y} \rightarrow \text{Zr} \rightarrow \text{Nb} \rightarrow \text{Mo} \rightarrow \text{Tc} \rightarrow \text{Ru} \rightarrow \text{Rh} \rightarrow \text{Pd} \rightarrow \text{Ag} \rightarrow {}^{48}\text{Cd} \xrightarrow{5}$
	3(f)	$\xrightarrow{7} {}^{58}\text{Y} \dots \text{Lanthanoiden ("seltene Erden")} \dots \rightarrow {}^{71}\text{Lu} \xrightarrow{8}$
5	0(s)	$\xrightarrow{3} {}^{37}\text{Rb} \rightarrow {}^{38}\text{Sr} \xrightarrow{4}$
	1(p)	$\xrightarrow{5} \text{In} \rightarrow \text{Sn} \rightarrow \text{Sb} \rightarrow \text{Te} \dots \rightarrow {}^{54}\text{Xe} \xrightarrow{6}$
	2(d)	$\xrightarrow{6} {}^{57}\text{La} \begin{matrix} \nearrow 7 \\ \searrow 8 \end{matrix} \quad {}^{72}\text{Hf} \rightarrow \dots \rightarrow {}^{80}\text{Hg} \xrightarrow{9}$
	3(f)	Actinoide
	4	
6	0(s)	$\xrightarrow{6} \text{Cs} \rightarrow \text{Ba} \xrightarrow{7}$
	1(p)	$\xrightarrow{9} {}^{81}\text{Ti} \rightarrow \text{Pb} \rightarrow \text{Bi} \rightarrow \text{Po} \rightarrow \text{At} \rightarrow {}^{86}\text{Rn} \rightarrow$
	2(d)	

Kapitel 13

Verschiedenes

13.1 Dirac– und Weyl–Gleichung

Wie kamen wir zur **Schrödinger–Gleichung**? Wir betrachteten die Energie–Impuls–Relation im nicht relativistischen Bereich und ersetzen $E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$, $\mathbf{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla$:

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x})$$
$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left[\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla \right)^2 + V(\mathbf{x}) \right] \psi$$

Die **Klein–Gordon–Gleichung** erhält man analog durch Benutzung der relativistischen Beziehung $E^2 = m^2 c^4 + \mathbf{p}^2 c^2$ oder $(E - \mathbf{p}c)(E + \mathbf{p}c) = m^2 c^4$ und obige Ersetzung.

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi = (m^2 c^4 - c^2 \hbar^2 \nabla^2) \psi$$
$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right) \psi = \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \psi \quad \frac{mc}{\hbar} = \frac{1}{\lambda_c}, \quad \lambda_c = \text{Comptonlänge}$$

Nachteil: enthält zweifache Zeitableitung, damit beschreibt ψ allein nicht die Zeitentwicklung des Systems (man muss $\psi(t)$ und $\dot{\psi}(t)$ angeben).

Suche jetzt nach Gleichung, die nur Ableitungen in erster Ordnung in t enthält (Symmetrie zwischen Zeit– und Ortsvariablen wegen Relativistik).

Wir beginnen mit masselosen Teilchen und machen folgenden Ansatz mit unbekanntenen Konstanten σ_i :

Weyl–Gleichung

$$\left(\frac{\partial}{c \partial t} \mp \sigma_i \frac{\partial}{\partial x_i} \right) \psi = 0$$

Diese Gleichungen entsprechen beide der relativistischen Dispersionsbeziehung im Fall $m = 0$ falls $\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \sigma_3^2 = 1$, $\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_1 = 0$, $\sigma_1 \sigma_3 + \sigma_3 \sigma_1 = 0$, $\sigma_2 \sigma_3 + \sigma_3 \sigma_2 = 0$. Durch Anwendung von $(\frac{\partial}{c \partial t} \pm \sigma_i \frac{\partial}{\partial x_i})$ folgt (über doppelt auftretende Indizes wird summiert)

$$\left(\frac{\partial^2}{c^2 \partial t^2} - \sigma_i \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_j} \sigma_j \right) \psi = 0$$

und mit obigen Forderungen an die σ_i ist die Klein–Gordon–Gleichung erfüllt.

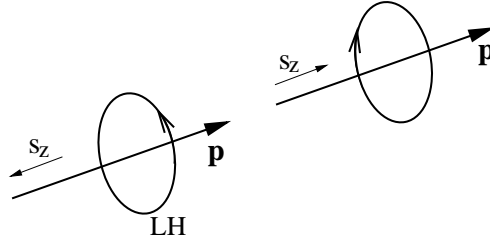
Wir hatten im Kapitel 7.5 gesehen, daß die Pauli-Matrizen gerade die Eigenschaft haben, die die Konstanten σ_i zu erfüllen haben (mit skalaren Konstanten lassen sich diese Bedingungen nicht erfüllen). Wir können unsere Ausgangsgleichungen daher in der Form

$$\left(i\hbar \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \hat{1} \pm \underline{\sigma}_i \frac{\hbar}{i} \nabla_i \right) \psi = 0$$

schreiben, wobei ψ ein **2-komponentiger Spinor** ist. Aus der zeitunabhängigen Form ($i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow E$) der Weyl-Gleichung folgt $\frac{1}{c} E \hat{1} = \mp \underline{\sigma}_i p_i \rightarrow \underline{\sigma}_i p_i$ muß Diagonalgestalt haben:

$$\underline{\sigma}_i \mathbf{p} = \mp \begin{pmatrix} \mathbf{p} & 0 \\ 0 & \mathbf{p} \end{pmatrix},$$

d.h. die Spin-Achse muß in $\pm \mathbf{p}$ -Richtung liegen. Die $\underline{\sigma}_i$ waren tatsächlich nicht eindeutig festgelegt, jede unitäre Transformation läßt die algebraischen Eigenschaften der $\underline{\sigma}_i$ ungeändert. Ich kann also die z -Achse immer so legen, daß sie parallel zu \mathbf{p} ist. $\rightarrow \sigma$ muß parallel zu \mathbf{p} sein. Masselosen Teilchen haben daher eine Helizität $H = \frac{\sigma p}{|p|} = \pm 1$. Bis vor wenigen Jahren glaubte man, dass Neutrinos masselos sind, der Neutrino-Spin wäre daher parallel oder antiparallel zu \mathbf{p} .



Wir kommen jetzt zur **vollen Gleichung** für **massive Teilchen**. Wäre ψ ein Skalar, so müsste unser Ansatz

$$\sum_{i=1}^3 a_i \frac{\partial \psi}{\partial x_i} + a_4 \frac{\partial}{\partial (ict)} \psi = \frac{mc}{\hbar} \psi$$

lauten. Es zeigt sich jedoch, daß ψ minimal 4 Komponenten ψ_k hat. Wir schreiben daher

$$imc\psi_k = \sum_{\mu=1}^4 \gamma_{kl}^{(\mu)} p_\mu \psi_l = \frac{\hbar}{i} \gamma_{kl}^{(\mu)} \frac{\partial \psi_l}{\partial x_\mu}$$

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} \quad \underline{\gamma}_\mu = \left(\gamma_{kl}^{(\mu)} \right)$$

$$x_4 = ict, \quad p_4 = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_4} = -\frac{\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t} \quad (\Rightarrow \frac{i}{c} E)$$

In Matrix-Darstellung nimmt obige Gleichung die Form

$$imc\psi = \frac{\hbar}{i} \underline{\gamma}_\mu \frac{\partial}{\partial x_\mu} \psi = \underline{\gamma}_\mu p_\mu \psi \quad (13.1)$$

an, $\hat{p}_\mu = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_\mu}$ wirkt auf x_1, \dots, x_4 . $\underline{\gamma}_\mu$ wirkt auf innere Variable ähnlich den Paulischen Spinvariablen. Es gilt

$$[\underline{\gamma}_\mu, \underline{1} \hat{p}_\nu] = [\underline{\gamma}_\mu, \underline{1} \hat{x}_\nu] = 0.$$

Mit $\hat{\underline{A}} = (imc\underline{1} + \underline{\gamma}_\mu \hat{p}_\mu)$ folgt

$$\begin{aligned}\hat{\underline{A}}\psi &= 0 \\ \hat{\underline{A}}^2\psi &= \left[-m^2c^2 + \underline{\gamma}_1^2 \hat{p}_1^2 + \underline{\gamma}_2^2 \hat{p}_2^2 + \underline{\gamma}_3^2 \hat{p}_3^2 - \frac{\underline{\gamma}_4^2}{c^2} E^2 + \right. \\ &\quad \left. (\underline{\gamma}_1 \underline{\gamma}_2 + \underline{\gamma}_2 \underline{\gamma}_1) \hat{p}_1 \hat{p}_2 + \dots + \text{ähnliche Terme} \right] \psi = 0\end{aligned}$$

Relativistische Dispersionsbeziehung ist also erfüllt, falls $\underline{\gamma}_1^2 = \underline{\gamma}_2^2 = \underline{\gamma}_3^2 = \underline{\gamma}_4^2 = 1$,

$\underline{\gamma}_\mu \underline{\gamma}_\nu + \underline{\gamma}_\nu \underline{\gamma}_\mu = 0$ für $\mu \neq \nu$ gilt.

Diese Bedingungen lassen sich durch 4×4 -Matrizen erfüllen.

$$\begin{aligned}\underline{\gamma}_1 &= \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix} & \underline{\gamma}_2 &= \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix} \\ \underline{\gamma}_3 &= \begin{vmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \end{vmatrix} & \underline{\gamma}_4 &= \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}\end{aligned}$$

Sei $(\underline{\gamma}_1, \underline{\gamma}_2, \underline{\gamma}_3) = (\underline{\gamma})$, so folgt in kompakter Form

$$imc\psi = (\underline{\gamma} \cdot \mathbf{p} + \frac{i}{c} E \underline{\gamma}_4) \psi.$$

Nach Multiplikation von links mit $\underline{\gamma}_4 = \underline{\beta}$ ($\underline{\gamma}_4^2 = \underline{\beta}^2 = \underline{1}$) folgt die Dirac-Gleichung in ihrer üblichen Form

Dirac-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = (mc^2 \underline{\beta} + c \underline{\alpha} \mathbf{p}) \psi = \hat{H} \psi$$

$\underline{\alpha} = i \underline{\beta} \underline{\gamma}$, $\underline{\alpha}_i = \begin{vmatrix} 0 & \underline{\sigma}_i \\ \underline{\sigma}_i & 0 \end{vmatrix}$, $\underline{\sigma}_i$ sind die Pauli-Matrizen. Die Matrizen $\underline{\alpha}_i$ und $\underline{\beta}$ haben folgende Eigenschaften

$$\begin{aligned}\underline{\beta}^2 &= \underline{\alpha}_1^2 = \underline{\alpha}_2^2 = \underline{\alpha}_3^2 = 1 \\ \underline{\beta} \underline{\alpha}_i + \underline{\alpha}_i \underline{\beta} &= 0 \quad i = 1, 2, 3 \\ \underline{\alpha}_1 \underline{\alpha}_2 + \underline{\alpha}_2 \underline{\alpha}_1 &= 0 \quad + \text{weitere Kombinationen}\end{aligned}$$

Die physikalischen Konsequenzen der Dirac-Gleichungen hängen **nicht** von dieser Wahl der $\underline{\alpha}_i, \underline{\beta}$ ab, solange deren Eigenschaften erfüllt sind.

Man kann jetzt die zeitunabhängige Gleichung durch $E \leftrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ bekommen.

Explizit lauten die zeitabhängigen Gleichungen:

$$\begin{aligned}i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_1 &= mc^2 \psi_1 + \frac{c\hbar}{i} \left(\frac{\partial \psi_4}{\partial x} - i \frac{\partial \psi_4}{\partial y} + \frac{\partial \psi_3}{\partial z} \right) \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_2 &= mc^2 \psi_2 + \frac{c\hbar}{i} \left(\frac{\partial \psi_3}{\partial x} + i \frac{\partial \psi_3}{\partial y} - \frac{\partial \psi_4}{\partial z} \right) \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_3 &= -mc^2 \psi_3 + \frac{c\hbar}{i} \left(\frac{\partial \psi_2}{\partial x} - i \frac{\partial \psi_2}{\partial y} + \frac{\partial \psi_1}{\partial z} \right) \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_4 &= -mc^2 \psi_4 + \frac{c\hbar}{i} \left(\frac{\partial \psi_1}{\partial x} + i \frac{\partial \psi_1}{\partial y} - \frac{\partial \psi_2}{\partial z} \right)\end{aligned}$$

Mit dem ebene-Wellen-Ansatz $\psi = \mathbf{u} e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}/\hbar} e^{-iEt/\hbar}$ folgt

$$\begin{aligned} Eu_1 &= mc^2 u_1 + c(p_x - ip_y)u_4 + cp_z u_3 \\ Eu_2 &= mc^2 u_2 + c(p_x + ip_y)u_3 - cp_z u_4 \\ Eu_3 &= -mc^2 u_3 + c(p_x - ip_y)u_2 + cp_z u_1 \\ Eu_4 &= -mc^2 u_4 + c(p_x + ip_y)u_1 - cp_z u_2 \end{aligned}$$

Lineares Gleichungssystem für $u_1, \dots, u_4 \rightarrow$ Lösbarkeitsbedingung $\det || = 0 \rightarrow$ Eigenwerte $E = \pm \sqrt{m^2 c^4 + c^2 \mathbf{p}^2}$ jeder Eigenwert ist 2-fach entartet.

$$\begin{vmatrix} -E + mc^2 & 0 & cp_z & c(p_x - ip_y) \\ 0 & -E + mc^2 & c(p_x + ip_y) & -cp_z \\ cp_z & c(p_x - ip_y) & -E - mc^2 & 0 \\ c(p_x + ip_y) & -cp_z & 0 & -E - mc^2 \end{vmatrix} = (E^2 - m^2 c^4 - c^2 \mathbf{p}^2)^2$$

\rightarrow Es existieren vier Lösungsvektoren (Dirac-Spinoren)

$$\begin{aligned} E = +\sqrt{m^2 c^4 + c^2 \mathbf{p}^2} = R \quad u^{(1)} &= \sqrt{\frac{mc^2 + R}{2R}} \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \\ cp_z/(mc^2 + R) \\ c(p_x + ip_y)/(mc^2 + R) \end{vmatrix} \\ u^{(2)} &= \sqrt{\frac{mc^2 + R}{2R}} \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \\ c(p_x - ip_y)/(mc^2 + R) \\ -cp_z/(mc^2 + R) \end{vmatrix} \\ E = -\sqrt{m^2 c^4 + c^2 \mathbf{p}^2} = -R \quad u^{(3)} &= \sqrt{\frac{R - mc^2}{2R}} \begin{vmatrix} cp_z/(R - mc^2) \\ c(p_x + ip_y)/(R - mc^2) \\ 1 \\ 0 \end{vmatrix} \\ u^{(4)} &= \sqrt{\frac{R - mc^2}{2R}} \begin{vmatrix} c(p_x - ip_y)/(R - mc^2) \\ -cp_z/(R - mc^2) \\ 0 \\ 1 \end{vmatrix} \end{aligned}$$

In den ersten beiden Lösungen sind für $|\mathbf{p}| \ll mc$ die 3. und 4. Komponente sehr klein, in den zweiten beiden die 1.+2. Komponente.

Bedeutung der negativen und positiven Energie-Niveaus, Vakuum-Zustand (keine beobachtbaren Teilchen) = Dirac-See: alle Zustände mit negativer Energie sind durch (prinzipiell nicht beobachtbare) Elektronen besetzt, alle Zustände mit positiver Energie sind leer.

Wenn ein Teilchen aus den Zuständen mit $E < 0$ in solche mit $E > 0$ übergeht, so entsteht ein Loch im See, mit entgegengesetzter Ladung, das Positron.

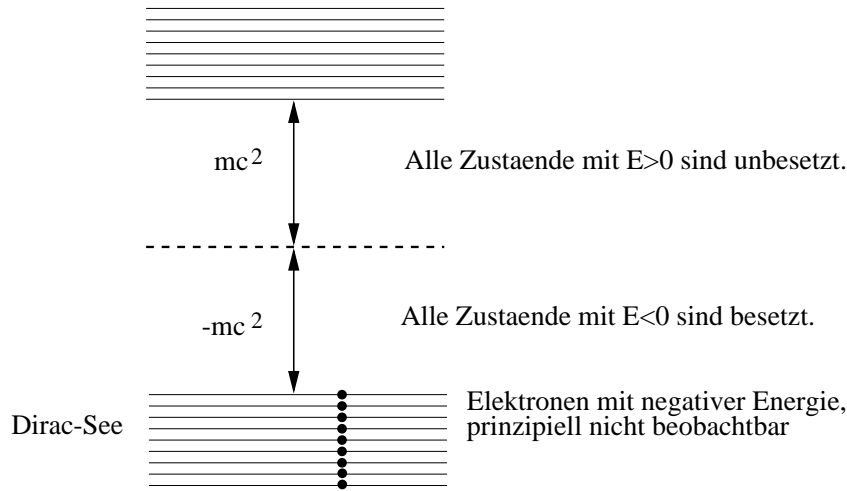
$$\begin{aligned} u^{(1)} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}\mathbf{x}}, \quad u^{(2)} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}\mathbf{x}} & \quad \text{Elektronenzustände (Spin up or down, Impuls } \mathbf{p}, E = +\sqrt{m^2 c^4 + c^2 \mathbf{p}^2}) \\ u^{(3)} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}\mathbf{x}}, \quad u^{(4)} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}\mathbf{x}} & \quad \text{Positronenzustände (Impuls } -\mathbf{p}, E = -\sqrt{m^2 c^4 + c^2 \mathbf{p}^2}) \end{aligned}$$

Wir können jetzt noch Projektionsoperatoren einführen \hat{P}, \hat{N}

$$\begin{aligned} \hat{P}u^{(1,2)} &= u^{(1,2)}, \quad \hat{P}u^{(3,4)} = 0 \\ \hat{N}u^{(1,2)} &= 0, \quad \hat{N}u^{(3,4)} = 0. \end{aligned}$$

Es gilt $\hat{H}u^{(1,2)} = Ru^{(1,2)}, \hat{H}u^{(3,4)} = -Ru^{(3,4)}$ mit $R = \sqrt{m^2 c^4 + c^2 \mathbf{p}^2}, \rightarrow$

$$\hat{P} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2R} \hat{H}, \quad \hat{N} = \frac{1}{2} - \frac{1}{2R} \hat{H}$$



Wir untersuchen nun noch den Kommutator zwischen \hat{H} und dem Drehimpuls $\underline{l} \cdot \underline{1}$:

$$[\hat{H}, \hat{l}_z \underline{1}] = \frac{\hbar c}{i} (\underline{\alpha}_1 p_y - \underline{\alpha}_2 p_x) \neq 0.$$

Damit ist $\hat{l}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$ nicht mehr Erhaltungsgröße für Dirac-Elektronen, wohl aber die Kombination $\underline{1}(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x) + \frac{1}{2} \frac{\hbar}{i} \underline{\alpha}_1 \underline{\alpha}_2 = \hat{j}_z$, $[\hat{H}, \hat{j}_z] = 0$.

$$\underline{\alpha}_1 \underline{\alpha}_2 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_1 \\ \sigma_1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_2 \\ \sigma_2 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_1 \sigma_2 & 0 \\ 0 & \sigma_1 \sigma_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \end{pmatrix}$$

$$\hat{j}_z = \begin{pmatrix} l_z + \frac{\hbar}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & l_z - \frac{\hbar}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & l_z + \frac{\hbar}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & l_z - \frac{\hbar}{2} \end{pmatrix}$$

Dies ist die z -Komponente des Gesamt-Drehimpulses in Matrix-Darstellung.

$$\hat{j}_z = \hat{l}_z + \frac{\hbar}{2} \underline{\sigma}'$$

$\underline{\sigma}' = \begin{pmatrix} \underline{\sigma} & 0 \\ 0 & \underline{\sigma} \end{pmatrix}$, $\underline{\sigma}$ Pauli-Matrizen. Damit haben wir den Spin als relativistischen Effekt gefunden.

13.2 Pfadintegrale via Trotter-Formel

Übergangsamplitude der Quantenmechanik (siehe Abschnitt 7)

$$K(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, 0) = \langle \mathbf{x} | \hat{T}_t e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \hat{\mathcal{H}}(t') dt'} | \mathbf{x}_0 \rangle$$

\hat{T}_t : Zeitordnungsoperator, ordnet Terme von rechts nach links nach aufsteigenden Zeiten.

$$\begin{aligned} \hat{T}_t e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \hat{\mathcal{H}}(t') dt'} &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \hat{T}_t e^{-\frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}(t)\varepsilon + \hat{\mathcal{H}}(t-\varepsilon)\varepsilon + \hat{\mathcal{H}}(t-2\varepsilon)\varepsilon + \dots + \hat{\mathcal{H}}(\varepsilon)\varepsilon]} \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}(t)\varepsilon} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}(t-\varepsilon)\varepsilon} \dots e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}(\varepsilon)\varepsilon}, \quad \varepsilon = \frac{t}{N} \end{aligned}$$

Insgesamt gibt es $N-1$ Exponentialterme. Dann wird durch Einschleiben vollständiger Sätze

$$\begin{aligned} K(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, 0) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \langle e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}(t)\varepsilon} \int d^d \mathbf{x}_{N-1} | \mathbf{x}_{N-1} \rangle \langle \mathbf{x}_{N-1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}(t-\varepsilon)\varepsilon} \times \\ &\quad \times \int d^d \mathbf{x}_{N-2} | \mathbf{x}_{N-2} \rangle \langle \mathbf{x}_{N-2} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}(t-2\varepsilon)\varepsilon} \dots | \mathbf{x}_0 \rangle \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int d^d \mathbf{x}_1 \dots d^d \mathbf{x}_{N-1} \langle \mathbf{x} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}(t)} | \mathbf{x}_{N-1} \rangle \langle \mathbf{x}_{N-1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}(t-\varepsilon)\varepsilon} | \mathbf{x}_{N-2} \rangle \dots \langle \mathbf{x}_1 | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}(\varepsilon)\varepsilon} | \mathbf{x}_0 \rangle \end{aligned}$$

Dies ist die sogenannte **Trotter-Formel**. Im Limes $\varepsilon \rightarrow 0$ sind die Matrixelemente nur in der Ordnung ε auszurechnen. Eine weitere Vereinfachung ergibt sich, wenn man zusätzlich $\hat{1} = \int d\mathbf{p} |\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}|$ wiederholt einschleibt:

$$\langle \mathbf{x}_n | e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}(n\varepsilon)} | \mathbf{x}_{n-1} \rangle \int d^d \mathbf{p}_n \langle \mathbf{x}_n | \mathbf{p}_n \rangle \langle \mathbf{p}_n | e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}(n\varepsilon)} | \mathbf{x}_{n-1} \rangle.$$

Zur Auswertung des neuen Matrixelements nehmen wir an, dass $\mathcal{H}(n\varepsilon)$ in **Normalordnung** vorliegt, d.h. dass alle $\hat{\mathbf{p}}$ -Operatoren links von den $\hat{\mathbf{x}}$ stehen. Das Resultat der Unordnung eines Operators $\hat{O}(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}})$ in Normalordnung wird mit $: \hat{O}(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}}) :$ bezeichnet.

Beispiele:

(i) $\hat{\mathcal{H}}(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}}; n\varepsilon) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\hat{x}; n\varepsilon)$ ist bereits in Normalordnung.

(ii) $: e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}}; n\varepsilon)} := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-i\frac{\varepsilon}{\hbar})^n \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} \left(\frac{\hat{p}^2}{2m}\right)^k (U(\hat{x}, n\varepsilon))^{n-k}$

Es gilt nun (wir verzichten hier auf den Beweis)

$$e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}} =: e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}} : - \left(\frac{\varepsilon}{\hbar}\right)^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i\varepsilon/\hbar)^n}{(n+2)!} (\hat{\mathcal{H}}^{n+2} - : \hat{\mathcal{H}}^{n+2} :),$$

d.h. die Differenz $e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}} - : e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}} :$ ist von der Ordnung ε^2 , diese Terme werden aber im Folgenden weggelassen ($\varepsilon \rightarrow 0, N \rightarrow \infty$). Deshalb folgt in $O(\varepsilon)$ (nach Anwendung von $\hat{\mathcal{H}}$ auf den bra- bzw. ket-Vektoren)

$$\langle \mathbf{x}_n | e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}}; n\varepsilon)} | \mathbf{x}_{n-1} \rangle = \int d^d \mathbf{p}_n \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} e^{i\mathbf{p}_n(\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_{n-1})/\hbar} e^{-i\varepsilon \hat{\mathcal{H}}(\mathbf{p}_n, \mathbf{x}_{n-1}; n\varepsilon)/\hbar}$$

Schreibt man jetzt

$$\begin{aligned} p_n &\equiv p(t_n = n\varepsilon) &\rightarrow p(t) \\ x_n &\equiv x(t_n = n\varepsilon) &\rightarrow x(t) \\ \frac{x_n - x_{n-1}}{\varepsilon} &&\rightarrow \frac{\partial}{\partial t} x(t) \end{aligned}$$

ist die **Pfadintegraldarstellung des Propagators in Hamiltonform:**

$$K(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, 0) = \int_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}_0}^{\mathbf{x}(t)=\mathbf{x}} \mathcal{D}\mathbf{x}(t') \mathcal{D}\mathbf{p}(t') e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \{p(t') \frac{\partial}{\partial t} x(t') - \mathcal{H}(\mathbf{p}(t), \mathbf{x}(t); t)\}}$$

wobei $\mathcal{D}\mathbf{p}(t') = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \prod_{n=1}^N d^d \mathbf{p}_n / (2\pi\hbar)^d$ ist. Nach Integration über \mathbf{p} erhält man wieder das Pfadintegral in Lagrangeform

$$\begin{aligned} & \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int d^d p_n e^{i\mathbf{p}_n(\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_{n-1})/\hbar - \frac{i\varepsilon}{\hbar} \frac{\mathbf{p}_n^2}{2m}} \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int d^d p_n e^{-\frac{i}{\hbar} \left[\frac{\varepsilon}{2m} (\mathbf{p}_n - (\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_{n-1}) \frac{m}{\varepsilon})^2 - \frac{m}{2\varepsilon} (\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_{n-1})^2 \right]} \\ &= (2\pi\hbar)^{-d} \left(\frac{2\pi m \hbar}{i\varepsilon} \right)^{d/2} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2\varepsilon} (\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_{n-1})^2} = \left(\frac{m}{2\pi i \varepsilon} \right)^{d/2} e^{\frac{im}{2\varepsilon \hbar} (\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_{n-1})^2} \end{aligned}$$

und damit

$$K(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, 0) = \int_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}_0}^{\mathbf{x}(t)=\mathbf{x}} \mathcal{D}x(t') e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt \left[\frac{m}{2} \dot{\mathbf{x}}^2(t) - U(\mathbf{x}(t)) \right]}$$

(vergleiche mit (??)), wobei $\mathcal{D}(x(t')) = \prod_{n=1}^{N-1} \left(\frac{m}{2\pi\hbar i \varepsilon} \right)^{d/2} dx_i$ bedeutet.

Wir können diese Rechnung unmittelbar auf die Übergangsamplitude zwischen **kohärenten Zuständen** übertragen ($\langle \phi | f \rangle = f(\phi^*)$):

$$K(\phi^*, t; \phi_0, 0) = \langle \phi | \hat{T}_t e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \hat{\mathcal{H}}(t') dt'} | \phi_0 \rangle$$

mit

$$|\phi\rangle = e^{\sum_{\alpha} \phi_{\alpha}^* \hat{b}_{\alpha}} |0\rangle.$$

Der Hamiltonian ist jetzt in zweiter Quantisierung anzugeben:

$$\hat{\mathcal{H}} = \mathcal{H}(\{\hat{b}_{\alpha}^{\dagger}, \hat{b}_{\alpha}\}),$$

wobei Normalordnung nun bedeutet, dass die Erzeuger links von den Vernichtern stehen. Die Vollständigkeitsrelation hat die Form (wir betrachten hier Bosonen)

$$\hat{1} = \int \frac{d\phi_{\alpha,n}^* d\phi_{\alpha,n}}{2\pi i} e^{-\sum_{\alpha} \phi_{\alpha,n}^* \phi_{\alpha,n}} |\phi_{\alpha,n}\rangle \langle \phi_{\alpha,n}|,$$

wobei

$$\hat{b}_{\alpha} |\phi_{\alpha,n}\rangle = \phi_{\alpha,n} |\phi_{\alpha,n}\rangle$$

gilt und $|\phi_{\alpha,n}\rangle$ der kohärente Zustand im n -ten Zeitschritt ist. Es folgt dann in vollkommener Analogie ($\phi_{\alpha,N} = \phi_{\alpha}^*$)

$$\begin{aligned} K(\phi^*, t; \phi_0, 0) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \left[\prod_{n=1}^{N-1} \prod_{\alpha} \left(\frac{d\phi_{\alpha,n}^* d\phi_{\alpha,n}}{2\pi i} \right) \right] e^{-\sum_{n=1}^{N-1} \sum_{\alpha} \phi_{\alpha,n}^* \phi_{\alpha,n}} \times \\ &\quad \times \prod_{n=1}^N \langle \phi_n | : e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar} \mathcal{H}(\{\hat{b}_{\alpha}^{\dagger}, \hat{b}_{\alpha}\})} : + O(\varepsilon^2) | \phi_{n-1} \rangle \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{n=1}^{N-1} \prod_{\alpha} \frac{d\phi_{\alpha,n}^* d\phi_{\alpha,n}}{2\pi i} e^{\phi_{\alpha,N}^* \phi_{\alpha,N}} e^{-\sum_{n,\alpha} [\phi_{\alpha,n}^* (\phi_{\alpha,n} - \phi_{\alpha,n-1}) + \frac{i\varepsilon}{\hbar} \mathcal{H}(\{\phi_{\alpha,n}^*, \phi_{\alpha,n-1}\})]} \end{aligned}$$

$$K(\phi^*, t; \phi_0, 0) = \int_{\phi_\alpha(0)=\phi_{\alpha,0}}^{\phi_\alpha^*(t)=\phi_\alpha^*} \mathcal{D}\phi_\alpha^*(t') \mathcal{D}\phi_\alpha(t') e^{\sum_\alpha \phi_\alpha^* \phi_\alpha} e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t \sum_\alpha \{i\hbar \phi_\alpha^*(t') \frac{\partial}{\partial t'} \phi_\alpha + \mathcal{H}(\{\phi_\alpha^*(t') \phi_\alpha(t')\}) dt'\}}$$

Im Unterschied zum Feynmanschen Pfadintegrale enthält der “Lagrangian” nun auch Terme der Ordnung \hbar .

Bemerkung zu den Randbedingungen: Es tritt nicht $\phi_{\alpha,0}^*$ und nicht $\phi_\alpha(t)$ auf – man sieht dies am diskreten Ausdruck.

Man kann jetzt nach dem bekannten Übergang $it \rightarrow \tau = \hbar\beta$ die **Zustandssumme** als

$$Z = \text{Tr} e^{-\frac{1}{\hbar}(\hat{\mathcal{H}} - \mu\hat{N})} = \int \prod_\alpha d\phi_\alpha^* d\phi_\alpha e^{-\sum_\alpha \phi_\alpha \phi_\alpha^*} \langle \zeta \phi | e^{-\frac{1}{\hbar}(\hat{\mathcal{H}} - \mu\hat{N})} | \phi \rangle$$

$$Z = \int_{\phi_\alpha(\hbar/T)=\phi_\alpha(0)} \mathcal{D}\phi_\alpha^*(\tau) \mathcal{D}\phi_\alpha(\tau) e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar/T} d\tau \left\{ \sum_\alpha \phi_\alpha^*(\tau) (\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \mu) \phi_\alpha(\tau) + \mathcal{H}(\phi_\alpha^*(\tau), \phi_\alpha(\tau)) \right\}}$$

(genauer: $\phi_{\alpha,0} = \phi_\alpha$, $\phi_{\alpha,N}^* = \zeta \phi_\alpha^*$)

Ein weitgehend analoges Resultat erhält man für Fermionen, wobei die komplexen Zahlen ϕ durch Grassmann-Zahlen ξ zu ersetzen sind.

Man kann jetzt diese Darstellung von Z als Ausgangspunkt für eine Störungstheorie nach nichtlinearen Termen in \mathcal{H} benutzen.

Wir wollen jetzt als konkretes Beispiel ein **wechselwirkendes Bosonensystem** mit Paarwechselwirkung betrachten. In 1.Quantisierung war der Hamiltonian im Ortsdarstellung durch

$$\hat{\mathcal{H}} = - \sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}_i}^2 + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} U(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$$

gegeben, in 2.Quantisierung hatten wir bereits die Form

$$\hat{\mathcal{H}} = \int d^3r \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \right) \hat{\psi}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \int d^3r d^3r' U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r})$$

gezeigt. Mit $\hat{\psi}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle b_{\mathbf{k}}$, $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \langle \mathbf{k} | \mathbf{r} \rangle b_{\mathbf{k}}^\dagger$ folgt bei Anwendung auf kohärente Zustände

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}) | \phi \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle \phi_{\mathbf{k}} | \phi \rangle = \psi(\mathbf{r}) | \phi \rangle$$

mit

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle \phi_{\mathbf{k}}, \quad \hat{b}_{\mathbf{k}} | \phi \rangle = \phi_{\mathbf{k}} | \phi \rangle.$$

Aus

$$\int d^d r \psi(\mathbf{r}) \langle \mathbf{k}' | \mathbf{r} \rangle = \int d^d r \langle \mathbf{k}' | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle \phi_{\mathbf{k}} = \phi_{\mathbf{k}'}$$

folgt

$$\sum_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger = \int d^d r \sum_{\mathbf{k}} \psi(\mathbf{r}) \langle \mathbf{k} | \mathbf{r} \rangle \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger = \int d^d r \psi(\mathbf{r}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})$$

und damit

$$|\phi\rangle = e^{\sum_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger} |0\rangle = e^{\int d^d r \psi(\mathbf{r}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})} |0\rangle.$$

Der Exponent im Funktionalintegral Z hat dann die Form

$$-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar/T} d\tau \int d^3 r \left\{ \psi^*(\mathbf{r}, \tau) \left(\hbar \partial_\tau - \mu - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \psi(\mathbf{r}, \tau) + \frac{1}{2} \int d^3 r' U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') |\psi(\mathbf{r}, \tau)|^2 |\psi(\mathbf{r}', \tau)|^2 \right\}$$

Zunächst betrachten wir den Fall $U \equiv 0$, für den die Zustandssumme **exakt** ausgerechnet werden kann. Hierzu ist es zweckmäßig, zur Impulsdarstellung überzugehen:

$$\begin{aligned} \int d^3 r \hat{\psi}^*(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \mu \right) \hat{\psi}(\mathbf{r}) &= \\ \int d^3 r \sum_{\mathbf{k}} \langle \mathbf{k} | \mathbf{r} \rangle \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \mu \right) \sum_{\mathbf{k}'} \langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle \hat{b}_{\mathbf{k}} &= \\ \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \langle \mathbf{k} | \mathbf{k}' \rangle \left(-\mu + \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{k}^2 \right) \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}} &= \\ \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}}, \quad E_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{k}^2 - \mu & \end{aligned}$$

Anhang A

Zusammenfassungen

A.1 Zusammenfassung 1. Woche

1. Quantenmechanische Objekte zeigen einen **Welle-Teilchen-Dualismus**. Licht hat auch Teilchencharakter (Photoeffekt, Compton-Effekt); Lichtteilchen = Photonen.

Teilchen haben auch Wellencharakter: Doppelspaltexperiment \rightarrow Interferenzbilder.

Nachweis immer als Teilchen, Wellencharakter tritt erst im Ensemble zutage, Interferenz klassisch nicht erklärbar.

Planck – Einstein – de Broglie – Beziehungen

Impuls $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$, $|\mathbf{k}| = 2\pi/\lambda$

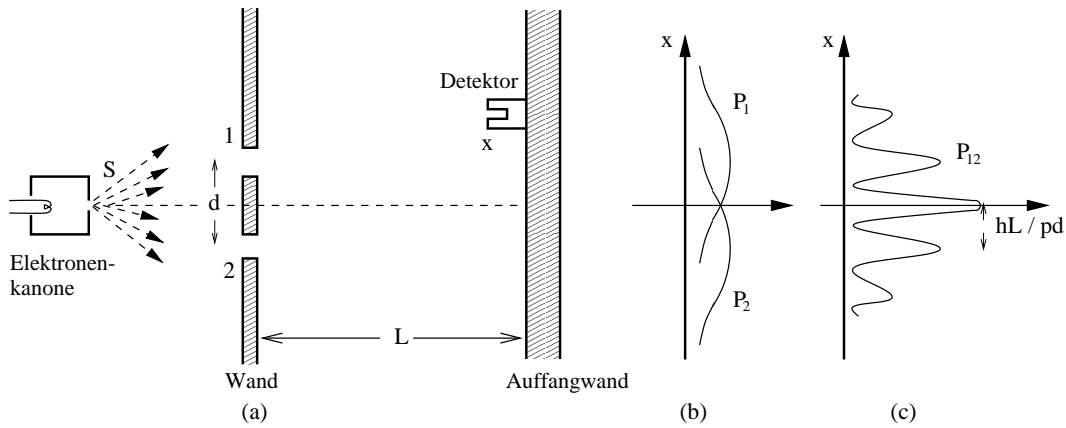
Energie $E = \hbar\omega$

2. Es existieren **diskrete Zustände**, kein Kontinuum wie klassisch zu erwarten (Energieniveaus der Atome, Richtungsquantisierung).

3. Quantenmechanische Objekte werden durch eine Wellenfunktion $\psi(\mathbf{x}, t)$ beschrieben, für die das Superpositionsprinzip (siehe Interferenz) gilt. $|\psi(\mathbf{x}, t)|^2$ ist die Wahrscheinlichkeitsdichte, das Teilchen am Ort \mathbf{x} zur Zeit t zu finden. Wir können nur noch Wahrscheinlichkeitsaussagen über die Position und Geschwindigkeit von Teilchen machen.

4. Der Meßprozeß stört den Zustand des Systems: Beim Doppelspaltexperiment stört die Lokalisierung des Teilchens bei einem der beiden Spalten mit Licht der Wellenlänge $\lambda_L = 2\pi/k_L = h/p_L \lesssim d$ den Impuls des Elektrons um $\Delta p_x \simeq p_L \gtrsim h/d$. Mit der Ortsunschärfe $\Delta x \approx d$ folgt also die **Heisenbergsche Unschärferelation** $\Delta x \Delta p_x \gtrsim h$.

5. Im Limes $\hbar \rightarrow 0$ erfolgt der Übergang zur klassischen Physik, (**Korrespondenzprinzip**).



A.2 Zusammenfassung 2. Woche

1. **Wellenpakete** der Anfangsausdehnung $\Delta x(0)$ entstehen aus einer Übergang ebener Wellen aus einem engen Wellenzahlintervall $\Delta k \sim 1/\Delta x$ um $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$, sie bewegen sich mit der Gruppengeschwindigkeit $\mathbf{v}_{\text{Gruppe}} = \nabla_{\mathbf{k}} \omega(\mathbf{k})|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0}$. Für große Zeiten zerfließt das Wellenpaket $\Delta x(t) \approx (\hbar \Delta k / m_0) t$.

2. Die **Wellenfunktion** $\psi(t)$ beschreibt das System zur Zeit t **vollständig** und legt demnach die zeitliche Entwicklung fest. Die grundlegende Bewegungsgleichung, die **Schrödinger-Gleichung**, ist daher durch

$$i\hbar \frac{d\psi(t)}{dt} = \hat{H}\psi$$

Der **Hamiltonoperator** \hat{H} ist ein linearer Operator.

3. Für **lineare Operatoren** \hat{A} gilt $\hat{A}(\lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2) = \lambda_1 \hat{A}\psi_1 + \lambda_2 \hat{A}\psi_2$, $\lambda_{1;2}$ komplex.

Der **konjugiert komplexe Operator** \hat{A}^* zu \hat{A} erfüllt $\hat{A}^* \psi^* = \psi'^*$ wenn $\hat{A}\psi = \psi'$ erfüllt.

Der **adjungierte Operator** \hat{A}^\dagger zu \hat{A} erfüllt

$(\phi, \hat{A}\psi) = (\hat{A}^\dagger \phi, \psi)$ für beliebige Funktion ϕ, ψ ,

wobei das **Skalarprodukt** durch $(\phi, \hat{A}\psi) = \int dq \phi^*(q) \hat{A}(q, t) \psi(q)$ gegeben ist. q symbolisiert die Gesamtheit der Koordinaten des quantenmechanischen Systems $q = (x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n)$.

Für **selbstadjungierte** oder **hermitesche Operatoren** gilt $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$.

$\hat{H} = -(\hbar/2m)\nabla^2 + V(\mathbf{x})$, $\hat{\mathbf{p}} = (\hbar/i)\nabla$, $\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{x}$ sind hermitesch.

4. Für die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi|^2$ gilt die

Kontinuitätsgleichung $\frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0$, mit $\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*) \psi)$ für die **Wahrscheinlichkeitsstromdichte** \mathbf{j} . Hieraus folgt die Erhaltung der **Norm** $(\psi, \psi) = \mathcal{N} < \infty$ für quadratintegrale Funktionen: $|\psi(\mathbf{x})| < |\mathbf{x}|^{-d/2}$ für $|\mathbf{x}| \rightarrow \infty$.

5. Der experimentell bestimmte Mittelwert \bar{F} einer Größe $F(\mathbf{x})$ ist gleich dem **quantenmechanischen Erwartungswert** $\langle \hat{F} \rangle = (\psi, \hat{F}\psi) / (\psi, \psi)$.

Für die Zeitableitung von $\langle \hat{\mathbf{x}} \rangle$ gilt $m \frac{d}{dt} \langle \hat{\mathbf{x}} \rangle = \langle \hat{\mathbf{p}} \rangle$

A.3 Zusammenfassung 3.Woche

1. Wellenamplitude in **Impulsdarstellung** $\tilde{\psi}(\mathbf{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3x e^{-i\mathbf{p}\mathbf{x}/\hbar} \psi(\mathbf{x}, t)$.
 $|\tilde{\psi}(\mathbf{p}, t)|^2$ ist die Wahrscheinlichkeitsdichte, das Teilchen zur Zeit t mit dem Impuls \mathbf{p} anzutreffen.

2. Die Erwartungswerte von $F(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}})$ folgen wieder aus

$$\langle \hat{F} \rangle = \int d^3p \tilde{\psi}^*(\mathbf{p}, t) F(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}}) \tilde{\psi}(\mathbf{p}, t) = (\tilde{\psi}, \hat{F}\tilde{\psi})$$

wobei $F(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}})$ in Impulsdarstellung anzugeben ist, insbesondere gilt $\hat{\mathbf{p}} = \mathbf{p}$, $\hat{\mathbf{x}} = -\frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{p}}$.

3. Im allgemeinen vertauschen quantenmechanischen Operatoren **nicht**, d.h. ihr **Kommutator** $[\hat{F}, \hat{G}] = \hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F}$ verschwindet nicht. Es gilt insbesondere für Ort, Impuls und Drehimpuls

$$[\hat{p}_j, \hat{x}_k] = \frac{\hbar}{i} \delta_{ij}, \quad [\hat{p}_j, \hat{p}_k] = [\hat{x}_l, \hat{x}_m] = 0, \quad [\hat{l}_x, \hat{l}_y] = i\hbar \hat{l}_z, \quad \hat{\mathbf{l}} = \hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}}$$

4. Die zeitliche Ableitung eines Erwartungswerts $\langle \hat{F} \rangle$ wird durch den Ehrenfestschen Satz $\frac{d}{dt} \langle \hat{F} \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{F}] \rangle + \frac{\partial}{\partial t} \hat{F} =: \langle \hat{\dot{F}} \rangle$ beschrieben.

Im Operatorform gilt also $\hat{\dot{F}} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}] + \frac{\partial}{\partial t} \hat{F}$

5. Für die Fluktuationen $\Delta \hat{x}_i = \hat{x}_i - \langle \hat{x}_i \rangle$ und $\Delta \hat{p}_i = \hat{p}_i - \langle \hat{p}_i \rangle$ des Erwartungswertes für die Orts- und Impulskoordinaten gelten die **Heisenbergschen Unschärferelationen** $\langle \Delta \hat{x}_i^2 \rangle \langle \Delta \hat{p}_j^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} \delta_{ij}$

6. **Stationäre Lösungen** der Schrödingergleichung haben die Form $\psi(\mathbf{x}, t) = \psi_E(\mathbf{x}) e^{-iEt/\hbar}$, wobei $\hat{H}\psi_E(\mathbf{x}) = E\psi_E(\mathbf{x})$ gilt. E ist die Gesamtenergie.

7. Im äußeren elektromagnetischen Feld hat \hat{H} die Form

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) + e\phi + V$$

wobei ϕ und \mathbf{A} das skalare und das Vektorpotential bedeuten.

Die Stromdichte erhält einen Anteil vom Vektorpotential

$$\mathbf{j} = \text{Re} \left(\psi^* \frac{1}{m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \psi \right) = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi)^* \psi \right) - \frac{e}{mc} |\psi|^2 \mathbf{A}$$

Die Theorie ist invariant unter der **Eichtransformation**

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} - \nabla\chi, \quad \phi \rightarrow \phi' = \phi + \frac{1}{c} \frac{\partial\chi}{\partial t}, \quad \psi(\mathbf{x}, t) \rightarrow \psi'(\mathbf{x}, t) = \psi(\mathbf{x}, t) e^{-i(e/\hbar c)\chi}$$

wobei $\chi(\mathbf{x}, t)$ ein skalares Feld darstellt.

A.4 Zusammenfassung 4. Woche

1. Die Phase $S(\mathbf{x}, t)/\hbar$ der Einteilchen–Wellenfunktion $\psi(\mathbf{x}, t) = |\psi(\mathbf{x}, t)| e^{iS(\mathbf{x}, t)/\hbar}$ genügt der Gleichung

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} (\nabla S)^2 + V(\mathbf{x}) - \frac{\hbar^2 \Delta |\psi(\mathbf{x}, t)|}{2m |\psi(\mathbf{x}, t)|} = 0,$$

die im klassischen Limes ($\hbar = 0$) in die Hamilton–Jacobi–Gleichung übergeht. Aus dieser folgt mit $\nabla S_{\text{kl}} = \mathbf{p} = m\mathbf{v}$ die Newton–Euler–Gleichung $m \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla \right) \mathbf{v} = m \frac{d}{dt} \mathbf{v} = -\nabla V$. Der Betrag von ψ genügt der Kontinuitätsgleichung $\frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} + \nabla(\mathbf{v}|\psi|^2) = 0$. Im klassischen Limes beschreibt die Wellenfunktion daher eine Eulersche ideale (Ensemble–) Flüssigkeit bei der sich die (nicht–wechselwirkenden) Flüssigkeitsteilchen nach den Gesetzen der Newtonschen Mechanik bewegen. Quantenmechanische Koorenatoren sind klein, solange $\hbar |\nabla \mathbf{p}| \ll \mathbf{p}^2$ gilt.

2. Das klassische Analogon des Ehrenfestschen Satzes

$$\hat{F} = \frac{\partial}{\partial t} \hat{F} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}]$$

ist die Poisson–Klammern–Relation

$$\frac{d}{dt} F(q, p, t) = \frac{\partial}{\partial t} F(q, p, t) + \{H, F\}$$

$$\text{mit } \{F, G\} = \sum_i \left(\frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial G}{\partial q_i} - \frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial G}{\partial p_i} \right)$$

3. Hermitesche Operatoren, die beobachtbaren physikalischen Größen entsprechen, heißen Observable. Die Eigenwerte solcher Observablen sind reell, die Eigenfunktionen ψ_n zu verschiedenen Eigenwerten bilden ein vollständiges Orthonormalsystem, d.h. sie erfüllen $(\psi_n, \psi_m) = \delta_{n,m}$ (Orthogonalität) und $\sum_n \psi_n^*(\mathbf{x}') \psi_n(\mathbf{x}) = \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x})$ (Vollständigkeit).

4. Der eindimensionale harmonische Oszillator $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2}$ läßt sich mit der Transformation $\hat{x} = (1/\sqrt{2})x_0(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$, $\hat{p} = -i(\hbar/\sqrt{2}x_0)(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)$, $x_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$ in die Form $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1/2)$ bringen, mit $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$, $[\hat{a}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger] = 0$. Eigenfunktionen des Besetzungszahloperators $\hat{n} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$ sind auch Eigenfunktionen von \hat{H} . Die Eigenwerte von \hat{n} sind $n = 0, 1, 2, \dots$, d.h. $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$. Die orthonormalen Eigenfunktionen sind

$$\Phi_n(x) = \frac{1}{(x_0 \sqrt{\pi n!} 2^n)^{1/2}} e^{-x^2/2x_0^2} H_n \left(\frac{x}{x_0} \right).$$

wobei $H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}$ die hermiteschen Polynome darstellen. Im n -ten angeregten Zustand gilt; $\Delta x \cdot \Delta p \geq (n + 1/2)\hbar$.

A.5 Zusammenfassung 5.Woche

1. **Kohärente Zustände** $\varphi_a(x)$ sind Eigenzustände des (nicht-hermiteschen) Vernichtungsoperators \hat{a} , $\hat{a}\varphi_a(x) = a\varphi_a(x)$, $\varphi_a(x) = e^{-|a|^2/2 + a\hat{a}^\dagger} \psi_0$, wobei ψ_0 der Grundzustand des Systems ist. Kohärente Zustände sind Zustände minimaler Unschärfe und beschreiben sich nicht-verbreiternde Wellenpakete. Als Eigenzustände nicht-hermitescher Operatoren sind Zustände zu verschiedenen Eigenwerten nicht mehr orthogonal $(\varphi_a, \varphi_b) = e^{a^*b}$.

2. Freie Teilchen haben ein kontinuierliches Eigenwertspektrum $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, $-\infty < k < \infty$, $\psi_k = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$, so daß Orthogonalitäts- und Vollständigkeitsrelation die Form

$$(\psi_k, \psi_{k'}) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_k^*(x) \psi_{k'}(x) = \delta(k - k')$$

und

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk \psi_k^*(x) \psi_k(x') = \delta(x - x')$$

annehmen.

Fordert man dagegen die Periodizität der Lösung mit der Periodenlänge $2x_0$, so ist das Spektrum diskret mit $k \rightarrow k_n = \frac{\pi n}{x_0}$, $n = \pm 1, \pm 2, \dots$. Es gilt dann $\psi_n = \frac{1}{\sqrt{2x_0}} e^{ik_n x}$, $(\psi_n, \psi_{n'}) = \delta_{n,n'}$, $\sum_n \psi_n^*(x) \psi_n(x') = \delta(x - x')$. Im Limes $\Delta k = \frac{\pi}{x_0} \rightarrow 0$ ergibt sich wieder das kontinuierliche Spektrum.

3. An Potentialstufen verhalten sich die Wellenfunktion und ihre erste Ableitung stetig, es treten Transmission und Reflexion der einfallende Welle auf, mit $j_{\text{ein}} = j_{\text{trans}} + j_{\text{ref}}$.

4. Gebundene Zustände im Potentialtopf lassen sich nach ihrer Parität klassifizieren, wobei mindestens ein gebundener Zustand mit gerader Parität auftritt. Im unendlich hohen Potentialtopf gilt

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 (n+1)^2}{8ma^2}, \quad n = 0, 1, \dots$$

5. Auch für Potentialtöpfe (oder Schwellen) mit $E > V_0$ kommt es zur Reflexion von einfallenden Teilchenwellen, so daß der Transmissionskoeffizient i.a. von 1 verschieden ist. Er weist Maxima ($|S(E)| = 1$) bei $E = E_R = \left(\frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{8ma^2} > V_0 \right)$ auf, diese Energien werden als Resonanzenergien bezeichnet.

A.6 Zusammenfassung 6. Woche

1. Unter einer **Transformation** \hat{t} eines physikalischen Systems, $\hat{t}\mathbf{x} = \mathbf{x}'$, transformiert sich die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{x})$ nach $\psi'(\mathbf{x}) = \hat{T}\psi(\mathbf{x}) = \psi(\hat{t}^{-1}\mathbf{x})$, ein beliebiger Operator \hat{A} nach $\hat{A}' = \hat{T}\hat{A}\hat{T}^{-1}$, i.e. $\hat{A}' = \hat{A}$ falls $[\hat{A}, \hat{T}] = 0$. Gilt insbesondere $[\hat{H}, \hat{T}] = 0$, dann ist mit $\hat{H}\psi_E = E\psi_E$ auch $\psi' = \hat{T}\psi_E$ Eigenfunktion von \hat{H} zum selben Eigenwert E .

2. Die Menge aller Elemente (z.B. Transformationen) a, b, c, \dots bildet eine **Gruppe** \mathcal{G} , falls

- (i) Eine **Verknüpfungsregel** $a \cdot b = c$ existiert, so daß jedem Elementepaar $a, b \in \mathcal{G}$ ein Element $c \in \mathcal{G}$ zugeordnet ist.
- (ii) Ein **Eins-** (oder **Neutral**)–**Element** e mit $e \cdot a = a \cdot e = a \quad \forall a \in \mathcal{G}$ existiert.
- (iii) Zu jedem $a \in \mathcal{G}$ ein **inverses** Element $a^{-1} \in \mathcal{G}$ mit $a \cdot a^{-1} = a^{-1} \cdot a = e$ existiert.
- (iv) Das **Assoziativgesetz** $(a \cdot b) \cdot c = a \cdot (b \cdot c) = a \cdot b \cdot c$ gilt.

Für **abelsche** Gruppen gilt $a \cdot b = b \cdot a$.

Darstellungen von Gruppen sind Abbildungen von Gruppenelementen a, b, \dots auf Operatoren $\hat{T}(a), \hat{T}(b), \dots$, so daß $\hat{T}(a) \cdot \hat{T}(b) = \hat{T}(a \cdot b) = \hat{T}(c)$ gilt. Bei **kontinuierlichen** Gruppen sind die Darstellungen (weitergehend) durch die Operatoren für infinitesimale Transformationen \hat{X}_i (die sogenannten Generatoren), die den **Vertauschungsregeln** $[\hat{X}_i, \hat{X}_j] = C_{ijk}\hat{X}_k$ genügen, festgelegt (C_{ijk} sind die Strukturkonstanten der Gruppe).

3. Die Menge aller **Translationen** um einen beliebigen Vektor \mathbf{a} im \mathbb{R}^3 bildet eine (abelsche) Gruppe. Die Verknüpfungsregel ist die Addition, Eins- und inverses Element entsprechen der Verschiebung um Null bzw. $-\mathbf{a}$. Für die Darstellung dieser Gruppe im \mathbb{R}^3 gilt:

$$\hat{t}_{\mathbf{a}}\mathbf{x} = \mathbf{x}' = \mathbf{x} + \mathbf{a}, \quad \hat{t}_{\mathbf{a}}\hat{t}_{\mathbf{b}} = \hat{t}_{\mathbf{a}+\mathbf{b}}, \quad \hat{t}_{\mathbf{0}} = 1, \quad \hat{t}_{\mathbf{a}} \cdot \hat{t}_{-\mathbf{a}} = 1, \\ \hat{t}_{\mathbf{a}+\mathbf{b}}\hat{t}_{\mathbf{c}} = \hat{t}_{\mathbf{a}}\hat{t}_{\mathbf{b}+\mathbf{c}} = \hat{t}_{\mathbf{a}}\hat{t}_{\mathbf{b}}\hat{t}_{\mathbf{c}} \text{ und in Funktionenraum}$$

$$\hat{T}_{\mathbf{a}} = e^{-\mathbf{a}\nabla} = e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{a}\hat{\mathbf{p}}}, \quad \left. \frac{\partial \hat{T}_{\mathbf{a}}}{\partial \mathbf{a}} \right|_{\mathbf{a}=0} = \hat{\mathbf{X}} = -\frac{i}{\hbar}\hat{\mathbf{p}}$$

d.h. die Generatoren der Translationsgruppe sind die Impulsoperatoren.

4. Die Menge aller **Rotationen** im \mathbb{R}^3 um einen Winkel φ ($\varphi/\varphi = \mathbf{n}$ bezeichnet die Richtung der durch den Koordinatenursprung gehenden Rotationsachse) bildet die (nicht-abelsche) Gruppe $SO(3)$. Die Verknüpfungsregel ist das Hintereinanderausführen von zwei Rotationen φ_1, φ_2 , was einer Rotation um φ_3 entspricht.

$$\hat{t}_\varphi \mathbf{x} = \mathbf{x} \cos \varphi + (1 - \cos \varphi)(\mathbf{x} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n} + \sin \varphi \mathbf{n} \times \mathbf{x}, \quad \hat{t}_{\delta\varphi} \mathbf{x} = (1 + \delta\varphi \times)\mathbf{x},$$

$$\hat{T}_\varphi = e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi \mathbf{i}}, \quad \hat{X}_i = -\frac{i}{\hbar} \hat{l}_i$$

$\hat{l}_i = \varepsilon_{ijk} x_j \hat{p}_k$, $[\hat{X}_i, \hat{X}_j] = \varepsilon_{ijk} X_k$, d.h. die Generatoren der $SO(3)$ Gruppe sind die Drehimpulsoperatoren.

5. Für Transformationen, die \hat{H} invariant lassen, gilt $[\hat{H}, \hat{T}_i] = 0$. Für kontinuierliche Gruppen entspricht dies $[\hat{H}, \hat{X}_i] = 0$. Ist \hat{T}_i bzw. \hat{X}_i (bis auf Konstanten) gleich einer physikalischen Observablen \hat{F} , dann folgt aus dem Ehrenfest'schen Satz die Erhaltung dieser Observablen; aus der **Homogenität des Raumes**, $[\hat{H}, \hat{T}_a] = 0$, $\forall \mathbf{a}$ folgt die **Erhaltung des Impulses**, aus der **Isotropie des Raumes** $[\hat{H}, \hat{T}_\varphi] = 0$ folgt die **Erhaltung des Drehimpulses**.

6. Die Drehimpulsoperatoren $\hat{\mathbf{I}}^2$ und \hat{l}_z haben wegen $[\hat{\mathbf{I}}^2, \hat{l}_z] = 0$ ein gemeinsames System von Eigenfunktionen

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{I}}^2 \psi_{lm} &= \hbar^2 l(l+1) \psi_{lm} \\ \hat{l}_z \psi_{lm} &= \hbar m \psi_{lm}, \quad -l \leq m \leq l, \quad l \text{ ganz oder halbzahlrig} \\ \hat{l}_\pm \psi_{lm} &= \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} \psi_{l, m \pm 1}, \quad \hat{l}_\pm = \hat{l}_x \pm i \hat{l}_y \end{aligned}$$

Für die Matrixelemente gilt:

$$\begin{aligned} (\psi_{lm}, \hat{l}_z \psi_{l'm'}) &= \hbar m \delta_{ll'} \delta_{mm'} \\ (\psi_{lm}, \hat{\mathbf{I}}^2 \psi_{l'm'}) &= \hbar^2 l(l+1) \delta_{ll'} \delta_{mm'} \\ (\psi_{lm}, \hat{l}_\pm \psi_{l'm'}) &= \delta_{ll'} \delta_{m, m' \pm 1} \hbar \sqrt{l(l+1) - m'(m' \pm 1)} \\ (\psi_{lm}, \hat{l}_x \psi_{l'm'}) &= \frac{\hbar}{2} \left\{ \sqrt{l(l+1) - m'(m'+1)} \delta_{m, m'+1} \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{l(l+1) - m'(m'-1)} \delta_{m, m'-1} \right\} \delta_{ll'} \\ (\psi_{lm}, \hat{l}_y \psi_{l'm'}) &= \frac{\hbar}{2i} \left\{ \sqrt{l(l+1) - m'(m'+1)} \delta_{m, m'+1} \right. \\ &\quad \left. - \sqrt{l(l+1) - m'(m'-1)} \delta_{m, m'-1} \right\} \delta_{ll'} \end{aligned}$$

A.7 Zusammenfassung 7.Woche

1. Eigenfunktionen der Drehimpulsoperatoren $\hat{\mathbf{I}}^2$ und \hat{l}_z (oder \hat{l}_x , oder \hat{l}_y) sind die **Kugelfunktionen**

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^{(m+|m|)/2} P_{l|m|}(\cos \theta) e^{im\varphi} \left[\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} \right]^{1/2}$$

wobei $P_{lm}(\xi) = (1 - \xi^2)^{m/2} \frac{d^m}{d\xi^m} P_l(\xi)$ und $P_l(\xi) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{d\xi^l} (\xi^2 - 1)^l$ die (zugeordneten) Legendreschen Polynome sind. Die $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ bilden ein vollständiges Orthonormalsystem.

2. Für Teilchen im Zentralfeld hängt $V(\mathbf{x})$ **nur** vom Betrag $|\mathbf{x}|$ ab, es gilt $[\hat{H}, \hat{l}_i] = 0$. Die Eigenfunktionen der Schrödingergleichung haben die Form $\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$, wobei (in d Dimensionen) $R(r)$ der Gleichung

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{d-1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] + V(r) - E \right\} R(r) = 0$$

genügt. Der Drehimpuls-abhängige Teil des Potentials repräsentiert die **Zentrifugalkräfte**. In $d = 3$ führt die Substitution $R(r) = u(r)/r$ auf das eindimensionale Problem ($r > 0$ d.h. $V(r < 0) = \infty!$)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) + V(r) - E \right] u(r) = 0$$

Für $l = 0$ ist der Grundzustand durch 1. angeregten Zustand des symmetrischen Problems ($-\infty < r < \infty$, $V(-r) = V(r)$) gegeben.

3. Beim **Coulombproblem** $V(r) = -\frac{e^2 Z}{r}$ werden Längen- und Energieskala durch $a_0 = \frac{\hbar^2}{2e^2 m} = \frac{1}{Z} 0,529 \cdot 10^{-8} \text{cm}$ und $E_0 = \frac{e^2 Z}{a_0} = \frac{Z^2 e^4 m}{\hbar^2} = Z^2 \cdot 27,21 \text{eV}$ gegeben.

4. Neben $\hat{\mathbf{I}}^2, \hat{l}_z$ ist beim Coulomb-Potential auch der **Runge-Lenz-Vektor** $\hat{\mathbf{A}} = \frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{l}} - \hat{\mathbf{l}} \times \hat{\mathbf{p}}) - \frac{e^2 Z}{r} \mathbf{x}$ Erhaltungsgröße, d.h. $[\hat{H}, \hat{\mathbf{A}}] = 0$. Bei Beschränkung auf den Unterraum der Eigenfunktionen von \hat{H} bilden die sechs Komponenten von $\hat{\mathbf{I}}$ und $\hat{\mathbf{A}}$ die **Generatoren der SO(4)-Gruppe**, die durch eine lineare Transformation in zwei Sätze $\hat{\mathbf{I}}, \hat{\mathbf{K}}$ von Generatoren je einer SO(3)-Gruppe entkoppelt werden können. Dies ergibt als Eigenwertspektrum des Coulombpotentials: $E_n = -\frac{E_0}{2n^2}$.

A.8 Zusammenfassung 8.Woche

1. Die Gesamtwellenfunktion für ein Elektron im Coulombpotential $-\frac{e^2 Z}{r}$ ist durch die drei Quantenzahlen n (Haupt-), l (azimutale) und m (magnetische Quantenzahl) festgelegt:

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = \langle r, \theta, \varphi | n, l, m \rangle = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

$Y_{lm}(\theta, \varphi)$ bezeichnet die Kugelfunktionen, der Radialanteil der Wellenfunktion ist durch

$$R_{nl}(r) = -\frac{2}{n^2 a_0^{3/2}} \left(\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3} \right)^{1/2} e^{-r/na_0} \left(\frac{2r}{na_0} \right)^l L_{n+l}^{2l+1} \left(\frac{2r}{a_0 n} \right)$$

gegeben, wobei die Funktionen $L_r^s(x)$ die Laguerresche Polynome bedeuten. $a_0 = \hbar^2/(Ze^2m) = (1/Z) \cdot 0,529 \cdot 10^{-8}\text{cm}$.

2. Quantenmechanische Zustände lassen sich durch “ket”-Vektoren $|a\rangle, |b\rangle, \dots$ in einem abstrakten unendlich-dimensionalen linearen Vektorraum (dem Hilbertraum) darstellen. Zu diesem Raum dual ist der Raum der “bra”-Vektoren $\langle a| = |a\rangle^\dagger$. Hermitesche Operatoren \hat{F} wirken von links auf ket-Vektoren $|b\rangle = \hat{F}|a\rangle$ und von rechts auf “bra”-Vektoren $\langle b| = (\hat{F}|a\rangle)^\dagger = \langle a|\hat{F}^\dagger = \langle a|\hat{F}$. Das Skalarprodukt zweier ket-Vektoren $|a\rangle, |b\rangle$ wird durch $\langle b| \cdot |a\rangle = \langle b|a\rangle$ definiert und ist eine komplexe Zahl $\langle a|b\rangle = \langle b|a\rangle^*$.

3. Für Eigenzustände $|f\rangle$ hermitescher Operatoren \hat{F} , $\hat{F}|f\rangle = F|f\rangle$ gelten die Orthogonalitäts- und Vollständigkeitsrelationen

$$\langle f|f'\rangle = \delta_{ff'}, \quad \sum_f |f\rangle\langle f| = \hat{1}.$$

$\langle f|a\rangle = \psi_a(f)$ bildet die “ f -Darstellung” des Zustands $|a\rangle$. Der Projektoperator $\hat{P}_f = |f\rangle\langle f|$ liefert die Projektion eines beliebigen Zustands $|a\rangle$ auf den Zustand $|f\rangle$: $\hat{P}_f|a\rangle = \langle f|a\rangle|f\rangle$.

4. Operatoren werden in f -Darstellung durch die Matrizen

$$A_{ff'} = \langle f|\hat{A}|f'\rangle, \quad \hat{A} = \sum_{f,f'} A_{ff'}|f\rangle\langle f'|$$

wiedergegeben. Gilt $|b\rangle = \hat{A}|a\rangle$, dann folgt in f -Darstellung

$$\langle f|b\rangle = \sum_{f'} A_{ff'}\langle f'|a\rangle.$$

A.9 Zusammenfassung 9.Woche

1. Der Wechsel zwischen verschiedenen Darstellungen erfolgt durch unitäre Transformationen, z.B. von der f - zur g -Darstellung

$$\begin{aligned} \psi_a(g) &= \langle g|a\rangle = \sum_f \langle g|f\rangle \langle f|a\rangle = \sum_f \langle g|f\rangle \psi_a(f) \\ A_{gg'} &= \langle g|\hat{A}|g'\rangle = \sum_{ff'} \langle g|f\rangle \langle f|\hat{A}|f'\rangle \langle f'|g'\rangle \end{aligned}$$

oder in Matrixform

$$\begin{aligned} \underline{\psi}_a(g) &= \underline{U}(g, f) \underline{\psi}_a(f), \quad \underline{U}\underline{U}^\dagger = \underline{U}^\dagger \underline{U} = \underline{1} \\ \underline{A}(g) &= \underline{U}(g, f) \underline{A}(f) \underline{U}^\dagger(g, f). \end{aligned}$$

2. Der Darstellungswechsel entspricht einer **kanonischen Transformation**, diese läßt das Skalarprodukt zweier Vektoren, die algebraischen Beziehungen zwischen den Vektoren und Operatoren (insbesondere die Kommutatorbeziehungen), sowie die Spur invariant. Im allgemeinen sind die Matrizen \hat{U} **nicht** quadratisch und daher **nicht** die Darstellung eines unitären Operators.

3. Existiert aber eine eindeutige Relation zwischen den alten und neuen Basisvektoren $|\bar{f}\rangle$ und $|f\rangle = \hat{U}|\bar{f}\rangle$, dann ist

$$\hat{U} = \sum_f |f\rangle\langle\bar{f}|, \quad \hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{1}$$

ein unitärer Operator.

4. Sei \hat{U} ein beliebiger unitärer Operator und sei $|b\rangle = \hat{A}|a\rangle$, dann folgt mit $|a'\rangle = \hat{U}|a\rangle$ und $\hat{A}' = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger$, $|b'\rangle = \hat{A}'|a'\rangle$. Die Anwendung unitärer Operatoren erhält die **algebraischen Eigenschaften** der Operatoren, ihre **Linearität** und **Hermitezität**.

5. Eine spezielle Form der unitären Transformation ist die **Phasentransformation** $\hat{U} = e^{i\hat{\alpha}}$, wobei $\hat{\alpha}$ ein **hermitescher Operator** ist. Wählt man insbesondere

$$\hat{U} \equiv \hat{S}(t, t_0) = \hat{T}_t e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}(t') dt'},$$

wobei \hat{S} der sogenannte **S- oder Streuoperator** ist, dann werden die **Zustände zeitunabhängig**, die **Operatoren zeitabhängig**, dies ist das sogenannte **Heisenberg-Bild**. Es gilt die **Heisenberg-Gleichung**

$$\frac{d\hat{A}_H}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}_H(t)] + \frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_H(t).$$

A.10 Zusammenfassung 10. Woche

1. Läßt sich der Zustand eines quantenmechanischen Systems durch einen Vektor $|\psi\rangle$ im Hilbertraum darstellen, dann nennt man diesen Zustand einen **reinen Zustand**.

2. Ist das System **Teil eines größeren Systems**, oder wird das System durch ein **Ensemble identischer Systeme** gebildet, von denen jeweils n_i im Zustand $|\psi_i\rangle$ sind, oder ist die Kenntnis des Zustands unvollständig, dann ist die **allgemeinste Form der quantenmechanischen Zustandsbeschreibung** die mit der **Dichtematrix** $\hat{\rho}$.

3. Die Dichtematrix $\hat{\rho}$ hat die Eigenschaften

$$\text{Sp } \hat{\rho} = 1, \quad \hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}, \quad \langle f|\hat{\rho}|f\rangle \geq 0 \quad \forall |f\rangle, \quad \text{Sp } \hat{\rho}^2 \leq 1.$$

Erwartungswerte werden über

$$\langle F \rangle = \text{Sp } \hat{\rho} \hat{F}$$

berechnet. Die Dichtematrix genügt der **von-Neumann-Gleichung**

$$\frac{d}{dt} \hat{\rho} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}].$$

4. Für reine Systeme gilt $\hat{\rho}_0^2 = \hat{\rho}_0 = |\psi\rangle\langle\psi|$.

5. Bei der Bewegung eines Elektrons im Feld eines positiv geladenen Atomkerns und einem **zusätzlichen äußeren Magnetfeld B** tritt eine charakteristische magnetische Länge $a_B = \sqrt{c\hbar/e_0 B} = \sqrt{\phi_0/\pi B}$ auf mit $\left(\frac{a_0}{a_B}\right)^2 \approx 4 \cdot 10^{-10} \frac{B(\text{Gauss})}{Z}$. Energieniveaus mit gleichen Quantenzahlen n und l werden in $(2l+1)$ Niveaus mit verschiedener magnetischer Quantenzahl m_l aufgespalten (normales Zeemann-Effekt)

$$E(n, l, m_l) = -\frac{E_0}{2} \left(\frac{1}{n^2} - \left(\frac{a_0}{a_B} \right)^2 m_l \right) = -\frac{E_0}{2n^2} + \hbar\omega_L m_l,$$

$\omega_L = \frac{e_0 B}{2mc}$ ist die Larmorfrequenz.

6. Die Bewegung **freier Elektronen** in der Ebene senkrecht zum äußeren homogenen Magnetfeld \mathbf{B} zeigt ein diskretes Anregungsspektrum, die sogenannten Landau-Niveaus, deren Energiedifferenz $2\hbar\omega_L$ ist.

A.11 Zusammenfassung 11.Woche

1. Im Rahmen der **quasiklassischen Näherung** läßt sich die Wellenfunktion für stationäre Zustände in der Form

$$\psi(\mathbf{x}, t) = A(\mathbf{x}, t) e^{-\frac{i}{\hbar} \left(Et - \int_{x_0}^x d\mathbf{x} \mathbf{p}(\mathbf{x}) \right)}$$

schreiben, wobei $\mathbf{p}(\mathbf{x})$ der klassische **kanonische Impuls** des Teilchens ist. Bei im Phasenraum geschlossenen Bahnen folgt hieraus die Bohr-Sommerfeld-Quantisierung

$$\oint \mathbf{p}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = 2\pi n \hbar.$$

2. Bei freien Elektronen im homogenen Magnetfeld \mathbf{B} ist im Rahmen der quasiklassischen Näherung neben der Energie auch der von der Bahn eingeschlossene Magnetfluß ϕ

$$\phi = n \left(\frac{hc}{e_0} \right) = n\phi_0, \quad n \text{ ganz},$$

sowie der Bahnradius

$$\rho_n = \sqrt{2n} a_B, \quad n \text{ ganz}$$

quantisiert.

3. Die raum–zeitliche Entwicklung der Wellenfunktion $\psi(\mathbf{x}', t)$ wird durch den **Propagator** $K(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t_0)$ beschrieben. Es gilt

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \int d^3x' K(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t_0) \psi(\mathbf{x}', t_0)$$

mit

$$K(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t_0) = \Theta(t - t_0) \langle \mathbf{x} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} | \mathbf{x}' \rangle.$$

Ist das Teilchen zum Zeitpunkt t_0 an \mathbf{x}_0 lokalisiert, $\psi(\mathbf{x}', t_0) = \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}_0)$, dann ist $K(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t_0)$ die Wellenfunktion zum Zeitpunkt t .

A.12 Zusammenfassung 12. Woche

1. In der **quasi–klassischen Approximation** hat der Propagator die Gestalt

$$K_0(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0) = A_0(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0) e^{\frac{i}{\hbar} S_0(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0)}$$

mit

$$S_0(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0) = \int_{t_0, \mathbf{x}(t_0)=\mathbf{x}_0}^{t, \mathbf{x}(t)=\mathbf{x}} dt L(\mathbf{x}(t), \dot{\mathbf{x}}(t), t).$$

$A_0^2(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_0, t_0)$ ist die auf 1 normierte Dichte einer klassischen Ensemble–Flüssigkeit, die bei t_0 an $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$ lokalisiert war.

2. Bei der Auswertung des Doppelspaltexperiments mit eingeschlossenen Magnetfluß ergeben sich Maxima des Interferenzmusters für

$$x = x_n = \frac{\lambda_z L}{d} \left(n + \frac{\phi}{\phi_0} \right) \quad \phi_0 = \frac{hc}{e_0}.$$

3. Das Elektron besitzt einen Eigendrehimpuls oder Drall: den **Spin** vom Betrag $\hbar/2$. Dieser entspricht einer halbzahligen Darstellung der Drehgruppe und wird durch die **Spin–Operatoren** $\hat{\mathbf{s}} = (\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z)$ mit $[\hat{s}_i, \hat{s}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{s}_k$ beschrieben. In der Darstellung, die als VONS die Eigenzustände $|\pm\rangle = |\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle$ der Operatoren \hat{s} und \hat{s}_z benutzt, werden die Spin–Operatoren durch $\underline{\underline{s}}_i = \frac{\hbar}{2} \underline{\underline{\sigma}}_i$ beschrieben, $\underline{\underline{\sigma}}_i$ sind die **Pauli Matrizen**.

4. Ein beliebiger Spin–Zustand kann in der Form $|\chi\rangle = \alpha_+ |+\rangle + \alpha_- |-\rangle$ mit $|\alpha_+|^2 + |\alpha_-|^2 = 1$ geschrieben werden. Die Koeffizienten $\alpha_{\pm} = \langle \pm | \chi \rangle$ bilden die beiden Komponenten des **Spinors** $\chi = \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix}$.

5. Der Gesamtzustand eines Teilchens ist das direkte Produkt von Orts- und Spinzustand. Wählt man als **Basis-kets** $|\pm\rangle|\mathbf{x}\rangle$, dann ist ein beliebiger Zustand in der Form

$$|\psi\rangle = \int d^3x \{ \psi_+(\mathbf{x})|\mathbf{x}\rangle|+\rangle + \psi_-(\mathbf{x})|\mathbf{x}\rangle|-\rangle \}$$

mit $\psi_{\pm}(\mathbf{x}) = \langle \pm | \langle \mathbf{x} | \psi \rangle$, $\int d^3x (|\psi_+|^2 + |\psi_-|^2) = 1$ gegeben. $\psi_{\pm}(\mathbf{x})$ bilden die Komponenten des Spinors $\Psi = \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix}$. Die nicht-relativistische (**Pauli-**) **Gleichung** des Elektrons lautet daher

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \left[\left(\frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + V(\mathbf{x}) \right) \underline{1} + \frac{g}{2} \mu_B \sum_i \underline{\sigma}_i \cdot B_i \right] \Psi$$

6. Ist $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1$, $\lambda \ll 1$ und $\hat{H}_0 |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle$, wobei die Zustände $|n^{(0)}\rangle$ nicht entartet sind, dann läßt sich das Problem mit einem Potenzreihenansatz lösen

$$\begin{aligned} E_n &= E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \\ |n\rangle &= |n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |n^{(2)}\rangle + \dots \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned} E_n^{(1)} &= \langle n^{(0)} | \hat{H}_1 | n^{(0)} \rangle \\ E_n^{(2)} &= \langle n^{(0)} | \hat{H}_1 | n^{(1)} \rangle = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle n^{(0)} | \hat{H}_1 | m^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \\ |n^{(1)}\rangle &= \sum_{m \neq n} \frac{\langle m^{(0)} | \hat{H}_1 | n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |m^{(0)}\rangle \end{aligned}$$

7. Ist ein Energieniveau entartet, $\hat{H}_0 |n_i^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n_i^{(0)}\rangle$, $i = 1, \dots, k$ dann ist die **Säkulargleichung** $|H_{1,ij} - H_1^{(\lambda)} \delta_{ij}| = 0$ mit $H_{1,ij} = \langle n_i^{(0)} | \hat{H}_1 | n_j^{(0)} \rangle$ zu lösen, die $H_1^{(0)}$ sind die erste Korrektur zu $E_n^{(0)}$.

8. Beim **Ritzschen Variationsverfahren** wird ein Versuchs-(trial)-Zustand $|\psi(\mu)\rangle$ als Funktion eines oder mehrerer Variationsparameter μ betrachtet und der genäherte Grundzustand aus dem Minimum von

$$E(\mu) = \frac{\langle \psi(\mu) | \hat{H} | \psi(\mu) \rangle}{\langle \psi(\mu) | \psi(\mu) \rangle}$$

bestimmt.

A.13 Zusammenfassung 13. Woche

1. Ist eine Störung $\lambda H_1(t)\Theta(t-t_0)$ explizit zeitabhängig (im Schrödingerbild), dann ist die **Wahrscheinlichkeitsamplitude** für den Übergang vom Ausgangszustand $|m\rangle$ in den Endzustand $|n\rangle$ in der Ordnung $\lambda \ll 1$ durch

$$\langle n(t)|m(t)\rangle = \langle n|m_D(t)\rangle = \delta_{n,m} + \frac{\lambda}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' e^{i(E_n-E_m)t'/\hbar} \langle n|H_1(t')|m\rangle$$

gegeben. Die **Übergangsrate** $\Gamma_{mn} = \frac{1}{t} P_{mn}(t) = \frac{1}{t} |\langle n(t)|m(t)\rangle|^2$ ist dann für $H_1(t) = V\Theta(t)$

$$\Gamma_{mn} \simeq \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_n - E_m) |\langle n|V|m\rangle|^2 \quad (\text{Goldene Regel})$$

und für $H_1(t) = \Theta(t) (\hat{F}e^{-i\omega t} + \hat{F}e^{i\omega t})$

$$\Gamma_{mn} = \frac{2\pi}{\hbar} \left[\delta(E_n - E_m - \hbar\omega) |\langle n|\hat{F}|m\rangle|^2 + \delta(E_n - E_m + \hbar\omega) |\langle n|\hat{F}|m\rangle|^2 \right].$$

2. Für mehrere spinlose Teilchen folgt aus der Invarianz des Hamiltonians gegenüber Drehung des Systems um einen festen Punkt um einen Winkel φ , d.h. $[\hat{T}\varphi, \hat{H}] = 0$, $\hat{T}\varphi = \exp(-\frac{i}{\hbar}\varphi\hat{\mathbf{L}})$, die Erhaltung des **Gesamtdrehimpulses** $\hat{\mathbf{L}} = \sum_{\alpha=1}^n \hat{\mathbf{L}}_{\alpha}$. Es gilt $[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hbar\hat{L}_k$. Der Drehimpuls $\hat{\mathbf{L}}_i$ der einzelnen Teilchen ist dabei i.a. nicht mehr erhalten: $[\hat{H}, \hat{\mathbf{L}}_i] \neq 0$.

3. Ein System aus zwei Teilchen, $\alpha = 1, 2$ kann durch die **Eigenzustände** $|l_1, l_2, m_1, m_2\rangle = |l_1, m_1\rangle|l_2, m_2\rangle$ der **Einzeldrehimpulse** oder durch die **Eigenzustände des Gesamtdrehimpulses** $|L, M, l_1, l_2\rangle$ beschrieben werden. Der Übergang zwischen beiden Basisvektorsystemen erfolgt über eine unitäre Transformation (siehe 6.3)

$$|L, M, l_1, l_2\rangle = \sum_{m_1, m_2=M-m_1} \langle l_1, l_2, m_1, m_2|L, M, l_1, l_2\rangle |l_1, l_2, m_1, m_2\rangle.$$

Die auf der rechten Seite auftretenden Koeffizienten sind die **Clebsch-Gordon Koeffizienten**. Der Gesamtdrehimpuls L ergibt sich dabei aus der **Vektoradditionsregel** $L = l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 1, \dots, |l_1 - l_2|$ und $-L \leq M \leq L$.

4. Analoge Regeln gelten für die Addition der Spins bei Teilchen mit Bahndrehimpuls Null.

A.14 Zusammenfassung 14.Woche

1. Bei identischen quantenmechanischen Teilchen ist es – im Gegensatz zur klassischen Physik – unmöglich festzustellen, welches Teilchen sich in welchem Zustand befindet. Zustandskets, die durch Vertauschung der Teilchenkoordinaten (z.B. Ort + Spin) auseinandervorgehen haben die gleichen Eigenwerte für alle physikalischen Observablen. Diese Vieldeutigkeit der Zustandsvektoren wird **Austauschentartung** genannt.

2. Unter allen Zustandskets, die durch Teilchenaustausch auseinander hervorgehen, sind die **vollkommen symmetrischen**

$$|\tilde{\psi}_+\rangle = \sqrt{\frac{N!}{n_{\nu_1}!n_{\nu_2}!\dots n_{\nu_N}!}} \hat{J}_+ |\psi\rangle$$

sowie die **vollkommen antisymmetrischen**

$$|\tilde{\psi}_-\rangle = \sqrt{N!} \hat{J}_- |\psi\rangle$$

in der Natur ausgezeichnet, nur sie werden realisiert. $\hat{J}_\pm = \frac{1}{N!} \sum_\alpha \varepsilon_\alpha \hat{P}_\alpha$, $\varepsilon_\alpha = 1$ für **Bosonen**, $\varepsilon_\alpha = \pm 1$ für gerade bzw. ungerade Permutationen α für **Fermionen**. \hat{P}_α ist der Permutationsoperator. Die \hat{P}_α , \hat{J}_\pm kommutieren mit allen Observablen, $\hat{J}_\pm^\dagger = \hat{J}_\pm$. Durch Beschränkung auf den Unterraum der $|\tilde{\psi}_\pm\rangle$ ist die Austauschentartung aufgehoben.

3. Bosonen sind Teilchen mit ganzzahligem Spin, Fermionen Teilchen mit halbzahligem Spin. Aus der Forderung der Antisymmetrie der Zustandsvektoren für Fermionen folgt das **Paulische Ausschließungsprinzip**: zwei Fermionen im gleichen Spinzustand können sich nicht am gleichen Ort aufhalten.

4. Der Grundzustand der Elektronen im Heliumatom ist ein Spin-Singulett. Bei den angeregten Zuständen unterscheidet man zwischen dem Spin-Singulett-Zustand (Parahelium) und Spin-Triplett-Zustand (Orthohelium), wobei der Triplettzustand die niedrigere Energie hat.

Anhang B

Übungsaufgaben

1. Aufgabe: Deltafunktion (5 Punkte)

Die Diracsche Deltafunktion kann dargestellt werden als

$$\delta(x) = \lim_{a \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{\pi}a} e^{-x^2/a^2}, \quad a > 0.$$

Beweisen Sie folgende Eigenschaften:

- (i) $\int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x) = 1$
- (ii) $\int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x) f(x) = f(0)$
- (iii) $\delta(cx) = \frac{1}{|c|} \delta(x), \quad c \neq 0$
- (iv) $x\delta(x) = 0$
- (v) $\int_{-\infty}^{\infty} dx \delta'(x) f(x) = -f'(0)$

Hinweis: Verwenden Sie *nur* das vollständige Gauß-Integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} = \sqrt{\pi}$$

sowie die Taylor-Entwicklung

$$f(x) = f(0) + f'(0)x + \frac{1}{2!} f''(0)x^2 + \dots$$

2. Aufgabe: Inverse Fourier-Transformation (4 Punkte)

Die Darstellung der Deltafunktion

$$2\pi\delta(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx}$$

soll durch Auswertung von $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} dk \exp(ikx - \epsilon k^2)$ für $\epsilon > 0$ mittels quadratischer Ergänzung und Rückführung auf obige δ -Funktionsdarstellung abgeleitet werden.

Zeigen Sie damit, daß eine Fourier-Transformation

$$\tilde{f}(k) \equiv \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ikx} f(x)$$

durch

$$f(x) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx} \tilde{f}(k)$$

invertiert wird.

3. Aufgabe: Zerfließende Wellenpakete (3 Punkte)

In der Vorlesung wurde gezeigt, wie ein eindimensionales Gaußsches Wellenpaket eines Teilchens der Masse m im Laufe der Zeit zerfließt. Wenn ein solches Wellenpaket anfangs ($t = 0$) die Form $\psi(k) = \mathcal{N} \exp(-(k - k_0)^2 b^2 / 2)$ mit einer Normierungskonstanten \mathcal{N} , einem mittleren Impuls $\hbar k_0$ und einer Ortsunschärfe b besitzt, gilt für die zeitliche Entwicklung der Ortsunschärfe

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

Wie lange dauert es für ein Elektron ($m \approx 10^{-27}$ g), ein C_{60} Molekül ($m \approx 10^{-21}$ g) und eine Schrotkugel ($m \approx 1$ g), bis sich das anfängliche Schwankungsquadrat der Ortsunschärfe verdoppelt hat? Dabei sei die Ortsunschärfe anfänglich jeweils etwa ein Atomabstand, $b \approx 10^{-8}$ cm. Ein Elektron in einem Elektronenmikroskop habe eine Geschwindigkeit $v \approx 10^8$ m/s und eine abgefeuerte Schrotkugel $v \approx 10^3$ m/s. Wie groß sind die zugehörigen de Broglie Wellenlängen?

4. Aufgabe: Klein-Gordon-Gleichung (4 Punkte)

a) Die Schrödingergleichung für ein freies Teilchen kann aus der nichtrelativistischen Energie-Impuls-Beziehung $E = \frac{p^2}{2m}$ durch die Ersetzung

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \vec{p} \rightarrow -i\hbar \nabla_{\vec{x}}$$

gewonnen werden. Leiten Sie auf analoge Weise eine Wellengleichung aus der relativistischen Energie-Impuls-Beziehung ab (Klein-Gordon-Gleichung).

b) Machen Sie für die relativistische Wellenfunktion $\Phi(\vec{x}, t)$ den Ansatz $\Phi(\vec{x}, t) = e^{-i \frac{m_0 c^2}{\hbar} t} \Psi(\vec{x}, t)$ und leiten Sie für ein langsam bewegtes Teilchen in führender Ordnung die Wellengleichung für $\Psi(\vec{x}, t)$ ab.

5. Aufgabe: Harmonischer Oszillator (4 Punkte)

Nach der Bohr-Sommerfeldschen Quantisierungsbedingung muß für einen stationären Zustand

$$\oint p dq = 2\pi\hbar(n + \gamma)$$

gelten. Ein mathematisches Pendel mit 1 cm Fadenlänge und einer Masse von 1 g kann näherungsweise als harmonischer Oszillator behandelt

werden. Der Maslovindex γ hat für den harmonischen Oszillator den Wert $\gamma = \frac{1}{2}$.

a) Geben Sie den Abstand der Energieniveaus in eV an.

b) Berechnen Sie den Grad der Anregung (Quantenzahl) für einen Ausschlag des Pendels (von der Ruhelage aus gemessen) von 1 mm und 10^{-8} cm.

6. Aufgabe: Unschärferelation (6 Punkte)

Es gelingt bekanntlich niemandem, einen gut gespitzten Zahnstocher auf harter Unterlage ohne Hilfsmittel so senkrecht auszubalancieren, daß er auf der Spitze stehen bleibt. Liegt das am Ungeschick oder an der Unschärfe? Wie lange dauert es z.B. maximal, bis die quantenmechanischen Unschärfen von Einstellwinkel und Drehimpuls um die Spitze zu einer Neigung von 1° gegen die Senkrechte führen? Das Ergebnis ist verblüffend. Kann man daraus wirklich schließen, die Unschärferelation spiele hier praktisch eine Rolle?

Tip: klassische Bewegungsgleichung lösen.

7. Aufgabe: Zur Schrödinger-Gleichung (3 Punkte)

Die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$ eines Teilchens in einem Potential $V(\mathbf{r})$ genügt der Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar\partial_t\psi(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right)\psi(\mathbf{r}, t).$$

Zeigen Sie, daß die Lösung der Schrödinger-Gleichung im allgemeinen *nicht* einfach durch $\psi(\mathbf{r}, t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}} \tilde{\psi}(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - Et/\hbar)}$ mit der "Energie" $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V(\mathbf{r})$ dargestellt werden kann.

8. Aufgabe: Gruppengeschwindigkeit (5 Punkte)

Der Zustand eines Teilchens (in einer Dimension, Koordinate x) sei durch ein Gaußsches Wellenpaket gegeben: $\psi(k) = \mathcal{N} \exp(-(k-k_0)^2 b^2/2)$ mit einer Normierungskonstanten \mathcal{N} , einem mittleren Impuls $\hbar k_0$ und einer Ortsunschärfe b , vergl. Vorlesung und Aufg. 3. Die Wellenfunktion im Ortsraum lautet demnach $\psi(x, t) = \int \frac{dk}{(2\pi)^{1/2}} \psi(k) e^{ikx - i\omega t}$ mit $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$.

Zeigen Sie, daß sich der Schwerpunkt von $\psi(x, t)$ mit der Gruppengeschwindigkeit v_{Gruppe} bewegt und daß diese daher der mittleren Geschwindigkeit des Teilchens gleicht, d.h. $\frac{d}{dt}\langle \hat{x} \rangle = v_{\text{Gruppe}}$.

9. Aufgabe: Adjungierte Operatoren (1+1=2 Punkte)

\hat{A}^\dagger heißt zu \hat{A} adjungierter Operator, wenn $(\hat{A}^\dagger\phi, \psi) = (\phi, \hat{A}\psi)$ für alle Wellenfunktionen ϕ und ψ . Zeigen Sie:

(a) $(c\hat{A})^\dagger = c^*\hat{A}^\dagger$ für alle Operatoren A und Zahlen $c \in \mathbb{C}$.

(b) $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger$ für alle Operatoren A, B .

10. Aufgabe: Kommutatoren I (1+2=3 Punkte)

Zeigen Sie, daß für beliebige Operatoren \hat{A} , \hat{B} und \hat{C} gilt:

(a) $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$.

(b) die Baker-Hausdorff-Identität

$$e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!}[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \frac{1}{3!}[\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]] + \dots,$$

wobei $e^{\hat{A}} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \hat{A}^n$.

Hinweis: Zeigen Sie diese Identität indem Sie \hat{A} durch $\lambda\hat{A}$ ersetzen und die Gleichheiten beider Seiten für $\lambda = 0$ und ihrer Ableitungen nach λ nachweisen.

11. Aufgabe: Drehimpulsoperator (4 Punkte)

Der Drehimpulsoperator ist definiert durch $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$ mit dem Orts- und Impulsoperator $\hat{\mathbf{r}}$ und $\hat{\mathbf{p}}$. Zeigen Sie, daß für seine Komponenten $[\hat{L}_\alpha, \hat{L}_\beta] = i\hbar\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{L}_\gamma$ gilt, wobei ϵ der total antisymmetrische Tensor ist. Hinweis: $\epsilon_{abc}\epsilon_{ade} = \delta_{bd}\delta_{ce} - \delta_{be}\delta_{cd}$.

*12. Aufgabe: Kommutatoren II (0 Punkte)¹

Nun kommutiere der Kommutator von \hat{A} und \hat{B} mit denselben, d.h. $[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0 = [\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]]$. Zeigen Sie:

(a)

$$\hat{A}e^{\hat{B}} = e^{\hat{B}}(\hat{A} + [\hat{A}, \hat{B}])$$

Hinweis: Verwenden Sie die Baker-Hausdorff-Identität.

(b)

$$e^{\hat{A}}e^{\hat{B}} = e^{\hat{B}}e^{\hat{A}}e^{[\hat{A}, \hat{B}]},$$

(c)

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}e^{-[\hat{A}, \hat{B}]/2}.$$

Hinweis: Verwenden / übertragen Sie den Hinweis zu Aufgabe 10 entsprechend.

13. Aufgabe: Ehrenfestscher Satz (4 Punkte)

Der Ehrenfestsche Satz über die Zeitentwicklung der Erwartungswerte von Operatoren liefert für den Ortsoperator die Beziehung

$$m\frac{d^2}{dt^2}\langle\hat{\mathbf{x}}\rangle = \langle\mathbf{K}(\hat{\mathbf{x}})\rangle.$$

¹Aufgaben mit * sind freiwillig zu bearbeiten. Solche Aufgaben gehen *nicht* in die Bonusregelung ein.

Um die klassische Bewegungsgleichung für $\langle \hat{\mathbf{x}} \rangle$ zu erhalten, müßte man $\langle \mathbf{K}(\hat{\mathbf{x}}) \rangle$ durch $\mathbf{K}(\langle \hat{\mathbf{x}} \rangle)$ ersetzen können. Leiten Sie durch Taylorentwicklung der Kraft in der Variablen $\hat{\mathbf{x}} - \langle \hat{\mathbf{x}} \rangle$ ein Kriterium für die Gültigkeit dieser Ersetzung ab.

14. Aufgabe Eichinvarianz von Wahrscheinlichkeits- und Stromdichte (2 Punkte)

Zeigen Sie die Invarianz von Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho = \Psi^* \Psi$ und Stromdichte $\mathbf{j} = \frac{1}{m} \text{Re} \left\{ \Psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \Psi \right\}$ unter Eichtransformationen $\mathbf{A}' = \mathbf{A} - \nabla \chi$, $\Psi' = \Psi e^{(e/i\hbar c)\chi}$.

15. Aufgabe: Erwartungswerte (4 Punkte)

Berechnen Sie die Erwartungswerte von \hat{x} , \hat{p} , \hat{x}^2 und \hat{p}^2 im Zustand

$$\Psi(x) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (\Phi_0(x) + \Phi_2(x)) \quad ,$$

wobei Φ_0 und Φ_2 die Wellenfunktionen für den Grundzustand und den zweiten angeregten Zustand des harmonischen Oszillators sind.

Aufgabe 16: Gültigkeit der klassischen Mechanik (2 Punkte)

Ein Kriterium für die Gültigkeit der klassischen Beschreibung eines Teilchens der Masse m in einem Potential $V(x)$ ist die Bedingung $p^3 \gg m\hbar V'$. Überzeugen Sie sich davon, daß es nahe am Umkehrpunkt eines harmonischen Oszillators einen Bereich $|x - x_{\max}| < \delta$ gibt, in dem die klassische Beschreibung ungültig ist. Formen Sie die Bedingung für p in eine Ungleichung für $\frac{\delta}{x_0}$ um mit $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m}\omega}$. Schätzen Sie ab, für welche Quantenzahl eines harmonischen Oszillators der Masse 1 g und Frequenz 2 Hz das Verhältnis $\frac{\delta}{x_0} \sim 10^{-3}$ wird.

*17. Aufgabe: Berechnung von Kommutatoren (0 Punkte)

Beweisen Sie unter Verwendung von $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ die Beziehung

$$[\hat{p}, f(\hat{x})] = -i\hbar f'(\hat{x}) \quad .$$

Nehmen Sie an, daß $f(\hat{x})$ als Potenzreihe $f(\hat{x}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} f^{(n)}(0) \hat{x}^n$ darstellbar ist.

18. Aufgabe: Paritätsoperator (2 Punkte)

Zeigen Sie, daß der Paritätsoperator \hat{P} mit Wirkung $\hat{P}\psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r})$ hermitesch ist.

19. Aufgabe: Abschätzungen zum Wasserstoffatom (3 Punkte)

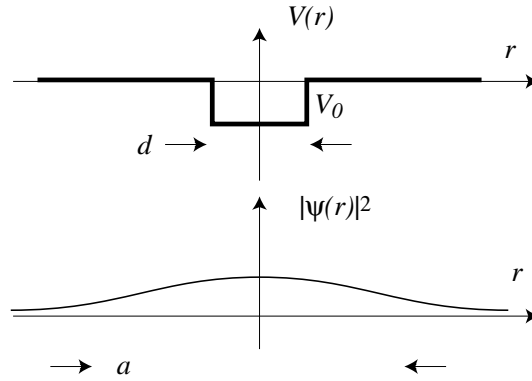
Ein Elektron (Masse m , Ladung e) bewege sich im dreidimensionalen elektrostatischen Potential $V(\mathbf{r}) = -e^2/r$. Die räumliche Ausdehnung a und Energie E_0 des Grundzustands soll in dieser Aufgabe grob abgeschätzt werden.

Nehmen Sie dazu an, daß sich das Elektron in einem Zustand befindet, dessen Wellenfunktion eine zunächst unbekannte Ausdehnung besitzt

und bestimmen Sie die zugehörige minimale Impulsunschärfe. Schätzen Sie sodann die kinetische und potentielle Energie des Zustands ab und bestimmen Sie a und E_0 durch Variation der Gesamtenergie.

20. Aufgabe: Schwach gebundene Zustände (4 Punkte)

Ein Teilchen bewege sich in einem D -dimensionalen rotationsymmetrischen Potentialtopf der Breite d und Tiefe V_0 , siehe Abbildung. In dieser Aufgabe soll untersucht werden, ob ein beliebig flacher Topf in der Lage ist, das Teilchen im Grundzustand zu binden.



Für flache Töpfe kann man annehmen, daß die Wellenfunktion eine Breite $a \gg d$ besitzt, siehe Abbildung. Schätzen Sie erneut die kinetische und potentielle Energie des Zustands unter Berücksichtigung der Heisenbergschen Unschärferelation ab und minimieren Sie die Energie. In welchen D wird das Teilchen durch einen beliebig flachen Topf gebunden?

21. Aufgabe: Kohärente Zustände (3+2=5 Punkte)

$\Phi_0(x)$ sei die Grundzustandswellenfunktion des eindimensionalen harmonischen Oszillators mit Frequenz ω und charakteristischer Länge $x_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$. Kohärente Zustände $\psi_\alpha(x) = e^{-|\alpha|^2/2 + \alpha \hat{a}^\dagger} \Phi_0(x)$ sind Eigenzustände des Vernichtungsoperators \hat{a} mit Eigenwert $\alpha \in \mathbb{C}$.

- Berechnen Sie die Erwartungswerte $\langle \hat{x} \rangle$, $\langle \hat{p} \rangle$, $\langle \hat{x}^2 \rangle$ und $\langle \hat{p}^2 \rangle$ eines kohärenten Zustands α . Zeigen Sie, daß ein kohärenter Zustand minimale Orts-/Impulsunschärfe besitzt.
- Die Wellenfunktion des Oszillators sei zur Zeit $t = 0$ ein kohärenter Zustand, d.h. $\Phi(x, 0) = \psi_{\alpha(0)}(x)$. Zeigen Sie, daß die Wellenfunktion im Laufe der Zeit ein kohärenter Zustand bleibt, d.h. $\Phi(x, t) = e^{i\chi(t)} \psi_{\alpha(t)}(x)$ mit einer gewissen Phase $\chi(t)$, und bestimmen Sie $\alpha(t)$ und $\chi(t)$.

*22. Aufgabe: Stetigkeitsbedingungen (0 Punkte)

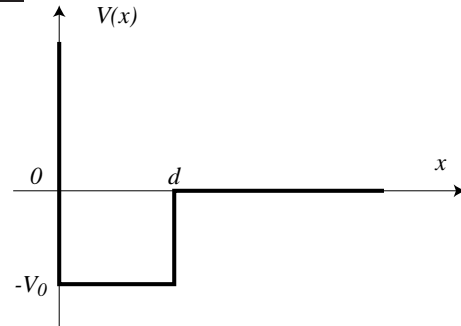
Ein Teilchen bewege sich in einem eindimensionalen Potential $V(x)$.

- $V(x)$ habe bei $x = x_0$ einen Sprung $\Delta V = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} [V(x_0 + \epsilon) - V(x_0 - \epsilon)]$. Zeigen Sie, daß die Lösung $\psi(x)$ der Schrödinger-Gleichung und $\psi'(x)$ stetig sind. Setzen Sie außerdem die Größe des Sprungs in $\partial_x^2 \psi(x)$ mit ΔV in Beziehung.

- (b) $V(x)$ habe bei $x = x_0$ eine "Spitze", d.h. $V(x) = V_0(x) + v\delta(x - x_0)$ mit einem glatten Hintergrundpotential V_0 . Zeigen Sie, daß $\psi(x)$ weiterhin stetig ist, daß aber $\psi'(x)$ einen Sprung besitzt, dessen Wert mit v in Beziehung zu setzen ist.

23. Aufgabe: Potentialtopf mit Wand (5 Punkte)

Ein Teilchen bewege sich in einem eindimensionalen Potentialtopf der Breite d und Tiefe V_0 mit einer harten Wand, siehe Abbildung. Leiten Sie aus der Schrödinger-Gleichung eine Bestimmungsgleichung für die Energien der gebundenen Zustände ab. Diese Gleichung kann zwar nicht explizit nach der Energie aufgelöst werden, jedoch sollen ihre Lösungen graphisch bestimmt werden. Versuchen Sie, im Bereich kleiner Energien durch eine geeignete Näherung eine analytische Lösung zu finden.



24. Aufgabe: Delta-Potential (1+2+2 Punkte)

- a) Gegeben sei das Potential $V(x) = -w\delta(x)$, $w > 0$. Die Lösung $\Psi(x)$ der zugehörigen Schrödingergleichung muß bei $x = 0$ stetig sein. Die Ableitung $\Psi'(x)$ macht bei $x = 0$ einen Sprung. Leiten Sie die Höhe des Sprunges durch Integration der Schrödingergleichung über eine infinitesimale Umgebung des Nullpunktes her.
- b) Bestimmen Sie für das Potential aus Teilaufgabe a) die normierten Lösungen $\Psi(x)$ zu Energien $E < 0$. Wie viele gebundene Zustände gibt es und zu welchen Energieeigenwerten gehören sie?
- c) Betrachten Sie nun ein Doppelmuldenpotential $V(x) = -w\delta(x - a/2) - w\delta(x + a/2)$. Überzeugen Sie sich davon, daß $[\hat{H}, \hat{P}] = 0$ gilt. Suchen Sie gebundene Lösungen mit gerader bzw. ungerader Parität.

25. Aufgabe: Drehimpulsoperator (4 Punkte)

Beweisen Sie die folgenden Relationen für Drehimpulsoperatoren:

- a) $[\hat{\mathbf{I}}^2, \hat{l}_i] = 0$ für $i = 1, 2, 3$.
- b) $(\hat{l}_\pm)^\dagger = \hat{l}_\mp$
- c) $[\hat{l}_+, \hat{l}_-] = 2\hbar\hat{l}_z$
- d) $[\hat{l}_z, \hat{l}_\pm] = \pm\hbar\hat{l}_\pm$

26. Aufgabe: Matrixdarstellung für Drehimpuls $l = 1$ (3 Punkte)

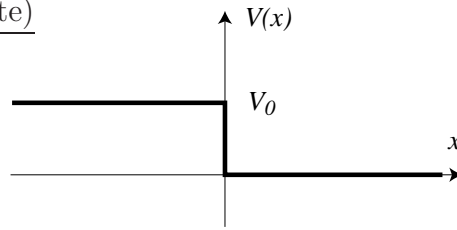
Leiten Sie unter Verwendung der Beziehungen

$$(\Psi_{l'm'}, \hat{l}_z \Psi_{lm}) = \hbar m \delta_{l',l} \delta_{m',m} \quad \text{und} \quad (\Psi_{l'm'}, \hat{l}_\pm \Psi_{lm}) = \hbar \sqrt{(l \mp m)(l \pm m + 1)} \delta_{l',l} \delta_{m',m \pm 1}$$

für festes $l \equiv l' \equiv 1$ eine Matrixdarstellung von $\hat{l}_x, \hat{l}_y, \hat{l}_z$ im $m - m'$ -Raum ab. Die Kugelfunktionen Ψ_{lm} sind Eigenfunktionen des Drehimpulsoperators mit Gesamtdrehimpuls l und z -Komponente m .

27. Aufgabe: Potentialstufe (4 Punkte)

Ein Teilchen bewege sich in einer eindimensionalen Potentialstufe der Höhe V_0 , siehe Skizze. Es laufe mit einer Energie $E > V_0$ in Richtung positiver x die Stufe "abwärts". Bestimmen Sie die Reflexions- und Transmissionsamplituden R und T . Welche Werte nehmen sie für $E = V_0 + 0^+$ an? Welchen qualitativen Unterschied zeigt dabei R zwischen Teilchen, die die Stufe aufwärts (siehe Vorlesung) bzw. abwärts laufen?

28. Aufgabe: Drehimpulserwartungswerte (2+2 Punkte)

- (a) Leiten Sie aus der Positivität von $I(\lambda) \equiv \langle (\Delta \hat{l}_x + i\lambda \Delta \hat{l}_y)^\dagger (\Delta \hat{l}_x + i\lambda \Delta \hat{l}_y) \rangle$ eine Unschärferelation für die Drehimpulskomponenten ab. Hierbei sei $\Delta \hat{l}_i \equiv \hat{l}_i - \langle \hat{l}_i \rangle$ und $\langle \dots \rangle$ sei der Mittelwert in einem beliebigen Teilchenzustand.
- (b) Ein Teilchen befinde sich in einem Eigenzustand der Drehimpulsoperatoren \hat{I}^2 und \hat{l}_z mit zugehörigen Eigenwerten $\hbar^2 l(l+1)$ und $\hbar m$, wobei $l = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$ und $m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$. Berechnen Sie explizit $\langle \hat{l}_x \rangle$, $\langle \hat{l}_y \rangle$, $\langle \hat{l}_x^2 \rangle$ und $\langle \hat{l}_y^2 \rangle$.

29. Aufgabe: Zeitverschiebungsoperator (2 Punkte)

Betrachten Sie ein beliebiges Teilchen, dessen Dynamik durch eine beliebige Schrödinger-Gleichung mit einem zeitunabhängigen Hamilton-Operator gegeben sei. Bestimmen Sie den Operator \hat{T}_τ der Zeitverschiebungen $\hat{T}_\tau \psi(t, \mathbf{r}) \equiv \psi(t - \tau, \mathbf{r})$.

30. Aufgabe: Kronig-Penney-Modell (2+2+2+2 Punkte)

Ein Teilchen bewege sich in dem eindimensionalen Potential $V(x) = w \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na)$ mit Periodizität a . Das sogenannte Bloch-Theorem (das hier nicht bewiesen werden soll) besagt, daß die Lösungen der stationären Schrödinger-Gleichung zur Energie E so gewählt werden können, daß sie

$$\psi(x + a) = e^{ika} \psi(x)$$

mit einem Bloch-Wellenvektor k erfüllen.

- (a) Erstellen Sie einen allgemeinen Ansatz für die Wellenfunktion zur Energie $E > 0$ als Linearkombination ebener Wellen in den Bereichen $-a < x < 0$ und $0 < x < a$. Welche Gleichungen folgen für die Koeffizienten der Linearkombination aus den Anschlußbedingungen bei $x = 0$?
- (b) Bestimmen Sie aus dem Bloch-Theorem zwei weitere Gleichungen für die Koeffizienten.

- (c) Zeigen Sie, daß aus der Lösbarkeit des linearen Gleichungssystems für die Koeffizienten folgt, daß E und k über

$$\cos(qa) + \tilde{w} \frac{\sin(qa)}{qa} = \cos(ka)$$

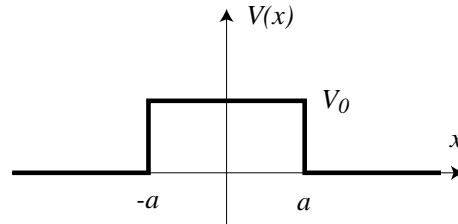
mit $q \equiv \sqrt{2mE}/\hbar$ und einem zu bestimmenden \tilde{w} in Beziehung stehen.

- (d) Bestimmen Sie die Lösungen dieser Gleichung graphisch und skizzieren Sie $E(k)$ qualitativ.

Bemerkung: für freie Teilchen ($w = 0$) besagt das Bloch-Theorem gerade, daß die Lösungen der stationären Schrödinger-Gleichung als ebene Wellen dargestellt werden können.

*31. Aufgabe: Potentialschwelle (0 Punkte)

Ein Teilchen bewege sich mit einer Energie $E > V_0$ in einem eindimensionalen Potential mit einer Schwelle der Höhe V_0 , siehe Skizze. Bestimmen Sie die Transmissionsamplitude T .



32. Aufgabe: Flacher Potentialtopf in zwei Dimensionen (3+3 Punkte)

Gegeben ist ein zweidimensionaler rotationssymmetrischer Potentialtopf mit $V(\mathbf{r}) = -V_0 \theta(a - |\mathbf{r}|)$, $V_0 > 0$. Die Radialkomponente des Laplaceoperators ist in zwei Dimensionen $\Delta_r = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \frac{\partial}{\partial r})$. Suchen Sie nach einem gebundenen Zustand mit Drehimpuls $l = 0$.

a) Nehmen Sie dazu an, daß im Inneren des Topfes die Wellenfunktion nahezu konstant ist (wann ist diese Näherung gut?) und daß $|E| \ll V_0$. Berechnen Sie unter Verwendung der radialen Schrödingergleichung $\int_0^a r \Delta_r R(r) dr$ und gewinnen Sie daraus eine Bedingung für die logarithmische Ableitung der Radialwellenfunktion am Topfrand.

b) Lösen Sie die Radialgleichung in der Form $r^2 \Delta_r R = r^2 \kappa^2 R$ für $\kappa a < \kappa r \ll 1$ (Tip: nach der Substitution der Ortsvariableneiner $s = \kappa r$ kann einer der Terme weggelassen werden) und berechnen Sie unter Verwendung des Ergebnisses für die logarithmische Ableitung aus a) die Bindungsenergie.

33. Aufgabe: Dreidimensionaler Potentialtopf (3 Punkte)

Gegeben ist nun ein dreidimensionaler Potentialtopf mit $V(\mathbf{r}) = -V_0 \theta(a - |\mathbf{r}|)$, $V_0 > 0$. Lösen Sie die Schrödingergleichung für Drehimpuls $l = 0$ für gebundene Zustände in den Bereichen $0 < r < a$ und $r > a$. Gewinnen Sie aus den Anschlußbedingungen bei $r = a$ eine Bestimmungsgleichung für die Energie gebundener Zustände. Lösen Sie die Gleichung graphisch und suchen Sie nach einer Bedingung für die Existenz eines gebundenen Zustandes.

34. Aufgabe: Harmonischer Oszillator in drei Dimensionen (3+3+3 Punkte)

Ein dreidimensionaler harmonischer Oszillator wird durch das Potential $V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2 + z^2)$ beschrieben.

a) Lösen Sie das Problem durch den Produktansatz $\Psi(\mathbf{r}) = \varphi_x(x)\varphi_y(y)\varphi_z(z)$, verwenden Sie dabei Ihr Wissen über den eindimensionalen harmonischen Oszillator. Berechnen Sie die Energieeigenwerte.

b) Stellen Sie die Radialwellengleichung unter Verwendung der Substitution $R(r) = u(r)/r$ auf. Lösen Sie sie für große r .

c) Setzen Sie die Substitution $u_{kl}(r) = y_{kl}(r) \exp(-r^2/2x_0^2)$ in die Radialgleichung ein und machen Sie den Ansatz $y_{kl}(r) = r^s \sum_{q=0}^{\infty} a_q r^q$. Bestimmen Sie s aus dem Verschwinden des konstanten Terms proportional r^s in der Radialgleichung. Welche Bedingung muß die Energie erfüllen, wenn die Potenzreihe für ein endliches q abbrechen soll? Vergleichen Sie mit dem Ergebnis aus a).

35. Aufgabe: Impulsdarstellung (2+2 Punkte)

Zeigen Sie für beliebige ket-Vektoren $|\alpha\rangle$ und $|\beta\rangle$

$$(i) \langle p|\hat{x}|\alpha\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\langle p|\alpha\rangle,$$

$$(ii) \langle\beta|\hat{x}|\alpha\rangle = \int dp \psi_{\beta}^*(p)i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\psi_{\alpha}(p).$$

Hierbei sind $\psi_{\alpha}(p) = \langle p|\alpha\rangle$ und $\psi_{\beta}(p) = \langle p|\beta\rangle$ eindimensionale Wellenfunktionen in der Impulsdarstellung und \hat{x} ist der Ortsoperator.

36. Aufgabe: Zweiniveausystem (4 Punkte)

Der Hamiltonoperator für ein Zweiniveausystem sei gegeben durch

$$\hat{H} = a(|1\rangle\langle 1| - |2\rangle\langle 2| + |1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|),$$

worin $a > 0$ die Dimension einer Energie hat. Berechnen Sie die Energieeigenwerte und die Eigenzustände als Linearkombinationen in der Orthonormalbasis $\{|1\rangle, |2\rangle\}$.

37. Aufgabe: Summenregel (4 Punkte)

Der Hamiltonoperator eines Teilchens in einer Dimension $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2M} + V(\hat{x})$ habe die Eigenzustände $|n\rangle$ mit zugehörigen Energieeigenwerten E_n . Zeigen Sie, daß die sogenannten Oszillatorstärken f_{nm} mit

$$f_{nm} \equiv \frac{2M}{\hbar^2}(E_m - E_n)|\langle n|\hat{x}|m\rangle|^2$$

der Summenregel $\sum_m f_{nm} = 1$ genügen. Betrachten Sie dazu die Kommutatoren $[\hat{x}, \hat{p}]$ und $[\hat{x}, \hat{H}]$. Nutzen Sie die Vollständigkeit der Zustände $|n\rangle$ aus.

38. Aufgabe: Drehimpulsbasis (4 Punkte)

Wie in der Vorlesung gezeigt, kann die gemeinsame Basis von $\hat{\mathbf{L}}^2$ und \hat{l}_z in Polarkoordinaten durch die Kugelfunktionen $\langle\theta, \varphi|l, m\rangle = Y_{lm}(\theta, \varphi)$

dargestellt werden. Berechnen Sie in diesen Koordinaten die Zustände $|l = 2, m = 1\rangle$ und $|l = 2, m = 2\rangle$ durch explizite Anwendung von \hat{L}_+ auf den Zustand $|l = 2, m = 0\rangle$.

39. Aufgabe: Schwarzsche Ungleichung (2 Punkte)

Zeigen Sie, daß

$$|\langle a|b\rangle|^2 \leq \langle a|a\rangle\langle b|b\rangle$$

für beliebige Zustände a und b gilt. Gehen Sie dazu von der Positivität von $I \equiv \langle c|c\rangle$ mit $|c\rangle \equiv |a\rangle + \lambda|b\rangle$ für beliebiges komplexes λ aus.

40. Aufgabe: Heisenbergbild (3+3 Punkte)

Gegeben sei ein harmonischer Oszillator mit Masse m und Frequenz ω_0 .

a) Stellen Sie die Heisenbergschen Bewegungsgleichungen für Orts- und Impulsoperator auf. Lösen Sie die Gleichungen durch eine Transformation auf Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren.

b) Im Heisenbergbild ist die Zeitabhängigkeit eines Operators durch

$$\hat{A}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{A}(0)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$$

gegeben. Berechnen Sie daraus unter Verwendung der Baker-Hausdorff Formel (Aufgabe 10) die Zeitabhängigkeit des Ortsoperators.

41. Aufgabe: Dichteoperator (3 Punkte)

Leiten Sie aus der Definition

$$\hat{\rho}(t) = \sum_i w_i |\alpha^{(i)}, t\rangle\langle\alpha^{(i)}, t|$$

die Bewegungsgleichung für den Dichteoperator ab. Tip: Schrödingergleichung verwenden.

42. Aufgabe: Elektronen im Magnetfeld (2+2+1+1+1+1 Punkte)

a) Stellen Sie den Hamiltonoperator für ein Elektron (Ladung $q = -e$) auf, das sich in einem Vektorpotential $\mathbf{A} = -\frac{1}{2}\mathbf{r} \times \mathbf{e}_z B$ bewegt. Welches Magnetfeld wird durch das Vektorpotential beschrieben?

b) Betrachten Sie die zeitunabhängige Schrödingergleichung $\hat{H}\psi = E\psi$. Machen Sie einen Produktansatz $\psi(x, y, z) = f(z)\varphi(x, y)$ und bestimmen Sie $f(z)$ sowie die zweidimensionale Schrödingergleichung $\hat{H}_\perp\varphi = \tilde{E}\varphi$.

c) Transformieren Sie den Hamiltonoperator \hat{H}_\perp auf komplexe Koordinaten $z = x + iy$, $\bar{z} = x - iy$.

d) Zeigen Sie, daß man den Hamiltonoperator

$$\hat{H}_\perp = \frac{2}{m} \left[-\hbar^2 \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \bar{z}} + \hbar \frac{eB}{4c} \left(z \frac{\partial}{\partial z} - \bar{z} \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \right) + \left(\frac{eB}{4c} \right)^2 z \bar{z} \right]$$

durch Einführung des Operators

$$\hat{a}_d = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{\bar{z}}{2l} + 2l \frac{\partial}{\partial z} \right]$$

in die Form $\hat{H}_\perp = \hbar\omega_c(\hat{a}_d^\dagger\hat{a}_d + \frac{1}{2})$ bringen kann. Die Konstante $l = \sqrt{\hbar c/eB}$ heißt magnetische Länge, $\omega_c = eB/mc$ ist die Zyklotronfrequenz. Beachten Sie $(\frac{\partial}{\partial \bar{z}})^\dagger = -\frac{\partial}{\partial z}$.

e) Weisen Sie durch Berechnung von $[\hat{a}_d, \hat{a}_d^\dagger]$ nach, daß es sich bei $\hat{a}_d^\dagger, \hat{a}_d$ um Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren handelt. Die zu Energieeigenwerten \tilde{E}_n gehörigen entarteten Eigenzustände heißen Landauniveaus.

f) Die Entartung eines Landauniveaus kann durch Einführung des Operators

$$\hat{a}_g = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{z}{2l} + 2l \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \right]$$

berechnet werden. Zeigen Sie, daß $\hat{a}_g, \hat{a}_g^\dagger$ Vernichtungs- und Erzeugungsoperatoren sind, die mit $\hat{a}_d, \hat{a}_d^\dagger$ kommutieren. Berechnen Sie mit $\langle \hat{\mathbf{X}} \rangle = 0$ und

$$\hat{\mathbf{X}}^2 = l^2(2\hat{a}_g^\dagger\hat{a}_g + 1) ,$$

wieviele Zustände in einem Kreis mit Radius $R \gg l$ Platz haben. Der Operator $\hat{\mathbf{X}}$ beschreibt das Zentrum klassischer Trajektorien. Tip: die Bedingung für den Zustand am Rand des Kreises ist $X^2 = R^2$.

43. Aufgabe: Flußquantum (2+2 Punkte)

Ein Teilchen (Ladung $-e$) bewege sich im dreidimensionalen Raum, in dessen Zentrum sich parallel zur z -Achse eine undurchdringliche Röhre mit Radius a befindet. ψ_0 sei eine Lösung der stationären Schrödingergleichung außerhalb der Röhre in Abwesenheit eines Magnetfeldes.

a) Nun wird im für das Teilchen unzugänglichen Inneren der Röhre ein Magnetfeld $B\mathbf{e}_z$ angelegt. Verifizieren Sie, daß die beschriebene Feldverteilung aus dem Vektorpotential

$$\mathbf{A}(r, \varphi, z) = \begin{cases} \frac{1}{2}Br \mathbf{e}_\varphi, & r < a \\ (a^2 B)/(2r) \mathbf{e}_\varphi, & r > a \end{cases}$$

abgeleitet werden kann.

b) Zeigen Sie, daß die Wellenfunktion $\psi = e^{-\frac{ie}{\hbar c}\chi}\psi_0$ mit

$$\chi(\mathbf{x}) = \int_{\mathbf{x}_0}^{\mathbf{x}} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s}$$

die Schrödingergleichung mit dem Vektorpotential aus Aufgabe a) löst. Welche Bedingung muß der Fluß Ba^2 erfüllen, damit die Wellenfunktion ψ eindeutig ist?

44. Aufgabe: zum fraktionalen Quanten-Hall Effekt (2+2+1+1+1 Punkte)

Zur Motivation: wenn Sie Teilaufgabe e) gelöst haben, verstehen Sie im Prinzip, für welche Entdeckung dieses Jahr der Nobelpreis für Physik verliehen wurde.

Wir betrachten Elektronen (Ladung $-e$), die sich unter dem Einfluß eines räumlich konstanten Magnetfeldes $-B\mathbf{e}_z$ in der xy -Ebene bewegen. Nach der Koordinatentransformation $z = x + iy$, $\bar{z} = x - iy$ ist der Hamiltonoperator durch

$$\hat{H} = \frac{2}{m} \left[-\hbar^2 \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \bar{z}} - \hbar \frac{eB}{4c} \left(z \frac{\partial}{\partial z} - \bar{z} \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \right) + \left(\frac{eB}{4c} \right)^2 z \bar{z} \right]$$

gegeben (vgl. Aufgabe 42).

a) Machen Sie einen Produktansatz $\psi(z, \bar{z}) = f(z, \bar{z}) \exp\left(-\frac{z\bar{z}}{4l^2}\right)$, $l = \sqrt{\hbar c/eB}$, und stellen Sie die stationäre Schrödingergleichung für f auf. Überzeugen Sie sich davon, daß die zum niedrigsten Eigenwert $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_c$, $\omega_c = eB/(mc)$ gehörigen Wellenfunktionen die Bedingung $\frac{\partial}{\partial \bar{z}} f = 0$ erfüllen und daher Polynome in z sind.

b) Berechnen Sie die Komponente des Drehimpulsoperators senkrecht zur x - y -Ebene in den komplexen Koordinaten z, \bar{z} und beweisen Sie $[\hat{H}, \hat{l}_z] = 0$. Zeigen Sie, daß die Funktionen $\varphi_m(z) = z^m \exp\left(-\frac{z\bar{z}}{4l^2}\right)$ Eigenfunktionen von \hat{l}_z sind und berechnen Sie ihre Eigenwerte.

c) Wo nehmen die Funktionen $|\varphi_m|^2$ ihren maximalen Wert an, wie groß ist die Teilchenzahldichte, wenn alle Zustände mit $m < m_{\max}$ besetzt sind? Vergleichen Sie mit B/Φ_0 , wobei $\Phi_0 = \frac{ch}{e}$ das in Aufgabe 43 berechnete Flußquantum ist.

d) In einem Gedankenexperiment wird nun ein Flußquant Φ_0 im Ursprung angebracht. Wie transformiert sich ein Zustand φ_m ? (siehe dazu Aufgabe 43).

Da auch der neue Eigenzustand eine analytische Funktion sein muß, ist er durch $\tilde{\varphi}_m = \varphi_{m+1}$ gegeben. Das Einführen eines Flußquants entspricht daher dem Verschieben aller Zustände in den äußeren Nachbarzustand.

e) Das unterste Landau-Niveau soll nun zu einem Teil $\nu = \frac{1}{k}$, $k = 3, 5, 7, \dots$ mit Elektronen gefüllt sein. Wegen der Coulomb-Abstoßung sind die Elektronen bestrebt, sich räumlich möglichst weit voneinander zu trennen, zwischen zwei besetzten Zuständen befinden sich daher immer $k - 1$ unbesetzte. Die Wellenfunktion $\Psi_N(z_1, \dots, z_N)$ eines Systems von N Elektronen hängt von allen Teilchenkoordinaten ab und muß wegen des Pauli-Prinzips antisymmetrisch unter Vertauschung zweier beliebiger Teilchenorte sein. R. Laughlin hat 1983 vorgeschlagen, die exakte Wellenfunktion durch ein antisymmetrisiertes Produkt aus Zuständen mit Drehimpuls $m = 0, k, 2k, \dots, Nk$ anzunähern,

$$\Psi_N(z_1, \dots, z_N) = \frac{1}{\mathcal{N}} \left| \begin{array}{ccc} 1 & \dots & 1 \\ z_1^k & & z_N^k \\ \cdot & & \cdot \\ \cdot & & \cdot \\ z_1^{k(N-1)} & \dots & z_N^{k(N-1)} \end{array} \right| \exp\left(-\frac{1}{4l^2} \sum_{i=1}^N |z_i|^2\right) .$$

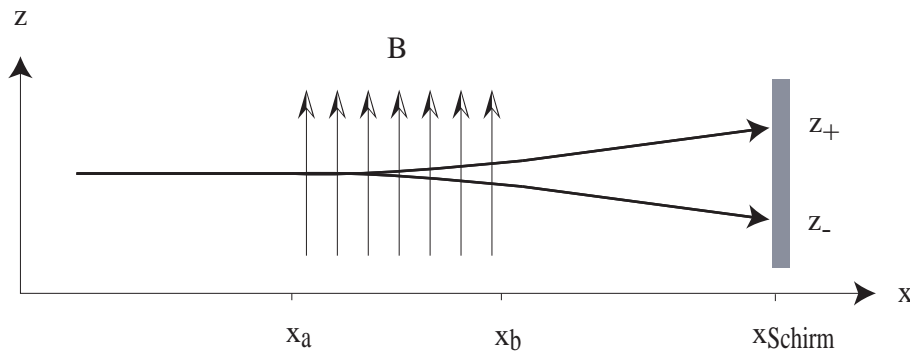
Ψ_N beschreibt den Grundzustand des Systems, der niedrigste angeregte Zustand kann durch Einschieben eines Flußquants erzeugt werden. Durch das Einschieben eines Flußquants bei $z = 0$ werden alle besetzten Zustände um eins nach außen geschoben. Berechnen Sie unter der Annahme einer konstanten Ladungsdichte $\rho = -\frac{eB}{k\Phi_0}$ die resultierende Gesamtladung des Systems.

Bemerkung: Der quantisierte Hall-Widerstand $R_H = (2k + 1)\frac{h}{e^2}$ des beschriebenen Zustands beruht auf der Tatsache, daß sich die Elektronen wegen der Coulombabstoßung nicht zusammenpressen lassen, sie bilden eine inkompressible Flüssigkeit.

45. Aufgabe: Stern-Gerlach Experiment (3 Punkte)

Ein Strahl von Elektronen (Ladung e , Masse m , Spin $s = 1/2$) komme mit einer Geschwindigkeit $\mathbf{v} = (v, 0, 0)$ bei $z = 0$ aus negativer x -Richtung (siehe Skizze). Im Bereich $x_a < x < x_b$ trete er durch ein inhomogenes Magnetfeld $\mathbf{B} = (0, 0, \gamma z)$ mit einer Konstanten γ , bevor er bei $x = x_{\text{Schirm}}$ auf einen Schirm treffe. Schätzen Sie die Aufspaltung $z_+ - z_-$ des Strahls für kleine γ in quasiklassischer Näherung ab, indem Sie auf die Änderung der Geschwindigkeit beim Durchflug durchs Magnetfeld berechnen.

Wie groß ist die Aufspaltung, wenn die kinetische Energie anfangs $\frac{1}{2}mv^2 = 100\text{eV}$ beträgt, $\gamma = 1\text{Tesla/cm}$, $x_b - x_a = 1\text{cm}$ und $x_{\text{Schirm}} - x_b = 100\text{cm}$?



46. Aufgabe: Elektron mit Spin im Magnetfeld (3 Punkte)

Betrachten Sie ein freies Elektron (Ladung e) mit Spin $S = 1/2$, das sich in der xy -Ebene in Gegenwart eines homogenen Magnetfeldes $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$ bewege. Somit lautet sein Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\hat{\mathbf{x}}, t) \right)^2 \underline{\underline{1}} + \frac{g}{2} \frac{e\hbar}{2mc} B \sigma_z$$

mit dem gyromagnetischen Faktor $g = 2.0023 \dots > 2$.

Wie lauten die Energieeigenwerte des Elektrons (verwenden Sie das Resultat für Teilchen ohne Spin, siehe Vorlesung oder Aufgabe 42)?

Wie groß ist die Entartung (Anzahl der Zustände pro Fläche) der Energieniveaus?

47. Aufgabe: Verstimmtter harmonischer Oszillator (1+4+2 Punkte)

Betrachten Sie den harmonischen Oszillator in einer Dimension

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2.$$

Nehmen Sie an, die Federkonstante $k = m\omega^2$ werde leicht geändert. Dies kann durch Addition des zusätzlichen Potentials

$$\hat{V} = \epsilon \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2, \quad \epsilon \ll 1$$

beschrieben werden.

- Bestimmen Sie die exakten Ausdrücke für die Energie und die Wellenfunktion des Grundzustands des neuen Hamilton-Operators $\hat{H}_0 + \hat{V}$.
- Verwenden Sie die zeitunabhängige Störungstheorie zur Berechnung des neuen Grundzustands bis zur Ordnung ϵ und der neuen Grundzustandsenergie bis zur Ordnung ϵ^2 . Gehen Sie dabei von den Eigenvektoren und Eigenwerten von \hat{H}_0 aus.
- Vergleichen Sie die Ergebnisse aus (b) mit der ϵ -Entwicklung der Ergebnisse aus (a).

Hinweis: Die auftretenden Matrixelemente lassen sich am einfachsten berechnen, wenn die Ortskoordinate auf \hat{a} und \hat{a}^\dagger transformiert wird.

48. Aufgabe: Anharmonischer Oszillator (4 Punkte)

Für den eindimensionalen *anharmonischen* Oszillator, der durch

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 + c\hat{x}^3 + d\hat{x}^4$$

beschrieben werde, berechne man die Energieeigenwerte in erster Ordnung Störungstheorie in den kleinen Größen c und d . Berücksichtigen Sie die zweite Ordnung Störungstheorie bezüglich des Beitrags $c\hat{x}^3$.

49. Aufgabe: Stark-Effekt (5 Punkte)

Als Beispiel für die Störungsrechnung mit Entartung sei der Effekt eines elektrischen Feldes $\mathbf{E} = (0, 0, E)$ auf ein Wasserstoffatom untersucht. Da der Grundzustand $n = 1$ nicht entartet ist (der Spin des Elektrons sei außer acht gelassen), betrachten wir hier die Niveaus $n = 2$ mit vierfacher Entartung. Deren Wellenfunktionen ψ_{nlm} lauten in Kugelkoordinaten bekanntermaßen

$$\begin{aligned} \psi_{200}(r, \theta, \phi) &= \frac{1 - r/(2a_0)}{\sqrt{2a_0^3}} e^{-r/(2a_0)} Y_{00}(\theta, \phi) \\ \psi_{21m}(r, \theta, \phi) &= \frac{r/(2a_0)}{\sqrt{6a_0^3}} e^{-r/(2a_0)} Y_{1m}(\theta, \phi), \quad m = 0, \pm 1 \end{aligned}$$

mit dem Bohrschen Radius a_0 .

Erstellen Sie den Operator der Störung durch das elektrische Feld und berechnen Sie die Energieänderungen der Zustände $n = 2$ in linearer Ordnung in E .

Hinweis: $z = \sqrt{4\pi/3} r Y_{10}(\theta, \phi)$. Verwenden Sie bei der Berechnung der erforderlichen Matrixelemente die Symmetrieeigenschaften und Orthogonalität der Kugelfunktionen.

50. Aufgabe: Spin-Präzession (3 Punkte)

Der Hamiltonoperator eines Spins ($s = 1/2$) im zeitlich konstanten Magnetfeld \mathbf{B} sei

$$\hat{H} = -\gamma \frac{\hbar}{2} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{B}.$$

Sei $\mathbf{P}(t) \equiv \text{Sp}[\hat{\boldsymbol{\sigma}} \hat{\rho}(t)]$ die Spinpolarisation zu gegebener Dichtematrix $\hat{\rho}(t)$. Zeigen Sie, daß $\mathbf{P}(t)$ der klassischen Bewegungsgleichung

$$\frac{d}{dt} \mathbf{P} = -\gamma \mathbf{B} \times \mathbf{P}$$

gehört.

51. Aufgabe: Spin im zeitabhängigen Magnetfeld (5+2 Punkte)

Ein quantenmechanischer Spin ($s = 1/2$) mit magnetischem Moment μ befinde sich in einem zeitlich veränderlichen Magnetfeld

$$\mathbf{B}(t) = B_{\parallel} \mathbf{e}_z + B_{\perp} [\cos(\omega_0 t) \mathbf{e}_x + \sin(\omega_0 t) \mathbf{e}_y].$$

Die Dynamik des Spins sei durch den Hamilton-Operator $\hat{H}(t) = -\mu \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{B}(t)$ bestimmt.

- (a) Lösen Sie die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung mit Hilfe des Ansatzes

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\tilde{\Psi}(t)\rangle, \quad \hat{U}(t) \equiv \exp(-\frac{i}{2} \omega_0 t \hat{\sigma}_z), \quad |\Psi(t=0)\rangle = |+\rangle.$$

Interpretieren Sie diesen Ansatz.

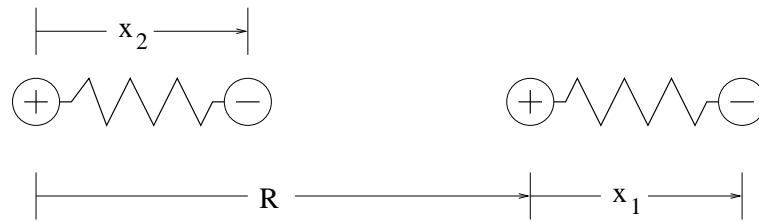
- (b) Mit welcher Wahrscheinlichkeit $P(t)$ befindet sich der Spin zur Zeit t im Zustand $|+\rangle$, wenn er sich zur Zeit $t = 0$ im Zustand $|+\rangle$ befunden hat? Diskutieren Sie die Abhängigkeit der Wahrscheinlichkeit $P(t)$ von ω_0 .

Hinweis: $|\pm\rangle$ sind die Eigenzustände zu $\hat{\sigma}_z$ mit den Eigenwerten ± 1 .

52. Aufgabe: Van der Waals-Wechselwirkung (4 Punkte)

Betrachten Sie zwei identische Edelgasatome, die sich im Abstand R voneinander befinden. In dieser Aufgabe soll die Wechselwirkung zwischen den Atomen untersucht werden.

Als Modell sollen zwei identische harmonische Oszillatoren 1 und 2 mit Frequenz ω_0 dienen, die durch den Abstand R voneinander getrennt sind. Die Frequenz ω_0 kann mit der stärksten optischen Absorptionslinie der isolierten Atome identifiziert werden.



Ihr Hamiltonoperator ist

$$H_0 = \frac{1}{2m} \hat{p}_1^2 + \frac{1}{2} m \omega_0^2 \hat{x}_1^2 + \frac{1}{2m} \hat{p}_2^2 + \frac{1}{2} m \omega_0^2 \hat{x}_2^2 .$$

Jeder Oszillator trage Ladungen $\pm e$, die Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Oszillatoren werde durch

$$H_1 = \frac{e^2}{|R|} + \frac{e^2}{|R + x_1 - x_2|} - \frac{e^2}{|R + x_1|} - \frac{e^2}{|R - x_2|}$$

beschrieben. Entwickeln Sie für $|x_1|, |x_2| \ll R$ die Wechselwirkung zwischen den Oszillatoren in niedrigster nicht verschwindender Ordnung und berechnen Sie die resultierende Verschiebung der Grundzustandsenergie.

Tip: Sie können ausnützen, daß der genäherte H_1 quadratisch in x_1, x_2 ist.

53. Aufgabe: zeitabhängige Störungsrechnung (3+1 Punkte)

Ein eindimensionaler harmonischer Oszillator befinde sich für Zeiten $t < 0$ in seinem Grundzustand. Für $t > 0$ ist er einer zeitabhängigen, jedoch räumlich konstanten Kraft (nicht Potential!) in x -Richtung ausgesetzt,

$$F(t) = F_0 e^{-t/\tau} .$$

- Berechnen Sie die Übergangswahrscheinlichkeit zum ersten angeregten Zustand, indem Sie zeitabhängige Störungstheorie erster Ordnung anwenden. Zeigen Sie, daß der Limes $t \rightarrow \infty$ Ihres Ausdrucks zeitunabhängig ist. Ist das vernünftig oder überraschend?
- Kann man höher angeregte Zustände beobachten?

54. Aufgabe: Addition zweier Drehimpulse $l = 1$ (3+3+3 Punkte)

Addieren Sie die zwei Drehimpulse $l_1 = 1$ und $l_2 = 1$, d.h. errechnen Sie die Eigenfunktionen und Eigenwerte von $\hat{\mathbf{L}}^2 = (\hat{\mathbf{l}}_1 + \hat{\mathbf{l}}_2)^2$. Diese Eigenfunktionen sind Linearkombinationen der 9 Funktionen

$$Y_{1m}(\theta_1, \varphi_1) \cdot Y_{1m'}(\theta_2, \varphi_2) = u_m v_{m'} \quad \text{mit} \quad m, m' = 1, 0, -1 .$$

- a) Stellen Sie die (9×9) -Matrix des Operators $\hat{\mathbf{L}}^2$ bezüglich der Basis der $u_m v_{m'}$ auf.
- b) Berechnen Sie die Eigenwerte von $\hat{\mathbf{L}}^2$ durch Diagonalisieren der Matrix.
- c) Berechnen Sie die zugehörigen Eigenfunktionen.

Rechenhilfe:

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = (\hat{\mathbf{l}}_1 + \hat{\mathbf{l}}_2)^2 = \hat{\mathbf{l}}_1^2 + \hat{\mathbf{l}}_2^2 + 2 \hat{\mathbf{l}}_1 \hat{\mathbf{l}}_2 = \hat{\mathbf{l}}_1^2 + \hat{\mathbf{l}}_2^2 + 2\hat{l}_{z1}\hat{l}_{z2} + \hat{l}_{+1}\hat{l}_{-2} + \hat{l}_{-1}\hat{l}_{+2}$$

$$\begin{aligned} \text{mit } \hat{l}_+ |lm\rangle &= (\hat{l}_x + i\hat{l}_y) |lm\rangle = \hbar \sqrt{(l-m)(l+m+1)} |l, m+1\rangle \\ \hat{l}_- |lm\rangle &= (\hat{l}_x - i\hat{l}_y) |lm\rangle = \hbar \sqrt{(l+m)(l-m+1)} |l, m-1\rangle \end{aligned}$$

Durch geeignete Zeilen- und Spaltenvertauschung erhält die Matrix folgende Blockform:

