

IV Quantenmechanik

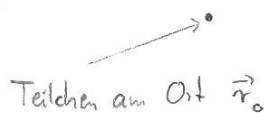
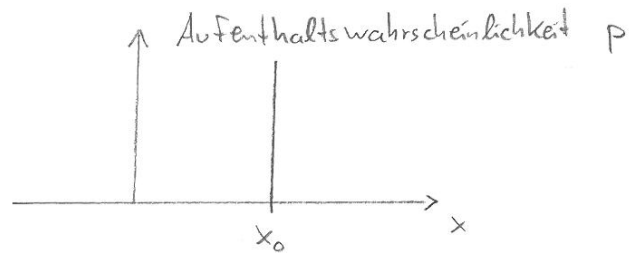
IV.1 Einleitung

bis jetzt: \rightarrow klassische Mechanik

Beschreibung des Systems durch die Bahnen einzelner

Teilchen: $\vec{r}_i(t)$

Teilchen am Ort \vec{r}_0

$$p(\vec{r}) = \delta(\vec{r} - \vec{r}_0)$$

\rightarrow Elektrodynamik

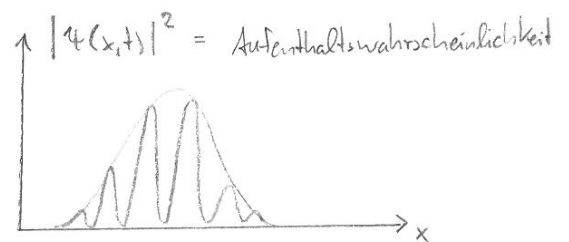
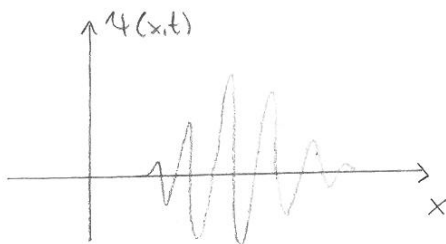
elektrisches und magnetisches Feld $\vec{E}(\vec{r}, t)$, $\vec{B}(\vec{r}, t)$

elektromagnetische Wellen



was ist die grundlegende Größe in der Quantenmechanik?

Wellenfunktion $\psi(\vec{r}, t)$ für ein Teilchen



Teilchen \rightarrow

hat sowohl Wellen- als auch Teilcheneigenschaften

„Welle-Teilchen-Dualismus“

⇒ Quantenmechanik zur Beschreibung von „kleinen“ Teilchen
(Elektronen, Atome, Moleküle) ersetzt die Beschreibung durch die
klassische Mechanik

warum brauchen wir überhaupt eine Quantenmechanik

ander formuliert: wann versagt die klassische Mechanik?

Beispiele:

1, Welleneigenschaften von Teilchen

Beugung von Materiestrahlen (z.B. Elektronen) an einem Gitter
mit kleiner Gitterkonstante a (Kristallgitter)

• • •
: : :
• • • $\updownarrow a$

⇒ Interferenzerscheinungen wie in der Optik für sichtbares Licht

Bestimmung der Wellenlänge ergibt empirisch

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}$$

p : Impuls des Teilchens

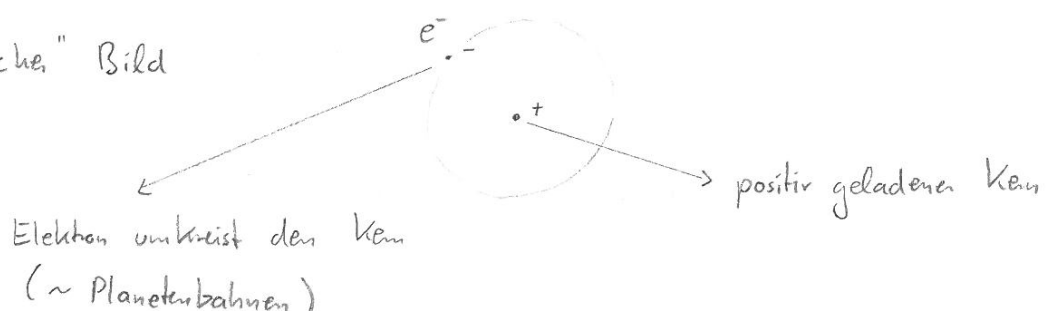
$$\hbar = 1,0546 \cdot 10^{-34} \text{ J}$$

Plancksches Wirkungsquantum

Interferenz in der klass. Mechanik nicht möglich!

2, Atomspalten

„klassisches“ Bild



aber: beschleunigte Ladungen strahlen Energie in Form von elektromagnetischen Wellen ab

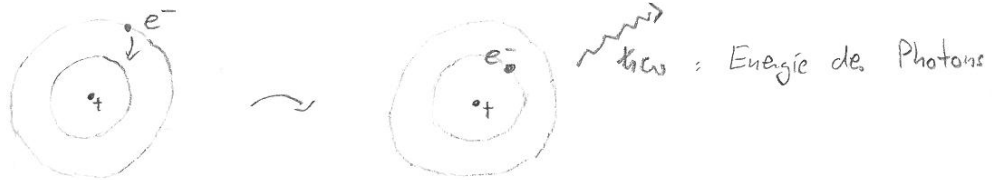
(Resultat der Elektrodynamik)

- ⇒
- e^- würde in den Kern stürzen
 - Abstrahlung em. Wellen beliebige Energie
 ~ kontinuierliches Spektrum

experimentell:

- Atome sind „stabil“ (e^- stürzt nicht in den Kern)
- ⇒ Vorstellung des e^- als Punktladung auf Kreisbahn nicht haltbar
- Atome können Energie in Form von em. Wellen abstrahlen
aber: diskretes Spektrum

in einem klassischen Bild würde das bedeuten:



- nur bestimmte Kreisbahnen sind möglich
 = Bohrsche Quantisierungsbedingung (1913)

Beispiel: Emissionslinien des Wasserstoffatoms

$$h\nu = \text{const} \cdot \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad n, m \in \mathbb{N}$$

aus 1, und 2, folgt also

- Klass. Mechanik zur Beschreibung "kleiner" Teilchen unzureichend
- Hinweise auf Struktur der neuen Theorie
 - muß wellenartige Zustände ermöglichen
 - muß diskrete Zustände ergeben

⇒ bekannt aus der Mathematik: Differentialgleichungen mit Randbedingungen für die Lösungen

Schrödinger-Gleichung für freie Teilchen

Lösungen dieser SG sollen von folgender Form sein

$$\psi(\vec{r}, t) = C e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad (\text{vgl. em. Welle})$$

$\psi(\vec{r}, t)$: skalares Feld, "Wellenfunktion"

$$|\vec{k}| = k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad \lambda: \text{Wellenlänge}$$

siehe XIII-2

$$\text{mit } \lambda = \frac{2\pi \hbar}{p}$$

$$\Rightarrow k = \frac{p}{\hbar}, \quad \vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$$

$$\vec{p} = \hbar \vec{k}$$

Interpretation von ω :

$$\hbar \omega = E : \text{Energie des Teilchens}$$

↪ analog zu Planck: Quantisierung der Energie em. Wellen in der Hohlraumstrahlung

Behauptung:

dieses $\psi(\vec{r}, t)$ ist die Lösung der zeitabhängigen SG für freie Teilchen:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t)}$$

Beweis:

$$\begin{aligned} 1. \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) &= C e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \underbrace{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{-i\omega t}}_{= -i\omega e^{-i\omega t}} \\ &= \underbrace{\hbar\omega}_{= E} \psi(\vec{r}, t) \end{aligned}$$

d.h. in der OM ist der Energie E der Operator $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$

zuzuordnen

$$\boxed{E \longrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}}$$

(mehr dazu später)

$$\begin{aligned} 2. \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t) \\ = \frac{1}{2m} (-i\hbar \vec{\nabla}) \cdot (-i\hbar \vec{\nabla}) \end{aligned}$$

bilde also:

$$\begin{aligned} -i\hbar \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, t) &= C e^{-i\omega t} \underbrace{(-i)\hbar \vec{\nabla} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}_{= i\vec{k} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}} \\ &= \underbrace{\hbar \vec{k}}_{= \vec{p}} \psi(\vec{r}, t) \end{aligned}$$

d.h. in der QM ist dem Impuls \vec{p} der Operator $-i\hbar \vec{\nabla}$
 zuzuordnen

$$\boxed{\vec{p} \longrightarrow -i\hbar \vec{\nabla}}$$

(mehr dazu später)

$$(-i\hbar \vec{\nabla}) \cdot (-i\hbar \vec{\nabla}) \psi(\vec{r}, t) =$$

$$\begin{aligned} -i\hbar \vec{\nabla} \cdot \hbar \vec{k} \psi(\vec{r}, t) &= -i\hbar^2 \vec{k} \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, t) \\ &= i\vec{k} \psi(\vec{r}, t) \\ &= \hbar^2 k^2 \psi(\vec{r}, t) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \psi(\vec{r}, t)$$

aus der SG für freie Teilchen folgt damit:

$$E \psi(\vec{r}, t) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \psi(\vec{r}, t) \quad \psi \neq 0$$

$$\Rightarrow \boxed{E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}}$$

$$\text{oder: } E = \frac{p^2}{2m}$$

$$\text{analog zu } E = T = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{p^2}{2m} \quad \text{in der klassischen Mechanik}$$

$$\begin{array}{ccc} \uparrow & & \uparrow \\ V=0 & & v = \frac{p}{m} \end{array}$$

jetzt $V \neq 0$:

→ Schrödinger-Gleichung für ein Teilchen im Potential $V(\vec{r})$

$$\text{Klassische Mechanik: } E = T + V = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r})$$

Übergang zur SG:

$$\begin{array}{rcc}
 E & = & \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}) \\
 \downarrow & & \downarrow \quad \downarrow \\
 i\hbar \frac{\partial}{\partial t} & & \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r})} \\
 & & = H \quad : \quad \text{Hamilton-Operator} \\
 & & \quad \quad \quad (\text{vgl. } H = T + V)
 \end{array}$$

und damit

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}, t)}$$

was haben wir bis jetzt:

- wellenartige Zustände ✓
- diskrete Zustände ?

↳ Lösung der SG für $V(\vec{r}) \neq 0$

IV.2 Struktur der Quantenmechanik

Operatoren:

zur Erinnerung:

$$E \longrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

$$\vec{p} \longrightarrow -i\hbar \vec{\nabla}$$

sag. Operatoren

allgemein: was macht ein Operator \hat{A}
 \rightarrow definiert über die Wirkung auf Funktionen ψ

○ $\hat{A}\psi = \varphi \rightarrow$ ebenfalls eine Funktion

z.B. $\hat{A} = \frac{\partial}{\partial t}$; $\psi = \psi(t)$

$$\Rightarrow \hat{A}\psi = \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) = \dot{\psi}(t)$$

• $\psi(t) = t^2 \Rightarrow \dot{\psi}(t) = 2t$

• $\psi(t) = e^{\alpha t} \Rightarrow \dot{\psi}(t) = \alpha e^{\alpha t}$

oder: $\hat{A} = \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial^2}{\partial x^2}, \dots$

○ auch: $\hat{A} = x$ oder allgemein $\hat{A} = f(x)$

$$\Rightarrow \hat{A}\psi = x \psi(x) = \varphi(x)$$

oder $\hat{A}\psi = f(x) \psi(x) = \varphi(x)$

lineare Operatoren:

sei $\hat{A}\psi_1 = \varphi_1$ und $\hat{A}\psi_2 = \varphi_2$; $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$

\hat{A} heißt linearer Operator falls

$$\hat{A}(c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2) = c_1 \varphi_1 + c_2 \varphi_2$$

Beispiele für lineare Operatoren:

$$\hat{A} = x, \frac{\partial}{\partial x}, \Delta, \dots$$

$$\text{z.B. } \frac{\partial}{\partial x} (c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2) = c_1 \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \psi_1}_{=\psi_1} + c_2 \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \psi_2}_{=\psi_2} \quad \checkmark$$

Rechnen mit Operatoren

gegeben: Operatoren \hat{A} und \hat{B}

i) $\hat{C} = \hat{A} + \hat{B}$ ebenfalls ein Operator

↳ Achtung! Operator-Gleichung

für \hat{C} gilt: $\hat{C}\psi = (\hat{A} + \hat{B})\psi := \hat{A}\psi + \hat{B}\psi$

ii) $\hat{C} = c\hat{A}$ mit $c \in \mathbb{C}$

$$\leadsto \hat{C}\psi = c \underbrace{\hat{A}\psi}_{=\psi} = c\psi$$

iii) $\hat{C} = \hat{A}\hat{B}$

$$\Rightarrow \hat{C}\psi = \hat{A}\hat{B}\psi := \hat{A}(\underbrace{\hat{B}\psi}_{=\psi}) = \hat{A}\psi$$

Achtung: Operator \hat{B} wirkt zuerst auf ψ ; danach wirkt \hat{A} auf $\psi = \hat{B}\psi$

d.h. Reihenfolge ist wichtig

Beispiel: $\hat{A} = x$; $\hat{B} = \frac{\partial}{\partial x}$; $\psi = \psi(x)$

$$\hat{A} \hat{B} \psi = x \underbrace{\left(\frac{\partial}{\partial x} \psi(x) \right)}_{= \psi'(x)} = x \psi'(x)$$

Reihenfolge vertauschen:

$$\hat{B} \hat{A} \psi = \frac{\partial}{\partial x} (x \psi(x)) \stackrel{\uparrow}{=} x \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) + \psi(x) = x \psi'(x) + \psi(x)$$

Produktregel

$$\Rightarrow \hat{A} \hat{B} \psi \neq \hat{B} \hat{A} \psi \quad (\text{in diesem Beispiel})$$

$\hat{A} \hat{B} \neq \hat{B} \hat{A}$ die Operatoren \hat{A} und \hat{B} kommutieren nicht

Frage: was ist der Unterschied zw. $\hat{A} \hat{B}$ und $\hat{B} \hat{A}$

$$\text{formal: } \hat{A} \hat{B} = \hat{B} \hat{A} + \hat{C}$$

$$\hat{C} = \hat{A} \hat{B} - \hat{B} \hat{A} =: \underbrace{[\hat{A}, \hat{B}]}$$

Kommutator

[siehe auch: Math. Meth. I, Kap. III.2 Matrizen]

für $\hat{A} = x$ und $\hat{B} = \frac{\partial}{\partial x}$ gilt:

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{B}] \psi(x) &= \hat{A} \hat{B} \psi(x) - \hat{B} \hat{A} \psi(x) = \\ &= x \psi'(x) - (x \psi'(x) + \psi(x)) = -\psi(x) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow [\hat{A}, \hat{B}] = -1 \quad ; \quad [x, \frac{\partial}{\partial x}] = -1$$

analog: $[x_i, \frac{\partial}{\partial x_j}] = -\delta_{ij}$

$$[f(\vec{r}), \frac{\partial}{\partial x_j}] = -\frac{\partial}{\partial x_j} f(\vec{r})$$

$$[x_i, x_j] = 0$$

(siehe Übungen)

Eigenfunktionen, Eigenwerte

[siehe auch Math. Meth. I; Kap. III.6 Eigenvektoren, Eigenwerte]

$$\text{sei } \hat{A} = \frac{\partial}{\partial x} ; \quad \psi(x) = e^{ikx}$$

$$\Rightarrow \hat{A}\psi = \frac{\partial}{\partial x} e^{ikx} = ik \underbrace{e^{ikx}}_{=\psi(x)} = a\psi \quad \text{mit } a = ik$$

Definition: ψ ist Eigenfunktion zum Operator \hat{A} mit Eigenwert a

falls

$$\boxed{\hat{A}\psi = a\psi} \quad a \in \mathbb{C}$$

noch ein Beispiel:

$$\hat{A} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} ; \quad \psi(x) = \sin kx$$

$$\Rightarrow \hat{A}\psi = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \sin kx = k \frac{\partial}{\partial x} \cos kx = \underbrace{-k^2 \sin kx}_{= \text{Eigenwert } a}$$

typische Aufgabe:

gegeben sei ein Operator \hat{A} ; geben Sie die Eigenfunktionen und die dazugehörigen Eigenwerte an.

z.B. $\hat{A} = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$; Eigenfunktionen $\psi_n(x)$ mit Eigenwerten a_n

$$\text{d.h.} \quad \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_n(x) = a_n \psi_n(x) \quad \text{Dgl!}$$

\Rightarrow Lösung des Problems durch Bestimmung der Lösungen der Dgl.

$$\text{Ansatz: } \psi_n(x) = \sin k_n x \quad [\text{allg. } e^{ikx}]$$

$$\Rightarrow -k_n^2 = a_n$$

$$\text{oder } \psi_n(x) = e^{k_n x}$$

$$\Rightarrow k_n^2 = a_n$$

Spektrum der möglichen Eigenwerte a_n

in diesem Fall: k_n beliebig

\Rightarrow jeder Wert von $a_n \in \mathbb{R}$ ist möglich \Rightarrow Kontinuierliches Spektrum

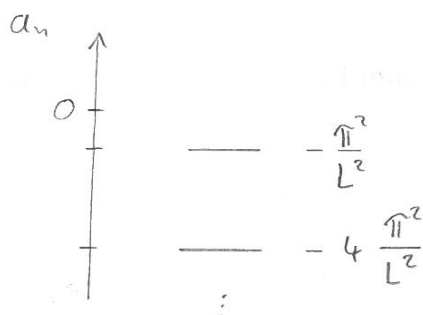
diskrete Spektrum: bei zusätzlichen Randbedingungen für die $\varphi_n(x)$

z.B. $\varphi_n(0) = 0$ & $\varphi_n(L) = 0$

$\Rightarrow e^{k_n x}$ nicht möglich

$\sin k_n 0 = 0$ immer; $\sin k_n L = 0$ für $k_n = \frac{n\pi}{L}$
 $n = 1, 2, \dots$

$\Rightarrow a_n = -k_n^2 = -\frac{\pi^2}{L^2} n^2$



Annahme: das Spektrum der a_n und die dazugehörigen φ_n seien bekannt. Wie wirkt \hat{A} auf eine beliebige Funktion $\varphi(x)$?

zunächst: Darstellung von $\varphi(x)$ mit Hilfe der Funktionen $\varphi_n(x)$

$$\varphi(x) = \sum_n \alpha_n \varphi_n(x)$$

Beispiel: $\varphi_n(x) = \sin(nx)$ $n \in \mathbb{N}$

$$\Rightarrow \varphi(x) = \sum_n \alpha_n \sin(nx)$$

[siehe Math. Meth. I, Kap VI.1 Fourier-Reihe]

Randbedingungen: hier $\psi_n(0) = \psi_n(\pi) = 0$

und es gilt
$$\alpha_n = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \psi(x) \sin(nx) dx$$

d.h. die α_n lassen sich aus $\psi(x)$ berechnen

jetzt:
$$\begin{aligned} \hat{A} \psi(x) &= \hat{A} \sum_n \alpha_n \psi_n(x) = (\hat{A} \text{ linear}) \\ &= \sum_n \alpha_n \underbrace{\hat{A} \psi_n(x)}_{= a_n \psi_n(x)} = \sum_n \alpha_n a_n \psi_n(x) \end{aligned}$$

i.A. gilt
$$\sum_n \alpha_n \psi_n(x) \neq c \cdot \sum_n \alpha_n a_n \psi_n(x)$$

d.h. $\psi(x)$ keine Eigenfunktion zu \hat{A}

Übungen für das Ende der Vorlesung

• $[f(\vec{r}), \frac{\partial}{\partial x_j}] = ?$

• hier $\psi = \psi(\vec{r})$, $\vec{r} = (x_1, x_2, x_3)$

$$[f(\vec{r}), \frac{\partial}{\partial x_j}] = f(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial x_j} - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} f(\vec{r})}$$

↑
Operator-Gleichung!

Achtung: hier die partielle Ableitung nicht ausführen; $\psi(\vec{r})$ fehlt noch

$$[f(\vec{r}), \frac{\partial}{\partial x_j}] \psi(\vec{r}) = f(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial x_j} \psi(\vec{r}) - \frac{\partial}{\partial x_j} f(\vec{r}) \psi(\vec{r}) = \dots$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j} f(\vec{r}) \psi(\vec{r}) = f(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial x_j} \psi(\vec{r}) + \psi(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial x_j} f(\vec{r})$$

$$\dots = - \left(\frac{\partial}{\partial x_j} f(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r})$$

als Operator-Gleichung: $\left[f(\vec{r}), \frac{\partial}{\partial x_j} \right] = - \left(\frac{\partial}{\partial x_j} f(\vec{r}) \right)$

↑ Bedeutung der Klammer !

Konkretes Beispiel: $f(\vec{r}) = r$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \frac{\partial}{\partial x_i} f(\vec{r}) &= \frac{\partial}{\partial x_i} r = \frac{\partial}{\partial x_i} (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)^{1/2} \\ &= \frac{x_i}{r} \end{aligned}$$

als Operator-Gleichung

$$\left[r, \frac{\partial}{\partial x_i} \right] = r \frac{\partial}{\partial x_i} - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} r}_{\neq \frac{x_i}{r} !} = - \left(\frac{\partial}{\partial x_i} r \right) = - \frac{x_i}{r}$$

IV.3 Lösung der Schrödingergleichung:
eindimensionale Probleme.

Ausgangspunkt: zeitabhängige Schrödingergleichung (SG)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}, t) \right] \bar{\psi}(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \bar{\psi}(\vec{r}, t)$$

mit $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$

speziell: zeitunabhängige Potential $V(\vec{r})$

\Rightarrow Produktansatz $\bar{\psi}(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) f(t)$

einsetzen in SG:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \underbrace{\Delta(\psi(\vec{r}) f(t))}_{= f(t) \Delta \psi(\vec{r})} + V(\vec{r}) \psi(\vec{r}) f(t) = i\hbar \underbrace{\frac{\partial}{\partial t} (\psi(\vec{r}) f(t))}_{= \psi(\vec{r}) f'(t)} \quad \Big| \cdot \frac{1}{\psi f}$$

$$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta \psi}{\psi} + V(\vec{r})}_{= E} = \underbrace{i\hbar \frac{f'(t)}{f(t)}}_{= E}$$

\Rightarrow zwei Dgl

(I) $i\hbar f'(t) = E f(t)$

(II) $\underbrace{\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right]}_{= H} \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$

\Rightarrow $\boxed{H\psi = E\psi}$

zeitunabhängige SG

Lösung von (I):

$$f(t) = e^{-i\omega t} \quad \text{mit } E = \hbar\omega$$

aber: (II) weiterhin partielle Dgl für $\psi(\vec{r})$

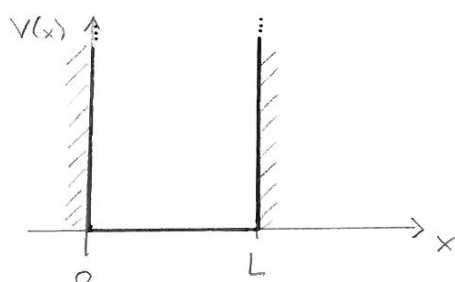
Schwierigkeit da Lösung hängt von $V(\vec{r})$ ab

im folgenden: eindimensionale Probleme

d.h. $V = V(x)$

A, unendlich hoher Potentialtopf

$$\text{sei } V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } 0 < x < L \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$



zu lösen ist

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi(x) = E \psi(x)$$

Aufteilung des Problems:

i, Innenbereich $\rightarrow V(x) = 0$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) = E \psi(x)$$

d.h. Lösungen z.B. von der Form

$$\psi(x) = A \sin kx$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) = -k^2 A \sin kx = -k^2 \psi(x)$$

und damit:

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

wie für freie Teilchen

ii, Außenbereich $\rightarrow V(x) = \infty$

es muß gelten $\psi(x) = 0$ für $x < 0$ und $x > L$

sonst: $V(x)\psi(x) \rightarrow \infty$

iii, $x = 0, x = L \rightarrow$ Randbedingungen

$\psi(x)$ muß stetig sein

hier also: $\psi(0) = 0, \psi(L) = 0$

aus den Randbedingungen folgt:

mit $\psi(x) = A \sin kx$

$$\psi(0) = 0 \quad \checkmark$$

$$\psi(L) = A \sin kL = 0 \quad \text{für} \quad kL = n\pi \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

\Rightarrow Einschränkung der möglichen Werte für k

$$k_n = \frac{n\pi}{L}$$

Spektrum der Energie-Eigenwerte

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{L^2} n^2$$

\rightarrow Quantisierung!

Eigenfunktionen

$$H \psi_n(x) = E_n \psi_n(x)$$

$$\text{mit} \quad \psi_n(x) = A_n \sin k_n x = A_n \sin\left(\frac{1}{L} n\pi x\right) \quad 0 < x < L$$

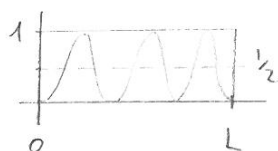
$\hookrightarrow ?$

Bestimmung der Vorfaktoren A_n

→ Postulat: $|\psi_n(x)|^2$ gibt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit (Dichte) für das Teilchen am Ort x an.

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(x)|^2 dx = 1 \quad \rightarrow \text{legt die } A_n \text{ fest}$$

$$\text{hier: } |A_n|^2 \int_0^L \left(\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \right)^2 dx = 1$$



$$|A_n|^2 \cdot \frac{L}{2} = 1$$

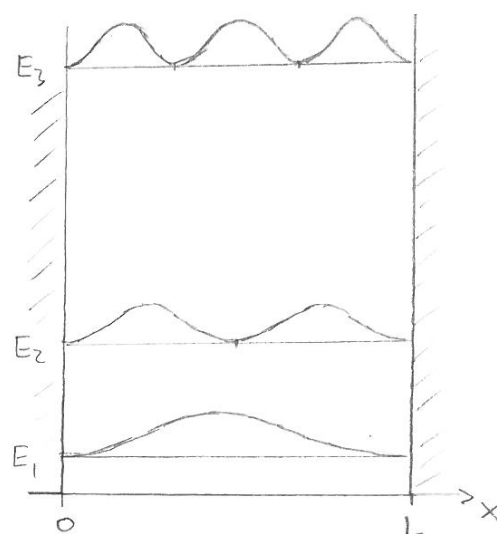
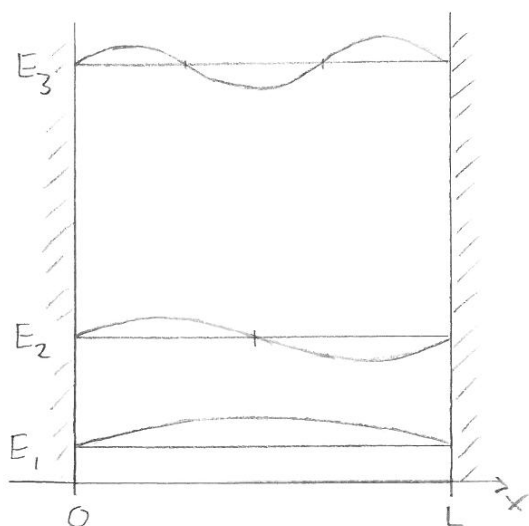
$$\Rightarrow A_n = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

damit folgt für die normierten Eigenfunktionen

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) & 0 < x < L \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$\psi_n(x)$

$|\psi_n(x)|^2$



zurück zur zeitabhängigen Lösung:

$$\begin{aligned}\bar{\psi}_n(x, t) &= \psi_n(x) f_n(t) \\ &= \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) e^{-i\omega_n t} & 0 < x < L \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}\end{aligned}$$

mit $\omega_n = \frac{E_n}{\hbar} = \frac{\hbar}{2m} \frac{\pi^2}{L^2} n^2$

sind Lösungen der zeitabhängigen SG

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

Für die Lösungen $\bar{\psi}_n(x, t)$ gilt

$$\begin{aligned}|\bar{\psi}_n(x, t)|^2 &= |\psi_n(x) f_n(t)|^2 = |\psi_n(x)|^2 \underbrace{|f_n(t)|^2}_{= e^{-i\omega_n t} \cdot e^{i\omega_n t} = 1} \\ &= |\psi_n(x)|^2\end{aligned}$$

\Rightarrow Für diese Lösungen ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte

$|\bar{\psi}_n(x, t)|^2$ unabhängig von der Zeit

\Rightarrow sog. stationäre Lösungen der SG für ein

Teilchen im Potential $V(x)$

Konstruktion zeitabhängiger Lösungen

d.h. mit $|\bar{\psi}(x, t)|$ abh. von t

Behauptung-

Linearkombinationen der Form

$$\bar{\psi}(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n \bar{\psi}_n(x, t)$$

sind ebenfalls Lösungen der zeitabhängigen SG

Beweis:

$$\text{zu zeigen ist: } H \bar{\psi}(x,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \bar{\psi}(x,t)$$

$$\text{mit } H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x)$$

$$\rightarrow H \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n \bar{\psi}_n(x,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n \bar{\psi}_n(x,t)$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n \underbrace{[H \psi_n(x)]}_{= E_n \psi_n(x)} f_n(t) = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n \psi_n(x) \underbrace{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f_n(t)}_{= i\hbar (-i\omega_n) f_n(t) = E_n f_n(t)} \quad \checkmark$$

Konkretes Beispiel:

$$\alpha_1 = 1, \alpha_2 = 1; \text{ alle anderen } \alpha_n = 0$$

$$\Rightarrow \bar{\psi}(x,t) = \bar{\psi}_1(x,t) + \bar{\psi}_2(x,t)$$

$$= \psi_1(x) f_1(t) + \psi_2(x) f_2(t)$$

$$= \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \left[\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \exp\left[-i \frac{\hbar}{2m} \frac{\pi^2}{L^2} t\right] + \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \times \right. \\ \left. \times \exp\left[-i \frac{\hbar}{2m} \frac{\pi^2}{L^2} 4t\right] \right] & 0 < x < L \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Aufenthaltswahrscheinlichkeit für diese Lösung

(Achtung: Normierung fehlt noch)

$$\rightarrow |\bar{\psi}(x,t)|^2 = \alpha \frac{2}{L} \left| \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) e^{-i\omega_1 t} + \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) e^{-4i\omega_1 t} \right|^2$$

↑
aus der Normierung

$$\begin{aligned}
&= \alpha \frac{2}{L} \underbrace{|e^{-i\omega_1 t}|^2}_{=1} \left| \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) + \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) e^{-3i\omega_1 t} \right|^2 \\
&= \alpha \frac{2}{L} \left| \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) + \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) (\cos 3\omega_1 t - i \sin 3\omega_1 t) \right|^2 \\
&= \alpha \frac{2}{L} \left\{ \left[\sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) + \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \cos 3\omega_1 t \right]^2 + \left[\sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \sin 3\omega_1 t \right]^2 \right\} \\
&= \alpha \frac{2}{L} \left\{ \sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) + 2 \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \cos 3\omega_1 t + \sin^2\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \right\}
\end{aligned}$$

→ Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist zeitabhängig

⇒ zeitabh. SG beschreibt die Dynamik der Wellenfunktion eines Teilchens in einem Potential $V(\vec{r})$

Weiter mit:

IV.3 A \rightarrow unendlich hohe Potentialtopf

bis jetzt: Lösung der zeitunabhängigen SG

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi_n(x) = E_n \psi_n(x)$$

$$\text{mit } V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } 0 < x < L \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$

mit den Randbedingungen $\psi_n(0) = \psi_n(L) = 0$ folgt für die normierten Eigenfunktionen

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) & \text{für } 0 < x < L \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$$\text{Eigenenergien: } E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2$$

Postulate der Quantenmechanik (eine Auswahl)

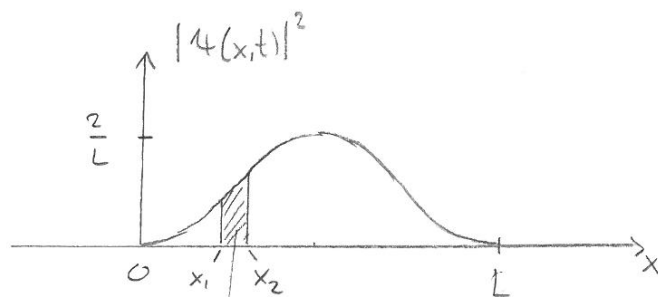
1. der Zustand eines Systems (z.B. ein Teilchen in einem Potential V) wird durch eine Wellenfunktion $\psi(\vec{r}, t)$ beschrieben;

$\int_{\Delta V} |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r$ gibt die Wahrscheinlichkeit an, das Teilchen

zur Zeit t im Volumen ΔV zu finden

$$\text{Beispiel: } \psi(x, t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) e^{-i\omega_1 t}$$

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right)$$



Fläche = $\int_{x_1}^{x_2} |\psi(x,t)|^2 dx =$ Wahrscheinlichkeit, das Teilchen im Intervall $[x_1, x_2]$ vorzufinden

$\Rightarrow |\psi(x,t)|^2$: Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = 1$$

d.h.: obwohl der Zustand des Systems eindeutig bestimmt ist (durch die Angabe von $\psi(x,t)$) macht die Quantenmechanik nur Wahrscheinlichkeitsaussagen! (mehr dazu später)

2. Meßgrößen (sog. Observable) der klassischen Physik entsprechen in der Quantenmechanik Operatoren

Beispiele: Ort $\hat{A} = x$ bzw. $\hat{A} = \vec{r}$

Impuls $\hat{A} = \vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla}$ bzw. $\hat{A} = p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

3. die Mittelwerte der Operatoren sind im Zustand $\psi(\vec{r}, t)$ gegeben durch

$$\langle \hat{A} \rangle = \int d^3r \psi^*(\vec{r}, t) \hat{A} \psi(\vec{r}, t)$$

$$\begin{aligned}
 \text{z.B. } \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x,t) x \psi(x,t) \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx x \underbrace{\psi^*(x,t) \psi(x,t)}_{= |\psi(x,t)|^2} = \int_{-\infty}^{\infty} dx x |\psi(x,t)|^2
 \end{aligned}$$

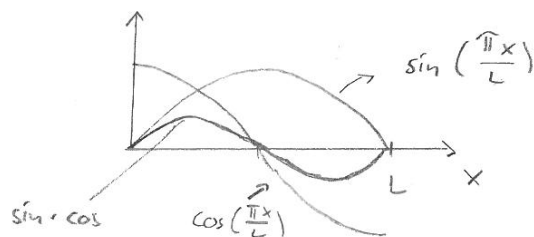
Konkretes Beispiel:

Grundzustand des unendlich hohen Potentialtopfs

d.h. stationäre Lösung mit $n=1$

$$\Rightarrow \langle x \rangle = \int_0^L dx x \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) \stackrel{!}{=} \frac{L}{2}$$

$$\begin{aligned}
 \langle p_x \rangle &= \int_0^L dx \psi^*(x,t) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi(x,t) \\
 &= -i\hbar \frac{2}{L} \int_0^L dx \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) e^{i\omega_1 t} \frac{\partial}{\partial x} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) e^{-i\omega_1 t} \\
 &= -i\hbar \frac{2}{L} \int_0^L dx \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \frac{\pi}{L} \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) \stackrel{!}{=} 0
 \end{aligned}$$



d.h. der mittlere Impuls der Teilchen in x -Richtung = 0

als nächstes: Maß für die mittlere Abweichung vom Mittelwert

Beispiel aus der Statistik: Würfel $n = 1, 2, \dots, 6$

$$p_n = \frac{1}{6} \quad \Rightarrow \quad \sum_{n=1}^6 p_n = 1$$

$$\langle n \rangle = \sum_{n=1}^6 n p_n = \frac{1}{6} (1 + 2 + \dots + 6) = \frac{7}{2}$$

betrachte: Standardabweichung $\sigma = \Delta n$ als Maß für die Streuung der Verteilung um den Mittelwert

$$\Delta n := \sqrt{\langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2}$$

$$\langle n^2 \rangle = \sum_{n=1}^6 n^2 p_n = \frac{1}{6} (1 + 4 + \dots + 36) = \frac{91}{6}$$

$$\Rightarrow \Delta n \approx \sqrt{15.2 - 12.2} = \sqrt{3} \approx 1.7$$

analog in der Quantenmechanik

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

heißt Unschärfe

Im folgenden: berechne Orts- und Impulsunschärfe im Grundzustand ($\mathbb{1} \square$)

→ berechne $\langle x^2 \rangle$ und $\langle p_x^2 \rangle$

... Resultat (siehe Übungen)

$$\Delta x = L \sqrt{\frac{1}{12} - \frac{1}{2\pi^2}}$$

$$\Delta p_x = \frac{\hbar \pi}{L}$$

betrachte das Unschärfeprodukt

$$\begin{aligned} \Delta x \Delta p_x &= \hbar \pi \sqrt{\frac{1}{12} - \frac{1}{2\pi^2}} \\ &= \frac{\hbar}{2} \underbrace{\sqrt{\frac{\pi^2}{3} - 2}}_{\approx 1.136} \quad \text{etwas größer als } \frac{\hbar}{2} \end{aligned}$$

allgemein: Heisenbergsche Unschärferelation

(hier für ein Teilchen in einem eindimensionalen Potential)

für jede Wellenfunktion $\psi(x,t)$ gilt für jede Zeit t :

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

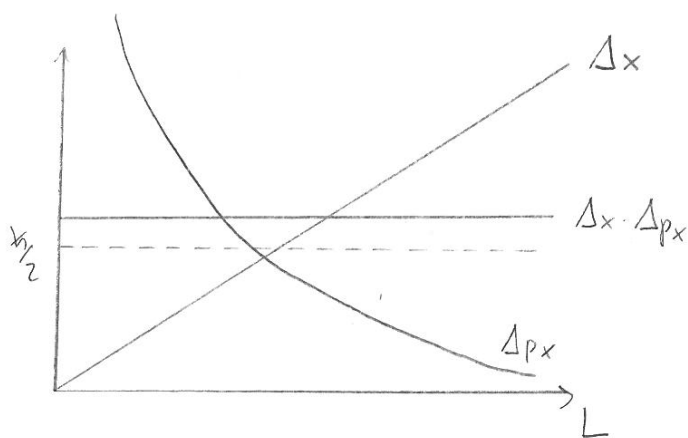
unabh. von $V(x)$

man sagt: "Ort und Impuls können nicht gleichzeitig beliebig scharf gemessen werden"

d.h. $\Delta x = 0$ und gleichzeitig $\Delta p_x = 0$ geht nicht!

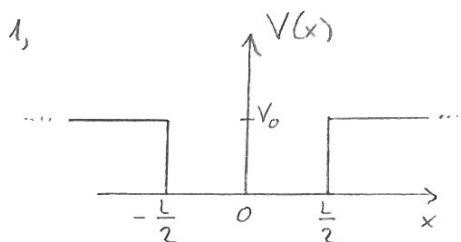
im Unterschied zur klassischen Mechanik

nochmals für den unendlich hohen Potentialtopf

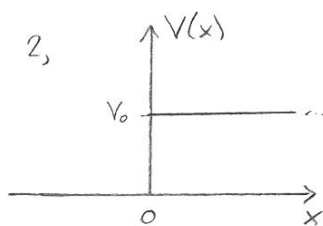


weiter eindimensionale Probleme → B. Rechteckpotentiale

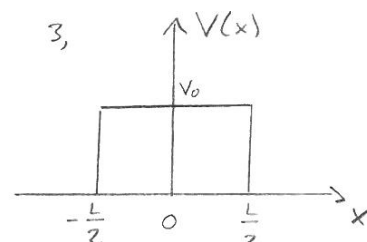
endlich hohe Potentialtopf



Potentialstufe



Potentialbarriere



$$1. \quad V(x) = \begin{cases} V_0 & x < -\frac{L}{2} \\ 0 & -\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2} \\ V_0 & x > \frac{L}{2} \end{cases}$$

$$2. \quad V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & x > 0 \end{cases}$$

$$3. \quad V(x) = \begin{cases} 0 & x < -\frac{L}{2} \\ V_0 & -\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2} \\ 0 & x > \frac{L}{2} \end{cases}$$

allgemeine Strategie zur Lösung der zeitunabhängigen SG

1. Lösung der zeitunabhängigen SG in den Teilbereichen mit Konstanten $V(x) = V$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \right] \psi(x) = E \psi(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + (V-E) \psi(x) = 0$$

$$\boxed{\psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E-V) \psi(x) = 0}$$

Fallunterscheidung: i, $E > V$

$$\Rightarrow \frac{2m}{\hbar^2} (E-V) = k^2 > 0$$

$\psi'' + k^2 \psi = 0$ hat Lösungen der Form
 $\sin kx, \cos kx, e^{ikx}$ oszillierende Lösungen

ii, $E < V$

$$\Rightarrow \frac{2m}{\hbar^2} (V-E) = \lambda^2 > 0$$

$\psi'' - \lambda^2 \psi = 0$ hat Lösungen der Form

$e^{\lambda x}, e^{-\lambda x} \rightarrow$ exponentiell ansteigende, bzw. abfallende Lösungen

iii, $E = V$

$$\Rightarrow \frac{2m}{\hbar^2} (E-V) = 0$$

$\psi'' = 0$ hat Lösungen der Form $a + bx$

2. Anschlussbedingungen

z.B. für Potentialstufe

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_{\text{I}}(x) & x < 0 \\ \psi_{\text{II}}(x) & x > 0 \end{cases}$$

\rightarrow Stetigkeit der Wellenfunktion

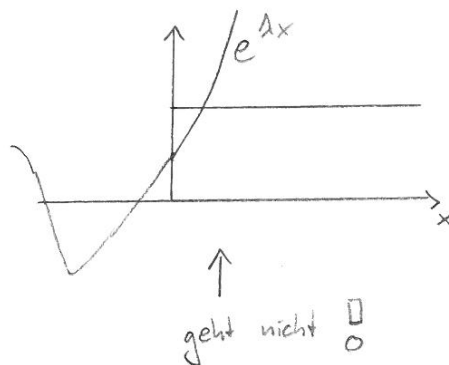
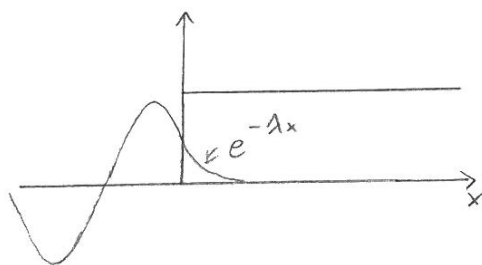
$$\psi_{\text{I}}(0) = \psi_{\text{II}}(0)$$

\rightarrow Stetigkeit der Ableitung der Wellenfunktion

$$\psi'_{\text{I}}(0) = \psi'_{\text{II}}(0)$$

3. $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \psi(x)$ endlich

z.B.

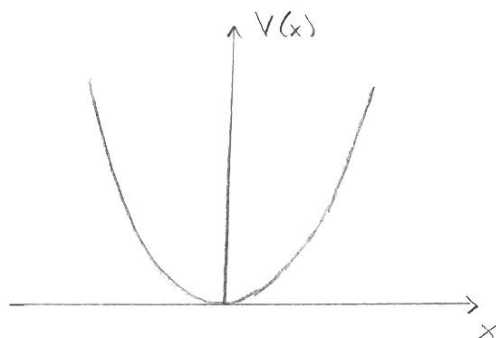


weiter mit IV.3 Lösung der SG: eindimensionale Probleme

\hookrightarrow de harmonische Oszillator

$$\text{sei } V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

$$= \frac{1}{2} k x^2 \quad \text{mit } \omega^2 = \frac{k}{m}$$



in der Klass. Mechanik \rightarrow oszillierende Lösungen $x(t) \propto \sin \omega t$

Quantenmechanik: gesucht sind die Lösungen der stationären SG

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right] \psi(x) = E \psi(x)$$

\hookrightarrow gewöhnliche Dgl. zweiter Ordnung mit nicht-konstanten Koeff.

\rightarrow siehe Math. Meth. I

Kap. V.3.3. „Frobenius-Methode für den harmonischen Oszillator“

Kurze Wiederholung:

Ansatz: $\psi(x) = u(x) e^{-\frac{x^2}{2}}$

$$\text{mit } u(x) = \sum_{n=0}^{\infty} b_n x^n$$

einsetzen in die Dgl. ergibt Rekursionsrelation für die b_n :

$$b_{n+2} = \frac{1 + 2n - 2\varepsilon}{(n+2)(n+1)} b_n \quad \varepsilon = \frac{E}{\hbar \omega}$$

ergibt Lösungen der SG für beliebige E !

aber: Einschränkung der möglichen Lösungen durch die

$$\text{Forderung } \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$$

geht nur, wenn Potenzreihe abbricht d.h. $b_{n+2} = 0$ obwohl $b_n \neq 0$

$$\Rightarrow 1 + 2n - 2\varepsilon = 0$$

$$\Rightarrow \text{Quantisierung der Energie } \boxed{E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)} \quad n=0,1,2,\dots$$

und damit:

$$H\psi_n(x) = E_n \psi_n(x) \quad \text{mit } \psi_n(x) = U_n(x) e^{-\frac{x^2}{2}}$$

und den sog. Hermite - Polynomen $U_n(x)$

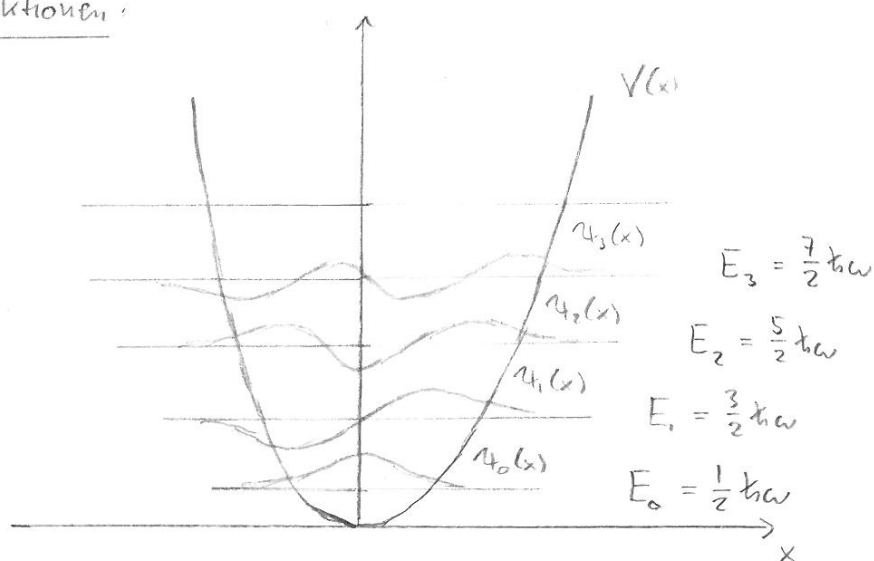
$$U_0(x) = b_0$$

$$U_1(x) = b_1 x$$

$$U_2(x) = b_0 (1 - x^2)$$

⋮

Wellenfunktionen:



algebraische Methode zur Lösung des quantenmechanischen harmonischen Oszillators

Behauptung: der Hamiltonoperator $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$

$$= \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

läßt sich schreiben als:

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

mit den Operatoren

$$a = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (m\omega x + ip)$$

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (m\omega x - ip)$$

„a kreuz“

Beweis:

betrachte $a + a^\dagger = \frac{2m\omega}{\sqrt{2m\hbar\omega}} x = \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x$

$$a - a^\dagger = \frac{2i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} p = \sqrt{\frac{2}{m\hbar\omega}} i p$$

\Rightarrow

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^\dagger)$$

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

einsetzen in $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow H &= \underbrace{-\frac{1}{2m} \frac{m\hbar\omega}{2} (a-a^\dagger)^2}_{= \frac{1}{4} \hbar\omega} + \underbrace{\frac{1}{2} m\omega^2 \frac{\hbar}{2m\omega} (a+a^\dagger)^2}_{= \frac{1}{4} \hbar\omega} \\
&= \frac{1}{4} \hbar\omega \underbrace{[-(a-a^\dagger)^2 + (a+a^\dagger)^2]} \\
&= -\overset{\checkmark}{aa} + \overset{\checkmark}{aa^\dagger} + \overset{\checkmark}{a^\dagger a} - \overset{\checkmark}{a^\dagger a^\dagger} + \overset{\checkmark}{aa} + \overset{\checkmark}{aa^\dagger} + \overset{\checkmark}{a^\dagger a} + \overset{\checkmark}{a^\dagger a^\dagger} \\
&= 2aa^\dagger + 2a^\dagger a \\
&= \frac{1}{2} \hbar\omega (aa^\dagger + a^\dagger a)
\end{aligned}$$

Achtung: $aa^\dagger \neq a^\dagger a$ dh. $[a, a^\dagger] \neq 0$

Berechnung des Kommutators:

$$\begin{aligned}
[a, a^\dagger] &= \frac{1}{2m\hbar\omega} [(m\omega x + ip), (m\omega x - ip)] \\
&= \frac{1}{2m\hbar\omega} \left\{ \underbrace{m^2\omega^2 [x, x]}_{=0} - \underbrace{[p, p]}_{=0} - m\omega i [x, p] + m\omega i \underbrace{[p, x]}_{=-[x, p]} \right\} \\
&= \frac{1}{2m\hbar\omega} \left\{ -2m\omega i [x, p] \right\} = -\frac{i}{\hbar} [x, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}] \\
&= -[x, \frac{\partial}{\partial x}] = 1
\end{aligned}$$

also $\boxed{[a, a^\dagger] = 1}$

dh. $aa^\dagger - a^\dagger a = 1$

$aa^\dagger = 1 + a^\dagger a \Rightarrow aa^\dagger + a^\dagger a = 1 + 2a^\dagger a$

$$\Rightarrow H = \frac{1}{2} \hbar \omega (1 + 2a^\dagger a) = \hbar \omega (a^\dagger a + \frac{1}{2}) \quad \checkmark$$

Def.: Besetzungszahloperator $\hat{n} = a^\dagger a$

damit folgt: die Lösung der stat. SG reduziert sich auf das Auffinden der Eigenfunktionen und Eigenwerte von \hat{n}

$$\hat{n} \psi_\nu = \nu \psi_\nu$$

denn: ψ_ν sind dann auch Eigenfunktionen zu H

$$\begin{aligned} H \psi_\nu &= \hbar \omega \left(\hat{n} + \frac{1}{2} \right) \psi_\nu = \hbar \omega \underbrace{\hat{n} \psi_\nu}_{= \nu \psi_\nu} + \frac{1}{2} \underbrace{\hbar \omega}_{\hbar \omega} \psi_\nu \\ &= \underbrace{\hbar \omega \left(\nu + \frac{1}{2} \right)}_{= E_\nu} \psi_\nu \end{aligned}$$

[aus der Lsg der Dgl wissen wir bereits, daß $E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \Rightarrow \nu = n$]

Behauptung:

$a^\dagger \psi_\nu$ ist Eigenfunktion ^{von \hat{n}} zum Eigenwert $\nu+1$

$$\text{d.h. } a^\dagger \psi_\nu = \alpha \psi_{\nu+1}$$

Beweis:

$$\text{betrachte } \hat{n} (a^\dagger \psi_\nu) = \underbrace{a^\dagger a a^\dagger}_{= 1 + a^\dagger a} \psi_\nu = a^\dagger (1 + a^\dagger a) \psi_\nu$$

$$= a^\dagger \psi_\nu + a^\dagger \underbrace{a^\dagger a}_{= \hat{n}} \psi_\nu = a^\dagger \psi_\nu + \nu a^\dagger \psi_\nu$$

$$= \underbrace{(1+\nu)}_{\text{Eigenwert!}} a^\dagger \psi_\nu \quad \checkmark$$

Bestimmung von α

Annahme: die ψ_ν seien alle auf 1 normiert d.h. $\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_\nu^*(x) \psi_\nu(x) = 1$

beachte: $\int_{-\infty}^{\infty} dx [a^\dagger \psi_\nu(x)]^* [a^\dagger \psi_\nu(x)] =$ (ohne Beweis)
 \sim Übungen

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_\nu^*(x) \underbrace{a a^\dagger}_{= a^\dagger a + 1} \psi_\nu(x) =$$

$$= \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_\nu^*(x) \nu \psi_\nu(x)}_{= \nu} + \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_\nu^*(x) \psi_\nu(x)}_{= 1}$$

$$= \nu + 1$$

$$\Rightarrow \psi_{\nu+1} = \frac{1}{\sqrt{\nu+1}} a^\dagger \psi_\nu \quad \text{ist auf 1 normiert}$$

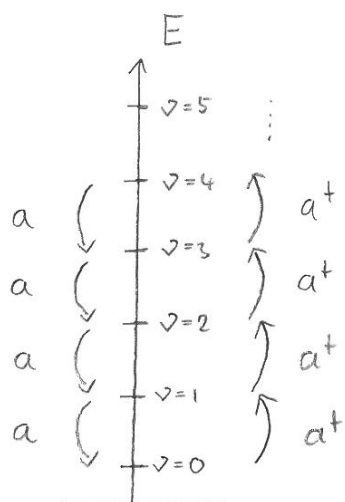
$$\boxed{a^\dagger \psi_\nu = \sqrt{\nu+1} \psi_{\nu+1}}$$

analog: $a \psi_\nu$ ist Eigenfunktion von \hat{n} zum Eigenwert $\nu-1$

$$a \psi_v = \sqrt{v} \psi_{v-1}$$

Interpretation von a^\dagger und a

Zunächst: das kleinste $v=0$ (z.B. aus der Lösung der Dgl.)



a^\dagger : "Erzeugungsoperator"

a : "Vernichtungsoperator"

durch mehrfache Anwenden von a^\dagger lassen sich alle Zustände generieren:

$$a^\dagger \psi_0 = \sqrt{0+1} \psi_1 = \psi_1$$

$$a^\dagger a^\dagger \psi_0 = a^\dagger \psi_1 = \sqrt{2} \psi_2$$

$$a^\dagger a^\dagger a^\dagger \psi_0 = \sqrt{2} a^\dagger \psi_2 = \sqrt{2} \sqrt{3} \psi_3$$

\vdots

$$(a^\dagger)^n \psi_0 = \underbrace{\sqrt{1} \sqrt{2} \dots \sqrt{n}}_{=\sqrt{n!}} \psi_n$$

$$\Rightarrow \psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n \psi_0$$

IV.4 Drehimpuls I

in der klass. Mechanik: Drehimpuls $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$

in der Quantenmechanik:

$$\vec{L} = \vec{r} \times (-i\hbar \vec{\nabla}) = -i\hbar \vec{r} \times \vec{\nabla}$$

ausgeschrieben:

$$\vec{L} = -i\hbar \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} = -i\hbar \begin{pmatrix} y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \\ z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \\ x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_1 \\ L_2 \\ L_3 \end{pmatrix}$$

noch kürzer:

$$L_i = -i\hbar \sum_{j,k} \epsilon_{ijk} x_j \frac{\partial}{\partial x_k}$$

ϵ_{ijk} : „der vollständig antisymmetrische Tensor dritte Stufe“

$$\epsilon_{123} = \epsilon_{231} = \epsilon_{312} = 1$$

dh. für gerade Permutationen von (1,2,3)

$$\epsilon_{321} = \epsilon_{213} = \epsilon_{132} = -1$$

— „ — ungerade — — —

$$\epsilon_{ijk} = 0 \text{ sonst}$$

$$\text{z.B. } L_1 = -i\hbar \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 \epsilon_{1jk} x_j \frac{\partial}{\partial x_k}$$

$$= -i\hbar \underbrace{\epsilon_{123}}_{=1} x_2 \frac{\partial}{\partial x_3} - i\hbar \underbrace{\epsilon_{132}}_{=-1} x_3 \frac{\partial}{\partial x_2} \quad \checkmark$$

es gelten die folgenden Vertauschungsrelationen

$$\begin{aligned} [L_i, L_j] &= i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} L_k \\ [L_i, x_j] &= i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} x_k \\ [L_i, p_j] &= i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} p_k \end{aligned}$$

Beispiel:

$$\begin{aligned} [L_1, L_2] &= i\hbar \sum_k \underbrace{\varepsilon_{12k}}_{=1 \text{ für } k=3; =0 \text{ sonst}} L_k = i\hbar L_3 \end{aligned}$$

Beweis:

$$\begin{aligned} [L_1, L_2] &= \left[-i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \right] \\ &= -\hbar^2 \left[y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y}, z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right] \\ &= -\hbar^2 \left\{ \underbrace{\left[y \frac{\partial}{\partial z}, z \frac{\partial}{\partial x} \right]}_{=0} - \underbrace{\left[y \frac{\partial}{\partial z}, x \frac{\partial}{\partial z} \right]}_{=0} - \underbrace{\left[z \frac{\partial}{\partial y}, z \frac{\partial}{\partial x} \right]}_{=0} \right. \\ &\quad \left. + \left[z \frac{\partial}{\partial y}, x \frac{\partial}{\partial z} \right] \right\} \\ &= -\hbar^2 \left\{ y \frac{\partial}{\partial x} \underbrace{\left[\frac{\partial}{\partial z}, z \right]}_{=1} + \frac{\partial}{\partial y} x \underbrace{\left[z, \frac{\partial}{\partial z} \right]}_{=-1} \right\} \\ &= \hbar^2 \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = i\hbar L_3 \quad \checkmark \end{aligned}$$

(weitere Beispiele in den Übungen)

außerdem gilt

$$\boxed{[\vec{L}^2, L_i] = 0 \quad ; \quad i=1,2,3}$$

Beweis:

$$\vec{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$$

betrachte: $[\vec{L}^2, L_z] = [L_x^2, L_z] + [L_y^2, L_z] + \underbrace{[L_z^2, L_z]}_{=0} = \dots$

verwende: $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$

$$\dots = L_x \underbrace{[L_x, L_z]}_{-i\hbar L_y} + \underbrace{[L_x, L_z]}_{-i\hbar L_y} L_x + L_y \underbrace{[L_y, L_z]}_{i\hbar L_x} + \underbrace{[L_y, L_z]}_{i\hbar L_x} L_y =$$

$$= 0$$

Eigenfunktionen des Drehimpulsoperators

gesucht sind im folgenden die Eigenfunktionen und Eigenwerte von \vec{L}^2 und L_z

es gilt allgemein: zwei Operatoren \hat{A} und \hat{B} besitzen ein

gemeinsames System von Eigenfunktionen ψ_{lm} mit

$$\hat{A} \psi_{lm} = a_l \psi_{lm} \quad \text{und} \quad \hat{B} \psi_{lm} = b_m \psi_{lm}$$

falls $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$

Begründung:

betrachte $[\hat{A}, \hat{B}] \psi_{lm} = (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) \psi_{lm}$

$$= \underbrace{\hat{A}\hat{B}\psi_{lm}}_{=b_m\psi_{lm}} - \underbrace{\hat{B}\hat{A}\psi_{lm}}_{=a_l\psi_{lm}} = \dots$$

$$\begin{aligned}
 &= b_m \hat{A} \psi_{lm} - a_e \hat{B} \psi_{lm} \\
 &= (b_m a_e - a_e b_m) \psi_{lm} = 0 \quad \checkmark
 \end{aligned}$$

andern formuliert: falls $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0 \Rightarrow$ es kann kein gemeinsames System von Eigenfunktionen geben

hier: $\hat{A} = \vec{L}^2$, $\hat{B} = L_z$

schreibe $a_e = \hbar^2 l(l+1)$

$b_m = \hbar m$

d.h.

$$\begin{aligned}
 \vec{L}^2 \psi_{lm} &= \hbar^2 l(l+1) \psi_{lm} \\
 L_z \psi_{lm} &= \hbar m \psi_{lm}
 \end{aligned}$$

(gesucht sind also die ψ_{lm} und die möglichen Werte der l, m)

\vec{L}^2 und L_z in Kugelkoordinaten

es gilt
$$\vec{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \quad (1)$$

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (2)$$

Beweis von (2)

sei $\psi(x, y, z)$ die Wellenfunktion in kartesischen Koordinaten

die entsprechende WF in Kugelkoordinaten sei $\bar{\psi}(r, \theta, \varphi)$

zu beachten: $\bar{\psi} \neq \psi$ in dem Sinne, daß

$$\bar{\psi}(a,b,c) \neq \psi(a,b,c)$$

es gilt aber: $\bar{\psi}(r,\vartheta,\varphi) = \psi(x(r,\vartheta,\varphi), y(r,\vartheta,\varphi), z(r,\vartheta,\varphi))$ (*)

mit $x(r,\vartheta,\varphi) = r \sin\vartheta \cos\varphi$

$$y(r,\vartheta,\varphi) = r \sin\vartheta \sin\varphi$$

$$z(r,\vartheta,\varphi) = r \cos\vartheta$$

○ wie wirkt $L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$ auf $\bar{\psi}(r,\vartheta,\varphi)$?

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \bar{\psi}(r,\vartheta,\varphi) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi(x(r,\vartheta,\varphi), y(r,\vartheta,\varphi), z(r,\vartheta,\varphi)) =$$

↑
(*)

$$= -i\hbar \left\{ \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \varphi} + \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \varphi} + \frac{\partial \psi}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \varphi} \right\} =$$

↑
Kettenregel

$$\begin{aligned} & \left. \begin{array}{l} \frac{\partial x}{\partial \varphi} = -r \sin\vartheta \sin\varphi = -y \\ \frac{\partial y}{\partial \varphi} = r \sin\vartheta \cos\varphi = x \\ \frac{\partial z}{\partial \varphi} = 0 \end{array} \right\} \\ & = -i\hbar \left\{ -y \frac{\partial \psi}{\partial x} + x \frac{\partial \psi}{\partial y} \right\} \end{aligned}$$

$$= -i\hbar \left\{ -y \frac{\partial \psi}{\partial x} + x \frac{\partial \psi}{\partial y} \right\}$$

$$= \left[-i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \right] \psi(x,y,z)$$

$$= L_z$$

✓

damit ergeben sich die folgenden Dgl:

$$(1) \left[\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \psi_{lm}(\vartheta, \varphi) = -l(l+1) \psi_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

$$(2) -i \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi_{lm}(\vartheta, \varphi) = m \psi_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

jetzt also: Lösung dieser Dgl.

Separationsansatz:

$$\psi_{lm}(\vartheta, \varphi) = \Phi(\varphi) \cdot \Theta(\vartheta)$$

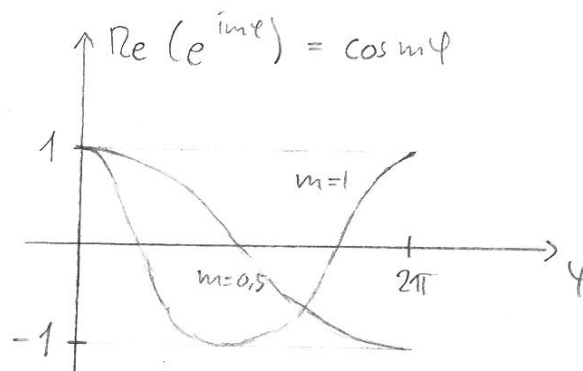
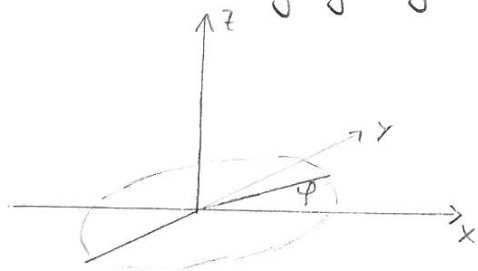
einsetzen in (2) ergibt

$$-i \frac{\partial}{\partial \varphi} \Phi(\varphi) \Theta(\vartheta) = m \Phi(\varphi) \Theta(\vartheta) \quad | \cdot \frac{1}{\Theta(\vartheta)}$$

$$-i \Phi'(\varphi) = m \Phi(\varphi)$$

$$\Rightarrow \boxed{\Phi(\varphi) = e^{im\varphi}}$$

welche Randbedingungen gibt es für $\Phi(\varphi)$?



$$\Rightarrow \text{es mu\ss} \text{ gelten } \Phi(\varphi + 2\pi) = \Phi(\varphi)$$

$$\Rightarrow m \in \mathbb{Z}$$

einsetzen in (1) ergibt

$$\left[\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \frac{m^2}{\sin^2 \vartheta} + l(l+1) \right] \Theta(\vartheta) = 0$$

Lösungen: \rightarrow Legendre Polynome

und damit:

die Eigenfunktionen von \vec{L}^2 und L_z sind die Kugelflächenfunktionen

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi}$$

$$l = 0, 1, 2, \dots$$

$$m = -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l$$

(mehr dazu in der nächsten Vorlesung und in den Übungen)

Aufgabe 2: Eigenfunktionen des Drehimpulsoperators; Kugelflächenfunktionen

Allgemein gilt: $Y_{l,m}(\theta, \phi) = (-1)^{(m+|m|)/2} \left[\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!} \right]^{1/2} P_l^{|m|}(\theta) e^{im\phi}$ mit

$$P_l^m(\theta) = (\sin \theta)^m \frac{d^m P_l(x)}{dx^m} \Big|_{x=\cos \theta}, \quad \text{und} \quad P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l$$

- Berechnen Sie mit Hilfe dieser Formeln die Funktionen $Y_{1,1}$, $Y_{1,0}$ und $Y_{1,-1}$.
- Zeigen Sie analog zur Vorlesung, dass

$$\hat{L}_{\pm} = \hbar e^{\pm i\phi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

IV.5 Wasserstoffatom

zeitunabhängige SG für ein Teilchen der Masse m im Potential $V(\vec{r})$; wobei V nur vom Betrag $r = |\vec{r}|$ abhängt $\rightarrow V = V(r)$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

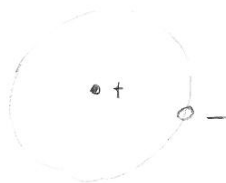
Achtung: weiterhin ein dreidimensionales Problem

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

$$\psi(\vec{r}) = \psi(x, y, z)$$

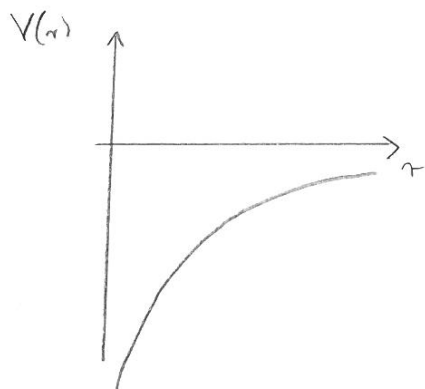
Konkretes Beispiel:

Wasserstoffatom



e^- im Coulombpotential des positiv geladenen Kerns (Proton)

$$V(\vec{r}) = \frac{q_1 q_2}{|\vec{r}|} = -\frac{e^2}{r} \quad (\text{Proton bei } \vec{0})$$



gesucht:

Eigenenergien und Eigenfunktionen
für das e^-

Übergang zu Kugelkoordinaten r, ϑ, φ

$$\psi \rightarrow \psi(r, \vartheta, \varphi)$$

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r}$$

$$+ \frac{1}{r^2} \left(\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right)$$

$$\stackrel{!}{=} -\frac{1}{\hbar^2} \vec{L}^2$$

$$\Rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\vec{L}^2}{2mr^2} + V(r) \right] \psi(r, \vartheta, \varphi) =$$

$$= E \psi(r, \vartheta, \varphi) \quad (*)$$

Separationsansatz:

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

einsetzen in (*):

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + V(r) \right] R(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

$$+ R(r) \frac{\vec{L}^2}{2mr^2} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = E R(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad | \cdot \frac{1}{Y_{lm}(\vartheta, \varphi)}$$

$$\stackrel{!}{=} \frac{1}{2mr^2} \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

$$\Rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] R(r) = E R(r)$$

⇒ gewöhnliche Dgl für den radialen Anteil $R(r)$

Ansatz für $R(r)$: $R(r) = g(r) e^{-\beta r}$

mit $\beta^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}$

$$\frac{\partial}{\partial r} g(r) e^{-\beta r} = g'(r) e^{-\beta r} - \beta g(r) e^{-\beta r}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial r^2} g(r) e^{-\beta r} &= g''(r) e^{-\beta r} - \beta g'(r) e^{-\beta r} \\ &\quad - \beta g'(r) e^{-\beta r} + \beta^2 g(r) e^{-\beta r} \end{aligned}$$

einsetzen in Dgl für $R(r)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(g''(r) - 2\beta g'(r) + \beta^2 g(r) + \frac{2}{r} g'(r) - \frac{2}{r} \beta g(r) \right)$$

$$+ \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} g(r) + \underbrace{V(r)}_{= -\frac{e^2}{r}} g(r) = E g(r) \quad | \cdot \frac{-2m}{\hbar^2}$$

$$g''(r) - 2\left(\beta - \frac{1}{r}\right) g'(r) - 2\left(\beta - \frac{me^2}{\hbar^2}\right) \frac{1}{r} g(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} g(r) = 0$$

Ansatz für $g(r)$:

$$g(r) = r^\lambda \sum_{n=0}^{\infty} a_n r^n \quad \text{mit } a_0 \neq 0$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} a_n r^{(n+\lambda)}$$

$$g'(r) = r^\lambda \sum_{n=0}^{\infty} a_n (n+\lambda) r^{n-1}$$

$$g''(r) = r^\lambda \sum_{n=0}^{\infty} a_n (n+\lambda)(n+\lambda-1) r^{n-2}$$

einsetzen in Dgl. für $g(r)$

$$r^\lambda \sum_{n=0}^{\infty} a_n (n+\lambda)(n+\lambda-1) r^{n-2} - 2\left(\beta - \frac{1}{r}\right) r^\lambda \sum_{n=0}^{\infty} a_n (n+\lambda) r^{n-1}$$

$$- 2\left(\beta - \frac{me^2}{\hbar^2}\right) \frac{1}{r} r^\lambda \sum_{n=0}^{\infty} a_n r^n - \frac{l(l+1)}{r^2} r^\lambda \sum_{n=0}^{\infty} a_n r^n = 0$$

$$| \cdot \frac{1}{r^\lambda}$$

dann: umschreiben in $\sum_m \dots r^m$

$$\text{z.B. erste Term: } \sum_{m=-2}^{\infty} a_{m+2} (m+2+\lambda)(m+1+\lambda) r^m$$

ebenso für die anderen Terme

$$\Rightarrow \sum_{m=-2}^{\infty} \alpha_m r^m = 0$$

geht nur wenn alle $\alpha_m = 0$

Vorfaktor von r^{-2} :

$$\alpha_{-2} = a_0 (\lambda(\lambda-1)) + 2a_0 \lambda - l(l+1)a_0 = 0 \quad | \cdot \frac{1}{a_0}$$

$$\Rightarrow \lambda(\lambda+1) - l(l+1) = 0$$

→ bestimmende Gleichung für λ

$$\lambda = \begin{cases} l \\ -(l+1) \end{cases}$$

es gilt: $l = 0, 1, 2, 3, \dots$

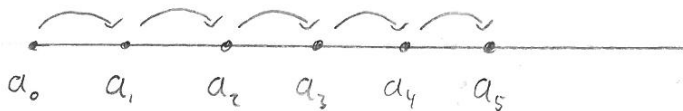
⇒ wähle Lösung mit $\lambda = l$ (sonst: $g(r) \rightarrow \infty$ für $r \rightarrow 0$)

Verfaktor von r^m mit $m \geq -1$:

$$\begin{aligned} \alpha_m &= a_{m+2} [(m+2+l)(m+3+l) - l(l+1)] \\ &+ a_{m+1} \left[-2\beta(m+2+l) + 2 \frac{me^2}{\hbar^2} \right] = 0 \end{aligned}$$

⇒ Rekursionsformel für die a_n

$$a_{n'} = \frac{2 \left[\beta(n'+l) - \frac{me^2}{\hbar^2} \right]}{(n'+l)(n'+l+1) - l(l+1)} a_{n'-1} \quad \text{für } n' \geq 1$$



Achtung:

Wellenfunktion muß normierbar sein

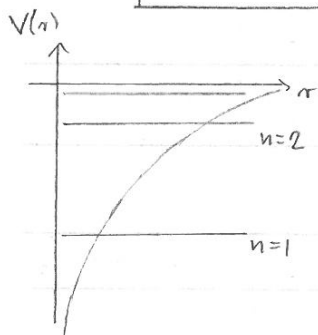
⇒ Reihe muß nach einer endlichen Anzahl von Gliedern abbrechen

$$\Rightarrow \underbrace{\beta(n'+l)}_{=: n} - \frac{me^2}{\hbar^2} = 0$$

$$n = \frac{\sqrt{m e^2}}{\sqrt{2|E|} \hbar} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

⇒ Quantisierung der möglichen Energieeigenwerte

$$E_n = -\frac{m e^4}{2 \hbar^2} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$



n heißt Hauptquantenzahl des Wasserstoffatoms

mögliche Werte von l für festes n :

$$n = n' + l \quad \text{mit } n' = 1, 2, 3, \dots$$

$$l = n - n' = n-1, n-2, \dots, 0$$

$$\Rightarrow 0 \leq l \leq n-1$$

die Lösung der stationären SG lautet damit

$$\psi_{n\ell m}(r, \vartheta, \varphi) = R_{n\ell}(r) Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi)$$

$$\text{mit } R_{n\ell}(r) = e^{-\beta_n r} r^\ell P_{n\ell}(r)$$

$$\beta_n = -\frac{2mE_n}{\hbar^2}$$

$$P_{n\ell}(r) = \sum_{\nu=0}^{n-\ell-1} a_\nu r^\nu$$

Laguerre-Polynome

die ersten Radialfunktionen lauten: $(a = \frac{\hbar^2}{me^2})$

$$R_{10}(r) = a^{-\frac{3}{2}} 2 e^{-\frac{r}{a}}$$

$$R_{20}(r) = a^{-\frac{3}{2}} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-\frac{r}{2a}}$$

$$R_{21}(r) = a^{-\frac{3}{2}} \frac{1}{\sqrt{6}} \frac{r}{2a} e^{-\frac{r}{2a}}$$

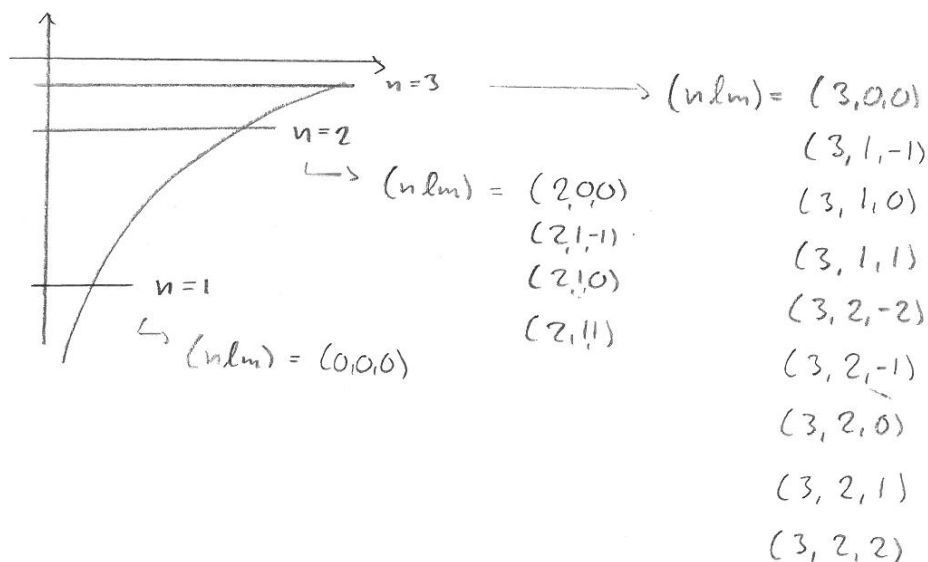
⋮

Entartungsgrad der Energieeigenwerte E_n

Zu jedem n gibt es die Werte für $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$

Zu jedem l gibt es die m -Werte $-l, -l+1, \dots, l$; d.h. $2l+1$ Werte

$$\Rightarrow \text{Entartungsgrad} = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2$$



IV.6 Dirac Notation

bisher: Lösungen der stationären SG

$$H \psi = E \psi$$

\Rightarrow Eigenfunktionen $\psi(x)$; $\psi(x, y, z)$; $\psi(r, \vartheta, \varphi)$

d.h. Eigenfunktionen berechnet in explizite Darstellung

Operatoren: in derselben Darstellung

z.B. $p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

$$L_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

im folgenden: Schreibweise, die unabhängig von der gewählten Darstellung ist:

$$\boxed{\text{Dirac - Notation}} \quad \rightarrow \quad \boxed{|\psi\rangle}$$

also z.B.

$$\boxed{H |\psi\rangle = E |\psi\rangle}$$

Dirac - Notation für den harmonischen Oszillator

in der Ortsdarstellung

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

$$H \psi_n(x) = E_n \psi_n(x)$$

$$\text{mit } E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

$$\Rightarrow \text{schreibe } H |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle$$

$$\text{oder noch kürzer: } \boxed{H |n\rangle = E_n |n\rangle}$$

Wirkung der Operatoren a, a^\dagger :

$$a^\dagger \psi_n(x) = \sqrt{n+1} \psi_{n+1}(x) \quad \hat{=} \quad a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$$

$$a \psi_n(x) = \sqrt{n} \psi_{n-1}(x) \quad \hat{=} \quad a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$$

$$a^\dagger a |n\rangle = a^\dagger \underbrace{(a |n\rangle)}_{= \sqrt{n} |n-1\rangle} = \sqrt{n} \underbrace{a^\dagger |n-1\rangle}_{= \sqrt{n} |n\rangle} = n |n\rangle$$

$$\text{außerdem: } H = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow H |n\rangle &= \hbar\omega \left(\underbrace{a^\dagger a |n\rangle}_{= n |n\rangle} + \frac{1}{2} |n\rangle\right) \\ &= \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) |n\rangle = E_n |n\rangle \end{aligned}$$

Dirac-Notation für das Wasserstoff-atom

$$\psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) \rightarrow |nlm\rangle$$

$$H |nlm\rangle = E_n |nlm\rangle$$

nlm : Quantenzahlen

Rechenregeln für die $|\psi\rangle$

wie für $\psi(x)$;

$$\text{z.B. } \alpha (|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle) = \alpha |\psi_1\rangle + \alpha |\psi_2\rangle$$

insbes. lassen sich Linearkombinationen bilden

Beispiel:

$$\text{sei } |\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle \quad c_n \in \mathbb{C}$$

$$\begin{aligned} \text{betrachte } a^+ |\psi\rangle &= a^+ \left(\sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle \right) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} c_n a^+ |n\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \sqrt{n+1} |n+1\rangle \end{aligned}$$

der duale Vektor $\langle\psi|$

zu jedem „Vektor“ $|\psi\rangle$ existiert ein sog. „dualer Vektor“ $\langle\psi|$

wozu braucht man diese $\langle\psi|$?

→ Definition des Skalarprodukts:

$$\text{sei } |a\rangle = |\psi_a\rangle \hat{=} \psi_a(x)$$

$$|b\rangle = |\psi_b\rangle \hat{=} \psi_b(x)$$

⇒ Skalarprodukt $\langle a|b\rangle$ oder kürzer $\langle a|b\rangle$

in der Ortsdarstellung:

$$\langle a|b\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \underbrace{\psi_a^*(x)}_{\hat{=} \langle a|} \underbrace{\psi_b(x)}_{|b\rangle}$$

speziell:

$$\langle a|a\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \underbrace{\psi_a^*(x) \psi_a(x)}_{= |\psi_a(x)|^2} = 1 \quad \text{falls } \psi_a(x) \text{ auf } 1 \text{ normiert}$$

Operatoren im Skalarprodukt

$$\langle a|\hat{X}|b\rangle = \langle a|\hat{X}b\rangle$$

$$\text{mit } |\hat{X}b\rangle \hat{=} \hat{X}\psi_b(x) =: \psi_c(x)$$

$$\Rightarrow \langle a|\hat{X}|b\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_a^*(x) \psi_c(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_a^*(x) \hat{X}\psi_b(x)$$

Übungen: Blatt \bar{X} , Aufgabe 3

$$a, \quad \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx (x\psi(x))^* \psi(x)}_{\langle x\psi|\psi\rangle} = \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x)^* (x\psi(x))}_{\langle \psi|x\psi\rangle}$$

$$\langle x\psi|\psi\rangle$$

$$\langle \psi|x\psi\rangle = \langle \psi|x|\psi\rangle$$

$$b, \quad \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx (p_x\psi(x))^* \psi(x)}_{\langle p_x\psi|\psi\rangle} = \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x)^* (\hat{p}_x\psi(x))}_{\langle \psi|\hat{p}_x\psi\rangle}$$

$$\langle p_x\psi|\psi\rangle$$

$$\langle \psi|\hat{p}_x\psi\rangle = \langle \psi|\hat{p}_x|\psi\rangle$$

in diesen beiden Fällen gilt offensichtlich

$$\langle \hat{A}\psi|\psi\rangle = \langle \psi|\hat{A}\psi\rangle$$

$$\text{c) } \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx (a^+ \psi(x))^* \psi(x)}_{\langle a^+ \psi | \psi \rangle} = \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x)^* (a \psi(x))}_{\langle \psi | a \psi \rangle}$$

Definition: A^+ heißt „zu A adjungierter Operator“ wenn gilt

$$\langle A^+ \psi | \varphi \rangle = \langle \psi | A \varphi \rangle$$

$$\text{c) } \hat{=} \int_{-\infty}^{\infty} dx (A^+ \psi(x))^* \varphi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x)^* (A \varphi(x))$$

Beispiel: $(a)^+ = a^+$; d.h. a^+ ist der zu a adj. Operator

$$(a^+)^+ = a$$

Definition: der Operator A heißt hermitesch (auch selbstadjungiert), wenn $A^+ = A$

$$\text{d.h. } \langle A \psi | \varphi \rangle = \langle \psi | A \varphi \rangle$$

Beispiele: x, p_x

ebenso x^2, p_x^2

sowie Summen hermitescher Operatoren

\Rightarrow der Hamiltonoperator H ist hermitesch!

$$\langle \psi | H | \varphi \rangle = \langle \psi | H \varphi \rangle = \langle H \psi | \varphi \rangle$$

als Anwendung dieser Eigenschaft von H :

Beweis der folgenden Aussage:

$$\text{sei } H|n\rangle = E_n|n\rangle \quad \text{mit } E_n \neq E_m \text{ für } n \neq m$$

(gilt z.B. für den harmonischen Osz.)

dam gilt

$$\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$$

$$\underline{n=m}: \quad \langle n|n\rangle = 1$$

d.h. Zustände sind normiert

$$\underline{n \neq m}: \quad \langle n|m\rangle = 0$$

$$\text{betrachte } \langle n|H|m\rangle = \underbrace{\langle n|H_m\rangle = \langle H_n|m\rangle}$$

$$\langle n|E_m|m\rangle = \langle E_n n|m\rangle$$

$$E_m \langle n|m\rangle = E_n \langle n|m\rangle$$

$$\underbrace{(E_m - E_n)}_{\neq 0} \underbrace{\langle n|m\rangle}_{=0} = 0$$

✓

Zum Abschluß noch ein paar Beweise:

Behauptung: sei A ein hermitescher Operator

$$\Rightarrow A^2 = AA \text{ ist ebenfalls hermitesch}$$

$$\text{d.h. } \langle A^2 \psi | \varphi \rangle = \langle \psi | A^2 \varphi \rangle$$

$$\text{Beweis: } \langle \psi | A^2 \varphi \rangle = \langle \psi | A A \varphi \rangle = \langle \psi | A \underbrace{|A \varphi\rangle}_{= |\bar{\varphi}\rangle} \rangle$$

$$= \langle \psi | A \bar{\varphi} \rangle = \langle A \psi | \bar{\varphi} \rangle = \langle \underbrace{A \psi}_{= \bar{\psi}} | A \varphi \rangle =$$

↑
A hermitisch

$$\downarrow$$

$$= \langle \bar{\psi} | A \varphi \rangle = \langle A \bar{\psi} | \varphi \rangle = \langle A A \psi | \varphi \rangle = \langle A^2 \psi | \varphi \rangle$$

$$\text{Behauptung: } (AB)^{\dagger} = B^{\dagger} A^{\dagger}$$

$$\text{d.h. } \langle \psi | AB \varphi \rangle = \langle B^{\dagger} A^{\dagger} \psi | \varphi \rangle = \langle (AB)^{\dagger} \psi | \varphi \rangle$$

Beweis:

$$\langle \psi | AB \varphi \rangle = \langle A^{\dagger} \psi | B \varphi \rangle = \langle B^{\dagger} A^{\dagger} \psi | \varphi \rangle \quad \checkmark$$

IV, 7 Störungstheorie

bis jetzt: exakte Lösung der SG für

- Potentialtopf
- harmonische Oszillatoren
- Wasserstoffatom

aber: in vielen Fällen ist eine exakte Lösung nicht möglich bzw. sehr schwierig

z.B.:
$$H = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2}_{\text{harm. Oszillator}} + \underbrace{\lambda \frac{m^2 \omega^3}{\hbar} x^4}_{\text{"Störung"}}, \lambda \in \mathbb{R}$$

Ausweg: näherungsweise Lösung der SG

im folgenden: zeitunabhängige Störungstheorie

für kleine Störungen, d.h. $\lambda \ll 1$

allgemein: der Hamilton-Operator bestehe aus zwei Anteilen

$$H = H_0 + \lambda H_1$$

Eigenwerte E_n^0 und Eigenfunktionen $|n^0\rangle$ von H_0 seien

exakt bekannt:

$$H_0 |n^0\rangle = E_n^0 |n^0\rangle$$

gesucht sind die Eigenwerte E_n und Eigenfunktionen $|n\rangle$ von H :

$$H |n\rangle = E_n |n\rangle$$

Annahme: E_n und $|n\rangle$ lassen sich als Potenzreihe in λ darstellen

$$\begin{aligned} E_n &= E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots \\ |n\rangle &= |n^0\rangle + \lambda |n^1\rangle + \lambda^2 |n^2\rangle + \dots \end{aligned}$$

Einsetzen in die SG $H|n\rangle = E_n |n\rangle$:

$$\begin{aligned} (H_0 + \lambda H_1) (|n^0\rangle + \lambda |n^1\rangle + \lambda^2 |n^2\rangle + \dots) \\ = (E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots) (|n^0\rangle + \lambda |n^1\rangle + \lambda^2 |n^2\rangle + \dots) \end{aligned}$$

Sortieren nach Potenzen von λ :

$$\begin{aligned} \lambda^0 [H_0 |n^0\rangle] + \lambda^1 [H_0 |n^1\rangle + H_1 |n^0\rangle] + \lambda^2 \dots \\ = \lambda^0 [E_n^0 |n^0\rangle] + \lambda^1 [E_n^0 |n^1\rangle + E_n^1 |n^0\rangle] + \lambda^2 \dots \end{aligned}$$

muß für beliebige λ gelten

$$\Rightarrow \lambda^0: H_0 |n^0\rangle = E_n^0 |n^0\rangle \quad \text{gilt nach Voraussetzung}$$

$$\lambda^1: H_0 |n^1\rangle + H_1 |n^0\rangle = E_n^0 |n^1\rangle + E_n^1 |n^0\rangle \quad (\text{I})$$

$$\lambda^2: H_0 |n^2\rangle + H_1 |n^1\rangle = E_n^0 |n^2\rangle + E_n^1 |n^1\rangle + E_n^2 |n^0\rangle \quad (\text{II})$$

\vdots

die Zustände $|n^0\rangle$ seien normiert

$$\text{d.h. } \langle n^0 | n^0 \rangle = 1$$

die Normierung von $|n\rangle$ kann dazu ausgenutzt werden, das Problem zu vereinfachen, d.h. anstelle von $\langle n | n \rangle = 1$ wird gefordert

$$\boxed{\langle n^0 | n \rangle = 1}$$

$$\text{d.h. } \langle n^0 | (|n^0\rangle + \lambda |n^1\rangle + \lambda^2 |n^2\rangle + \dots) = 1$$

$$\underbrace{\langle n^0 | n^0 \rangle}_{=1} + \lambda \langle n^0 | n^1 \rangle + \lambda^2 \langle n^0 | n^2 \rangle + \dots = 1$$

$$\Rightarrow \langle n^0 | n^1 \rangle = 0$$

$$\langle n^0 | n^2 \rangle = 0$$

⋮

Bestimmung von E_n^1

○ bilde $\langle n^0 | \times (I)$ d.h.:

$$\begin{aligned} \underbrace{\langle n^0 | H_0 | n^1 \rangle} + \langle n^0 | H_1 | n^0 \rangle &= \underbrace{\langle n^0 | E_n^0 | n^1 \rangle} + \underbrace{\langle n^0 | E_n^1 | n^0 \rangle} \\ &= \underbrace{\langle H_0 n^0 | n^1 \rangle}_{=0} = E_n^0 \underbrace{\langle n^0 | n^1 \rangle}_{=0} & \underbrace{\langle n^0 | E_n^1 | n^0 \rangle}_{=1} = E_n^1 \underbrace{\langle n^0 | n^0 \rangle}_{=1} \\ & & \swarrow \\ & = E_n^0 \underbrace{\langle n^0 | n^1 \rangle}_{=0} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \boxed{E_n^1 = \langle n^0 | H_1 | n^0 \rangle}$$

↳ Term $\propto \lambda^1$ in der Potenzreihe für E_n

z.B. in einer eindimensionalen Ortsdarstellung:

$$E_n^1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx (\psi_n^0(x))^* H_1 \psi_n^0(x)$$

Konkrete Beispiele später

Bestimmung von $|n^1\rangle$

bilde $\langle m^0 | \times (I)$ mit $m \neq n$; d.h.

$$\begin{aligned} \underbrace{\langle m^0 | H_0 | n^1 \rangle}_{=} + \langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle &= \underbrace{\langle m^0 | E_n^0 | n^1 \rangle}_{= E_n^0 \langle m^0 | n^1 \rangle} + \underbrace{\langle m^0 | E_n^1 | n^0 \rangle}_{= E_n^1 \langle m^0 | n^0 \rangle = 0} \\ &= E_m^0 \langle m^0 | n^1 \rangle \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \langle m^0 | n^1 \rangle (E_m^0 - E_n^0) + \langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle = 0$$

$$\langle m^0 | n^1 \rangle = \frac{\langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0} \quad \text{falls } E_n^0 \neq E_m^0$$

Behauptung: aus diese Gleichung folgt

$$\boxed{|n^1\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0} |m^0\rangle} \quad *$$

↳ Term $\propto \lambda^1$ in der Potenzreihe für $|n\rangle$

Beweis: schreibe

$$|n^1\rangle = \sum_{\bar{m} \neq n} \frac{\langle \bar{m}^0 | H_1 | n^0 \rangle}{E_n^0 - E_{\bar{m}}^0} |\bar{m}^0\rangle, \quad \text{von links mit } \langle m^0 |$$

und $m \neq n$

$$\begin{aligned} \langle m^0 | n^1 \rangle &= \sum_{\bar{m} \neq n} \frac{\langle \bar{m}^0 | H_1 | n^0 \rangle}{E_n^0 - E_{\bar{m}}^0} \underbrace{\langle m^0 | \bar{m}^0 \rangle}_{= \delta_{m\bar{m}}} \\ &= \frac{\langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0} \quad \checkmark \end{aligned}$$

Bestimmung von E_n^2

bilde $\langle n^0 | \times$ (II) d.h.:

$$\underbrace{\langle n^0 | H_0 | n^2 \rangle}_{=0} + \langle n^0 | H_1 | n^1 \rangle = \langle n^0 | E_n^0 | n^2 \rangle + \langle n^0 | E_n^1 | n^1 \rangle + \langle n^0 | E_n^2 | n^0 \rangle$$

$$\text{rechte Seite: } \underbrace{E_n^0 \langle n^0 | n^2 \rangle}_{=0} + \underbrace{E_n^1 \langle n^0 | n^1 \rangle}_{=0} + \underbrace{E_n^2 \langle n^0 | n^0 \rangle}_{=1}$$

$$\text{linke Seite: } \langle n^0 | H_1 | n^1 \rangle$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow E_n^2 &= \underbrace{\langle n^0 | H_1 | n^1 \rangle}_{=} \\ &= \sum_{m \neq n} \frac{\langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0} |\bar{m}^0\rangle \end{aligned}$$

$$= \sum_{m \neq n} \frac{\langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0} \underbrace{\langle n^0 | H_1 | m^0 \rangle}_{\stackrel{!}{=} (\langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle)^*} = \dots$$

Nebenrechnung:

für einen hermiteschen Operator \hat{A} gilt

$$\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = (\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle)^*$$

Beweis:

$$\langle \psi | A | \psi \rangle = \langle A \psi | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx (A \psi(x))^* \psi(x) =$$

\uparrow A hermitesch \uparrow in eindim. Ortsdarstellung

$$= \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx (A \psi(x)) \psi(x)^* \right]^* \stackrel{!}{=} \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x)^* A \psi(x) \right]^* =$$

\uparrow $(a^*b) = (ab^*)^*$ für $a, b \in \mathbb{C}$ \uparrow $(A\psi(x))\psi(x)^* = \psi(x)^* A\psi(x)$

$$= \langle \psi | A | \psi \rangle^* \quad \checkmark$$

$$\dots = \boxed{\sum_{m \neq n} \frac{|\langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0} = E_n^2}$$

noch ein paar Bemerkungen:

- diese Art der Störungstheorie funktioniert nur für nicht-entartete Zustände, d.h. für solche $|n^0\rangle$ mit $E_n^0 \neq E_m^0$ für jedes $m \neq n$.

denn: $|n^1\rangle$ enthält $\frac{1}{E_n^0 - E_m^0}$

Falls Zustände entartet: verwende Störungstheorie für entartete Zustände
 → Schwabl Kap. 11.1.2

- sei $|n^0\rangle$ der (nicht-entartete) Grundzustand des ungestörten Systems

d.h. $E_n^0 < E_m^0$ für jedes $m \neq n$

$$\Rightarrow E_n^0 - E_m^0 < 0, \quad \frac{1}{E_n^0 - E_m^0} < 0$$

und mit $|\langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle|^2 \geq 0$ für jedes n, m

folgt dann $E_n^2 \leq 0$

Weite mit IV.7: Störungstheorie

zeitunabhängige Störungstheorie für den harmonischen Oszillator

der ungestörte Hamiltonoperator:

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 = \hbar \omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right)$$

es gilt: $H_0 |n^0\rangle = E_n^0 |n^0\rangle$

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

betrachte jetzt:

$$H = H_0 + \lambda H_1 \quad \text{mit} \quad H_1 = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

$\Rightarrow \lambda H_1$ wird als kleine Störung betrachtet

Achtung: Störungstheorie eigentlich gar nicht notwendig, da H auch exakt gelöst werden kann, denn

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \underbrace{(1+\lambda) \omega^2}_{=\bar{\omega}^2} x^2$$

\Rightarrow harm. Oszillator mit Kreisfrequenz $\bar{\omega} = \omega \sqrt{1+\lambda}$

\leadsto die exakten Eigenenergien sind

$$E_n = \hbar \bar{\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right) = \hbar \omega \sqrt{1+\lambda} \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

Frage: was folgt aus der Störungstheorie für die E_n^1 und E_n^2 in

$$E_n = E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots$$

es gilt:

$$E_n^1 = \langle n^0 | H_1 | n^0 \rangle$$

nützlich: Darstellung von H_1 mit Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren:

$$H_1 = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 = \frac{1}{2} m \omega^2 \underbrace{\frac{\hbar}{2m\omega}}_{= \frac{1}{4} \hbar \omega} (a + a^\dagger)^2$$

$$(a + a^\dagger)^2 = (a + a^\dagger)(a + a^\dagger) = aa + aa^\dagger + a^\dagger a + a^\dagger a^\dagger$$

$$aa^\dagger = 1 + a^\dagger a \quad = 1 + 2a^\dagger a + aa + a^\dagger a^\dagger$$

$$\Rightarrow H_1 = \frac{1}{4} \hbar \omega (1 + 2a^\dagger a + aa + a^\dagger a^\dagger)$$

$$\Rightarrow E_n^1 = \frac{1}{4} \hbar \omega \left[\underbrace{\langle n^0 | 1 | n^0 \rangle}_{=1} + 2 \langle n^0 | a^\dagger a | n^0 \rangle + \langle n^0 | aa | n^0 \rangle + \langle n^0 | a^\dagger a^\dagger | n^0 \rangle \right]$$

$$\bullet \underbrace{\langle n^0 | a^\dagger a | n^0 \rangle}_{= \hat{n}} = n \langle n^0 | n^0 \rangle = n$$

$$\bullet \underbrace{\langle n^0 | aa | n^0 \rangle}_{\sqrt{n} \langle n-1 | n-1 \rangle} = \sqrt{n} \underbrace{\langle n^0 | a | (n-1)^0 \rangle}_{= \sqrt{n-1} \langle n-2 | n-2 \rangle} =$$

$$= \sqrt{n} \sqrt{n-1} \underbrace{\langle n^0 | (n-2)^0 \rangle}_{=0} = 0 \quad (\text{siehe Vorl. Nr. XXI Seite 6})$$

$$\bullet \langle n^0 | a^\dagger a^\dagger | n^0 \rangle = \sqrt{n+1} \sqrt{n+2} \underbrace{\langle n^0 | (n+2)^0 \rangle}_{=0} = 0$$

$$\Rightarrow \boxed{E_n^1 = \frac{1}{2} \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2}\right)}$$

$$\begin{aligned} \text{d.h. } E_n &= E_n^0 + \lambda E_n^1 + \dots \\ &= \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{\lambda}{2} \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2}\right) + \dots \\ &= \hbar \omega \left(1 + \frac{\lambda}{2}\right) \left(n + \frac{1}{2}\right) + \dots \\ &= \hbar \omega \sqrt{1+\lambda} \left(n + \frac{1}{2}\right) \\ &\quad \uparrow \\ &\text{exakte Ergebnis} \end{aligned}$$

Potenzreihenentwicklung von $\sqrt{1+\lambda}$:

$$\sqrt{1+\lambda} = 1 + \frac{\lambda}{2} - \frac{\lambda^2}{8} + \dots$$

d.h. das Ergebnis der Störungsrechnung muß lauten

$$E_n = \hbar \omega \left(1 + \frac{\lambda}{2} - \frac{\lambda^2}{8} + \dots\right) \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

$$\text{d.h. } E_n^1 = \frac{1}{2} \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad \checkmark$$

$$E_n^2 = -\frac{1}{8} \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

↳ wird jetzt ausgerechnet

es gilt:

$$E_n^2 = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0}$$

berechne also $\langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle$ mit $m \neq n$

$$\begin{aligned} \langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle &= \frac{1}{4} \hbar \omega \left[\underbrace{\langle m^0 | 1 | n^0 \rangle}_{=0} + 2 \underbrace{\langle m^0 | a^\dagger a | n^0 \rangle}_{=n \langle m^0 | n^0 \rangle}_{=0} \right. \\ &\quad \left. + \langle m^0 | a a | n^0 \rangle + \langle m^0 | a^\dagger a^\dagger | n^0 \rangle \right] \end{aligned}$$

$$\bullet \langle m^0 | a a | n^0 \rangle = \sqrt{n} \sqrt{n-1} \underbrace{\langle m^0 | (n-2)^0 \rangle}_{= \delta_{m, n-2}}$$

Achtung: $a | 0^0 \rangle = \sqrt{0} \underbrace{|(-1)^0 \rangle}_{\text{diesen Zustand gibt's gar nicht}} = 0$

$$a a | 1^0 \rangle = \sqrt{1} \sqrt{0} |(-1)^0 \rangle = 0$$

Formel wg. Vorfaktor $\sqrt{n} \sqrt{n-1}$ trotzdem richtig

$$\bullet \langle m^0 | a^\dagger a^\dagger | n^0 \rangle = \sqrt{n+1} \sqrt{n+2} \underbrace{\langle m^0 | (n+2)^0 \rangle}_{= \delta_{m, n+2}}$$

$$\Rightarrow E_n^2 = \frac{|\langle (n-2)^0 | H_1 | n^0 \rangle|^2}{E_n^0 - E_{n-2}^0} + \frac{|\langle (n+2)^0 | H_1 | n^0 \rangle|^2}{E_n^0 - E_{n+2}^0} = \dots$$

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

$$\Rightarrow E_n^0 - E_{n-2}^0 = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - \hbar \omega \left(n-2 + \frac{1}{2} \right) = 2\hbar \omega$$

$$E_n^0 - E_{n+2}^0 = -2\hbar \omega$$

$$|\langle (n-2)^0 | H_1 | n^0 \rangle|^2 = \left(\frac{1}{4} \hbar \omega \sqrt{n} \sqrt{n-1} \right)^2 = \frac{1}{16} \hbar^2 \omega^2 n(n-1)$$

$$|\langle (n+2)^0 | H_1 | n^0 \rangle|^2 = \frac{1}{16} \hbar^2 \omega^2 (n+1)(n+2)$$

$$\dots = \frac{1}{32} \hbar \omega \left[n(n-1) - (n+1)(n+2) \right] =$$

$$= n^2 - n - (n^2 + 3n + 2) = -4n - 2$$

$$= -\frac{1}{8} \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad \checkmark$$

betrachte jetzt:

$$H = H_0 + \lambda H_1 \quad \text{mit } H_1 = \alpha X$$

$$\alpha = \sqrt{m \hbar \omega^3}$$

gesucht: E_n bis zur zweiten Ordnung in λ

dh. $E_n^1, E_n^2 \rightarrow$ siehe Übungen

Achtung: auch diese H läßt sich exakt lösen

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 + \lambda \alpha x = \dots$$

$$\hookrightarrow = \frac{1}{2} m \omega^2 \left[x^2 + \frac{2\lambda \alpha}{m \omega^2} x \right]$$

$$= (x + x_0)^2 - c$$

$$= x^2 + 2x x_0 + x_0^2 - c$$

$$\Rightarrow x_0 = \frac{\lambda \alpha}{m \omega^2}, \quad c = x_0^2 = \left(\frac{\lambda \alpha}{m \omega^2} \right)^2$$

$$\dots = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 (x + x_0)^2 - \frac{1}{2} \frac{\lambda^2 \alpha^2}{m \omega^2}$$

Substitution: $x' = x + x_0$

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x'}$$

$$\Rightarrow H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x'^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x'^2 - \frac{1}{2} \frac{\lambda^2 \alpha^2}{m \omega^2}$$

aus $H_0 \psi_n^0(x) = E_n^0 \psi_n^0(x)$ folgt:

$\psi_n(x) = \psi_n^0(x + x_0)$ sind die Lösungen der SG

$$H \psi_n(x) = E_n \psi_n(x) \quad \text{mit Eigenwerten } E_n$$

$$E_n = E_n^0 - \frac{1}{2} \frac{\lambda^2 \alpha^2}{m \omega^2}$$

Beweis:

$$H \psi_n(x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 (x + x_0)^2 - \frac{1}{2} \frac{\lambda^2 \alpha^2}{m \omega^2} \right] \psi_n^0(x + x_0) = \dots$$

Substitution wie zuvor:

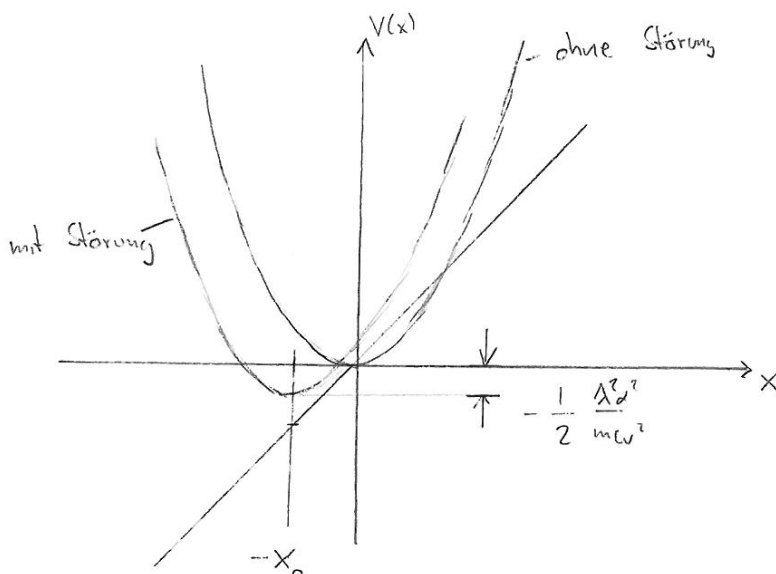
$$= \underbrace{\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x'^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x'^2 \right]}_{= E_n^0} \psi_n^0(x') - \frac{1}{2} \frac{\lambda^2 \alpha^2}{m \omega^2} \psi_n^0(x')$$

$$= E_n^0 \psi_n^0(x')$$

$$= \underbrace{\left(E_n^0 - \frac{1}{2} \frac{\lambda^2 \alpha^2}{m \omega^2} \right)}_{= E_n} \underbrace{\psi_n^0(x')}_{\psi_n(x)}$$

$$= E_n \psi_n(x) \quad \checkmark$$

graphisch:

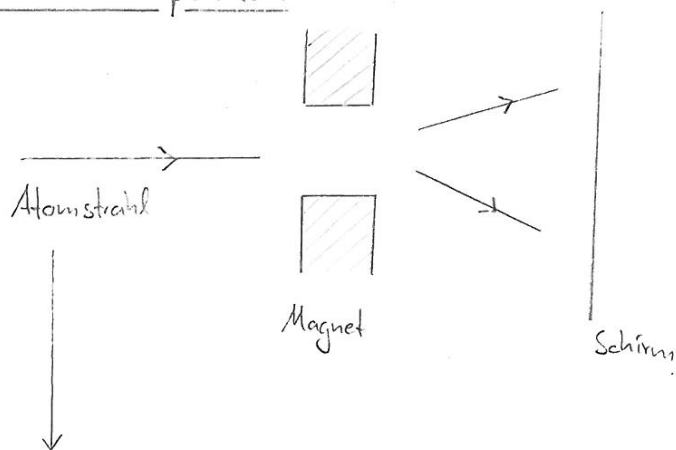


IV.8 Drehimpuls II: Spin

Spin = „innerer“ Drehimpuls eines Teilchens

Stern-Gerlach-Experiment

(1922)



Silberatome, $l = 0 \Rightarrow$ man erwartet keine Aufspaltung aufgrund der Bahn-Drehimpulse, da $5s e^-$

Aufspaltung in zwei Teilstrahlen \Rightarrow Elektron muß einen inneren Drehimpuls (= Spin) mit zwei möglichen Einstellungen haben

mathematische Formulierung

$$\text{Spinoperator } \vec{S} = \begin{pmatrix} S_x \\ S_y \\ S_z \end{pmatrix}$$

hat die Eigenschaften eines Drehimpuls-Operators, d.h.

Vertauschungsrelationen: $[S_i, S_j] = i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} S_k$

Def. $S_+ = S_x + i S_y$

$S_- = S_x - i S_y$

vgl. Blatt XI, Aufgabe 1.

$$\text{es gilt: } [S_+, S_-] = 2\hbar S_z$$

$$[S_z, S_\pm] = \pm \hbar S_\pm$$

$$\text{außerdem: } [\vec{S}^2, S_i] = 0$$

Eigenfunktionen des Spin-Operators

analog zum Drehimpulsoperator:

$$\vec{L}^2 |lm\rangle = \hbar^2 l(l+1) |lm\rangle$$

$$L_z |lm\rangle = \hbar m |lm\rangle$$

$$\text{mit } l = 0, 1, 2, \dots$$

$$m = -l, -l+1, \dots, +l$$

$$\text{hier: } l = \frac{1}{2} \text{ „Spin } \frac{1}{2}\text{“}$$

$$\Rightarrow m = -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$$

$$\text{d.h. } \vec{S}^2 \left| \frac{1}{2} m \right\rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 \left| \frac{1}{2} m \right\rangle$$

$$S_z \left| \frac{1}{2} m \right\rangle = m \hbar \left| \frac{1}{2} m \right\rangle$$

abkürzende Schreibweise:

$$m = +\frac{1}{2}: \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle = |\uparrow\rangle \quad (\text{„Spin rauf“}) \quad (\text{up})$$

$$m = -\frac{1}{2}: \left| \frac{1}{2} -\frac{1}{2} \right\rangle = |\downarrow\rangle \quad (\text{„Spin runter“}) \quad (\text{down})$$

$$\text{es gilt: } \langle \uparrow | \uparrow \rangle = \langle \downarrow | \downarrow \rangle = 1$$

$$\langle \downarrow | \uparrow \rangle = 0$$

Behauptung:

$$S_+ |\downarrow\rangle = \hbar |\uparrow\rangle, \quad S_- |\uparrow\rangle = \hbar |\downarrow\rangle$$

Beweis: es gilt $[S_z, S_+] = \hbar S_+$

$$\Rightarrow [S_z, S_+] |\downarrow\rangle = \hbar S_+ |\downarrow\rangle$$

$$\begin{aligned} S_z S_+ |\downarrow\rangle - S_+ \underbrace{S_z}_{-\frac{1}{2}\hbar} |\downarrow\rangle &= \hbar S_+ |\downarrow\rangle \\ &= \frac{1}{2}\hbar S_+ |\downarrow\rangle \end{aligned}$$

$$\Rightarrow S_z (S_+ |\downarrow\rangle) = \frac{1}{2}\hbar (S_+ |\downarrow\rangle)$$

$\Rightarrow S_+ |\downarrow\rangle$ ist Eigenzustand zu S_z mit Eigenwert $\frac{1}{2}\hbar$

d.h. $S_+ |\downarrow\rangle \propto |\uparrow\rangle$

[Vorfaktor \hbar fehlt noch]

andere Schreibweise

$$\boxed{|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}}$$

\rightarrow Vektoren in einem zwei-dimensionalen Zustandsraum

$\Rightarrow S_x, S_y, S_z$ lassen sich als (2×2) -Matrizen schreiben \square

z.B. $S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

denn: $S_z |\downarrow\rangle = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle$

$S_z |\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle$ ✓

Pauli-Matrizen

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \sigma_x, \quad S_y = \frac{\hbar}{2} \sigma_y, \quad S_z = \frac{\hbar}{2} \sigma_z$$

oder kurz $\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$

mit

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

In dieser Darstellung gilt:

$$S_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

denn:

$$\begin{aligned} S_+ &= S_x + i S_y = \frac{\hbar}{2} \sigma_x + i \frac{\hbar}{2} \sigma_y \\ &= \frac{\hbar}{2} \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \right] = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \checkmark \\ &= \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Eigenschaften der Pauli-Matrizen:

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \mathbb{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i \sigma_z$$

... (siehe Schwabl, Kap. 9.3)