

Theoretische Physik III
WS 92/93

Professor Johannes Zittartz

22. Dezember 1996

Getippt by Michael Pütter¹

Zeichnungen by
Michael Pütter
Susan Dittmar

Korrekturen by
Sigrun Ritter
Georg Harzheim

¹ zu erreichen unter puetter@sun.ph-cip.uni-koeln.de

Inhaltsverzeichnis

1	Grundlagen der Quantenmechanik	1
1.1	Einleitung	1
1.2	Quantennatur des Lichtes	1
1.2.1	Photoeffekt	2
1.2.2	Comptoneffekt	2
1.3	Elektronenbeugung, Zustand, Zustandsfunktion, Statistische Deutung	3
1.3.1	Versuch von Davisson und Germer (1927)	3
1.3.2	De Broglie und Beugung am Spalt	4
1.3.3	Superpositionsprinzip	5
1.3.4	Doppelspalt	5
1.4	Schrödingergleichung	6
1.5	Kontinuitätsgleichung, Mittelwerte	7
1.5.1	Ortsmittel	9
1.5.2	Impulsmittel	9
1.5.3	Satz von Ehrenfest	9
1.6	Stationäre Zustände, Eigenzustände, Eigenwerte, Operatoren	10
1.6.1	Stationäre Zustände	10
1.6.2	Eigenwerte, Eigenwertgleichung	10
1.6.3	Operatoren	11
1.6.4	Hermiteische Operatoren	11
1.6.5	Allgemeines Eigenwertproblem	12
1.7	Teilchen im begrenzten Raumbereich	13
1.8	Linearer, harmonischer Oszillator	15
1.9	Potentialtopf (eindimensionaler), Streuzustände, Impulsdarstellung	19
1.9.1	Impulsdarstellung	22
2	Allgemeiner Formalismus der Quantenmechanik	26
2.1	Dirac-Formalismus, Mathematische Grundlagen	26
2.1.1	Der Hilbertraum	27
2.1.2	Operatoren im Hilbertraum	28
2.1.3	Orthonormierung	30
2.1.4	Darstellung von Operatoren	30
2.1.5	Das Operatorprodukt	30
2.1.6	Der Basiswechsel	31
2.1.7	Darstellungswechsel für Vektoren	31
2.1.8	Darstellungswechsel für Operatoren	31
2.2	Eigenwertproblem	32

2.2.1	Matrixmethode zur Lösung des Eigenwertproblems	33
2.2.2	Entartung	33
2.2.3	Eigenwertproblem von Observablen	34
2.3	Deduktiver Aufbau der Quantenmechanik	37
2.4	Allgemeine Unschärferelation (Heisenberg)	39
2.5	Zeitliche Entwicklung: Schrödingerbild und Heisenbergbild	40
3	Symmetrien, Drehimpuls, Zentralsymmetrische Probleme	42
3.1	Symmetrietransformationen	42
3.1.1	Spiegelinvarianz	43
3.1.2	Translationsinvarianz	44
3.2	Rotationsinvarianz (Drehungen), Vektoroperatoren	44
3.3	Drehimpuls, Eigenwerte und Eigenzustände	47
3.3.1	Eigenwerte und Eigenzustände	48
3.4	Ortsdarstellung der Bahndrehimpulszustände; Kugelfunktionen	51
3.5	Zentralsymmetrische Probleme, das Wasserstoffatom	53
3.5.1	Das Wasserstoffatom	55
3.6	Normaler Zeeman-Effekt	60
3.7	Zweikörperproblem, kontinuierliches Spektrum	61
3.8	Kontinuierliches Spektrum für das Zentralproblem	63
4	Streutheorie	65
4.1	Streuquerschnitt, Partialwellen	65
4.1.1	Partialwelle für ein Zentralpotential	67
4.2	Berechnung der Streuphasen, Bornsche Näherung	69
4.3	Potential endlicher Reichweite, Niederenergie-Streuung	71
4.3.1	Klassische Streuung	71
4.3.2	Quantenmechanische Streuung	73
4.3.3	Niederenergie-Streuung	73
4.4	Harte Kugel; s -Wellenstreuung am Potentialtopf; Resonanz	74
4.4.1	s -Wellen-Streuung am Potentialtopf	76
4.5	Beschreibung des Streuproblems mittels der Green'schen Funktion; elastische Streuung am Atom	79
4.5.1	Bornsche Näherung, Diagramme	82
4.6	Komplexe Streuungen, Abstrakte Formulierungen	85
4.6.1	Verallgemeinerung unserer Beschreibung	86
5	Stationäre Näherungsverfahren	87
5.1	Rayleigh-Schrödinger Störungsentwicklung, nichtentarteter Fall	87
5.2	Störungsrechnung im Falle von Entartung bzw. Fastentartung	91
5.3	Variationsverfahren	95
5.3.1	Variationsverfahren für den Grundzustand	96

6 Spin (des Elektrons)	97
6.1 Spin und Spinoren	97
6.1.1 Verallgemeinerung auf N Elektronen	101
6.2 Spinabhängige Wechselwirkungen	102
6.3 Addition von Drehimpulsen	103
6.3.1 Addition von $\vec{J}_1 + \vec{J}_2 = \vec{J}$	104
6.4 Feinstruktur der Atome, speziell des Wasserstoffs	108
6.5 Anomaler Zeeman-Effekt, Landé-Faktor	110
7 Theorie der Quantenübergänge (Allgemeine zeitabhängige Entwicklungen)	112
7.1 Wechselwirkungsbild (Dirac bzw. Tomanaga-Bild)	114
7.2 Kleine Störung, erste Näherung, Goldene Regel	116
7.3 Exakte Streutheorie, S -Matrix, T -Matrix	118
7.3.1 S -Matrix und T -Matrix	121
7.3.2 Verknüpfung von S - und T -Matrix	121
7.4 Allgemeiner linearer Response	122
8 Identische Teilchen, Vielkörperproblem	124
8.1 Nichtunterscheidbarkeit von identischen Teilchen	124
8.2 Permutationen	126
8.3 2. Quantisierung	132
8.3.1 Besetzungszahldarstellung	132
8.3.2 Darstellung der Operatoren	134

Abbildungsverzeichnis

1	Photoeffekt	2
2	Photon-Elektron-Stoß (Comptoneffekt)	3
3	Davisson Germer (1927)	4
4	Doppelspalt	5
5	unendlich hoher Potentialtopf	13
6	stehende Wellen im unendlich hohen Potentialtopf	14
7	Energien des harmonischen Oszillators	18
8	Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators	19
9	Eindimensionaler Potentialtopf	20
10	Stehende Welle im Potentialtopf	22
11	Verlauf des Transmissionskoeffizienten	23
12	Drehung um z -Achse	42
13	Drehung um den Winkel α	45
14	Auswirkung des Paritätsoperators	53
15	55
16	Effektives Potential $V_{eff}(l)$	57
17	Aufenthaltswahrscheinlichkeit des $1s$ Orbitals	59
18	Auswirkung des Paritätsoperators	61
19	Auslaufende Kugelwelle	64
20	Kugelwelle, Streuung an einem Target	65
21	Streuexperiment	66
22	67
23	Zerlegung von $U(r)$	71
24	Potential endlicher Reichweite	72
25	Klassische Streuung	72
26	Sphärische Besselfunktion	73
27	Schattenstreuung	76
28	Potentialtopf	76
29	Lorentzkurve bei Resonanz	78
30	Randfunktionen	80
31	82
32	Graphische Deutung der Integralgleichung	82
33	0. Näherung	83
34	1. Näherung (Bornsche Näherung)	83
35	2. Näherung	83
36	n -te Näherung	84
37	88

38	H_0 -Spektrum	92
39	Aufspaltung des H_0 -Spektrums	93
40	95
41	Multipllett	99
42	105
43	Termschema für $n = 2$	110
44	Streuung zweier Teilchen	113
45	Zwei identische Teilchen klassisch	124
46	Zwei identische Teilchen quantenmechanisch	125
47	Streuexperiment	125
48	Young-Tableaus	128

1 Grundlagen der Quantenmechanik

1.1 Einleitung

Die klassische Physik, d.h. Mechanik und Elektrodynamik, beschreibt viele Phänomene ausreichend. Es gibt jedoch viele Phänomene (meistens Entdeckungen dieses Jahrhunderts), die gar nicht oder nicht zufriedenstellend beschrieben werden:

1. Atomphysik: Größe und Stabilität der Atome, Atomspektren: diskrete Linien, Linienaufspaltung in elektromagnetischen Feldern: Starkeffekt, Zeeman-Effekt; Wechselwirkung von Licht und Atomen
2. Molekülphysik: Spektren, chemische (homöopolare) Bindung
3. Kernphysik: Spektren, Kernreaktionen, radioaktiver Zerfall
4. Teilchenphysik: Streuung, Zerfall, Wechselwirkung mit Strahlung
5. makroskopische Phänomene: Strahlung des schwarzen Körpers (Planck), Kondensationsphänomene: Ferromagnetismus, Supraleitung

Die Quantenmechanik erklärt alle diese Phänomene, jedenfalls im nichtrelativistischen Bereich quantitativ und qualitativ. Nichtrelativistischer Bereich: $v \ll c$, mit v als die Geschwindigkeit der betrachteten Objekte.

In den meisten Fällen ist die klassische Physik der Grenzfall der allgemeinen Quantenmechanik, in dem das Planck'sche Wirkungsquantum \hbar gegen Null geht.

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,05 \cdot 10^{-27} \text{ erg sec}$$

Das geht jedoch nicht immer, oft existiert ein solcher Grenzfall nicht, d.h. es existiert kein klassisches Analogon.

In der Quantenmechanik werden wir gewisse Begriffe der klassischen Physik aufgeben bzw. erweitern müssen, z.B. ist der Begriff der definierten Bahn eines Teilchens nicht mehr haltbar.

Die Grundgesetze der Quantenmechanik können wir ebensowenig ableiten, wie etwa die Newtonschen Gleichungen der Mechanik oder die Maxwell-Gleichungen der Elektrodynamik. Wir wollen im Folgenden jedoch keinen deduktiven Weg beschreiten, sondern die Gesetzmäßigkeiten induktiv, durch einen Lernvorgang, aus experimentellen Fakten und Plausibilitätsbetrachtungen abstrahieren.

1.2 Quantennatur des Lichtes

Die Optik beschäftigt sich mit Lichtwellen. Ebene Welle Ebene in z -Richtung:

$$E_x = E_z = B_y = B_z = 0$$

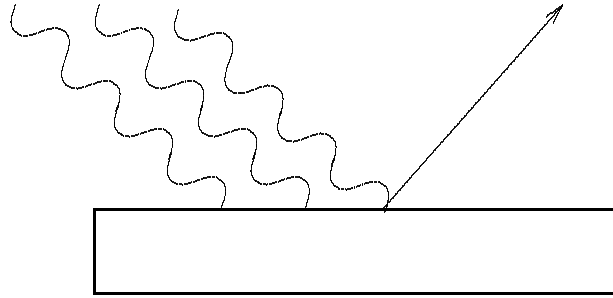
$$E_y = -B_x = A \cos(kz - \omega t) = \text{Re} \left(A e^{i(kz - \omega t)} \right)$$

dann ist

$$\omega = 2\pi\nu \quad \text{Kreisfrequenz}$$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi\nu}{\lambda\nu} = \frac{\omega}{c}$$

$$\vec{k} = (0, 0, k) \quad \text{Ausbreitungsvektor}$$



Änderung der Frequenz \rightarrow Änderung der kinetischen Energie.
 Änderung der Intensität \rightarrow Änderung der Anzahl der Elektronen.

Abbildung 1: Photoeffekt

Intensitäten der Welle: $(E^2 + B^2) \sim |Ae^{i(kz - \omega t)}|^2$

Die Wellennatur des Lichtes ist ersichtlich bei Interferenzen und Beugung. Interferenz ist die Überlagerung von Wellen:

$$\psi_1(\vec{r}, t) = A_1 e^{i(\vec{k}_1 \vec{r} - \omega t)} \quad \text{Zustand 1} \quad (1.2. 1)$$

$$\psi_2(\vec{r}, t) = A_2 e^{i(\vec{k}_2 \vec{r} - \omega t)} \quad \text{Zustand 2} \quad (1.2. 2)$$

$$\psi_3(\vec{r}, t) = \psi_1(\vec{r}, t) + \psi_2(\vec{r}, t) \quad \text{Zustand 3} \quad (1.2. 3)$$

$$I_3 \neq I_1 + I_2 \quad (1.2. 4)$$

Die Wellenbeschreibung bricht zusammen bei Absorption und Emission.

1.2.1 Photoeffekt

Deutung: Elektronen absorbieren *Lichtquanten*, Photonen, s. Abbildung (1). Photonenenergie $\varepsilon = \hbar\omega$ (monochromatische Welle besteht aus vielen Photonen)

$$E_{kin}^{Elektron} = \frac{m}{2} v^2 = \frac{p_{Elektron}^2}{2m} = \hbar\omega - A \quad A = \text{Austrittsarbeit} \quad (1.2. 5)$$

Der Effekt findet erst statt, wenn $\hbar\omega > A$. Im Wellenbild sollten auch bei sehr kleiner Frequenz ω Elektronen austreten, wenn nur genügend Intensität (d.h. Energie/Zeit) vorhanden ist.

1.2.2 Comptoneffekt

Aus der Energie $\varepsilon = \hbar\omega$ folgt, daß die Photonen auch einen Impuls haben. Aus der Relativitätstheorie folgt:

$$E = \sqrt{m_0^2 c^4 + p^2 c^2} = mc^2 \quad (1.2. 6)$$

Photonen oder andere Teilchen mit $v = c$ haben Ruhemasse $m_0 = 0$, da sonst $E = m = \infty$. Also:

$$p = |\vec{p}| = \frac{E}{c} = \frac{\hbar\omega}{c} = \frac{\hbar 2\pi\nu}{\lambda\nu} = \hbar \frac{2\pi}{\lambda} = \hbar k \quad (1.2. 7)$$

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} \quad (1.2. 8)$$

Daß diese Deutung richtig ist, wird durch den Comptoneffekt bestätigt, s. Abbildung (2).

$$\varepsilon_0 + m_0 c^2 = \varepsilon + E \quad \text{Energiesatz} \quad (1.2. 9)$$

$$\hbar \vec{k}_0 = \hbar \vec{k} + \vec{p} \quad \text{Impulssatz} \quad (1.2. 10)$$

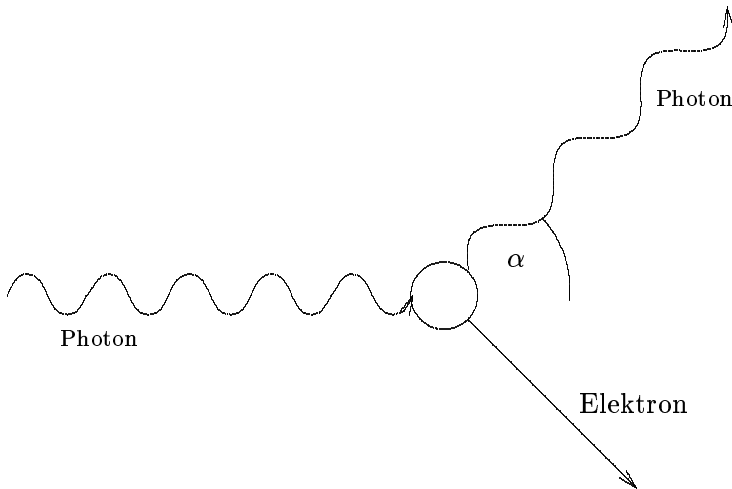


Abbildung 2: Photon-Elektron-Stoß (Comptoneffekt)

$$\hbar c(k_0 - k) + m_0 c^2 = \sqrt{m_0^2 c^4 + c^2 \hbar^2 (\vec{k}_0 - \vec{k})^2} \quad \text{mit } E = \hbar c |\vec{k}| \quad (1.2. 11)$$

quadrieren und Division durch $2\hbar^2 c^2$ liefert:

$$k \left(k_0 (1 - \cos \alpha) + \frac{m_0 c}{\hbar} \right) = \frac{m_0 c}{\hbar} k_0 \quad (1.2. 12)$$

$$\lambda = \lambda_0 + \lambda_{Compton} (1 - \cos \alpha) \quad (1.2. 13)$$

$$\lambda_{Compton} = \frac{2\pi\hbar}{m_0 c} = \frac{h}{m_0 c} = \text{Comptonwellenlänge} \approx 2,4 * 10^{-12} m \quad (1.2. 14)$$

Genau dies wird beobachtet.

Bemerkung: Die Quantennatur des Lichtes haben wir hier nur als Beispiel angeführt. Die entsprechende Quantenmechanik des Lichtes ist notwendig relativistisch \rightarrow Quantenelektrodynamik bzw. Quantentheorie der Strahlung.

Wir betrachten in dieser Vorlesung nur die nichtrelativistische Quantenmechanik . Wir werden das Photon als relativistisch gar nicht mitbehandeln. Die Untersuchung des Comptonprozesses ist Aufgabe der Quantenelektrodynamik.

1.3 Elektronenbeugung, Zustand, Zustandsfunktion, Statistische Deutung

1.3.1 Versuch von Davisson und Germer (1927)

Beim Versuch von Davisson und Germer, s. Abbildung (3), durchlaufen die Elektronen, die aus einer Quelle herauskommen, ein Potential und erlangen dabei eine Energie

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad (1.3. 1)$$

Nach Durchtritt durch einen Kristall zeigt sich, auf einer Photoplatte oder anderem Detektum, das gleiche Beugungsbild, wie bei der Lichtbeugung an Gittern Gitter bzw. Röntgenlichtbeugung am Kristall. Elektronen haben anscheinend Welleneigenschaften.

Das Experiment kann mit anderen Teilchen, z.B. Neutronen oder Atomen, wiederholt werden und liefert das gleiche Ergebnis.

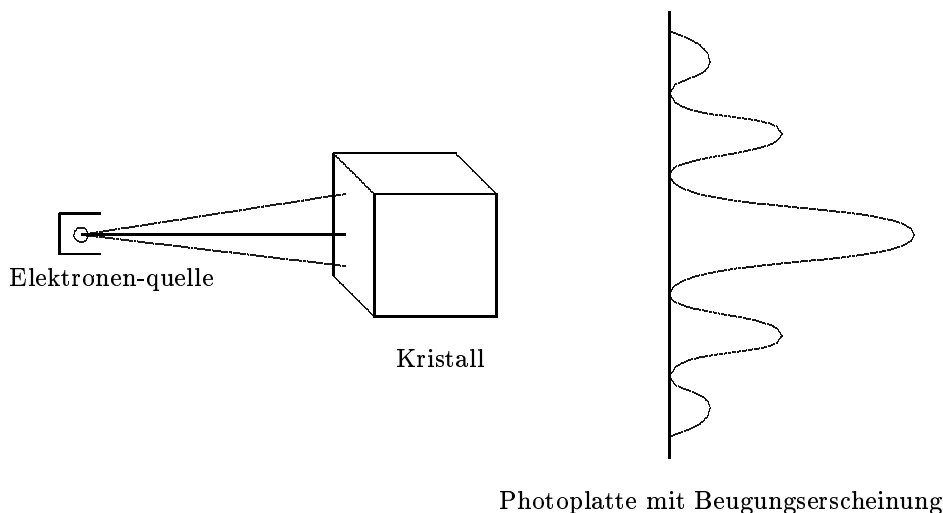


Abbildung 3: Davisson Germer (1927)

1.3.2 De Broglie und Beugung am Spalt

Folgerung:

- Um die Beugungsfigur quantitativ zu deuten, können wir uns an die Regeln der Wellenlehre halten daraus folgt die Wellenlänge λ .

Die Zusammenhänge sind wie beim Photon: $E = \hbar\omega$, $\vec{p} = \hbar\vec{k}$, $E = |\vec{p}|c$

Nach **de Broglie** gilt auch für Teilchen:

$$E = \hbar\omega, \quad \vec{p} = \hbar\vec{k}$$

aber z.B. für Elektronen ist $E = \frac{p^2}{2m}$.

Z.B. Elektronenstrahl mit Impuls \vec{p} , Energie $\frac{p^2}{2m} \Rightarrow \psi(\vec{r}, t) = Ae^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}$.

Bei der Lichtbeugung am Spalt gehen wir so vor:

Wir beschreiben die von den einzelnen Punkten des Spaltes ausgehenden Wellen durch die Wellenfunktion.

$$\psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)} \quad \text{ebene Welle} \quad (1.3. 2)$$

Und deuten die Beugungsintensität durch die Interferenz der von den einzelnen Spaltpunkten ausgehenden ebenen Wellen. Das gleiche Prinzip führt auch bei der Elektronenbeugung zum Erfolg.

2. Bedeutung von $\psi(r, t)$

Wenn wir die Beobachtungszeit verringern, also weniger Elektronen aus der Quelle kommen, so bleibt die Beugungsfigur erhalten, aber die Intensität nimmt ab. Schließlich löst sich die Figur in eine körnige Struktur auf, daraus folgt die Punkte der Struktur entsprechen den einzelnen eingetroffenen Elektronen. Das könnte man auch durch einen Geigerzähler nachmessen. Es ergibt sich ein gleich starkes Signal. Das bedeutet: Elektronen treffen als ganze Teilchen auf die Photoplatte auf (es gibt keine halben Elektronen).

Deutung: Die Elektronen, oder Materieteilchen, verlaufen nicht auf einer wohldefinierten Bahn, sondern können anscheinend an einen beliebigen Ort der Photoplatte gelangen. Aber es gibt eine Häufigkeitsverteilung.

Beachte: Die Elektronen kommen einzeln an, d.h. unabhängig voneinander. \rightarrow Gesamtheit identischer Teilchen, alle im gleichen Zustand. Zustand heißt in diesem Fall: Jedes Elektron hat die Energie $E = \frac{p^2}{2m}$ und tritt durch den Kristall.

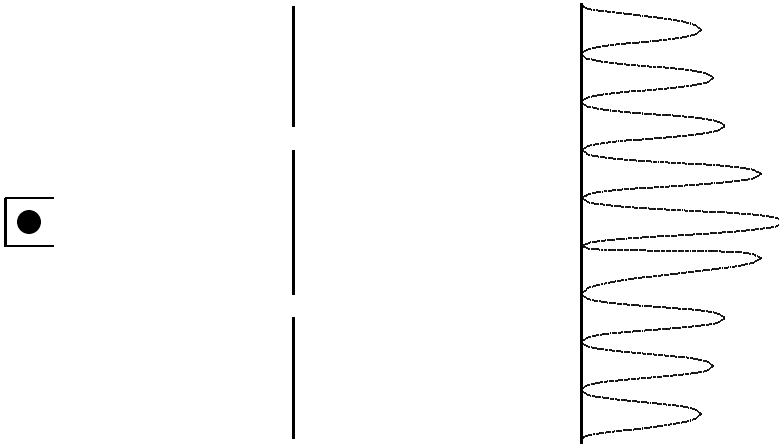


Abbildung 4: Doppelspalt

Deutung: Es gibt eine Wahrscheinlichkeit

$$\rho(r, t) dF \tag{1.3. 3}$$

daß das einzelne Elektronen am Ort r des Bildschirms im Intervall dF zur Beobachtung kommt. Es gilt:

$$\rho(r, t) = \psi^*(r, t)\psi(r, t) = |\psi(r, t)|^2 \tag{1.3. 4}$$

$\psi(r, t)$ = Wahrscheinlichkeitsamplitude für den Zustand ψ = Zustandsfunktion

Für ein einzelnes Elektron gibt es also eine Wahrscheinlichkeit ψ , an den Ort r zu gelangen. Wenn wir nun, wie im Experiment, viele Elektronen durch den Kristall schicken, ergibt sich aus dem Punktmuster eine Beugungsfigur, d.h. eine Intensitätsverteilung.

Bemerkung: Wie wir beim Licht die Intensität beobachten, so beobachten wir auch hier die Wahrscheinlichkeit $|\psi|^2$. Zugrunde liegt aber die Zustandsfunktion. So wie in der Wellenlehre die Wellenfunktion sich aus einer Wellengleichung ergibt (Maxwell Gleichung für Licht), so erwarten wir hier eine Gleichung für die Zustandsfunktion $\psi(r, t)$.

1.3.3 Superpositionsprinzip

Wenn $\psi_1(\vec{r}, t)$ und $\psi_2(\vec{r}, t)$ mögliche Zustände sind, dann auch $\psi = \psi_1 + \psi_2$ (wobei $\rho \neq \rho_1 + \rho_2$).

1.3.4 Doppelspalt

Ein einfaches Beispiel für **Zustand** \equiv Wellenfunktion \equiv Wahrscheinlichkeitsamplitude ist der Doppelspalt, s. Abbildung (4).

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi_1(\vec{r}, t) + \psi_2(\vec{r}, t) \tag{1.3. 5}$$

$$\rho(\vec{r}, t) \equiv |\psi(\vec{r}, t)|^2 = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + \psi_1^*\psi_2 + \psi_1\psi_2^* \tag{1.3. 6}$$

Deutung: Kennzeichnend für eine Gesamtheit von Teilchen im gleichen Zustand ψ ist die Zustandsfunktion $\psi(\vec{r}, t)$.

$$\rho(\vec{r}, t) d^3 r = |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3 r \tag{1.3. 7}$$

ist die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen im Zustand $\psi(\vec{r}, t)$ an der Stelle $\vec{r}, \vec{r} + d\vec{r}$ zur Zeit t anzutreffen.

Normierung:

$$\int d^3 r \rho(\vec{r}, t) = \int d^3 r \psi^*(\vec{r}, t)\psi(\vec{r}, t) = 1 \tag{1.3. 8}$$

$\psi(\vec{r}, t)$ ist zeitlich veränderlich, da der Zustand sich ändern kann, aber die Gesamtwahrscheinlichkeit, das Teilchen irgendwo anzutreffen, muß eins sein, d.h. Gewißheit, und zwar unabhängig von t .

1.4 Schrödingergleichung

Klassische Mechanik: Ein Teilchen der Masse m in einem Potential $V(\vec{r})$ wird beschrieben durch die Hamiltonfunktion

$$H = H(\vec{p}, \vec{r}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \quad \text{mit } H(\vec{p}, \vec{r}) = E = \text{Energie} \quad (1.4. 1)$$

für ein freies Teilchen gilt:

$$H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} \quad (1.4. 2)$$

Wir suchen eine Gleichung für die Zustandsfunktion.

$$\psi(\vec{r}, t) = A e^{i(\frac{\vec{p}}{\hbar}\vec{r} - \frac{E}{\hbar}t)} \quad \text{ebene Welle} \quad (1.4. 3)$$

Suche DGL, die $E = \frac{\vec{p}^2}{2m}$ erzwingt.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = E \psi(\vec{r}, t) \quad (1.4. 4)$$

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad (1.4. 5)$$

$$\nabla \psi(\vec{r}, t) = \frac{i}{\hbar} \vec{p} \psi(\vec{r}, t) \quad (1.4. 6)$$

$$\left(\frac{\hbar}{i} \nabla \right)^2 \psi(\vec{r}, t) = \vec{p}^2 \psi(\vec{r}, t) \quad (1.4. 7)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla \right)^2 \psi(\vec{r}, t) \quad (1.4. 8)$$

Gleichung (1.4. 8) ist die **Schrödingergleichung** für ein freies Teilchen der Masse m . Der Übergang zur Quantenmechanik folgt somit aus dem Korrespondenzprinzip.

Korrespondenzprinzip: Ersetze $E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ und $\vec{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla$

$$\rightarrow H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla \right)^2 \quad (1.4. 9)$$

$$\nabla^2 = \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (1.4. 10)$$

Die Schrödingergleichung folgt dann aus dem Energiesatz $H = E$.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t) \quad (1.4. 11)$$

Die Größe $\frac{\partial}{\partial t}$ und ∇ heißen auch Differentialoperator. Allgemein definiert jede Transformation

$$\psi(\vec{r}, t) \rightarrow \rho(\vec{r}, t)$$

den Operator A :

$$\rho(\vec{r}, t) = A \psi(\vec{r}, t) \quad (1.4. 12)$$

Der Hamiltonoperator für ein freies Teilchen lautet:

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla \right)^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta = \frac{\hat{p}^2}{2m} \quad (1.4. 13)$$

Sei $\psi(\vec{r}, t) = f(\vec{r})\psi(\vec{r}, t)$ eine einfache Multiplikation, dann ist $f(\vec{r})$ ebenfalls ein Operator.

Der Hamiltonoperator \hat{H} bei einem äußeren Feld lautet

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}) \quad (1.4. 14)$$

Allgemeine Schrödingergleichung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \hat{H}\psi(\vec{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})\right)\psi(\vec{r}, t) \quad (1.4. 15)$$

Dies ist die fundamentale Gleichung, die den quantenmechanischen Zustand ψ definiert. Sie spielt die gleiche Rolle wie die Newtonsche Bewegungsgleichung $m\ddot{\vec{r}} = K(\vec{r})$ zur Bestimmung der klassischen Bahn eines Teilchens.

Bemerkung: Die Deutung der Zustandsfunktion hatten wir schon gegeben. Zusammen mit der Schrödingergleichung haben wir jetzt die Grundlage zur Behandlung quantenmechanischer Probleme geschaffen. Wir haben die Schrödingergleichung nicht abgeleitet, sondern nur plausibel gemacht. Ihre Bedeutung wird alleine durch die Erfahrung gerechtfertigt.

Verallgemeinerung für N Teilchen:

$$H(\vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \frac{p_1^2}{2m_1} + \dots + \frac{p_N^2}{2m_N} + V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \quad (1.4. 16)$$

$$\begin{aligned} \vec{p}_1 &\rightarrow \frac{\hbar}{i}\nabla_1 = \frac{\partial}{\partial \vec{r}_1} \\ &\vdots \\ \vec{p}_N &\rightarrow \frac{\hbar}{i}\nabla_N \\ \psi &= \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t) \end{aligned}$$

Schrödingergleichung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H}\psi \quad (1.4. 17)$$

$$\rho(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t) = |\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t)|^2 \quad (1.4. 18)$$

Gleichung (1.4. 18) ist die Wahrscheinlichkeit zur Zeit t bei einer Messung Teilchen 1 an Ort \vec{r}_1 , Teilchen 2 am Ort \vec{r}_2 , ... und Teilchen N am Ort \vec{r}_N anzutreffen.

1.5 Kontinuitätsgleichung, Mittelwerte

Wir können axiomatisch zusammenfassen:

1. Der quantenmechanische Zustand bestimmt sich aus der Zustandsfunktion $\psi(\vec{r}, t)$.
2. Wenn wir $\psi(\vec{r}, t)$ zur Zeit t kennen, folgt $\psi(\vec{r}, t)$ für alle späteren Zeiten aus der Schrödingergleichung.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \hat{H}\psi(\vec{r}, t) \quad \text{Kausalität}$$

Wir prüfen nach ob das, was wir über $\psi(\vec{r}, t)$ schon gesagt hatten, widerspruchsfrei ist.

3. Superposition: Wenn ψ_1 und ψ_2 Lösungen der Schrödingergleichung, dann auch $\psi = a\psi_1 + b\psi_2$.

Beweis:

$$(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H})\psi = a \underbrace{(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H})\psi_1}_{=0} + b \underbrace{(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H})\psi_2}_{=0} = 0 \quad (1.5. 1)$$

4. Deutung von $|\psi|^2$ als Wahrscheinlichkeitsdichte: Nur solche Funktionen $\psi(\vec{r}, t)$ sind als eigentliche Zustandsfunktionen zulässig, die absolut quadratintegabel sind:

$$\int d^3r \psi^*(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) = C \text{ mit } 0 < C < \infty \quad (1.5. 2)$$

Da mit $\psi(\vec{r}, t)$ auch jedes $\lambda\psi(\vec{r}, t)$ (λ const.) Lösung der Schrödingergleichung ist, läßt sich C jedenfalls zu einer Zeit t zu 1 bestimmen. Dann ist:

$$\rho(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2 = \text{Wahrscheinlichkeitsdichte} \quad (1.5. 3)$$

Offenbar bleibt diese Eigenschaft erhalten, wenn wir zeigen können, daß für alle späteren Zeiten gilt:

$$\int |\psi|^2 d^3r = 1 \quad (1.5. 4)$$

Beweis:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{r}, t) = \dot{\psi}^* \psi + \psi^* \dot{\psi} \quad (1.5. 5)$$

Es gilt:

$$i\hbar \dot{\psi} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right) \psi \quad (1.5. 6)$$

$$-i\hbar \dot{\psi}^* = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right) \psi^* \quad (1.5. 7)$$

daraus folgt:

$$\begin{aligned} \text{Gl. (1.5.5)} &= \frac{1}{i\hbar} \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right) \psi - \frac{1}{i\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right) \psi^* \psi \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} (\psi^* (\Delta \psi) - (\Delta \psi^*) \psi) = -\vec{\nabla} \cdot \frac{\hbar}{2m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \\ &= -\vec{\nabla} \cdot \vec{j} \end{aligned} \quad (1.5. 8)$$

mit dem Wahrscheinlichkeitsstrom:

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \quad (1.5. 9)$$

Kontinuitätsgleichung:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{r}, t) + \text{div } \vec{j} = 0 \quad (1.5. 10)$$

Integration über d^3r :

$$\begin{aligned} \int d^3r \frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{r}, t) &= \frac{d}{dt} \int d^3r \rho(\vec{r}, t) = - \int d^3r \vec{\nabla} \cdot \vec{j} \\ &= - \int_{\text{Oberfläche}} d\vec{F} \vec{j}_{\text{normal}} \end{aligned} \quad (1.5. 11)$$

Die Abnahme der Gesamtwahrscheinlichkeit ist gleich dem Wahrscheinlichkeitsstrom durch die Oberfläche. Da

$$\psi \rightarrow 0 \text{ für } |\vec{r}| \rightarrow \infty \Rightarrow |\vec{j}| \rightarrow 0 \Rightarrow \int d\vec{F} \vec{j}_{\text{normal}} \rightarrow 0$$

Also gilt:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int d^3r \rho(\vec{r}, t) = 0 \Rightarrow \int d^3r \rho(\vec{r}, t) = \text{const.} = 1$$

Mit dem Begriff der Wahrscheinlichkeitsdichte ist der Begriff Mittelwert verknüpft.

1.5.1 Ortsmittel

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d^3 \vec{r} x \rho(x, y, z, t), \quad \langle y \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d^3 \vec{r} y \rho(x, y, z, t), \quad \dots \quad (1.5.12)$$

$$\langle \vec{r} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d^3 r \vec{r} \rho(\vec{r}, t) = \int d^3 r \psi^*(\vec{r}, t) \vec{r} \psi(\vec{r}, t) \quad (1.5.13)$$

$\langle \vec{r} \rangle$ bezeichnet man als Ortsmittel.

1.5.2 Impulsmittel

Der Impulsmittel ist mit $\vec{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla$ definiert als:

$$\langle \vec{p} \rangle = \int d^3 r \psi^*(\vec{r}, t) \frac{\hbar}{i} \nabla \psi(\vec{r}, t) \quad (1.5.14)$$

Definition 1.5.1: Die allgemeine Definition eines Mittelwertes lautet mit A als beliebigen Operator:

$$\langle A \rangle = \int d^3 r \psi^*(\vec{r}, t) A \psi(\vec{r}, t) \quad (1.5.15)$$

Diese Definition ist plausibel, da die klassische Beziehung:

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{r} \rangle = \frac{1}{m} \langle \vec{p} \rangle \quad (1.5.16)$$

folgt.

Beweis:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle x \rangle &= \frac{d}{dt} \int d^3 r x \rho(\vec{r}, t) & (1.5.17) \\ &= \int d^3 r x \dot{\rho}(\vec{r}, t) = - \int d^3 r x (\nabla \cdot \vec{j}) \\ &= - \int d^3 r x \left(\frac{\partial}{\partial x} j_x + \frac{\partial}{\partial y} j_y + \frac{\partial}{\partial z} j_z \right) = \int d^3 r j_x \\ &= \frac{\hbar}{2im} \int d^3 r \left(\psi^* \frac{\partial}{\partial x} \psi - \left(\frac{\partial}{\partial x} \psi^* \right) \psi \right) = \frac{1}{m} \int d^3 r \psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi \\ &= \frac{1}{m} \langle p_x \rangle & (1.5.18) \end{aligned}$$

1.5.3 Satz von Ehrenfest

$$\begin{aligned} m \frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle &= \frac{\hbar}{i} \int d^3 r \left(\dot{\psi}^* \frac{\partial}{\partial x} \psi + \psi^* \frac{\partial}{\partial x} \dot{\psi} \right) \\ &= \int d^3 r \left(\left(\left(-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + V \right) \psi^* \right) \frac{\partial}{\partial x} \psi - \psi^* \frac{\partial}{\partial x} \left(-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + V \right) \psi \right) \\ &= \int d^3 r \left(V \psi^* \frac{\partial}{\partial x} \psi - \psi^* \frac{\partial}{\partial x} V \psi - \psi^* V \frac{\partial}{\partial x} \psi \right) \\ &= \left\langle -\frac{\partial}{\partial x} V \right\rangle = \langle K_x \rangle & (1.5.19) \end{aligned}$$

$\left\langle -\frac{\partial}{\partial x} V \right\rangle$ ist der örtliche Mittelwert der Kraft $K_x = -\frac{\partial}{\partial x} V$. Aus dem örtlichen Mittelwert der Beschleunigung ergibt sich der örtliche Mittelwert der Kraft. Der örtliche Mittelwert verhält sich also so wie in der klassischen Mechanik.

1.6 Stationäre Zustände, Eigenzustände, Eigenwerte, Operatoren

1.6.1 Stationäre Zustände

Wir betrachten einen speziellen Typ von Zustandsfunktionen:

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) e^{-i\alpha t} \quad (1.6. 1)$$

Aus der Schrödinger Gleichung folgt:

$$\hat{H}\psi(\vec{r})e^{-i\alpha t} = i\hbar\dot{\psi} = \hbar\alpha\psi(\vec{r})e^{-i\alpha t} \quad (1.6. 2)$$

$$\hat{\psi}(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \text{ mit } E = \hbar\alpha \quad (1.6. 3)$$

$$\rho(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2 = |\psi(\vec{r})|^2 = \text{zeitunabhängig} \quad (1.6. 4)$$

Solche Zustände heißen stationär.

1.6.2 Eigenwerte, Eigenwertgleichung

Für den Mittelwert folgt:

$$\langle \hat{H} \rangle = \int d^3r \psi^*(\vec{r}, t) \hat{H} \psi(\vec{r}, t) \quad (1.6. 5)$$

$$= \int d^3r \psi^*(\vec{r}) \hat{H} \psi(\vec{r}) = E \int d^3r \psi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) = E \quad (1.6. 6)$$

Somit ergibt sich die zeitfreie Schrödingergleichung:

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = \left(-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + V(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (1.6. 7)$$

Dies ist eine Eigenwertgleichung. Nicht alle Energiewerte sind erlaubt, sondern nur solche, für die die Zustandsfunktion normierbar ist:

$$\int d^3r |\psi|^2 = 1 \quad (1.6. 8)$$

Die erlaubten Energiewerte E_1, E_2, \dots, E_n heißen Eigenwerte. Die zugehörigen Zustände, Eigenzustände ψ_n . Neben einem diskreten Spektrum E_1, E_2, \dots, E_n gibt es oft noch einen kontinuierlichen Bereich oder nur diesen. Die zugehörigen Zustände (uneigentliche Zustände) sind dann allgemein nicht normierbar.

Beispiel: Für ein freies Teilchen gilt:

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} \quad (1.6. 9)$$

$$\psi(\vec{r}) = ae^{i\vec{k}\vec{r}} \quad (1.6. 10)$$

$$E = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \quad (1.6. 11)$$

mit der Nebenbedingung: $|\psi|^2 =$ ist beschränkt folgt

$$\int d^3r |\psi|^2 = |a|^2 \int d^3r = |a|^2 \cdot \text{Volumen} \rightarrow \infty \quad (1.6. 12)$$

Funktionsklasse: $f(\vec{r})$ ist eindeutig und $\int d^3r |f(\vec{r})|^2$ existiert, d.h. es ist quadrat-integrierbar. Diese Funktionen bilden einen Hilbertraum \mathcal{H} .

Definition 1.6.1:

$$\langle f|g \rangle = \int d^3r f^*(\vec{r})g(\vec{r}) = \text{komplexe Zahl} \quad (1.6. 13)$$

heißt Skalarprodukt.

1.6.3 Operatoren

Mit der Transformation $f \rightarrow g$ mit $f, g \in \mathcal{H}$ ist ein linearer Operator A definiert als:

$$g = Af \quad (1.6.14)$$

wenn die Linearitätsbedingung:

$$A(c_1 f_1 + c_2 f_2) = c_1 A f_1 + c_2 A f_2 \quad (1.6.15)$$

erfüllt ist.

1.6.4 Hermitesche Operatoren

Wenn gilt:

$$\langle f | Ag \rangle = \langle A^+ f | g \rangle \quad (1.6.16)$$

dann ist A^+ adjungiert zu A . Gilt $A = A^+$, dann heißt A hermitesch oder selbstadjungierter Operator.

Beispiel: Sei $V(\vec{r})$ hermitescher Operator und $V(\vec{r})$ reell, wenn gilt:

$$\langle f | V(\vec{r}) g \rangle = \int d^3 r f^* V(\vec{r}) g \quad (1.6.17)$$

$$\langle V^+(\vec{r}) f | g \rangle = \int d^3 r f^* V(\vec{r}) g \quad (1.6.18)$$

folgt:

$$V = V^+ \quad (1.6.19)$$

Wenn $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla$ dann gilt:

$$\langle f | \hat{p} g \rangle = \int d^3 r f^* \frac{\hbar}{i} \nabla g \quad (1.6.20)$$

$$= - \int d^3 r \left(\frac{\hbar}{i} \nabla f^* \right) g \quad (1.6.21)$$

$$= \int d^3 r \left(\frac{\hbar}{i} \nabla f \right)^* g \quad (1.6.22)$$

$$= \langle \hat{p} f | g \rangle \quad (1.6.23)$$

Wenn A hermitesch ist, dann sind auch A^2, A^3, \dots hermitesch. Allgemein gilt: $F(A)$ ist hermitesch für jedes $F(x)$, das als Potenzreihe darstellbar ist.

Wenn A, B hermitesch sind, dann ist auch $A + B$ hermitesch.

Damit folgt, daß auch $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r})$ hermitesch ist.

Der Erwartungswert eines hermiteschen Operators ist reell.

$$\langle A \rangle = \langle f | A | f \rangle = \int d^3 r f^*(\vec{r}) A f(\vec{r}) = \int d^3 r (A^+ f(\vec{r}))^* f(\vec{r}) \quad (1.6.24)$$

$$= \int d^3 r (A f(\vec{r}))^* f(\vec{r}) = \langle A \rangle^* \quad (1.6.25)$$

Physikalische Meßgrößen: Physikalische Meßgrößen werden mathematisch durch Operatoren dargestellt, z.B. Impuls, Energie, Drehimpuls, etc. In Frage kommen nur hermitesche Operatoren, damit alle Mittelwerte reell sind.

Daraus folgt, daß Physikalische Meßgrößen in der Quantenmechanik durch Operatoren dargestellt werden. Allgemein ist jede physikalische Meßgröße F eine Funktion von Ort und Impuls.

$$F = F(\vec{r}, \vec{p}) \quad (1.6. 26)$$

Um zum Operator \hat{F} zu kommen, ersetzt man \vec{r} und \vec{p} durch die Operatoren $\hat{r}, \hat{p} = \frac{\hbar}{i}\nabla$.

$$\hat{F} = F(\hat{r}, \hat{p}) \quad (1.6. 27)$$

Wenn \hat{F} hermitesch ist, sind wir fertig, wenn nicht, so müssen wir geeignet symmetrisieren.

Beispiel: Seien A, B hermitesch, also $A = A^+$ und $B = B^+$, dann gilt:

$$\langle f|ABg \rangle = \langle f|A(Bg) \rangle = \langle (A^+f)|Bg \rangle = \langle B^+A^+f|g \rangle \quad (1.6. 28)$$

$$(AB)^+ = B^+A^+ = BA \quad (1.6. 29)$$

Wenn $AB \neq BA$, so ist AB nicht hermitesch, z.B. $A = \hat{p}, B = \hat{x}$

$$(AB - BA)f = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} x f - x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} f = \frac{\hbar}{i} f \quad (1.6. 30)$$

$$[\hat{p}, \hat{x}] = \hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \quad \text{Vertauschungsregel} \quad (1.6. 31)$$

Symmetrisierung: Sei $a \rightarrow A$ und $b \rightarrow B$

$$ab = \frac{1}{2}(ab + ba) \quad (1.6. 32)$$

daraus folgt:

$$\frac{1}{2}(AB + BA) \quad \text{ist hermitesch} \quad (1.6. 33)$$

1.6.5 Allgemeines Eigenwertproblem

Es gelte

$$A\psi = a\psi \rightarrow \{\psi\} = \{\psi_1, \psi_2, \dots\} \quad (1.6. 34)$$

so daß

$$A\psi_n = a_n\psi_n \quad (1.6. 35)$$

mit a_n als Eigenwerten und ψ_n als Eigenfunktion.

Eigenwerte von hermiteschen Operatoren sind reell, daraus folgt: ψ_n ist normiert.

$$\langle \psi_n|A\psi_n \rangle = a_n \langle \psi_n|\psi_n \rangle = a_n \quad (1.6. 36)$$

$$a_n^* = \langle A\psi_n|\psi_n \rangle = \langle A^+\psi_n|\psi_n \rangle = \langle \psi_n|A\psi_n \rangle = a_n \quad (1.6. 37)$$

Satz: Eigenfunktionen zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal.

$$A\psi_n = a_n\psi_n \quad \langle \psi_m|A\psi_n \rangle = a_n \langle \psi_m|\psi_n \rangle \quad (1.6. 38)$$

$$A\psi_m = a_m\psi_m \quad \langle A^+\psi_m|\psi_n \rangle = \langle A\psi_m|\psi_n \rangle = a_m \langle \psi_m|\psi_n \rangle \quad (1.6. 39)$$

daraus folgt:

$$0 = (a_m - a_n) \langle \psi_m|\psi_n \rangle \quad (1.6. 40)$$

$$\langle \psi_m|\psi_n \rangle = 0 \quad (1.6. 41)$$

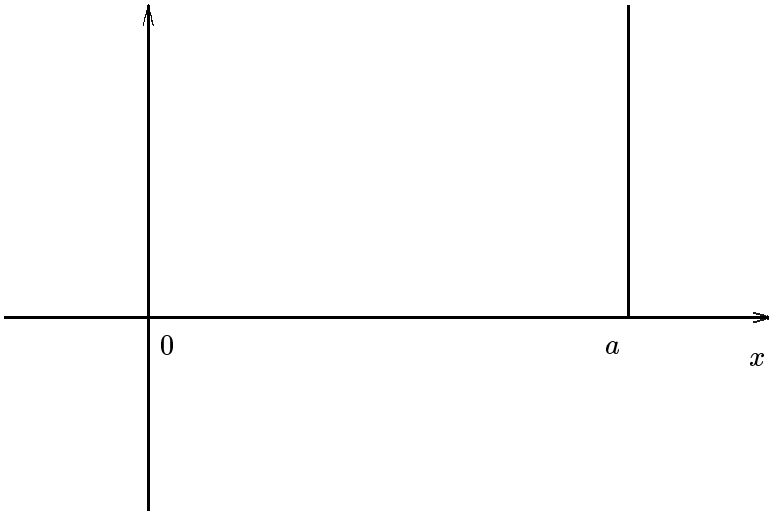


Abbildung 5: unendlich hoher Potentialtopf

1.7 Teilchen im begrenzten Raumbereich

Allgemeine Randbedingungen: Die Zustandsfunktion $\psi(\vec{r}, t)$ und damit die stationären Zustände $\psi(\vec{r})$ müssen eindeutig und stetig sein. Im Allgemeinen ist $\frac{\partial}{\partial x}\psi$ oder $\nabla\psi$ auch stetig, selbst wenn V unstetig ist (Ausnahme: V ist jenseits einer ganzen Fläche unendlich groß. Dort ist $\psi = 0$, aber keine Forderung an $\nabla\psi$. Dort wo V unendlich ist, ist $\nabla\psi$ endlich. Dabei sind aber Punktsingularitäten zugelassen.)

Wir betrachten als Beispiel folgendes eindimensionale Potential, s. Abbildung (5):

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ 0 & 0 \leq x \leq a \\ \infty & a < x \end{cases} \quad (1.7.1)$$

Die Schrödingergleichung lautet hier:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} u(x) = E u(x) \quad \text{mit } 0 < x < a \quad (1.7.2)$$

Mit den Randbedingungen $u(0) = u(a) = 0$ ergibt sich aus der allgemeinen Lösung:

$$u = C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx} \quad \text{und} \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (1.7.3)$$

für $x = 0$:

$$0 = C_1 + C_2 \quad (1.7.4)$$

$$u = C_1 (e^{ikx} - e^{-ikx}) = 2iC_1 \sin kx = C \sin kx \quad (1.7.5)$$

für $x = a$:

$$0 = \sin ka \rightarrow ka = n\pi \quad (1.7.6)$$

Normierung:

$$\begin{aligned} 1 &= \int_0^a dx \sin^2 kx = \frac{C^2}{k} \int_0^{n\pi} da \sin^2 a \\ &= \frac{nC^2}{k} \int_0^\pi da \sin^2 a = \frac{nC^2 \pi}{2k} = \frac{C^2 a}{2} \end{aligned} \quad (1.7.7)$$

$$C = \sqrt{\frac{2}{a}} \quad (1.7.8)$$

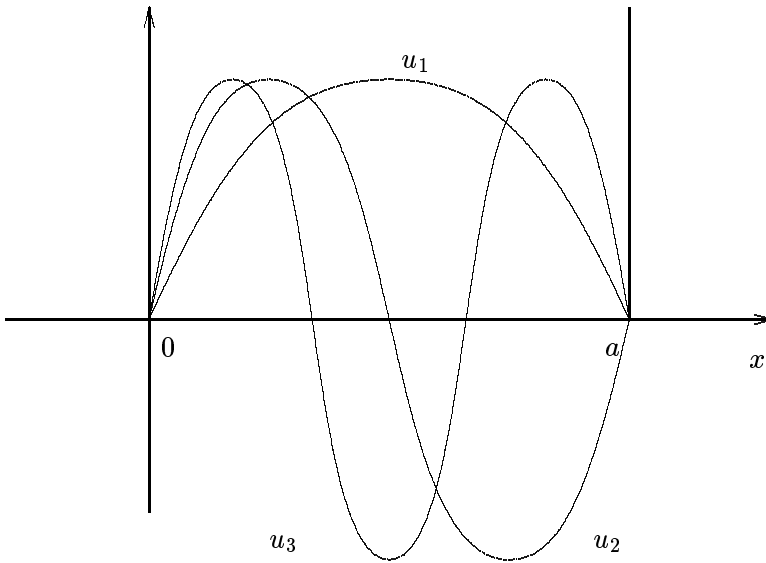


Abbildung 6: stehende Wellen im unendlich hohen Potentialtopf

Somit ergibt sich für die Eigenfunktionen:

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin k_n x, \quad k_n = \frac{n\pi}{a}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.7. 9)$$

und für die Eigenwerte:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} \quad (1.7. 10)$$

Der Grundzustand $u_1 = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi x}{a}$ ist knotenfrei. Die u_n bezeichnen stehende Wellen, s. Abbildung (6). Da u reell ist, folgt für den Strom:

$$\text{Strom} = \frac{\hbar}{2im} \left(\psi^* \frac{\partial}{\partial x} \psi - \left(\frac{\partial}{\partial x} \psi^* \right) \psi \right) = 0 \quad (1.7. 11)$$

$$\langle p \rangle = \frac{\hbar}{i} \int dx u^* \frac{\partial}{\partial x} u = \frac{\hbar}{i} \int dx u \frac{\partial}{\partial x} u = \frac{\hbar}{2i} u^2 \Big|_0^a = 0 \quad (1.7. 12)$$

Verschiebung der vorgegebenen Mitte liefert mit $x = \frac{a}{2} + \xi$, $-\frac{a}{2} \leq \xi \leq \frac{a}{2}$

$$\sin k_n x = \sin \left(k_n \xi + \frac{n\pi}{2} \right) \quad (1.7. 13)$$

$$u_n(\xi) = \sqrt{\frac{2}{m}} \begin{cases} \cos k_n \xi & n = 1, 3, 5, \dots \text{ ungerade} \\ \sin k_n \xi & n = 2, 4, 6, \dots \text{ gerade} \end{cases} \quad (1.7. 14)$$

Die Mittelwerte ergeben sich aus

$$\langle \xi \rangle_n = \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} d\xi \xi u_n^2(\xi) = 0 \quad \text{da ungerade} \quad (1.7. 15)$$

$$\langle p \rangle_n = 0 \quad (1.7. 16)$$

Die $\langle p^2 \rangle$, $\langle \xi^2 \rangle$ sind im Grundzustand gemittelt.

$$\langle \xi^2 \rangle = \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} d\xi \xi^2 \frac{2}{a} \cos^2 k_1 \xi = \frac{4}{ak_1^3} \int_0^{\frac{\pi}{2}} dx x^2 \cos^2 x \quad (1.7. 17)$$

$$I = \int_0^{\frac{\pi}{2}} dx x^2 \cos^2 x = \frac{x + \sin x \cos x}{2} x^2 \Big|_0^{\frac{\pi}{2}} - \int_0^{\frac{\pi}{2}} dx x (x + \sin x \cos x)$$

$$= \frac{\pi^3}{48} - \frac{x}{2} \sin^2 x \Big|_0^{\frac{\pi}{2}} + \frac{1}{2} \int_0^{\frac{\pi}{2}} dx \sin^2 x = \frac{\pi^3}{48} + \frac{\pi}{8} \quad (1.7.18)$$

$$\langle \xi^2 \rangle = \frac{a^2}{\pi^2} \left(\frac{1}{2} + \frac{\pi^2}{12} \right) = \frac{a^2}{2\pi^2} \left(1 + \frac{\pi^2}{6} \right) \quad (1.7.19)$$

$$\begin{aligned} \langle p^2 \rangle &= \frac{2}{a} \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} d\xi \cos(k-1\xi) (-\hbar^2) \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \cos k_1 \xi \\ &= \frac{2}{a} k_1^2 \hbar^2 \int_0^{\frac{a}{2}} d\xi \cos^2 k_1 \xi = \frac{2}{a} 2\hbar^2 k_1 \int_0^{\frac{\pi}{2}} dx \cos^2 x = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2a} \end{aligned} \quad (1.7.20)$$

$$\Delta p \Delta \xi = \sqrt{\langle \xi^2 \rangle \langle p^2 \rangle} = \hbar \sqrt{\frac{1 + \frac{\pi^2}{6}}{2}} \geq \hbar \quad (1.7.21)$$

Gleichung (1.7.21) ist die Unschärferelation. Sie besagt, daß Impuls und Ort nicht gleichzeitig scharf sein können. p und x sind komplementäre Größen. Wenn x absolut scharf wäre, $\Delta x = 0$, so wäre $\Delta p = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\hbar}{\Delta x} = \infty$ absolut unsharp und umgekehrt. Sie erklärt auch die Tatsache, daß für die Grundzustände gilt $E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} > 0$. (Klassisch wäre $E_{Grund} = 0$, das Teilchen läge auf dem Boden). Wäre

$$\langle H \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} = \frac{(\Delta p)^2}{2m} \quad (1.7.22)$$

somit wäre

$$\Delta x = \infty \quad (1.7.23)$$

Das ist aber unmöglich, da das Teilchen eingesperrt ist.

1.8 Linearer, harmonischer Oszillator

Wir betrachten das Potential:

$$V(x) = \frac{m}{2} \omega^2 x^2 \rightarrow K = -m\omega^2 x \quad (1.8.1)$$

Der Hamiltonoperator lautet dann:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m}{2} \omega^2 \hat{x}^2 \quad (1.8.2)$$

und für die Schrödinger-Eigenwertgleichung folgt:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \varphi''(x) + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \varphi(x) = E \varphi(x) \text{ mit } \int_{-\infty}^{\infty} dx |\varphi(x)|^2 = 1 \quad (1.8.3)$$

$$\frac{1}{2} \left(\frac{m\omega}{\hbar} x^2 - \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d^2}{dx^2} \right) \varphi(x) = \frac{E}{\hbar\omega} \varphi(x) \quad (1.8.4)$$

Definiere:

$$\alpha^2 = \frac{\hbar}{m\omega} = (\text{Länge})^2 \quad (1.8.5)$$

Damit ergibt sich:

$$\frac{1}{2} \left(\left(\frac{x}{\alpha} \right)^2 - \left(\alpha \frac{d}{dx} \right)^2 \right) \varphi(x) = \frac{E}{\hbar\omega} \varphi(x) \quad (1.8.6)$$

Setze:

$$b = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{\alpha} + \alpha \frac{d}{dx} \right); \quad b^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{\alpha} - \alpha \frac{d}{dx} \right) \quad (1.8.7)$$

Für $f(x)$ beliebig gilt dann:

$$bb^+ f = \frac{1}{2} \left[\frac{x}{\alpha} + \alpha \frac{d}{dx} \right] \left[\frac{x}{\alpha} f - \alpha f' \right] = \frac{1}{2} \left[\frac{x^2}{\alpha^2} f - x f' + f + x f' - \alpha^2 f'' \right]$$

$$= \frac{1}{2} \left[\frac{x^2}{\alpha^2} - \alpha^2 \frac{d^2}{dx^2} \right] f + \frac{1}{2} f \quad (1.8. 8)$$

$$\begin{aligned} b^+ b f &= \frac{1}{2} \left[\frac{x}{\alpha} - \alpha \frac{d}{dx} \right] \left[\frac{x}{\alpha} f + \alpha f' \right] = \frac{1}{2} \left[\frac{x^2}{\alpha^2} f + x f' - f - x f' - \alpha^2 f'' \right] \\ &= \frac{1}{2} \left[\frac{x^2}{\alpha^2} - \alpha^2 \frac{d^2}{dx^2} \right] f - \frac{1}{2} f \end{aligned} \quad (1.8. 9)$$

Daraus folgt:

$$(b b^+ - b^+ b) f = f \quad (1.8. 10)$$

$$b b^+ - b^+ b = [b, b^+] = 1 \quad (1.8. 11)$$

Gleichung (1.8. 11) ist aber nichts anderes als die Vertauschungsregel:

$$[\hat{p}, \hat{x}] = \frac{\hbar}{i} \text{ mit } \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \quad (1.8. 12)$$

denn mit $[\hat{p}, \hat{p}] = [\hat{x}, \hat{x}] = 0$ folgt:

$$[b, b^+] = \frac{1}{2} \left[\frac{\hat{x}}{\alpha} + \alpha \frac{d}{dx}, \frac{\hat{x}}{\alpha} - \alpha \frac{d}{dx} \right] = \frac{1}{2} \left[\frac{\hat{x}}{\alpha} + \alpha \frac{i}{\hbar} \hat{p}, \frac{\hat{x}}{\alpha} - \alpha \frac{i}{\hbar} \hat{p} \right] \quad (1.8. 13)$$

$$= \frac{1}{2} \frac{i}{\hbar} ([\hat{p}, \hat{x}] - [\hat{x}, \hat{p}]) = 1 \quad (1.8. 14)$$

Die Differentialgleichung (1.8. 6) lautet mit Gleichung (1.8. 11) dann:

$$\left(b^+ b + \frac{1}{2} \right) \varphi(x) = \frac{E}{\hbar\omega} \varphi(x) \quad (1.8. 15)$$

oder:

$$b^+ b \varphi(x) = \left(\frac{E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \right) \varphi(x) \quad (1.8. 16)$$

setze:

$$\lambda = \frac{E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \quad (1.8. 17)$$

$$E = \hbar\omega \left(\lambda + \frac{1}{2} \right) \quad (1.8. 18)$$

b^+ ist adjungiert zu b , wie das Zeichen andeutet.

Beweis:

$$\begin{aligned} \langle f | b g \rangle &= \int dx f^+ \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{x}{\alpha} + \alpha \frac{d}{dx} \right] g \\ &= \int dx \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{x}{\alpha} - \alpha \frac{d}{dx} \right] f^+ \right) g = \langle b^+ f | g \rangle \end{aligned} \quad (1.8. 19)$$

Damit ist $b^+ b$ selbstadjungiert oder hermitesch:

$$(b^+ b)^+ = b^+ (b^+)^+ = b^+ b \quad (1.8. 20)$$

$$\begin{aligned} \langle \varphi | b^+ b \varphi \rangle &= \langle b \varphi | b \varphi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx (b \varphi)^+ b \varphi \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx |b \varphi|^2 = \lambda \int_{-\infty}^{\infty} dx |\varphi|^2 = \lambda \langle \varphi | \varphi \rangle = \lambda \geq 0 \end{aligned} \quad (1.8. 21)$$

Das Gleichheitszeichen in Gleichung (1.8. 21) ist nur erfüllt, wenn $b \varphi(x) = 0$.

$$\lambda b\varphi = bb^+b\varphi = (b^+b + 1)b\varphi \rightarrow b^+b(b\varphi) = (\lambda - 1)b\varphi \quad (1.8. 22)$$

d.h. wenn φ Eigenzustand zu b^+b ist, so ist $b\varphi$ Eigenzustand mit Eigenwert $(\lambda - 1)$.

$$(b^+b)(b^+\varphi) = b^+(b^+b + 1)\varphi = (\lambda + 1)(b^+\varphi) \quad (1.8. 23)$$

d.h. $b^+\varphi$ ist Eigenzustand mit Eigenwert $(\lambda + 1)$.

Theorem: Aus dem Eigenzustand φ zum Eigenwert λ erhält man weitere Zustände zu den Eigenwerten $\lambda - 1, \lambda - 2, \dots$ durch Anwendung von b, b^2, b^3, \dots auf φ und zu den Eigenwerten $\lambda + 1, \lambda + 2, \dots$ durch Anwendung von $b^+, (b^+)^2, (b^+)^3, \dots$ auf φ . (b ist der Absteiger oder Absteige-Operator; b^+ ist der Aufsteiger oder Aufsteige-Operator)

Man kann so zu negativen Eigenwerten durch fortgesetzte Anwendung von b kommen, das darf nach Gleichung (1.8. 21) nicht sein, also muß es in der Reihe $b\varphi, b^2\varphi, b^3\varphi, \dots$ ein φ_0 geben, so daß $b\varphi_0 = 0$. Diese Bedingung ist notwendig.

$$b^+b\varphi_0 = b^+(b\varphi_0) = 0 \rightarrow \lambda_0 = 0 \quad (1.8. 24)$$

Grundzustand:

$$0 = b\varphi_0(x) = \left(\frac{x}{\alpha} + \alpha\frac{d}{dx}\right)\varphi_0 \quad (1.8. 25)$$

$$\varphi_0' = -\frac{x}{\alpha^2}\varphi_0 \rightarrow \varphi_0 = Ce^{-\frac{1}{2}\frac{x^2}{\alpha^2}} \quad (1.8. 26)$$

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx\varphi_0^2 = C^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{x^2}{\alpha^2}} = C^2\sqrt{\pi}\alpha \quad (1.8. 27)$$

Normierter Grundzustand:

$$\varphi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{\alpha\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{1}{2}\frac{x^2}{\alpha^2}} \quad (1.8. 28)$$

Durch Anwendung von $b^+, (b^+)^2, \dots$ auf φ_0 erhalten wir Eigenzustände $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ zu den Eigenwerten $\lambda_n = \lambda_0 + n = n$.

Es gilt also:

$$H\varphi_n = E_n\varphi_n \quad (1.8. 29)$$

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) \text{ mit } n = 0, 1, 2, \dots \quad (1.8. 30)$$

$$\varphi = C_n (b^+)^n \varphi_0(x) \quad (1.8. 31)$$

Bestimmung von C_n :

Sei φ_n normiert:

$$b^+\varphi_n = N\varphi_{n+1} \quad (1.8. 32)$$

$$\langle b^+\varphi_n | b^+\varphi_n \rangle = N^2 \langle \varphi_{n+1} | \varphi_{n+1} \rangle = N^2 \quad (1.8. 33)$$

$$\begin{aligned} \langle b^+\varphi_n | b^+\varphi_n \rangle &= \langle \varphi_n | bb^+\varphi_n \rangle = \langle \varphi_n | (b^+b + 1)\varphi_n \rangle \\ &= (n + 1) \langle \varphi_n | \varphi_n \rangle = n + 1 \end{aligned} \quad (1.8. 34)$$

$$N^2 = n + 1 \quad (1.8. 35)$$

$$\varphi_{n+1} = \frac{b^+}{\sqrt{n+1}}\varphi_n = \frac{(b^+)^2}{\sqrt{(n+1)n}}\varphi_{n-1} = \dots \quad (1.8. 36)$$

$$\varphi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (b^+)^n \varphi_0 \quad (1.8. 37)$$

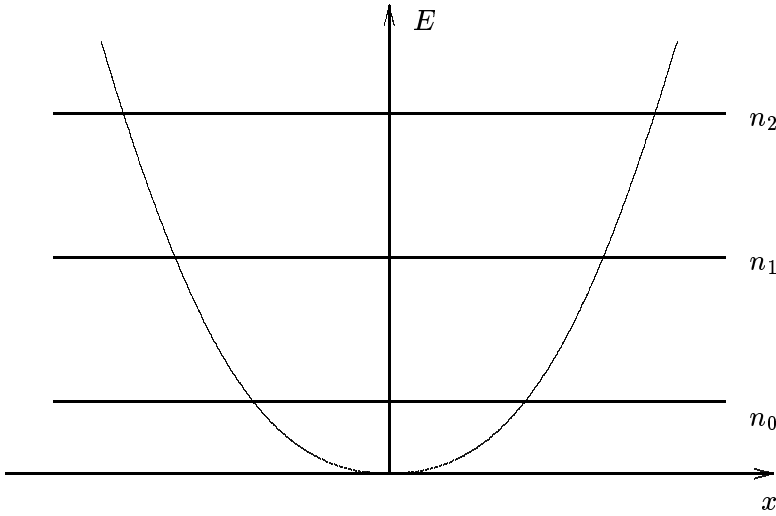


Abbildung 7: Energien des harmonischen Oszillators

Orthogonalität: $\langle \varphi_m | \varphi_n \rangle = \delta_{nm}$

Das System $\{\varphi_n\}$ ist ein orthogonales und normiertes Eigenfunktionssystem, kurz: ein orthonormiertes System.

Explizite Darstellung:

$$b^+ f = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{\alpha} - \alpha \frac{d}{dx} \right) f = -\frac{\alpha}{\sqrt{2}} e^{\frac{x^2}{2\alpha^2}} \frac{d}{dx} \left(e^{-\frac{x^2}{2\alpha^2}} f \right) \quad (1.8. 38)$$

$$(b^+)^n f = \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n}} e^{\frac{x^2}{2\alpha^2}} \left(\alpha \frac{d}{dx} \right)^n \left(e^{-\frac{x^2}{2\alpha^2}} f(x) \right) \quad (1.8. 39)$$

$$\varphi_n(x) = \frac{(-1)^n}{\sqrt{\alpha \sqrt{\pi} 2^n n!}} e^{\frac{x^2}{2\alpha^2}} \left(\alpha \frac{d}{dx} \right)^n e^{-\frac{x^2}{2\alpha^2}} \quad (1.8. 40)$$

Definition 1.8.1: Hermite-Polynome

$$H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \left(\frac{d}{dy} \right)^n e^{-y^2}, \quad \frac{x}{\alpha} = y \quad (1.8. 41)$$

$$\varphi_n(x) = \frac{(-1)^n}{\sqrt{\alpha \sqrt{\pi} 2^n n!}} H_n \left(\frac{x}{\alpha} \right) e^{-\frac{x^2}{2\alpha^2}} \quad (1.8. 42)$$

Die $\varphi_n(x)$ sind somit Hermite-Funktionen.

Wir haben zwei eindimensionale Systeme kennengelernt. wo es nur diskrete Eigenwerte gab. Die Eigenfunktionen waren normierbar.

Beim harmonischen Oszillator ergibt sich für die diskreten Eigenwerte, s. Abbildung (7):

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (1.8. 43)$$

Diese sind äquidistant.

$$\varphi_n(x) = \frac{(-1)^n}{\sqrt{\alpha \sqrt{\pi} 2^n n!}} H_n \left(\frac{x}{\alpha} \right) e^{-\frac{x^2}{2\alpha^2}} \quad (1.8. 44)$$

$$\alpha^2 = \frac{\hbar}{m\omega} \quad (1.8. 45)$$

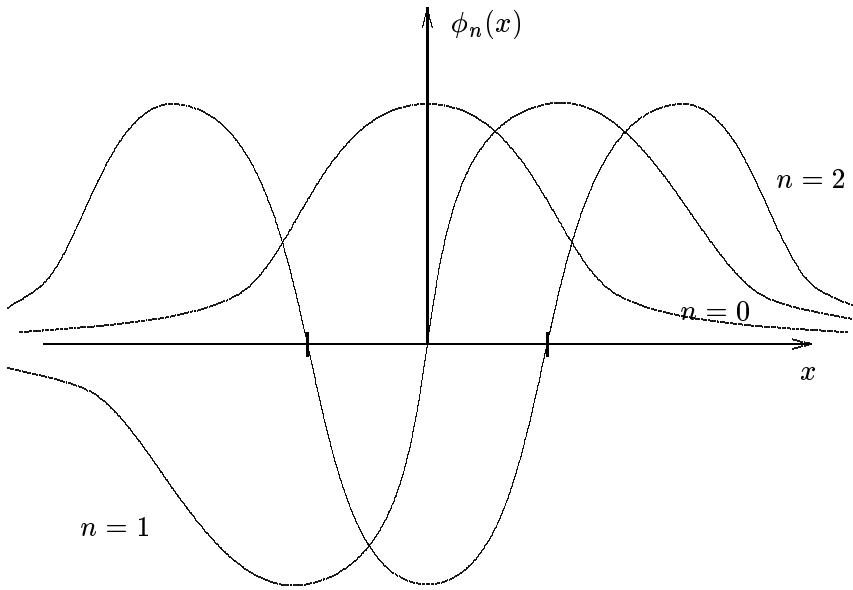


Abbildung 8: Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators

Die n -te Anregung ist mit n Quanten angeregt, s. Abbildung (8).

Klassischer Fall: alle Energiewerte $E > 0$ sind erlaubt. Die maximale Amplitude der Schwingung liegt bei:

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega^2 x^2 = \text{const.} \rightarrow x_{max} = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} \tag{1.8. 46}$$

Die Teilchenbewegung ist begrenzt auf den Bereich:

$$-x_{max} \leq x \leq x_{max} \tag{1.8. 47}$$

Quantenmechanischer Fall: Es gibt nur diskrete Energiewerte E_n . Der Bewegungsablauf ist nicht zu verfolgen, d.h. es gibt keine Bahn. Aber für alle x mit $-\infty < x < \infty$ gibt es eine nicht verschwindende Aufenthaltswahrscheinlichkeit:

$$\rho_n(x) = |\varphi_n(x)|^2 > 0 \tag{1.8. 48}$$

Ein Operator A lässt sich auch in Form einer Matrix darstellen. Die Matrixelemente entsprechen folgender Zuordnung: Operator $A \rightarrow$ Matrix A_{nm} . Sei $\{\varphi_n\}$ ein System von Funktionen, dann können wir definieren:

Definition 1.8.2: Matrixdarstellung des Operators A :

$$A_{nm} = \langle \varphi_n | A \varphi_m \rangle = \langle \varphi_n | A | \varphi_m \rangle \tag{1.8. 49}$$

1.9 Potentialtopf (eindimensionaler), Streuzustände, Impulsdarstellung

Ein Teilchen in einem begrenzten Raumgebiet und der lineare harmonische Oszillator waren Beispiele für Systeme, die nur ein diskretes Energiespektrum haben. Die entsprechenden Eigenzustände $u_n(x)$ waren normiert. Wir betrachten jetzt den eindimensionalen Potentialtopf, s. Abbildung (9).

$$V(x) = \begin{cases} 0 & |x| > \frac{a}{2} \\ -V & |x| < \frac{a}{2} \end{cases} \tag{1.9. 1}$$

mit $V > 0$

Klassischer Fall:

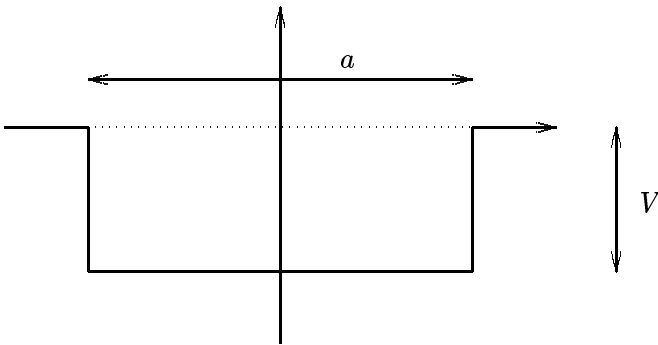


Abbildung 9: Eindimensionaler Potentialtopf

1. $E < 0$, d.h. $-V \leq E < 0$ Das Teilchen läuft im Topf hin und her, man sagt auch das Teilchen sei gebunden.
2. $E > 0$ Teilchen läuft von $-\infty$ her kommend nach $+\infty$ (oder umgekehrt). Dabei ist seine Gesamtenergie $E = \frac{m}{2}v^2 + V(x)$. Beim Passieren des Punktes $-\frac{a}{2}$ springt die kinetische Energie um V , beim Passieren des Punktes $\frac{a}{2}$ geht die Energie auf den ursprünglichen Wert zurück.

Quantenmechanik :

1. $E < 0$, ???????

Es gibt nur diskrete Eigenwerte (diskretes Spektrum). Zugehörige Zustände $u_n(x)$ sind **gebundene** Zustände.

Definition 1.9.1: Zustände in einem Potential heißen **gebundene Zustände**, wenn die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|u(\vec{r})|^2$ für $|\vec{r}| \rightarrow \infty$ gegen Null geht. (Anschaulich: Das Teilchen ist mehr oder minder an das Potential gebunden.)

2. $E > 0$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] u(x) = Eu(x) \quad (1.9. 2)$$

$$\frac{d^2}{dx^2} u(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) u(x) = 0 \quad (1.9. 3)$$

$$|x| > \frac{a}{2} : \quad \frac{d^2}{dx^2} u(x) + k^2 u(x) = 0 \quad (1.9. 4)$$

mit:

$$\hbar k = \pm \sqrt{2mE} \quad (1.9. 5)$$

$$|x| < \frac{a}{2} \quad \frac{d^2}{dx^2} u(x) + K^2 u(x) = 0 \quad (1.9. 6)$$

mit:

$$\hbar K = \pm \sqrt{2m(E + V(x))} \quad (1.9. 7)$$

Lösung für große x : e^{ikx} , e^{-ikx} Bestimme u so daß gilt:

$$u(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & x \rightarrow \infty \\ Ce^{ikx} + De^{-ikx} & x \rightarrow -\infty \end{cases} \quad (1.9. 8)$$

Von den Koeffizienten A, B, C, D sind aber nur zwei unabhängig und die anderen können aus Gleichung (1.9. 2) berechnet werden, da diese eine Differentialgleichung zweiter Ordnung in x ist.

Definition 1.9.2: $u_k(x)$ heißt **Streuzustand**, wenn

- (a) $u_k(x)$ Lösung von Gleichung (1.9. 2) zur Energie $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ ist,
 (b) $u_k(x)$ folgendes asymptotisches Verhalten zeigt:

$$u_k(x) = \begin{cases} e^{ikx} + r_k e^{-ikx} & x \rightarrow -(\text{sign } k)\infty \\ t_k e^{ikx} & x \rightarrow (\text{sign } k)\infty \end{cases} \quad (1.9. 9)$$

Seien nun u_1, u_2 Lösungen zu gleicher Energie E :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}u_1'' + V(x)u_1 = Eu_1 \quad (1.9. 10)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}u_2'' + V(x)u_2 = Eu_2 \quad (1.9. 11)$$

dann gilt:

$$u_2 u_1'' - u_1 u_2'' = 0 \quad (1.9. 12)$$

$$u_2 u_1' - u_1 u_2' = \text{const} = W \quad (1.9. 13)$$

Dies ist die Wronski-Determinante der Differentialgleichung zweiter Ordnung.

Setze nun $u_1 = u_k, u_2 = u_k^*$:

$$u_1 u_2' - u_2 u_1' = -2ik|t_k|^2 \quad \text{für } x \rightarrow \text{sign } k \cdot \infty \quad (1.9. 14)$$

$$\begin{aligned} u_1 u_2' - u_2 u_1' &= \left(e^{ikx} + r_k e^{-ikx} \right) \left(-ike^{-ikx} + ikr_k^* e^{ikx} \right) - \\ &\quad - \left(ike^{ikx} - ikr_k e^{-ikx} \right) \left(e^{-ikx} + r_k^* e^{ikx} \right) \\ &= -2ik \left(1 - |r_k|^2 \right) \quad \text{für } x \rightarrow -(\text{sign } k)\infty \end{aligned} \quad (1.9. 15)$$

Aus der Konstanz der Wronski-Determinante folgt dann:

$$1 = |r_k|^2 + |t_k|^2 \quad (1.9. 16)$$

mit

$$R = |r_k|^2 = \text{Reflexionskoeffizient}$$

$$T = |t_k|^2 = \text{Transmissionskoeffizient}$$

$$x < -\frac{a}{2} \quad u_k = e^{ikx} + r_k e^{-ikx} \quad u_k' = ik \left(e^{ikx} - r_k e^{-ikx} \right) \quad (1.9. 17)$$

$$|x| < \frac{a}{2} \quad u_k = ce^{iKx} + be^{-iKx} \quad u_k' = iK \left(ce^{iKx} - be^{-iKx} \right) \quad (1.9. 18)$$

$$x > \frac{a}{2} \quad u_k = t_k e^{ikx} \quad u_k' = ikt_k e^{ikx} \quad (1.9. 19)$$

Als Randbedingungen ist zu beachten die Stetigkeit von u_k und u_k' bei $|x| = \frac{a}{2}$ für $x = -\frac{a}{2}$:

$$e^{-ik\frac{a}{2}} + r_k e^{ik\frac{a}{2}} = ce^{-iK\frac{a}{2}} + be^{iK\frac{a}{2}} \quad (1.9. 20)$$

$$\frac{k}{K} \left[e^{-ik\frac{a}{2}} - r_k e^{ik\frac{a}{2}} \right] = ce^{-iK\frac{a}{2}} - be^{iK\frac{a}{2}} \quad (1.9. 21)$$

für $x = \frac{a}{2}$:

$$ce^{iK\frac{a}{2}} + be^{-iK\frac{a}{2}} = t_k e^{ik\frac{a}{2}} \quad (1.9. 22)$$

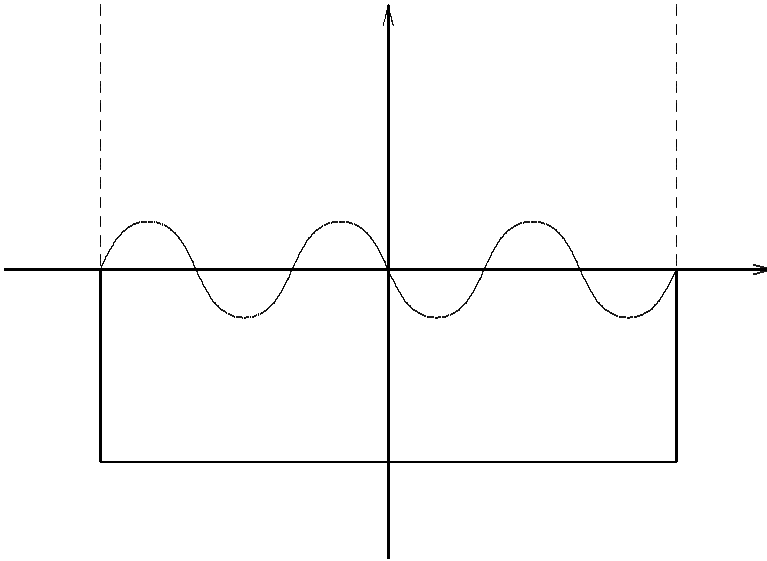


Abbildung 10: Stehende Welle im Potentialtopf

$$ce^{iK\frac{a}{2}} - be^{-iK\frac{a}{2}} = \frac{k}{K}t_k e^{ik\frac{a}{2}} \quad (1.9.23)$$

Dies ist ein lineares Gleichungssystem für vier Unbekannte. Die Lösung lautet mit $\alpha = \frac{k}{K} \leq 1$:

$$t_k = \frac{\alpha e^{-ika}}{\alpha \cos Ka - i\frac{1+\alpha^2}{2} \sin Ka} \quad (1.9.24)$$

$$T_k = |t_k|^2 = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{1}{\alpha} - \alpha\right)^2 \sin^2 Ka} \quad (1.9.25)$$

Für die klassische Bewegung läuft das Teilchen immer durch, d.h. $T_k = 1$. In der Quantenmechanik wird T_k nur gleich eins, wenn gilt $Ka = n\pi$, d.h. es tritt Resonanz auf.

Diese Streuresonanz entspricht den Eigenwerten des unendlich tiefen Topfes: stehende Welle im Topf, s. Abbildung (10). Der Wellenzug paßt genau in den Topf. Wir sagen auch, wir haben ein **virtuelles Niveau im Kontinuum**. Dieses Resonanzverhalten wird besonders klar für einen sehr tiefen Topf, d.h. $V \gg E$, s. Abbildung (11):

$$\alpha = \frac{k}{K} = \sqrt{\frac{E}{E+V}} \ll 1 \quad (1.9.26)$$

Für $\sin ka \neq 0$ gilt

$$T_k \approx \frac{1}{1 + \frac{1}{4\alpha^2} \sin^2 Ka} \approx \frac{4\alpha^2}{\sin^2 Ka} \ll 1 \quad (1.9.27)$$

außer bei $Ka = n\pi$.

1.9.1 Impulsdarstellung

Die Schrödingergleichung lautet hier

$$H\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}, x\right)\psi(x,t) = i\hbar\dot{\psi}(x,t) \quad (1.9.28)$$

$\psi(x,t)$ sei normiert, damit folgt $|\psi(x,t)|^2 = \rho(x,t)$ dies ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte@Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte.

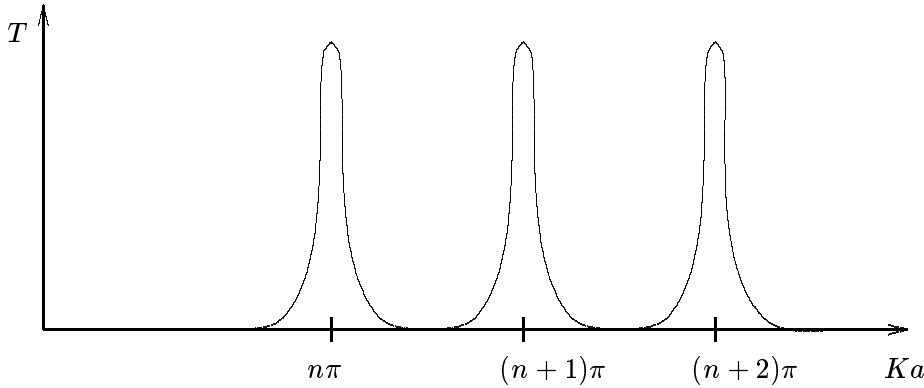


Abbildung 11: Verlauf des Transmissionskoeffizienten

Fourierintegral: Sei $f(x)$ quadratintegabel, dann existiert eine Fouriertransformierte:

$$\tilde{f}(K) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) e^{-iKx} \quad (1.9.29)$$

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dK \tilde{f}(K) e^{iKx} \quad (1.9.30)$$

wobei $\tilde{f}(K)$ quadratintegabel ist. Eine mathematisch genauere Darstellung liefert: Sei $f(x)$ quadratintegabel und:

$$\tilde{f}_L(K) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-L}^L dx f(x) e^{-iKx} \quad (1.9.31)$$

dann existiert ein quadratintegables $\tilde{f}(K)$, so daß:

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} dK |\tilde{f}_L(K) - \tilde{f}(K)|^2 = 0 \quad (1.9.32)$$

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \tilde{f}_L(K) = \tilde{f}(K) \quad \text{fast überall} \quad (1.9.33)$$

Dirac'sche δ -Funktion

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dK \tilde{f}(K) e^{iKx} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dK \int_{-\infty}^{\infty} dx' f(x') e^{iK(x-x')} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' f(x') \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dK e^{iK(x-x')} = \int_{-\infty}^{\infty} dx' f(x') \delta(x-x') \end{aligned} \quad (1.9.34)$$

Für die δ -Funktion gilt:

$$\delta(x) = 0 \quad \text{für } x \neq 0 \quad (1.9.35)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x) = 1 \quad (1.9.36)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x-x_0) f(x) = f(x_0) \quad (1.9.37)$$

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dK e^{iKx} \rightarrow \tilde{\delta}(K) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \quad \text{Fouriertransformierte} \quad (1.9.38)$$

Eigentlich müßte man mathematisch sauber formulieren: Aus der Erweiterung des Integralbegriffes folgt die Distribution (s. Anhang Messiah, BI-Taschenbuch).

Die δ -Funktion $\delta(x-x_0)$ definiert das lineare Funktional (Distribution)

$$\delta_{x_0} [f(x)] = f(x_0) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x-x_0) f(x) \quad (1.9.39)$$

für jede im Punkt x_0 stetige Funktion $f(x)$.

Formal gilt:

$$\delta(x - x_0) = \begin{cases} 0 & x \neq x_0 \\ \infty & x = x_0 \end{cases} \quad (1.9. 40)$$

In der Physik ist es üblich die Funktionalschreibweise zu benutzen, ohne das Wort "Distribution" erwähnen zu müssen. Das ist möglich, wenn wir uns an die Regeln halten.

????Übung????

Die Fouriertransformierte der Zustandsfunktion lautet:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dK \tilde{\psi}(K, t) e^{iKx} \quad (1.9. 41)$$

$$\int dx f^*(x)g(x) = \int dK \tilde{f}^*(K)\tilde{g}(K) \quad (1.9. 42)$$

$$1 = \int dx \psi^*(x, t)\psi(x, t) = \int dK \tilde{\psi}^*(K, t)\tilde{\psi}(K, t) \quad (1.9. 43)$$

$$\langle \hat{p} \rangle = \int dx \psi^*(x, t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t) \quad (1.9. 44)$$

$$= \int dx \psi^*(x, t) \frac{\hbar}{\sqrt{2\pi}} \int dK \tilde{\psi}(K, t) K e^{iKx} \quad (1.9. 45)$$

$$= \hbar \int dK' \tilde{\psi}^*(K', t) \int dK K \tilde{\psi}(K, t) \frac{1}{2\pi} \int dx e^{i(K-K')x} \quad (1.9. 46)$$

$$= \hbar \int dK dK' \tilde{\psi}^*(K', t) K \tilde{\psi}(K, t) \delta(K - K') \quad (1.9. 47)$$

$$= \int dK \tilde{\psi}^*(K, t) \hbar K \tilde{\psi}(K, t) \quad (1.9. 48)$$

$$\hat{p} \rightarrow p = \hbar K \quad (1.9. 49)$$

$|\tilde{\psi}(K, t)|^2 dK$ ist die Wahrscheinlichkeit den Impuls $\hbar K$ zwischen $K, K + dK$ zur Zeit t zu finden. Ebenso gilt:

$$\langle \hat{x} \rangle = \int dx \psi^*(x, t) x \psi(x, t) = \int dK \tilde{\psi}^*(K, t) \left(-\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial K} \right) \tilde{\psi}(K, t) \quad (1.9. 50)$$

$$H(\hat{p}, \hat{x}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \quad (1.9. 51)$$

$$H\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, x\right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \quad (1.9. 52)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dK \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi}(K, t) \right) e^{iKx} \quad (1.9. 53)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dK \left(H\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, x\right) \tilde{\psi}(K, t) \right) e^{iKx} \quad (1.9. 54)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dK \left(H\left(\hbar K, -\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial K}\right) \tilde{\psi}(K, t) \right) e^{iKx} \quad (1.9. 55)$$

$$H(\hat{p}, \hat{x}) = H\left(\hbar K, -\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial K}\right) = \frac{1}{2m} (\hbar K)^2 + V\left(-\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial K}\right) \quad (1.9. 56)$$

Damit ergibt sich die Schrödingergleichung in der K -Darstellung.

$$H\left(\hbar K, -\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial K}\right) \tilde{\psi}(K, t) = i\hbar \dot{\tilde{\psi}}(K, t) \quad (1.9. 57)$$

$$\left(\frac{(\hbar K)^2}{2m} + V \left(-\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial K} \right) \right) \tilde{\psi}(K, t) = i\hbar \dot{\psi}(K, t) \quad (1.9. 58)$$

In der Hamiltongleichung $H(p, x)$ ersetze man also p durch $\hbar K$ und x durch $-\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial K}$. Wenn man statt K als Variable $p = \hbar K$ verwendet, folgt dann:

$$\tilde{\psi}(p, t) = \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \tilde{\psi}(K, t) \quad (1.9. 59)$$

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \tilde{\psi}(p, t) e^{i\frac{px}{\hbar}} \quad (1.9. 60)$$

$$1 = \int dp |\tilde{\psi}(p, t)|^2 \quad (1.9. 61)$$

und mit

$$\langle p \rangle = \int dp \tilde{\psi}(p, t)^* p \tilde{\psi}(p, t) \quad (1.9. 62)$$

$$\langle x \rangle = \int dp \tilde{\psi}(p, t)^* \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} \right) \tilde{\psi}(p, t) \quad (1.9. 63)$$

folgt die Hamiltongleichung in der Impuls-Darstellung.

$$H \left(p, -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} \right) \tilde{\psi}(p, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi}(p, t) \quad (1.9. 64)$$

Fazit: Fouriertransformationen vermitteln den Übergang von der Ortsdarstellung, $\psi(x, t)$ des Zustandes ψ , zur K -Darstellung, bzw. Impulsdarstellung.

Damit folgt die **Vertauschungsrelation**:

$$x\text{-Darstellung: } [\hat{p}, \hat{x}] = \left[\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, x \right] = \frac{\hbar}{i} \quad (1.9. 65)$$

$$p\text{-Darstellung: } [\hat{p}, \hat{x}] = \left[p, -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} \right] = \frac{\hbar}{i} \quad (1.9. 66)$$

diese ist unabhängig von der Darstellung:

$$[\hat{p}, \hat{x}] = \frac{\hbar}{i} \quad (1.9. 67)$$

Die zeitfreie Schrödingergleichung lautet in der Impulsdarstellung:

$$H \left(p, -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} \right) \tilde{\psi}(p) = E \tilde{\psi}(p) \quad (1.9. 68)$$

Beispiel: Harmonischer Oszillator:

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m}{2} \omega^2 \hat{x}^2 = \begin{cases} \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 + \frac{m}{2} \omega^2 x^2 \\ \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2} \omega^2 \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} \right)^2 \end{cases} \quad (1.9. 69)$$

Ebene Welle:

$$\psi_K(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{iKx} \quad (1.9. 70)$$

bzw.

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{px}{\hbar}} \quad (1.9. 71)$$

Die Fouriertransformierte lautet hier formal:

$$\tilde{\psi}_K(K') = \delta(K' - K) \quad (1.9. 72)$$

bzw.

$$\tilde{\psi}_p(p') = \delta(p' - p) \quad (1.9. 73)$$

denn für die uneigentlichen Zustände gilt:

$$\psi_K(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dK' \tilde{\psi}_K(K') e^{iK'x} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dK' \delta(K - K') e^{iK'x} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{iKx} \quad (1.9. 74)$$

Somit folgt die δ -Funktions-Normierung:

$$\langle \psi_{K'} | \psi_K \rangle = \int dx \psi_{K'}^*(x) \psi_K(x) = \frac{1}{2\pi} \int dx e^{i(K-K')x} = \delta(K - K') \quad (1.9. 75)$$

$$\langle \psi_{p'} | \psi_p \rangle = \int dx \psi_{p'}^*(x) \psi_p(x) = \delta(p - p') \quad (1.9. 76)$$

Wir hatten bei der Besprechung des endlich tiefen Potentialtopfes Streuzustände kennen gelernt, dann hatten wir das Fourierintegral und Begriffe wie Ortsdarstellung, K -Darstellung und Impulsdarstellung eingeführt. Wir wollen festhalten, was wir schon oft benutzt haben.

Regel: Aus der Zustandsfunktion für einen quantenmechanischen Zustand folgt eine quadratintegrale oder normierbare Funktion. Ist $f(x)$ quadratintegrale und $\tilde{f}(K)$ normierbar, so gilt:

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dK \tilde{f}(K) e^{iKx} \quad (1.9. 77)$$

Wir hatten schon früher gesehen, wieder im Zusammenhang mit dem Streuzustand, daß auch nicht normierbare Funktionen eine große Rolle spielen, so z.B. für die ebene Welle von freien Teilchen.

Regel: Eine ebene Welle ist kein quantenmechanischer Bewegungszustand, aber eine ebene Welle kann als Grenzfall eines eigentlichen Zustands aufgefaßt werden, der uneigentliche Zustand.

z.B. $f(x)$ aufgebaut aus ebenen Wellen mit Gewichtskoeffizient $\tilde{f}(x)$.

i

2 Allgemeiner Formalismus der Quantenmechanik

2.1 Dirac-Formalismus, Mathematische Grundlagen

Wir hatten im 1. Kapitel die Schrödingertheorie der Quantenmechanik hergeleitet und die Born'sche Deutung der Zustandsfunktion: Aus der Ortsdarstellung $\psi(\vec{r}, t)$ folgt die Wahrscheinlichkeitsdichte des Ortes $|\psi(\vec{r}, t)|^2 = \rho(\vec{r}, t)$ und aus der Impulsdarstellung $\psi(\vec{p}, t)$ folgt die Wahrscheinlichkeitsdichte des Impulses $|\psi(\vec{p}, t)|^2 = \rho(\vec{p}, t)$.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{cases} \psi(\vec{r}, t) \\ \psi(\vec{p}, t) \end{cases} = \begin{cases} H\left(\frac{\hbar}{i}\nabla_{\vec{r}}, \vec{r}\right) \psi(\vec{r}, t) \\ H\left(\vec{p}, -\frac{\hbar}{i}\nabla_{\vec{p}}\right) \psi(\vec{p}, t) \end{cases} \quad (2.1. 1)$$

Es liegt nahe, daß sich quantenmechanische Aussagen auch darstellungsfrei formulieren lassen. Eine Aussage wie z.B. Energiewerte des harmonischen Oszillators $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$ hängen wohl nicht davon ab, ob wir die Eigenfunktion $u_n(x)$ oder $u_n(K) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-iKx} u_n(x)$ benutzen. Der Zustand u_n wird allein gekennzeichnet durch die Quantenzahl n . Wir bezeichnen den abstrakten Zustand durch

$$|u_n\rangle = \text{Zustandsvektor, Zustand, Ket-Vektor}$$

Wir betrachten einen linearen Vektorraum von Elementen $|\psi\rangle, |\varphi\rangle, |f\rangle, |g\rangle, \dots$. Diese Vektoren heißen nach Dirac auch **Ket-Vektoren** oder kurz **Ket**. Zu jedem Ket-Vektor gibt es eineindeutig den dualen Vektor, duale (zugeordnete) Vektoren bilden den dualen Raum.

$$|\psi\rangle \rightarrow \langle\psi| = \mathbf{Bra\text{-}Vektor} \quad (2.1. 2)$$

Hierbei entspricht das Einordnen dem Adjungieren:

$$(|\psi\rangle)^+ \equiv \langle\psi| \quad (2.1. 3)$$

$$(\langle\psi|)^+ = |\psi\rangle \quad (2.1. 4)$$

mit a als Zahl

$$a^+ = a^* \quad (2.1. 5)$$

Die Bezeichnung Bra und Ket folgt aus der englischen Bezeichnung Bracket für die Klammer des Skalarproduktes. Wir hatten für das Skalarprodukt $\langle\varphi|\psi\rangle$ verwendet, somit folgt für den linken Teil der Klammer **Bra** und für den rechten Teil **Ket**:

Die Wahrscheinlichkeitsamplitude dafür, daß man im Zustand ψ den Zustand φ antrifft (**Überlappung** zwischen ψ und φ) lautet:

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \int d^3r \varphi^*(\vec{r})\psi(\vec{r}) \quad \text{in Ortsdarstellung} \quad (2.1. 6)$$

Beispiel: Sei $|x\rangle$ der Zustand eines Teilchens, das genau am Ort x lokalisiert ist, dann ist:

$$\langle x|\psi_n\rangle \equiv \psi_n(x) \quad (2.1. 7)$$

die Wahrscheinlichkeitsamplitude, daß man im Zustand ψ_n den Zustand x antrifft, bzw. daß im Zustand ψ_n das Teilchen am Ort x ist.

2.1.1 Der Hilbertraum

Die quantenmechanischen Zustände sind Elemente im Hilbertraum \mathcal{H} .

1. \mathcal{H} ist ein linearer Vektorraum, d.h.

$$|f\rangle, |g\rangle \in \mathcal{H} \rightarrow a|f\rangle + b|g\rangle \in \mathcal{H}, \text{ mit } a, b \text{ komplexe Zahlen} \quad (2.1. 8)$$

Aus:

$$|af\rangle = a|f\rangle \quad (2.1. 9)$$

folgt, daß derselbe quantenmechanische Zustand beschrieben wird.

Es existiert ein Nullelement:

$$|f\rangle + 0 = |f\rangle, \quad 0|f\rangle = 0 \quad (2.1. 10)$$

Im dualen Raum gilt:

$$\langle af| = a^* \langle f| = (|af\rangle)^+ \quad (2.1. 11)$$

2. Es existiert ein Skalarprodukt (Metrisierung des Hilbertraumes). Zu jedem Paar $|f\rangle, |g\rangle$ gibt es eine komplexe Zahl $\langle f|g\rangle = \langle f||g\rangle$. In der Physik hat das Skalarprodukt die Bedeutung einer Wahrscheinlichkeitsamplitude.

$$\langle f|g\rangle = a \quad (2.1. 12)$$

(a)

$$\langle f|g\rangle = \langle g|f\rangle^* = (\langle g|f\rangle)^+ \quad (2.1. 13)$$

$$(b) \quad \langle f|g_1 + g_2 \rangle = \langle f|g_1 \rangle + \langle f|g_2 \rangle \quad (2.1. 14)$$

$$(c) \quad \langle f|ag \rangle = a \langle f|g \rangle \quad (2.1. 15)$$

$$(d) \quad \langle f|f \rangle \geq 0 \quad (= 0 \text{ nur für } |f \rangle = 0), \quad \langle f|f \rangle < \infty \quad (2.1. 16)$$

Die Länge des Zustandsvektors sei definiert als die Norm von f :

$$\|f\| = +\sqrt{\langle f|f \rangle} \quad (2.1. 17)$$

Die Schwarzsche Ungleichung lautet hier:

$$\langle f|f \rangle \langle g|g \rangle \geq \langle f|g \rangle \langle g|f \rangle = |\langle f|g \rangle|^2 \quad (2.1. 18)$$

Beweis:

$$|f \rangle = |g \rangle \frac{\langle g|f \rangle}{\langle g|g \rangle} + |p \rangle \quad (2.1. 19)$$

$$|p \rangle = |f \rangle - |g \rangle \frac{\langle g|f \rangle}{\langle g|g \rangle} \quad (2.1. 20)$$

$$\langle g|p \rangle = 0 \quad (2.1. 21)$$

$$\langle f|f \rangle = \langle g|g \rangle \frac{|\langle g|f \rangle|^2}{\langle g|g \rangle^2} + \langle p|p \rangle \quad (2.1. 22)$$

Da $\langle p|p \rangle \geq 0$ ist, folgt die Behauptung.

3. $\dim \mathcal{H}$ ist abzählbar unendlich (Die Dimension ist die maximale Zahl linear unabhängiger Elemente $|f_1 \rangle, |f_2 \rangle, \dots$)

Definition 2.1.1: Die Elemente $|f_1 \rangle, |f_2 \rangle, \dots$ sind linear unabhängig, wenn gilt:

$$0 = c_1|f_1 \rangle + c_2|f_2 \rangle + \dots + c_r|f_r \rangle \rightarrow c_1 = c_2 = \dots = c_r = 0 \quad (2.1. 23)$$

4. \mathcal{H} ist vollständig. Jede Cauchy-Folge von Elementen aus \mathcal{H} konvergiert in \mathcal{H} , d.h zu jedem $\varepsilon > 0$ gibt es $n, m > N_\varepsilon$, so daß $\|f_n - f_m\| < \varepsilon$. Also: das Grenzelement einer Cauchy-Folge gehört auch zu \mathcal{H} .
5. Wir betrachten in der Physik speziell den Hilbertraum, der auch separabel ist:

\mathcal{H} ist separabel, d.h. es gibt eine in \mathcal{H} dichte, abzählbare Menge. (bei Zittartz: abzählbare Menge = Folge) **Beispiel:** Die rationalen Zahlen (abzählbar, Folge) liegen dicht in den reellen Zahlen.

2.1.2 Operatoren im Hilbertraum

Jede Zuordnung $|g \rangle \mapsto |f \rangle$ definiert einen Operator $|f \rangle = A|g \rangle = |Ag \rangle$. Wir betrachten nun lineare Operatoren:

Linearität:

$$A|a_1f_1 + a_2f_2 \rangle = a_1A|f_1 \rangle + a_2A|f_2 \rangle \quad (2.1. 24)$$

$$(AB)|f \rangle = A(B|f \rangle) = A \underbrace{|Bf \rangle}_{=|g \rangle} = A|g \rangle \quad (2.1. 25)$$

$$(A + B)|f \rangle = A|f \rangle + B|f \rangle \quad (2.1. 26)$$

Wichtige Operatoren für die Physik:

1. Der Einheitsoperator:

$$1|f\rangle = |f\rangle \quad (2.1.27)$$

2. Adjungierte Operatoren:

$$\langle A^+ f | g \rangle = \langle f | A g \rangle \quad (2.1.28)$$

bzw.:

$$|g\rangle = A|f\rangle \Rightarrow \langle g| = (A|f\rangle)^+ = (|f\rangle)^+ A^+ = \langle f| A^+ \quad (2.1.29)$$

mit:

$$(A+B)^+ = A^+ + B^+, \quad (AB)^+ = B^+ A^+, \quad (A^+)^+ = A \quad (2.1.30)$$

3. Hermitesche Operatoren (entsprechen physikalischen Meßgrößen, z.B. H, \hat{p}, \hat{x} , etc.)

$$A = A^+ \quad (2.1.31)$$

4. Unitäre Operatoren: U heißt unitär, wenn

$$UU^+ = 1, \quad U^+ = U^{-1}, \quad U^+U = UU^+ \quad (2.1.32)$$

Eigenschaften: unitäre Operatoren sind normerhaltend

$$\langle Uf | Ug \rangle = \langle f | U^+ Ug \rangle = \langle f | g \rangle \rightarrow \|Uf\| = \|f\| \quad (2.1.33)$$

Die Vorteile der Dirac-Schreibweise:

1. $|u\rangle =$ Ket-Vektor

2. $\langle u| (\equiv (|u\rangle)^+) =$ Bra-Vektor (= adjungierter oder dualer Vektor).

3. $\langle u|v\rangle =$ einer komplexen Zahl und der Wahrscheinlichkeitsamplitude für die Überlappung von $|u\rangle$ und $|v\rangle$.

4. $\langle u|v\rangle = 0$ bedeutet, daß wenn ein Teilchen im Zustand $|v\rangle$ ist, so kann es nicht im Zustand $|u\rangle$ sein.

5. $|u\rangle\langle v|$ ist ein Operator, denn:

$$|u\rangle\langle v|f\rangle = |u\rangle \underbrace{\langle v|f\rangle}_{\text{Zahl } c} = c|u\rangle \quad (2.1.34)$$

$|u\rangle\langle v|$ ist sogar ein linearer Operator, also:

$$A = \frac{|u\rangle\langle v|}{c} \text{ mit } A|f\rangle = |u\rangle \quad (2.1.35)$$

6. Speziell haben wir Projektionsoperatoren. Sei $\langle u|u\rangle = 1$, dann ist $P_u = |u\rangle\langle u|$ der Projektionsoperator, der jeden beliebigen Zustand auf den Vektor $|u\rangle$ projiziert.

$$P_u|f\rangle = |u\rangle\langle u|f\rangle = f(u)|u\rangle \quad (2.1.36)$$

$$P^2 = P \quad (2.1.37)$$

denn:

$$|u\rangle\langle u||u\rangle\langle u| = |u\rangle\langle u|u\rangle\langle u| = |u\rangle\langle u| = P \quad (2.1.38)$$

2.1.3 Orthonormierung

Ein System $|u_n\rangle$ heißt orthonormiert, wenn:

$$\langle u_n | u_m \rangle = \delta_{nm} = \begin{cases} 1 & n = m \\ 0 & n \neq m \end{cases} \quad (2.1. 39)$$

Dabei ist δ_{nm} das Kronecker-Symbol.

Definition 2.1.2: Ein System heißt vollständig, wenn es orthonormiert ist und wenn:

$$1 = \sum_n |u_n\rangle \langle u_n| \quad (2.1. 40)$$

Diese Definition entspricht der üblichen Definition, da für beliebige $|f\rangle$ gilt:

$$|f\rangle = 1|f\rangle = \sum_n |u_n\rangle \langle u_n|f\rangle = \sum_n f(u_n)|u_n\rangle \quad (2.1. 41)$$

Ein orthonormiertes und vollständiges System heißt Basis. Wir sagen auch: $|f\rangle$ ist in der Basis $|u_n\rangle$ dargestellt, die Zahlen $f(u_n) = \langle u_n|f\rangle$ heißen Darstellung von f in der u -Darstellung.

Das Skalarprodukt wird wie folgt dargestellt:

$$\langle f|g\rangle = \langle f|1|g\rangle = \sum_n \langle f|u_n\rangle \langle u_n|g\rangle = \sum_n f^*(u_n)g(u_n) \quad (2.1. 42)$$

2.1.4 Darstellung von Operatoren

$$A = 1A1 = \sum_{nm} |u_n\rangle \underbrace{\langle u_n|A|u_m\rangle}_{A_{nm}} \langle u_m| = \sum_{nm} |u_n\rangle A_{nm} \langle u_m| \quad (2.1. 43)$$

$$A_{nm} = \langle u_n|A|u_m\rangle = \langle u_n|Au_m\rangle = \langle A^+u_n|u_m\rangle \quad (2.1. 44)$$

Die Matrix A_{nm} (unendlichdimensional) heißt die Darstellung von A in der u -Basis.

Beispiel: Die Hermite Funktionen $u_n(x)$ sind eine Basis. Die Operatoren b, b^+ bzw. \hat{p}, \hat{x} werden dargestellt durch die Matrix:

$$\langle u_n|b|u_m\rangle = b_{nm} \quad (2.1. 45)$$

bzw.

$$\langle u_n|b^+|u_m\rangle = (b^+)_{nm} \quad (2.1. 46)$$

$$(b^+b)_{nm} = n\delta_{nm} \quad (2.1. 47)$$

2.1.5 Das Operatorprodukt

$$C = AB = 1A1B1 \quad (2.1. 48)$$

$$= \sum_{nml} |u_n\rangle \langle u_n|A|u_m\rangle \langle u_m|B|u_l\rangle \langle u_l| \quad (2.1. 49)$$

$$= \sum_{nml} |u_n\rangle A_{nm}B_{ml} \langle u_l| \quad (2.1. 50)$$

$$= \sum_{nl} |u_n\rangle C_{nl} \langle u_l| \quad (2.1. 51)$$

$$C_{nl} = \sum_m A_{nm}B_{ml} = (AB)_{nl} = \text{Darstellung des Produkts} \quad (2.1. 52)$$

Dem Operatorenprodukt entspricht also in der Darstellung die Matrizenmultiplikation.

$$(A^+)_{mn} = \langle u_m | A^+ | u_n \rangle = \langle u_m | A^+ u_n \rangle = \langle Au_m | u_n \rangle \quad (2.1.53)$$

$$= \langle u_n | Au_m \rangle^* = \langle u_n | A | u_m \rangle^* = A_{nm}^* \quad (2.1.54)$$

Die Matrix des Adjungierten entspricht der transponierten und komplex-konjugierten Matrix.

Sei A hermitesch, dann folgt

$$A_{mn} = A_{nm}^* \rightarrow A_{nn} = A_{nn}^* \quad (2.1.55)$$

d.h. die Diagonalelemente sind reell.

2.1.6 Der Basiswechsel

Seien $|u_n\rangle$ und $|v_n\rangle$ zwei verschiedene Basen, d.h.

$$1 = \sum_n |u_n\rangle \langle u_n| = \sum_m |v_m\rangle \langle v_m| \quad (2.1.56)$$

damit folgt für den Übergang:

$$|u_n\rangle = 1|u_n\rangle = \sum_m |v_m\rangle \underbrace{\langle v_m | u_n \rangle}_{U_{mn}} \quad (2.1.57)$$

Die Matrix U_{mn} vermittelt den Übergang von der v -Basis zur u -Basis.

2.1.7 Darstellungswechsel für Vektoren

$$|f\rangle = \sum_n |u_n\rangle \langle u_n | f \rangle = \sum_n f(u_n) |u_n\rangle \quad u\text{-Darstellung} \quad (2.1.58)$$

$$|f\rangle = \sum_n |v_n\rangle \langle v_n | f \rangle = \sum_n f(v_n) |v_n\rangle \quad v\text{-Darstellung} \quad (2.1.59)$$

damit folgt:

$$f(u_n) = \langle u_n | f \rangle = \langle u_n | 1 | f \rangle = \sum_m \langle u_n | v_m \rangle \langle v_m | f \rangle = \sum_m U_{mn}^* f(v_m) \quad (2.1.60)$$

Wir zeigen jetzt, daß U unitär ist.

$$\begin{aligned} (UU^+)_{nm} &= \sum_l U_{nl} (U^+)_{lm} = \sum_l U_{nl} U_{ml}^* = \sum_l \langle v_n | u_l \rangle \langle v_m | u_l \rangle^* \\ &= \sum_l \langle v_n | u_l \rangle \langle u_l | v_m \rangle = \langle v_n | 1 | v_m \rangle = \langle v_n | v_m \rangle = \delta_{nm} \end{aligned} \quad (2.1.61)$$

$$UU^+ = 1 \quad (2.1.62)$$

2.1.8 Darstellungswechsel für Operatoren

$$\tilde{A}_{mn} = \langle v_m | A | v_n \rangle = \langle v_m | 1 A 1 | v_n \rangle = \sum_{lr} \langle v_m | u_l \rangle \langle u_l | A | u_r \rangle \langle u_r | v_n \rangle \quad (2.1.63)$$

$$= \sum_{lr} U_{ml} A_{lr} (U^+)_{rn} = (UAU^+)_{mn} = (UAU^{-1})_{mn} \quad (2.1.64)$$

Fazit: Wir werden quantenmechanische Zustandsvektoren von Fall zu Fall in verschiedenen Darstellungen beschreiben, z.B. x -Darstellung, p -Darstellung, usw. Der Übergang wird vermittelt durch unitäre Transformationen, so daß:

$$|f\rangle \rightarrow U|f\rangle \quad (2.1. 65)$$

$$\langle f| \rightarrow (U|f\rangle)^+ = \langle f|U^+ \quad (2.1. 66)$$

$$A \rightarrow UAU^{-1} = UAU^+ \quad (2.1. 67)$$

Davon wird die Wahrscheinlichkeitsamplitude nicht beeinflusst, denn

$$\langle g|A|f\rangle \rightarrow \langle g|U^+UAU^{-1}U|f\rangle = \langle g|A|f\rangle \quad (2.1. 68)$$

ist invariant.

Bemerkung: Da quantenmechanische Aussagen nur Wahrscheinlichkeitsamplituden (Matrixdarstellung) enthalten, die invariant gegen Darstellungswechsel sind, so ist es gleichgültig, welche Darstellung wir wählen. Vorteil: zweckmäßige Wahl der Darstellung, um die Rechnung zu vereinfachen.

2.2 Eigenwertproblem

Sei A ein linearer Operator, dann betrachten wir

$$A|\psi\rangle = a|\psi\rangle \quad (2.2. 1)$$

mit a als Zahl, dem Eigenwert. $|\psi\rangle$ ist dann der Eigenvektor, Eigenzustand oder Eigen-Ket.

Mit $|\psi\rangle \hat{=} |a\rangle$ schreibt man auch suggestiv:

$$A|a\rangle = a|a\rangle \quad (2.2. 2)$$

d.h. wir bezeichnen den Eigen-Ket durch den Eigenwert.

Beispiel: Harmonischer Oszillator:

$$H|n\rangle = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle \quad (2.2. 3)$$

wobei $\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$ der Eigenwert ist.

Sei nun A hermitesch, dies ist der einzige Fall von praktischem Interesse für die Physik.

1. Die Eigenwerte sind reell, wie schon gezeigt wurde.

2. Wie schon gezeigt gilt:

$$\langle a_1|a_2\rangle = 0 \quad \text{für } a_1 \neq a_2 \quad (2.2. 4)$$

Sei U unitär

$$U|u\rangle = |u\rangle \quad (2.2. 5)$$

$$\langle u|U^+ = \langle Uu| = \langle u|u^* \quad (2.2. 6)$$

1.

$$\langle Uu|Uu\rangle = \langle u|U^+U|u\rangle = u^*u = \langle u|u\rangle = \langle u|u\rangle \quad (2.2. 7)$$

$$|u| = 1 \quad (2.2. 8)$$

Sei $u = e^{i\varphi}$ mit φ reell, dann gilt:

$$u^* = e^{-i\varphi} = \frac{1}{u} \quad (2.2. 9)$$

2. Sei $U|u_1\rangle = u_1|u_1\rangle$, $U|u_2\rangle = u_2|u_2\rangle$ und $u_1 \neq u_2$, dann gilt:

$$\langle u_1|u_2\rangle = \langle Uu_1|Uu_2\rangle = u_1^*u_2 \langle u_1|u_2\rangle \quad (2.2. 10)$$

und wegen:

$$u_1^*u_2 = \frac{u_2}{u_1} \neq 1 \quad (2.2. 11)$$

folgt die Orthogonalität:

$$\langle u_1|u_2\rangle = 0 \quad (2.2. 12)$$

2.2.1 Matrixmethode zur Lösung des Eigenwertproblems

Sei $A|a\rangle = a|a\rangle$ und $|u_n\rangle$ beliebige Basis, dann gilt:

$$\begin{aligned} a \langle u_n|a\rangle &= \langle u_n|a\rangle a = \langle u_n|A|a\rangle = \langle u_n|A1|a\rangle \\ &= \sum_m \langle u_n|A|u_m\rangle \langle u_m|a\rangle = \sum_m A_{nm} \langle u_m|a\rangle \end{aligned} \quad (2.2. 13)$$

In einem Raum endlicher Dimension N , mit $|u_1\rangle, |u_2\rangle, \dots, |u_N\rangle$ als Basis, ist dies ein System von N linearen, homogenen Gleichungen für die Unbekannten $\langle u_n|a\rangle$. Die Bedingung für die Lösung lautet:

$$\det(A_{nm} - a\delta_{nm}) = 0 \quad (2.2. 14)$$

Daraus folgt ein Polynom N -ten Grades in a und somit ergeben sich N Lösungen für a , woraus die Eigenwerte a folgen. Die Methode ist sehr geeignet für kleine Dimensionen. Für $N \rightarrow \infty$ (Hilbertraum) eignen sich meistens andere Methoden etwas besser; z.B. Behandlung des harmonischen Oszillators wie vorgeführt.

2.2.2 Entartung

Sei $|\varphi\rangle$ Eigenvektor zu einem diskreten Eigenwert, so ist auch $c|\varphi\rangle$ Eigenvektor, so daß wir o.B.d.A. $|\varphi\rangle$ als normiert ansehen können.

$$\langle \varphi|\varphi\rangle = 1 \quad (2.2. 15)$$

Sei A hermitesch, dann sind die Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten automatisch orthogonal.

Sei a n -fach entartet, d.h. $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \dots, |\varphi_n\rangle$ sind Eigenvektoren zum gleichen Eigenwert a und die $|\varphi_\nu\rangle$ ($\nu = 1, \dots, n$) sind linear unabhängig, dann ist jede Linearkombination

$$c_1|\varphi_1\rangle + c_2|\varphi_2\rangle + \dots + c_n|\varphi_n\rangle = |\varphi\rangle \quad (2.2. 16)$$

ebenfalls Eigenvektor, denn:

$$\begin{aligned} A|\varphi\rangle &= A(c_1|\varphi_1\rangle + c_2|\varphi_2\rangle + \dots + c_n|\varphi_n\rangle) \\ &= c_1a|\varphi_1\rangle + c_2a|\varphi_2\rangle + \dots + c_na|\varphi_n\rangle = a|\varphi\rangle \end{aligned} \quad (2.2. 17)$$

Die $\{|\varphi_\nu\rangle\}$ lassen sich dann ebenfalls orthonormieren (Erhard Schmidt). Die Gesamtheit der Eigenvektoren $|\varphi\rangle$ zu diskreten Eigenwerten, lassen sich also zu einem orthonormierten System zusammenfassen.

2.2.3 Eigenwertproblem von Observablen

Wir haben gesehen, daß sich die Eigenvektoren zu diskreten Eigenwerten zu einem orthonormierten System zusammenfassen lassen.

Betrachten wir nochmals das Eigenwertproblem, dann ist $A|\varphi\rangle = a|\varphi\rangle$, wenn A hermitescher Operator ist. Das System eines solchen Operators ist im allgemeinen diskret und kontinuierlich. Allgemein gilt, daß das Spektrum aus Punktspektrum plus Linienspektrum besteht.

Wir kommen jetzt zum Begriff der Observablen.

Definition 2.2.1: Ein hermitescher Operator heißt Observable, wenn das zugehörige System von Eigenvektoren vollständig ist und somit eine Basis.

Damit ist gemeint:

1. Rein diskretes Spektrum:

$$1 = \sum_n |a_n\rangle\langle a_n| \quad \text{mit } A|a_n\rangle = a_n|a_n\rangle \quad (2.2. 18)$$

2. Rein kontinuierliches Spektrum:

$$1 = \int d\lambda |a_\lambda\rangle\langle a_\lambda| \quad \text{mit } A|a_\lambda\rangle = a_\lambda|a_\lambda\rangle \quad (2.2. 19)$$

3. Gemischtes Spektrum:

$$1 = \sum_n |a_n\rangle\langle a_n| + \int d\lambda |a_\lambda\rangle\langle a_\lambda| \quad (2.2. 20)$$

mit:

$$A|a_n\rangle = a_n|a_n\rangle, \quad A|a_\lambda\rangle = a_\lambda|a_\lambda\rangle$$

Dies ist die entsprechende Verallgemeinerung des Falles (1).

Feststellung: $|a_\lambda\rangle$ ist nicht normierbar im üblichen Sinne, wir können aber eine verallgemeinerte Normierung einführen (Dirac). Die $|a_\lambda\rangle$ sind uneigentliche Eigenvektoren (keine Elemente des Hilbertraumes, aber eine Erweiterung dessen).

Wir beschäftigen uns jetzt nur noch mit Observablen, denn physikalische Meßgrößen sind immer Observable. Dieses läßt sich allgemein gar nicht beweisen. Wir wollen diese Tatsache als Regel einführen.

Regel: Aus den physikalische Meßgrößen (wie z.B. Ort, Impuls, Drehimpuls, Energie) folgen die Observablen.

Anmerkung: Für die meisten Meßgrößen läßt sich die Regel beweisen. Im Prinzip muß aber die Regel in jedem Spezialfall nachgewiesen werden.

Bemerkungen zu den einzelnen Fällen:

1. Reines Punktspektrum. Sei A Observable mit $A|a_n\rangle = a_n|a_n\rangle$ und a_n diskret, dann gilt:

$$\sum_n |a_n\rangle\langle a_n| = 1$$

Spektraldarstellung:

$$A = A1 = A \sum_n |a_n\rangle\langle a_n| = \sum_n a_n \underbrace{|a_n\rangle\langle a_n|}_{P(a_n)} = \sum_n a_n P(a_n) \quad (2.2. 21)$$

mit $P(a_n) =$ Projektionsoperator. Das ist die Spektraldarstellung der Observablen in seiner Eigenbasis, z.B. für den harmonischen Oszillator gilt dann:

$$H = \sum_n \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| \quad (2.2. 22)$$

2. Reines Linienspektrum (z.B. Impulsoperator, Eigenwerte p , $-\infty < p < \infty$). Es gilt also für $A|a_\lambda\rangle = a_\lambda|a_\lambda\rangle$ und A Observable:

$$\int d\lambda |a_\lambda\rangle\langle a_\lambda| = 1 \quad (2.2. 23)$$

Darstellung der Observablen A :

$$\begin{aligned} A &= A1 = A \int d\lambda |a_\lambda\rangle\langle a_\lambda| = \int d\lambda a_\lambda |a_\lambda\rangle\langle a_\lambda| \\ &= \int d\lambda a_\lambda P(a_\lambda) \quad \text{Spektraldarstellung} \end{aligned} \quad (2.2. 24)$$

Sei nun $|f\rangle \in \mathcal{H}$ mit $\langle f|f\rangle < \infty$, z.B. Fouriertransformation:

$$\begin{aligned} f(x) &= \int dK \underbrace{\tilde{f}(x)}_{|a_\lambda\rangle} \frac{e^{iKx}}{\sqrt{2\pi}} \\ |f\rangle &= 1|f\rangle = \int d\lambda |a_\lambda\rangle \underbrace{\langle a_\lambda|f\rangle}_{f(\lambda)} = \int d\lambda f(\lambda) |a_\lambda\rangle \end{aligned} \quad (2.2. 25)$$

Symbolisch sieht $|f\rangle$ wie folgt aus, mit $f(\lambda)$ als Darstellung von f im kontinuierlichen λ -Spektrum:

$$|f\rangle = \begin{pmatrix} f(\lambda_1) \\ f(\lambda_2) \\ \vdots \\ f(\lambda_n) \end{pmatrix} \quad (2.2. 26)$$

$$\begin{aligned} f(\lambda) &= \langle a_\lambda|f\rangle = \langle a_\lambda|1|f\rangle = \int d\lambda' \langle a_\lambda|a_{\lambda'}\rangle \langle a_{\lambda'}|f\rangle \\ &= \int d\lambda' \underbrace{\langle a_\lambda|a_{\lambda'}\rangle}_{\delta(\lambda-\lambda')} f(\lambda') \end{aligned} \quad (2.2. 27)$$

also ist

$$\langle a_{\lambda'}|a_\lambda\rangle = \delta(\lambda - \lambda') = \begin{cases} 0 & \lambda \neq \lambda' \\ \infty & \lambda = \lambda' \end{cases} \quad (2.2. 28)$$

und heißt δ -Funktions-Normierung.

Die δ -Funktions-Normierung für uneigentliche Vektoren ist die sinnvolle Erweiterung der üblichen Normierung für eigentliche Vektoren im Hilbertraum.

Satz: Haben zwei verschiedene Observablen eine gemeinsame Eigenbasis, dann sind A und B vertauschbar.

Voraussetzung:

$$A|\varphi_n\rangle = a_n|\varphi_n\rangle, \quad B|\varphi_n\rangle = b_n|\varphi_n\rangle, \quad \sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = 1 \quad (2.2. 29)$$

Beweis:

$$\begin{aligned} [A, B] &= AB - BA = (AB - BA)1 = \sum_n (AB - BA)|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| \\ &= \sum_n (a_n b_n - b_n a_n)|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = 0 \end{aligned} \quad (2.2. 30)$$

In der Physik ist allerdings die Umkehrung wichtiger.

Satz: Wenn zwei Observablen kommutieren, so existiert eine simultane Eigenbasis.

Voraussetzung:

$$A|\varphi_n\rangle = a_n|\varphi_n\rangle, \quad \sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|, \quad AB = BA \quad (2.2. 31)$$

Beweis:

(a) Sei a ein nichtentarteter Eigenwert, d.h. $A|\varphi\rangle = a|\varphi\rangle$:

$$BA|\varphi\rangle = aB|\varphi\rangle = AB|\varphi\rangle \quad (2.2. 32)$$

Aus Gleichung (2.2. 32) folgt mit $|\varphi\rangle$ ist auch $B|\varphi\rangle$ Eigenvektor. Da $|\varphi\rangle$ einfach, folgt daß $B|\varphi\rangle = b|\varphi\rangle$.

(b) Sei a K -fach entartet: $A|\varphi_k\rangle = a|\varphi_k\rangle$, mit $k = 1, \dots, K$ und $\{|\varphi_k\rangle\}$ sind linear unabhängig.

$$BA|\varphi_k\rangle = aB|\varphi_k\rangle = AB|\varphi_k\rangle \quad (2.2. 33)$$

Da $B|\varphi_k\rangle$ Eigenket von A zum Eigenwert a , so liegt jedenfalls $B|\varphi_k\rangle$ im K -dimensionalen Raum der $\{|\varphi_k\rangle\}$. Eine Entwicklung liefert: $B|\varphi_k\rangle = \sum_{i=1}^K \alpha_{ik}|\varphi_i\rangle$. Somit haben wir es mit einem K -dimensionalen Eigenwertproblem für die $B|\varphi_k\rangle$ zu tun. Das läßt sich nach der Matrixmethode lösen.

Ergebnis:

$$B|\tilde{\varphi}_k\rangle = b_k|\tilde{\varphi}_k\rangle, \quad |\tilde{\varphi}_k\rangle \in \{|\varphi_k\rangle\} \quad (2.2. 34)$$

mit $A|\tilde{\varphi}_k\rangle = a|\tilde{\varphi}_k\rangle$.

Damit haben die Observablen A, B eine gemeinsame Eigenbasis.

Verallgemeinerung: Paarweise vertauschbare Operatoren A, B, C, \dots haben eine gemeinsame Eigenbasis.

Definition 2.2.2: Ein System von vertauschbaren Operatoren A, B, C, \dots heißt vollständig, wenn seine gemeinsame Eigenbasis eindeutig festliegt, d.h.

$$A|\varphi_k\rangle = a_k|\varphi_k\rangle, \quad B|\varphi_k\rangle = b_k|\varphi_k\rangle, \quad C|\varphi_k\rangle = c_k|\varphi_k\rangle, \dots \quad (2.2. 35)$$

Zu jedem k ist dann mindestens ein a_k, b_k, c_k, \dots einfach.

Die Funktion eines Operators lautet:

$$g(A) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n A^n \quad (2.2. 36)$$

$$A|\varphi_n\rangle = a_n|\varphi_n\rangle \rightarrow g(A)|\varphi_n\rangle = g(a_n)|\varphi_n\rangle \quad (2.2. 37)$$

und

$$g(A) = \sum_n g(a_n)|a_n\rangle\langle a_n| \quad (2.2. 38)$$

3. Kombiniertes Spektrum:

$$\sum_n |a_n \rangle \langle a_n| + \int d\lambda |a_\lambda \rangle \langle a_\lambda| \tag{2.2. 39}$$

mit

$$\langle a_n | a_m \rangle = \delta_{nm} \tag{2.2. 40}$$

$$\langle a_n | a_\lambda \rangle = 0 \tag{2.2. 41}$$

$$\langle a_\lambda | a_{\lambda'} \rangle = \delta(\lambda - \lambda') \tag{2.2. 42}$$

$$A = \sum_n a_n |a_n \rangle \langle a_n| + \int d\lambda a_\lambda |a_\lambda \rangle \langle a_\lambda| \tag{2.2. 43}$$

Bemerkung:

$$P(\lambda_1, \lambda_2) = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} d\lambda |a_\lambda \rangle \langle a_\lambda| = \text{Projektionsoperator} \tag{2.2. 44}$$

denn

$$\begin{aligned} P^2 &= \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} d\lambda \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} d\lambda' |a_\lambda \rangle \langle a_\lambda | a_{\lambda'} \rangle \langle a_{\lambda'}| \\ &= \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} d\lambda |a_\lambda \rangle \langle a_\lambda| = P \end{aligned} \tag{2.2. 45}$$

Beispiel: Ebene Welle:

$$\varphi_K(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{iKx} \tag{2.2. 46}$$

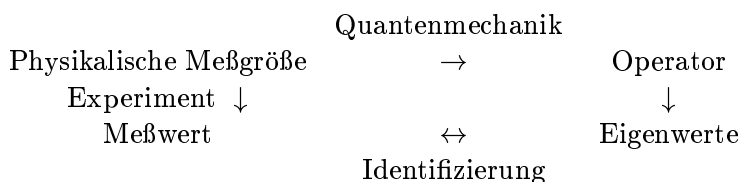
denn

$$\begin{aligned} \langle \varphi_{K'} | \varphi_K \rangle &= \int dx \varphi_{K'}^*(x) \varphi_K(x) \\ &= \frac{1}{2\pi} \int dx e^{i(K-K')x} = \delta(K - K') \end{aligned} \tag{2.2. 47}$$

2.3 Deduktiver Aufbau der Quantenmechanik

Nach bisherigen Betrachtungen sind wir jetzt in der Lage, die quantenmechanischen Grundregeln deduktiv zu formulieren:

1. Der quantenmechanische Bewegungszustand wird beschrieben durch einen Vektor im Hilbertraum: wähle $|\psi(t)\rangle$ so, daß zu jeder festen Zeit t_0 , $|\psi(t_0)\rangle$ den Zustand charakterisiert. Dabei ist $\langle \varphi | \psi(t) \rangle$ die Wahrscheinlichkeitsamplitude dafür, daß der Zustand ψ zur Zeit t mit dem Zustand φ zusammenfällt oder überlappt.
2. Physikalische Meßgrößen werden in der Quantenmechanik in Observablen, d.h. hermitesche Operatoren mit vollständigem Eigenwertspektrum, überführt. Damit werden dann die Meßwerte der physikalischen Meßgrößen durch die Eigenwerte der Observablen dargestellt.



3. Fundamentale Vertauschungsrelationen:

$$\vec{\hat{r}} = (\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3) = \hat{x}_i; \quad \vec{\hat{p}} = (\hat{p}_1, \hat{p}_2, \hat{p}_3) = \hat{p}_i \quad (2.3. 1)$$

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_k] = [\hat{p}_i, \hat{p}_k] = 0 \quad (2.3. 2)$$

$$[\hat{p}_i, \hat{x}_k] = \frac{\hbar}{i} \delta_{ki} 1 \quad (2.3. 3)$$

Man erhält Operatoren für physikalische Meßgrößen, indem man für den Ort und Impuls (bzw. für andere Abhängigkeiten) die entsprechenden Operatoren in die Funktion einsetzt.

$$F = F(\vec{r}, \vec{p}) \rightarrow \hat{F} = (\vec{\hat{r}}, \vec{\hat{p}}) \quad (2.3. 4)$$

4. Die zeitliche Änderung eines Zustandes $|\psi(t)\rangle$ beschreibt die Schrödingergleichung, mit H dem Hamiltonoperator:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle \quad (2.3. 5)$$

Bemerkungen zu den einzelnen Punkten:

1. Die Tatsache, daß $|\psi\rangle$ ein Ket im Hilbertraum ist, impliziert folgendes: Die Quantenmechanik ist eine lineare Theorie, damit ist die Superposition von Zuständen zulässig. Direkte physikalische Bedeutung hat das Skalarprodukt als Wahrscheinlichkeitsamplitude.
2. Wenn wir eine physikalische Größe messen, so finden wir eine reelle Zahl a . Es muß dann erlaubt sein zu sagen, daß der entsprechende Operator in dem Zustand den Wert a annimmt. Von einem Operator kann man aber nur sagen, daß er einem Zahlenwert entspricht, wenn der Zustand ein Eigenzustand ist, a ist also ein Eigenwert. Die Verknüpfung der reellen Meßwerte mit den Eigenwerten des Operators ist daher die einzig mögliche Schlussweise. Für die Wahrscheinlichkeit, daß ein beliebiger Zustand ψ den Eigenwert a_i repräsentiert, folgt mit $|a_i\rangle, |\psi\rangle$ normiert:

$$W(a_i, \psi) = |\langle a_i | \psi \rangle|^2 \quad (2.3. 6)$$

Wenn gilt $|a_i\rangle = |\psi\rangle$, folgt $W(a_i, a_i) = 1$.

Dann sagen wir: A hat mit Sicherheit den Wert a_i . Nur in diesem Falle ist die physikalische Größe A scharf: a_i . Jede Messung an identischen Systemen im Zustand $|a_i\rangle$ liefert mit Sicherheit den Eigenwert a_i .

Erwartungswert: Sei $\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle$ mit $\langle \psi | \psi \rangle = 1$, wenn gilt:

$$A = \sum_i a_i |a_i\rangle \langle a_i| + \int d\lambda a_\lambda |a_\lambda\rangle \langle a_\lambda| \quad (2.3. 7)$$

dann folgt für den Erwartungswert:

$$\langle A \rangle = \sum_i a_i |\langle a_i | \psi \rangle|^2 + \int d\lambda a_\lambda |\langle a_\lambda | \psi \rangle|^2 \equiv \int a_i |\langle a_i | \psi \rangle|^2 \quad (2.3. 8)$$

Der spezielle Meßwert a_i tritt mit der Wahrscheinlichkeit $|\langle a_i | \psi \rangle|^2$ auf. Bei der Einzelmessung an einem System der Gesamtheit finden wir a_i , bei der Einzelmessung an einem anderen System der Gesamtheit finden wir a_j , etc. Die Mittelung über viele Messungen liefert dann $\langle A \rangle$. Genauer: die Anzahl der Messungen sei N und man habe N_i -mal den Wert a_i , mit $\sum_i N_i = N$, dann gilt

$$\langle A \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_i \frac{N_i}{N} a_i \rightarrow \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_i}{N} = |\langle a_i | \psi \rangle|^2 \quad (2.3. 9)$$

3. Die Gleichung (2.3. 4) gibt die Vorschrift an, wie man physikalische Meßgrößen, die ein klassisches Analogon haben, in die Quantenmechanik übersetzt.

Beachte: Es gibt typische quantenmechanische Größen wie zum Beispiel den Spin.

Anmerkung: Die Operatoren können explizit zeitabhängig sein, z.B. ein zeitabhängiges Potential $V(\vec{r}, t)$, aber sie können keine dynamische Zeitabhängigkeit haben, d.h. \hat{x}_i, \hat{p}_i sind zeitunabhängig.

4. Gleichung (2.3. 5) ist die allgemeine Schrödingergleichung. $|\psi\rangle$ ist determiniert, wenn wir $\psi_0(t_0)$ für $t > t_0$ kennen.

2.4 Allgemeine Unschärferelation (Heisenberg)

Wir betrachten zunächst den Mittelwert eines Operators (hermitesch).

$$\langle A \rangle = \langle \varphi | A | \varphi \rangle = \text{Mittelwert, mit } \langle \varphi | \varphi \rangle = 1 \quad (2.4. 1)$$

Für das Schwankungsquadrat folgt:

$$\begin{aligned} (\Delta A)^2 &= \langle \varphi | (A - \langle A \rangle)^2 | \varphi \rangle = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle \geq 0 \\ &= \langle \varphi | A^2 - 2A \langle A \rangle + \langle A \rangle^2 | \varphi \rangle = \langle \varphi | A^2 - \langle A \rangle^2 | \varphi \rangle \\ &= \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \end{aligned} \quad (2.4. 2)$$

Setze $A|\varphi\rangle = \langle A \rangle |\varphi\rangle + |\chi\rangle \rightarrow \langle \varphi | \chi \rangle = 0$

$$\langle \varphi | A^2 | \varphi \rangle = \langle A \varphi | A \varphi \rangle = \langle A \rangle^2 + \langle \chi | \chi \rangle \quad (2.4. 3)$$

$$(\Delta A)^2 = \langle \chi | \chi \rangle \quad (2.4. 4)$$

ΔA ist nur gleich null, wenn $|\chi\rangle = 0$ ist, daraus folgt, daß

$$A|\varphi\rangle = \langle A \rangle |\varphi\rangle \quad (2.4. 5)$$

und daraus folgt, daß $|\varphi\rangle$ ein Eigenvektor und $\langle A \rangle$ ein Eigenwert ist.

Betrachte nun zwei Observable A, B . Wenn gilt $[A, B] = 0$, dann existiert eine gemeinsame Eigenbasis und A, B sind gleichzeitig scharf meßbar. Solche Operatoren bezeichnet man als kompatible Operatoren bzw. Meßgrößen.

Wir gehen jetzt über zur Heisenbergschen Unschärferelation für nicht vertauschbare Operatoren. Seien A, B Observablen und es gelte:

$$[A, B] = AB - BA = \frac{\hbar}{i} \quad (2.4. 6)$$

dann folgt mit $\langle \varphi | \varphi \rangle = 1$, für die Unschärfe $\Delta A \Delta B$ in einem beliebigen Zustand:

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{\hbar}{2} \quad (2.4. 7)$$

Beweis: Setze $A' = A - \langle A \rangle$ und $B' = B - \langle B \rangle$

$$(\Delta A)^2 = (\Delta A')^2 = \langle A'^2 \rangle \quad (2.4. 8)$$

$$(\Delta B)^2 = (\Delta B')^2 = \langle B'^2 \rangle \quad (2.4. 9)$$

$$\begin{aligned} (\Delta A)^2 (\Delta B)^2 &= \langle \varphi | A'^2 | \varphi \rangle \langle \varphi | B'^2 | \varphi \rangle \\ &= \langle A' \varphi | A' \varphi \rangle \langle B' \varphi | B' \varphi \rangle \geq | \langle A' \varphi | B' \varphi \rangle |^2 \end{aligned} \quad (2.4. 10)$$

(2.4. 10) ist die Schwarzzsche Ungleichung.

$$\begin{aligned} & \langle A'\varphi|B'\varphi \rangle = \langle \varphi|A'B'|\varphi \rangle \\ & = \underbrace{\langle \varphi|\frac{A'B'+B'A'}{2}|\varphi \rangle}_{K=\text{reell}} + \underbrace{\langle \varphi|\frac{A'B'-B'A'}{2}|\varphi \rangle}_{\frac{\hbar}{2i}=\text{imaginär}} \end{aligned} \quad (2.4. 11)$$

$$|\langle A'\varphi|B'\varphi \rangle|^2 = K^2 + \frac{\hbar^2}{4} \geq \frac{\hbar^2}{4} \quad (2.4. 12)$$

$$\rightarrow (\Delta A)(\Delta B) \geq \frac{\hbar}{2} \quad (2.4. 13)$$

Damit das Gleichheitszeichen gilt, muß gelten:

1. die Schwarzsche Ungleichung mit Gleichheitszeichen:

$$A'|\varphi \rangle = cB'|\varphi \rangle \quad (2.4. 14)$$

2.

$$0 = K = \langle \varphi|A'B'+B'A'|\varphi \rangle = (c^* + c) \langle \varphi|B'^2|\varphi \rangle \quad (2.4. 15)$$

Es folgt somit: c ist rein imaginär, mit $c = i\gamma$. Der entsprechende Zustand $|\varphi \rangle$ folgt aus der Gleichung (2.4. 14):

$$(A - \langle A \rangle - i\gamma(B - \langle B \rangle))|\varphi \rangle = 0 \quad (2.4. 16)$$

Speziell gilt hier, mit $[\vec{p}, \vec{x}] = \frac{\hbar}{i}$:

$$(p - p_0 - i\gamma(x - x_0))|\varphi \rangle = 0 \quad (2.4. 17)$$

als Bedingungsgleichung.

2.5 Zeitliche Entwicklung: Schrödingerbild und Heisenbergbild

Die Schrödingergleichung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t) \rangle = H |\psi(t) \rangle \quad (2.5. 1)$$

können wir formal lösen. Wenn H nicht explizit zeitabhängig ist, d.h. $\frac{\partial}{\partial t} H = 0$, dann ist:

$$|\psi(t) \rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} |\psi(0) \rangle \quad (2.5. 2)$$

Lösung bei vorgegebenem $|\psi(0) \rangle$.

Der Operator:

$$U(t, 0) = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \quad (2.5. 3)$$

heißt Evolutionsoperator. U ist unitär, da gilt:

$$U^+ = e^{\frac{i}{\hbar} H t} = U^{-1} \quad (2.5. 4)$$

Allgemein:

$$U(t_1, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} H(t_1 - t_0)} \quad (2.5. 5)$$

Gleichung (2.5. 5) transformiert $|\psi(t_0) \rangle$ in $|\psi(t_1) \rangle$:

$$|\psi(t_1) \rangle = U(t_1, t_0) |\psi(t_0) \rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} H(t_1 - t_0)} |\psi(t_0) \rangle \quad (2.5. 6)$$

Die Transformation ist normerhaltend, da U unitär ist.

$$\langle \psi(t_1) | \psi(t_1) \rangle = \langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle \quad (2.5. 7)$$

Es gibt nun zwei mögliche Beschreibungen des dynamischen Systems.

1. **Schrödingerbild:** Die Vektoren sind zeitabhängig.

$$|\psi_S(t)\rangle = U(t)|\psi_S(0)\rangle \quad (2.5.8)$$

Die Operatoren sind zeitunabhängig.

$$A = A_S \quad (2.5.9)$$

2. **Heisenbergbild:** Die Vektoren sind zeitunabhängig. Für alle Zeiten gilt:

$$|\psi_H\rangle = |\psi_S(0)\rangle \quad (2.5.10)$$

Die Operatoren sind zeitabhängig.

$$A_H(t) = e^{\frac{i}{\hbar}Ht} A_S e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} = U^{-1}(t) A_S U(t) \quad (2.5.11)$$

und für $t = 0$:

$$A_H = A_S \quad (2.5.12)$$

d.h. Die Zeitabhängigkeit wird auf die Operatoren mittels unitärer Transformation geschoben.

Beide Bilder sind vollkommen äquivalent, da die Matrixelemente nicht betroffen sind, denn:

$$\langle \psi_S(t) | A_S | \varphi_S(t) \rangle = \langle \psi_S(0) | U^{-1} A_S U | \varphi_S(0) \rangle = \langle \psi_H | A_H(t) | \varphi_H \rangle \quad (2.5.13)$$

Im Heisenbergbild gilt:

$$\frac{d}{dt} A_H(t) = \underbrace{\left(\frac{\partial}{\partial t} \right) A}_{\text{explizit, nicht dynamisch}} + \underbrace{\frac{i}{\hbar} [H, A]_H}_{\text{zeitabhängig}} \quad (2.5.14)$$

Speziell für nicht von der Zeit abhängige Operatoren gilt:

$$\frac{d}{dt} A_H(t) = \frac{i}{\hbar} [H, A]_H \quad (2.5.15)$$

und für den Hamiltonoperator gilt:

$$\frac{d}{dt} H(t) = 0, \quad \text{da } H(t) = H \quad (2.5.16)$$

Wir betrachten nun die zeitliche Entwicklung des Erwartungswertes:

$$\langle A \rangle = \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle = \langle \psi_H | A_H | \psi_H \rangle \quad (2.5.17)$$

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \langle \psi_H | \left(\frac{\partial}{\partial t} A \right)_{\text{expl.}} | \psi_H \rangle + \frac{i}{\hbar} \langle \psi_H | [H, A]_H(t) | \psi_H \rangle \quad (2.5.18)$$

bzw.

$$= \frac{i}{\hbar} \langle \psi_H | [H, A]_H(t) | \psi_H \rangle \quad (2.5.19)$$

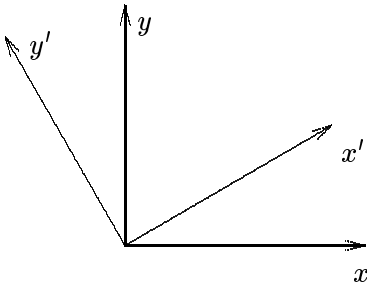
wenn A nicht explizit von t abhängt.

Definition 2.5.1: A heißt Bewegungskonstante, wenn A nicht explizit zeitabhängig ($\frac{\partial}{\partial t} A = 0$) und wenn $[H, A] = 0$. Daraus folgt A hat mit H eine gemeinsame Eigenbasis, dann:

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = 0 \quad (2.5.20)$$

bzw.

$$A_H(t) = e^{\frac{i}{\hbar}Ht} A_S e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} = A_S \quad (2.5.21)$$

Abbildung 12: Drehung um z -Achse

3 Symmetrien, Drehimpuls, Zentralsymmetrische Probleme

3.1 Symmetrietransformationen

Der Bewegungszustand eines quantenmechanischen Systems wird beschrieben durch die Schrödinger-Gleichung (Schrödingerbild):

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle \quad (3.1. 1)$$

Der wichtigste der physikalischen Operatoren ist der Hamiltonoperator.

Alle Operatoren F , die explizit zeitunabhängig sind und für die gilt:

$$[F, H] = 0 \quad (3.1. 2)$$

nannten wir Bewegungskonstante oder Erhaltungsgrößen. Diese hängen mit den Symmetrien des Problems zusammen. Ein Problem heißt symmetrisch, wenn es Transformationen gibt, die an den dynamischen Gegebenheiten, d.h. den Kräften bzw. dem Potential aus denen der Hamiltonoperator folgt, nichts ändern.

Wir betrachten nun Transformationen, die von einem oder mehreren Parametern abhängen.

Beispiel:

1. Drehungen des Koordinatensystems um eine feste Achse (ein Parameter = Drehwinkel) oder Drehung des Koordinatensystems um eine allgemeine Achse (drei Parameter = Eulersche Drehwinkel).
2. Translationen (drei Verschiebungsparameter) für freie Systeme, wenn kein äußeres Potential existiert.

Solche Transformationen entsprechen einem Darstellungswechsel, zum Beispiel, s.h. Abbildung (12):

$$\vec{r}\text{-Darstellung} \xrightarrow{\text{Drehung}} \vec{r}'\text{-Darstellung} \quad (3.1. 3)$$

Der Darstellungswechsel wird vermittelt durch unitäre Operatoren.

$$UU^+ = 1 \quad (3.1. 4)$$

so daß:

$$|\psi'\rangle = U|\psi\rangle \quad (3.1. 5)$$

$$A' = UAU^{-1} \quad (3.1. 6)$$

Die Physik bleibt dabei ungeändert.

$$\langle \varphi' | A' | \psi' \rangle = \langle \varphi | U^{-1} U A U^{-1} U | \psi \rangle = \langle \varphi | A | \psi \rangle \quad (3.1. 7)$$

Wir betrachten nun Transformationen $U(\alpha)$ mit dem stetigen Parameter α . Wir parametrisieren so, daß gilt:

$$U(0) = 1 \quad (3.1. 8)$$

und setzen:

$$U(\alpha) = e^{-i\alpha F} \quad (3.1. 9)$$

mit $F = F^+$ hermitesch, da U unitär.

Die infinitesimale Transformation mit $\alpha \rightarrow 0$ lautet dann:

$$U(\alpha) = 1 - i\alpha F + O(\alpha^2) \quad (3.1. 10)$$

F ist hier der Generator der Transformation.

Für die Operatoren folgt dann:

$$A' = UAU^{-1} = (1 - i\alpha F) A (1 + i\alpha F) + O(\alpha^2) = A - i\alpha [F, A] + O(\alpha^2) \quad (3.1. 11)$$

Definition 3.1.1: Eine Transformation heißt Symmetrietransformation, wenn H invariant ist, dann gilt:

$$H = H' = UHU^{-1} \quad (3.1. 12)$$

$$= H - i\alpha [F, H] + O(\alpha^2) \quad (3.1. 13)$$

$$[F, H] = 0 \quad (3.1. 14)$$

Es gibt also einen hermiteschen Operator F , der mit H kommutiert, also eine Bewegungskonstante oder eine Erhaltungsgröße.

3.1.1 Spiegelinvarianz

Sei:

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r}), \quad V(\vec{r}) = V(-\vec{r}) \quad (3.1. 15)$$

Dieses Problem ist invariant gegenüber der Spiegelung am Ursprung. Der zugehörige unitäre Operator ist der Paritätsoperator P .

$$Pf(\vec{r}) = f(-\vec{r}) \quad (3.1. 16)$$

$$H' = PHP^{-1} \equiv H \quad (3.1. 17)$$

Die Eigenwerte von P lauten 1 und -1 , denn:

$$P^2 f(\vec{r}) = Pf(-\vec{r}) = f(\vec{r}) \quad (3.1. 18)$$

Daraus folgt der Eigenwert von P^2 muß eins sein.

$$P = P^+ = P^{-1} \quad \text{wegen } P^2 = 1 \quad (3.1. 19)$$

Wenn P und H vertauschen, d.h.

$$[P, H] = 0 \quad (3.1. 20)$$

dann existiert eine gemeinsame Eigenbasis und die Energie-Eigen-Zustände können in gerade und ungerade eingeteilt werden, denn für den Eigenwert 1 gilt:

$$f(-\vec{r}) = Pf(\vec{r}) = f(\vec{r}) \quad (3.1. 21)$$

und für -1 :

$$f(-\vec{r}) = Pf(\vec{r}) = -f(\vec{r}) \quad (3.1. 22)$$

3.1.2 Translationsinvarianz

Für ein freies System gilt:

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{1}{2m} (\hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2 + \hat{p}_3^2), \quad \vec{p} = (\hat{p}_1, \hat{p}_2, \hat{p}_3) \quad (3.1. 23)$$

Der zugehörige unitäre Operator lautet mit dem kontinuierlichen (stetigen) Parameter $\vec{a} = (a_1, a_2, a_3)$:

$$T(\vec{a}) = e^{-\frac{i}{\hbar}(a_1\hat{p}_1 + a_2\hat{p}_2 + a_3\hat{p}_3)} \quad (3.1. 24)$$

Offensichtlich gilt, da $\hat{p}_{1,2,3}$ untereinander vertauschen:

$$H' = THT^{-1} = H \quad (3.1. 25)$$

Eigenschaften:

$$\langle \vec{p}' | T(\vec{a}) = \langle \vec{p}' | e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{a}\vec{p}} \quad (3.1. 26)$$

$$\langle \vec{p}' | T(\vec{a}) | \vec{r} \rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{a}\vec{p}} \langle \vec{p}' | \vec{r} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{a}+\vec{r})\vec{p}} = \langle \vec{p}' | \vec{r} + \vec{a} \rangle \quad (3.1. 27)$$

Multiplikation mit $\int d^3p |\vec{p}\rangle \langle \vec{p}| = 1$ liefert wegen $\int d^3p |\vec{p}\rangle \langle \vec{p}| = 1$:

$$T(\vec{a}) | \vec{r} \rangle = | \vec{r} + \vec{a} \rangle \quad (3.1. 28)$$

Dies ist eine Verschiebung um \vec{a} .

Analog gilt:

$$\langle \vec{r} + \vec{a} | = \langle \vec{r} | T^{-1}(\vec{a}) = \langle \vec{r} | T(-\vec{a}) \quad (3.1. 29)$$

Daraus folgt:

$$\langle \vec{r} | T(\vec{a}) | \psi \rangle = \psi(\vec{r} - \vec{a}) \quad (3.1. 30)$$

3.2 Rotationsinvarianz (Drehungen), Vektoroperatoren

Wir betrachten ein zentralsymmetrisches Problem mit

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(r), \quad r = |\vec{r}| \quad (3.2. 1)$$

Das Problem ist invariant gegenüber Drehungen um eine beliebige Achse. Die Drehung läßt sich durch einen unitären Operator darstellen.

$$D(\vec{\alpha}) = e^{\frac{i}{\hbar}\vec{\alpha}\vec{L}} \quad (3.2. 2)$$

Dabei ist die Drehachse festgelegt durch den Vektor $\vec{\alpha}$ mit dem Drehwinkel α im Rechtssinn.

\vec{L} ist der verallgemeinerte Impuls, woraus der Drehimpuls folgt:

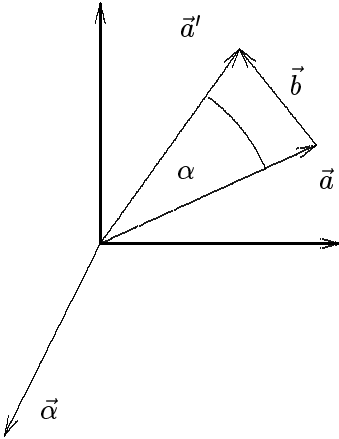
$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \quad (3.2. 3)$$

Mit $\vec{r} = x_i = (x_1, x_2, x_3)$, $\vec{p} = p_i = (p_1, p_2, p_3)$ und

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & \text{für } ijk = 123, 231, 312 \\ -1 & \text{für } ijk = 213, 132, 321 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.2. 4)$$

folgt dann:

$$L_i = \varepsilon_{ijk} x_j p_k \quad (3.2. 5)$$

Abbildung 13: Drehung um den Winkel α

Hierbei wurde die Einsteinsche Summenkonvention verwendet, das heißt, über doppelt auftretende Indizes wird summiert.

Beweis: Wir legen nun die Drehachse $\vec{\alpha}$ in z -Richtung und wählen die Polarkoordinatendarstellung mit \vec{r}, θ, ϕ .

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (3.2. 6)$$

Damit folgt für die Drehung:

$$D(\vec{\alpha}) = e^{\alpha \frac{\partial}{\partial \phi}} \quad (3.2. 7)$$

und die Taylorentwicklung liefert:

$$D(\vec{\alpha})\psi(\vec{r}, \theta, \phi) = e^{\alpha \frac{\partial}{\partial \phi}} \psi = \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{1}{\nu!} \alpha^\nu \frac{\partial^\nu}{\partial \phi^\nu} \psi(\vec{r}, \theta, \phi) = \psi(\vec{r}, \theta, \phi + \alpha) \quad (3.2. 8)$$

Ein Zustand verhält sich unter einer Drehung wie folgt:

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = D(\vec{\alpha})|\psi\rangle \quad (3.2. 9)$$

und für einen Operator folgt:

$$A \rightarrow A' = D(\vec{\alpha})AD^{-1}(\vec{\alpha}) \quad (3.2. 10)$$

Eine infinitesimale Transformation lautet hier:

$$D(\vec{\alpha}) = 1 + \frac{i}{\hbar} \vec{\alpha} \vec{L} + O(\alpha^2) \quad (3.2. 11)$$

Damit folgt für einen Operator:

$$A \rightarrow A' = A + \frac{i}{\hbar} \vec{\alpha} [\vec{L}, A] + O(\alpha^2) = A + \frac{i}{\hbar} \alpha_j [L_j, A] \quad (3.2. 12)$$

Wir betrachten nun Vektoren im R_3 . Bei einer infinitesimalen Drehung, s. Abbildung (13), geht \vec{a} über in:

$$\vec{a}' = \vec{a} + \vec{b} = \vec{a} + \vec{\alpha} \times \vec{a} \quad (3.2. 13)$$

Ein Skalar ändert sich unter einer Drehung nicht, er bleibt erhalten, z.B.

$$\vec{a}'^2 = \vec{a}^2, \quad \vec{a}' \vec{b}' = \vec{a} \vec{b} \quad (3.2. 14)$$

Definition 3.2.1: Ein Vektor der klassischen Mechanik wird in der Quantenmechanik zu einem Vektoroperator.

$$\vec{a} \rightarrow \vec{A} = A_i \quad (3.2. 15)$$

Zum Beispiel:

- Ort

$$\vec{r} \rightarrow \hat{\vec{r}} = (\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3) = \hat{x}_i \quad (3.2. 16)$$

- Impuls

$$\vec{p} \rightarrow \hat{p}_i \quad (3.2. 17)$$

- Drehimpuls

$$\vec{L} \rightarrow \hat{L}_i \quad (3.2. 18)$$

- etc.

Definition 3.2.2: Ein Skalar der klassischen Mechanik wird in der Quantenmechanik zu einem Skalaroperator.

$$a \rightarrow A \quad (3.2. 19)$$

Zum Beispiel:

$$\hat{r}^2, \hat{p}^2, \hat{L}^2, (\hat{r}\hat{p}), (\hat{p}\hat{L}), \text{ etc.}$$

Wir kombinieren jetzt die Transformationseigenschaften:

$$\begin{array}{ccc} \text{Skalaroperator:} & a & \xrightarrow{\text{inf. Drehung}} a' = a \\ & \downarrow & \downarrow \\ \text{Quantenmechanik:} & A & A' = A \end{array}$$

Durch Vergleichen mit Gleichung (3.2. 12) folgt:

$$[L_i, A] = 0 \quad (3.2. 20)$$

d.h. der Drehimpuls vertauscht mit dem Skalaroperator, da der Skalaroperator erhalten bleibt.

$$\begin{array}{ccc} \text{Vektoroperator:} & a_i & \xrightarrow{\text{Drehung}} a'_i = a_i + (\vec{\alpha} \times \vec{a})_i = a_i + \varepsilon_{ijk} \alpha_j a_k \\ & \downarrow & \downarrow \\ \text{Quantenmechanik:} & A_i & \longrightarrow A'_i = a_i + \varepsilon_{ijk} \alpha_j A_k \end{array}$$

Durch Vergleich mit Gleichung (3.2. 12) folgt:

$$\frac{i}{\hbar} \alpha_j [L_j, A_i] = \varepsilon_{ijk} \alpha_j A_k \quad (3.2. 21)$$

Es folgt, da α beliebig:

$$[L_i, A_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} A_k \quad (3.2. 22)$$

Gleichung (3.2. 22) ist die Vertauschungsregel für den Drehimpuls mit dem Vektoroperator. Explizit lautet Gleichung (3.2. 22) dann:

$$[L_x, A_y] = i\hbar A_z \quad \text{und zyklisch} \quad (3.2. 23)$$

$$[L_x, A_x] = [L_y, A_y] = [L_z, A_z] = 0 \quad (3.2. 24)$$

Speziell gilt für Vektoroperatoren:

$$[L_i, x_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}x_k \quad (3.2. 25)$$

$$[L_i, p_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}p_k \quad (3.2. 26)$$

$$[L_i, L_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}L_k \quad (3.2. 27)$$

und für Skalaroperatoren:

$$[L_i, \vec{p}^2] = [L_i, \vec{L}^2] = [L_i, \vec{r}^2] = [L_i, (\vec{p}\vec{r})] = 0 \quad (3.2. 28)$$

$$[L_i, H] = 0 \quad \text{wenn } H \text{ zentralsymmetrisch, d.h. } V = V(r) \quad (3.2. 29)$$

$$[\vec{L}^2, H] = [\vec{L}^2, \vec{p}^2] = [\vec{L}^2, \vec{r}^2] = 0 \quad \text{da } H \text{ mit } L_i \text{ vertauscht} \quad (3.2. 30)$$

Betrachten wir wieder das zentralsymmetrische Problem

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(r), \quad r = |\vec{r}| \quad (3.2. 31)$$

H, \vec{L}^2, L_z bilden dann ein vertauschbares Operatorsystem. Dieses System ist vollständig, d.h. die gemeinsame Eigenbasis liegt eindeutig fest. Bei zentralsymmetrischen Problemen existiert eine simultane Eigenbasis zu H, L^2, L_z .

3.3 Drehimpuls, Eigenwerte und Eigenzustände

Definition 3.3.1: Der Vektoroperator \vec{J} mit der Vertauschungsrelation

$$[J_i, J_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}J_k \quad (3.3. 1)$$

heißt **Drehimpuls**.

Bemerkung: Wir fordern **nicht** speziell $\vec{J} = \vec{L} = \hat{r} \times \hat{p}$; diesen Operator nennen wir dann **Bahndrehimpuls**.

Wir setzen:

$$\vec{J} = \hbar\vec{\Lambda} \quad (3.3. 2)$$

$$[\Lambda_i, \Lambda_j] = i\varepsilon_{ijk}\Lambda_k \quad (3.3. 3)$$

$$[\Lambda_x, \Lambda_y] = i\Lambda_z \quad (3.3. 4)$$

$$[\Lambda_y, \Lambda_z] = i\Lambda_x \quad (3.3. 5)$$

$$[\Lambda_z, \Lambda_x] = i\Lambda_y \quad (3.3. 6)$$

Definition 3.3.2:

$$\Lambda_{\pm} = \Lambda_x \pm i\Lambda_y \quad (3.3. 7)$$

Da $\Lambda_{x,y}$ hermitesch:

$$(\Lambda_-)^+ = \Lambda_+ \quad (3.3. 8)$$

$$[\Lambda_z, \Lambda_{\pm}] = [\Lambda_z, \Lambda_x \pm i\Lambda_y] = i\Lambda_y \pm i(-i)\Lambda_x = \pm(\Lambda_x \pm i\Lambda_y) = \pm\Lambda_{\pm} \quad (3.3. 9)$$

$$\Lambda_+\Lambda_- = (\Lambda_x + i\Lambda_y)(\Lambda_x - i\Lambda_y) = \Lambda_x^2 + \Lambda_y^2 - i[\Lambda_x, \Lambda_y] = \vec{\Lambda}^2 - \Lambda_z^2 + \Lambda_z \quad (3.3. 10)$$

$$\Lambda_-\Lambda_+ = (\Lambda_x - i\Lambda_y)(\Lambda_x + i\Lambda_y) = \vec{\Lambda}^2 - \Lambda_z^2 - \Lambda_z \quad (3.3. 11)$$

Aus Gleichung (3.3. 10) und Gleichung (3.3. 11) folgt dann:

$$[\Lambda_+, \Lambda_-] = 2\Lambda_z \quad (3.3. 12)$$

$$[\vec{\Lambda}^2, \Lambda_{\pm}] = 0 \quad (3.3. 13)$$

$$[\vec{\Lambda}^2, \Lambda_z] = 0 \quad (3.3. 14)$$

Wir suchen eine gemeinsame Eigenbasis für $\vec{\Lambda}^2$ und Λ_z .

3.3.1 Eigenwerte und Eigenzustände

$$\vec{\Lambda}^2|ab\rangle = a|ab\rangle \quad (3.3. 15)$$

$$\Lambda_z|ab\rangle = b|ab\rangle \quad (3.3. 16)$$

$|ab\rangle$ sei normiert, d.h. $\langle ab|ab\rangle = 1$. a und b sind reell.

$$\begin{aligned} a &= \langle ab|a|ab\rangle = \langle ab|\vec{\Lambda}^2|ab\rangle = \langle ab|\Lambda_x^2 + \Lambda_y^2 + \Lambda_z^2|ab\rangle \\ &= b^2 + \underbrace{\langle ab|\Lambda_x^2 + \Lambda_y^2|ab\rangle}_{\geq 0} \geq b^2 \end{aligned} \quad (3.3. 17)$$

$$a \geq b^2 \geq 0 \quad (3.3. 18)$$

Wegen Gleichung (3.3. 9) ist:

$$\Lambda_z\Lambda_{\pm}|ab\rangle = [\Lambda_{\pm}\Lambda_z \pm \Lambda_{\pm}]|ab\rangle = \Lambda_{\pm}(b \pm 1)|ab\rangle \quad (3.3. 19)$$

$$\Lambda_z\Lambda_+|ab\rangle = (b+1)\Lambda_+|ab\rangle \quad (3.3. 20)$$

$$\Lambda_z\Lambda_-|ab\rangle = (b-1)\Lambda_-|ab\rangle \quad (3.3. 21)$$

Ferner folgt aus Gleichung (3.3. 14):

$$\Lambda^2\Lambda_{\pm}|ab\rangle = a\Lambda_{\pm}|ab\rangle \quad (3.3. 22)$$

D.h. $\Lambda_{\pm}|ab\rangle$ gehören entweder zu den Eigenwerten $(b \pm 1)$ (Aufsteigeoperator Λ_+ , Absteigeoperator Λ_-) oder $\Lambda_{\pm}|ab\rangle = 0$; jeweils bei unveränderten Eigenwert a von Λ^2 .

Behauptung: Ausgehend von $|ab_0\rangle \neq 0$, mit a, b_0 fest, dann brechen beide Reihen ab.

Angenommen:

$$(\Lambda_+)^n|ab_0\rangle \neq 0 \quad \rightarrow \quad \text{Eigenwert } b_0 + n \quad (3.3. 23)$$

$$(\Lambda_-)^m|ab_0\rangle \neq 0 \quad \rightarrow \quad \text{Eigenwert } b_0 - m \quad (3.3. 24)$$

Es muß immer gelten:

$$a \geq b^2 \quad (3.3. 25)$$

Für genügend große n, m gilt aber:

$$a < (b_0 + n)^2 = b^2 \quad (3.3. 26)$$

$$a < (b_0 - m)^2 = b^2 \quad (3.3. 27)$$

Gleichung (3.3. 26) und Gleichung (3.3. 27) führen mit Gleichung (3.3. 25) aber zum Widerspruch.

(Für genügend große n, m gibt es daher ein:

$$\bar{b} = b_0 + \bar{n} \quad (3.3. 28)$$

$$\underline{b} = b_0 - \underline{m} \quad (3.3. 29)$$

für die die Ungleichungen gerade noch gelten, also $\bar{b}^2 < a, \underline{b}^2 < a$.)

Es folgt dann: Es gibt \bar{b}, \underline{b} , so daß gilt:

$$\Lambda_+ |a\bar{b}\rangle = 0 \quad |a\bar{b}\rangle \neq 0 \quad (3.3. 30)$$

$$\Lambda_- |a\underline{b}\rangle = 0 \quad |a\underline{b}\rangle \neq 0 \quad (3.3. 31)$$

$$0 = \Lambda_- \Lambda_+ |a\bar{b}\rangle = (\vec{\Lambda}^2 - \Lambda_z^2 - \Lambda_z) |a\bar{b}\rangle = (a - \bar{b}^2 - \bar{b}) |a\bar{b}\rangle \quad (3.3. 32)$$

$$0 = \Lambda_+ \Lambda_- |a\underline{b}\rangle = (\vec{\Lambda}^2 - \Lambda_z^2 + \Lambda_z) |a\underline{b}\rangle = (a - \underline{b}^2 + \underline{b}) |a\underline{b}\rangle \quad (3.3. 33)$$

$$a = \bar{b}^2 + \bar{b} \quad (3.3. 34)$$

$$a = \underline{b}^2 - \underline{b} \quad (3.3. 35)$$

Andererseits gilt aber auch:

$$(\Lambda^+)^n |a\underline{b}\rangle = |a\bar{b}\rangle \quad (3.3. 36)$$

$$\bar{b} = \underline{b} + n \quad (n = 0, 1, 2, 3, \dots) \quad (3.3. 37)$$

Rechnung:

$$\bar{b}^2 + \bar{b} = \underline{b}^2 - \underline{b} = \bar{b}^2 - 2\bar{b}n + n^2 - \bar{b} + n \quad (3.3. 38)$$

$$2(n+1)\bar{b} = n(n+1) \quad (3.3. 39)$$

$$\bar{b} = \frac{n}{2} - j \quad j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots \quad (3.3. 40)$$

$$\bar{b} = j \quad (3.3. 41)$$

$$\underline{b} = -j \quad (3.3. 42)$$

Ergebnis: Eigenwerte von $\vec{\Lambda}^2$:

$$a = j(j+1) \quad j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots \quad (3.3. 43)$$

Zu jedem festen j lauten die Eigenwerte von Λ_z :

$$b = m \quad (\text{bzw. } m_j) \quad m = -j, -j+1, \dots, j-1, j \quad (3.3. 44)$$

Es gibt also $2j+1$ Eigenwerte von Λ_z zu festen j .

Beispiel: Quantelung des Drehimpulses, Richtungsquantelung.

$$j = 0 \quad \rightarrow \quad m = 0 \quad (3.3. 45)$$

$$j = \frac{1}{2} \quad \rightarrow \quad m = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \quad (3.3. 46)$$

$$j = 1 \quad \rightarrow \quad m = -1, 0, 1 \quad (3.3. 47)$$

etc.

Wir bezeichnen die normierten Eigenvektoren jetzt mit $|jm\rangle$, so daß:

$$\vec{J}^2|jm\rangle = \hbar^2 j(j+1)|jm\rangle \quad (3.3. 48)$$

$$J_z|jm\rangle = \hbar m|jm\rangle, \quad m = -j, \dots, j \quad (3.3. 49)$$

\vec{J}^2, J_z sind also gleichzeitig scharf meßbar, J_x und J_y sind dann unscharf.

Erwartungswerte:

$$\langle J_x \rangle = \langle jm|J_x|jm\rangle = \frac{\hbar}{2} \langle jm|\Lambda_+ + \Lambda_-|jm\rangle = 0 \quad (3.3. 50)$$

Für $\langle J_y \rangle$ analog.

Schwankung:

$$\begin{aligned} \langle J_x^2 \rangle &= \frac{\hbar^2}{4} \langle jm|(\Lambda_+ + \Lambda_-)^2|jm\rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{4} \langle jm|\Lambda_+^2 + \Lambda_-^2 + \Lambda_+\Lambda_- + \Lambda_-\Lambda_+|jm\rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{4} \langle jm|\Lambda_+\Lambda_- + \Lambda_-\Lambda_+|jm\rangle = \frac{\hbar^2}{4} \langle jm|\vec{\Lambda}^2 - \Lambda_z^2|jm\rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{4} (j(j+1) - m^2) \geq \frac{\hbar^2}{2} j > 0 \quad \text{außer für } j = 0 \end{aligned} \quad (3.3. 51)$$

Bahndrehimpuls in Kugelkoordinaten (r, θ, φ) mit z als Polarachse:

$$\vec{J}_{Bahn} = \vec{L} = \hat{r} \times \hat{p} \quad (3.3. 52)$$

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (3.3. 53)$$

Wir ersetzen in der Bezeichnung jetzt j durch l , bzw. m durch m_l .

$$L_z|lm\rangle = \hbar m|lm\rangle \quad (3.3. 54)$$

In der Ortsdarstellung folgt dann:

$$\hbar m \langle \vec{r}|lm\rangle = \langle \vec{r}|L_z|lm\rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \underbrace{\langle \vec{r}|lm\rangle}_{\varphi_{lm}(\vec{r})} \quad (3.3. 55)$$

Als Lösung für $\varphi_{lm}(\vec{r})$ aus Gleichung(3.3. 55) ergibt sich für die φ -Abhängigkeit:

$$\langle \vec{r}|lm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} F_{l,m}(r, \theta) \quad (3.3. 56)$$

Aus der Eindeutigkeit von $e^{2\pi im} = 1$ folgt, daß m ganzzahlig sein muß und somit gilt: $l = 0, 1, 2, 3, \dots$

Für den Bahndrehimpuls kommen nur die ganzzahligen l -Werte in Frage; man wählt folgende Bezeichnung (Spektroskopie):

$$\begin{aligned} l = 0 &\longrightarrow s\text{-Zustände} \\ l = 1 &\longrightarrow p\text{-Zustände} \\ l = 2 &\longrightarrow d\text{-Zustände} \\ &\vdots \end{aligned}$$

Die halbzahligen j -Werte hängen mit dem Spin zusammen.

3.4 Ortsdarstellung der Bahndrehimpulszustände; Kugelfunktionen

Wir werden zeigen, daß in der Ortsdarstellung gilt:

$$\langle \vec{r} | lm \rangle = f_l(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (3.4. 1)$$

Die $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ sind die Kugelfunktionen.

Aus der Normierung folgt, mit $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$:

$$\begin{aligned} 1 = \langle lm | lm \rangle &= \int d^3 r \langle lm | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | lm \rangle = \int d^3 r |f_l(r)|^2 |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 \\ &= \underbrace{\int_0^\infty d^3 r |f_l(r)|^2}_1 \underbrace{\int d\Omega |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2}_1 \end{aligned} \quad (3.4. 2)$$

Wir betrachten nun:

$$\begin{aligned} \langle \vec{r} | \Lambda_\pm | lm \rangle &= \langle \vec{r} | \Lambda_x \pm i \Lambda_y | lm \rangle = \frac{1}{\hbar} \langle \vec{r} | y p_z - z p_y \pm i(z p_x - x p_z) | lm \rangle \\ &= \frac{1}{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \pm i \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \right) \langle \vec{r} | lm \rangle \end{aligned} \quad (3.4. 3)$$

Mit folgenden Ersetzungen:

$$x = r \sin \theta \cos \varphi \quad (3.4. 4)$$

$$y = r \sin \theta \sin \varphi \quad (3.4. 5)$$

$$z = r \cos \theta \quad (3.4. 6)$$

folgt für Gleichung(3.4. 3):

$$= e^{\pm i\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \langle \vec{r} | lm \rangle \quad (3.4. 7)$$

Mit Gleichung(3.3. 56) folgt aus Gleichung(3.4. 7):

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(m\pm 1)\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} - m \cot \theta \right) F_{l,m}(r, \theta) \quad (3.4. 8)$$

Da für $l = m$ gilt:

$$\Lambda_+ |ll \rangle = 0 \quad (3.4. 9)$$

folgt:

$$0 = \langle \vec{r} | \Lambda_+ |ll \rangle \quad (3.4. 10)$$

und weiter gilt:

$$\left(\frac{\partial}{\partial \theta} - l \cot \theta \right) F_{l,l}(r, \theta) = 0 \quad (3.4. 11)$$

Aus Gleichung(3.4. 11) ergibt sich als Lösung für $F_{l,l}(r, \theta)$:

$$F_{l,l}(r, \theta) = \underbrace{\frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2+l)!}{2}}}_{\text{Normierungsfaktor } \alpha_l} f_l(r) \sin^l \theta \quad (3.4. 12)$$

Da weiterhin gilt:

$$|lm \rangle = \alpha_{lm} (\Lambda_-)^{l-m} |ll \rangle \quad (3.4. 13)$$

folgt:

$$\langle \vec{r} | lm \rangle = \alpha_{lm} \langle \vec{r} | (\Lambda_-)^{l-m} |ll \rangle$$

$$\begin{aligned}
&= \alpha_{lm} \left(e^{-i\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right)^{l-m} \langle \vec{r} | l l \rangle \\
&= \frac{\alpha_{lm}}{\sqrt{2\pi}} \left(e^{-i\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right)^{l-m} e^{il\varphi} a_l f_l(r) \sin^l \theta = f_l(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)
\end{aligned} \tag{3.4. 14}$$

Die Funktionen lauten explizit:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^l \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi} \tag{3.4. 15}$$

$$P_l^m(\cos \theta) = (-1)^m \sin^m \theta \frac{d^m}{d \cos \theta^m} P_l(\cos \theta) \tag{3.4. 16}$$

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l \tag{3.4. 17}$$

Gleichung(3.4. 17) ist das Legendre-Polynom vom Grade l , mit $P_l(1) = 1$.

Gleichung(3.4. 15) ist die Kugelflächenfunktion, ein vollständiges System auf der Einheitskugel.

Aus der Orthonormierung folgt:

$$\int d\Omega Y_{lm}^*(\theta, \varphi) Y_{l'm'}(\theta, \varphi) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta Y_{lm}^* Y_{l'm'} = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \tag{3.4. 18}$$

Jede Funktion $g(\theta, \varphi)$ läßt sich nach den Y_{lm} entwickeln:

$$g(\theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l a_{lm} Y_{lm}(\theta, \varphi) \tag{3.4. 19}$$

$$a_{lm} = \int d\Omega Y_{lm}^*(\theta, \varphi) g(\theta, \varphi) \tag{3.4. 20}$$

Anmerkung: Die Radialkomponente $f_l(r)$ hängt allein von l ab, s. Gleichung(3.4. 14).

Der Paritätsoperator

$$Pf(\vec{r}) = f(-\vec{r})$$

wirkt sich hier wie folgt aus, s. Abbildung (14):

$$Pf(r, \theta, \varphi) = f(r, \pi - \theta, \pi + \varphi) \tag{3.4. 21}$$

Damit folgt:

$$\theta \rightarrow \pi - \theta \Rightarrow \begin{cases} \cos \theta \rightarrow -\cos \theta \\ \sin \theta \rightarrow \sin \theta \end{cases} \tag{3.4. 22}$$

$$\varphi \rightarrow \pi + \varphi \Rightarrow e^{im\varphi} \rightarrow (-1)^m e^{im\varphi} \tag{3.4. 23}$$

Der Paritätsoperator angewendet auf Gleichung (3.4. 15), Gleichung (3.4. 16) und Gleichung (3.4. 17) liefert:

$$P_l(\cos \theta) \rightarrow P_l(-\cos \theta) = (-1)^l P_l(\cos \theta) \tag{3.4. 24}$$

$$P_l^m(\cos \theta) \rightarrow P_l^m(-\cos \theta) = (-1)^{l+m} P_l^m(\cos \theta) \tag{3.4. 25}$$

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) \rightarrow Y_{lm}(\pi - \theta, \pi + \varphi) = (-1)^{l+m} (-1)^m Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^l Y_{lm}(\theta, \varphi) \tag{3.4. 26}$$

$$PY_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^l Y_{lm}(\theta, \varphi) \tag{3.4. 27}$$

Daraus folgt, daß Y_{lm} die Parität $(-1)^l$ hat.

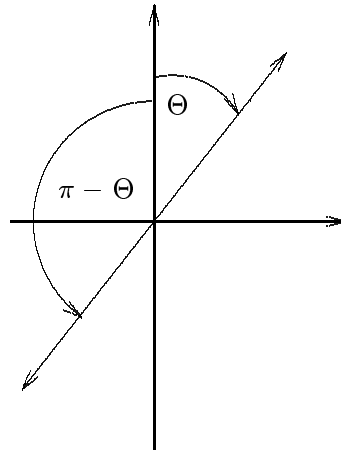


Abbildung 14: Auswirkung des Paritätsoperators

3.5 Zentralsymmetrische Probleme, das Wasserstoffatom

Sei:

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(r) \quad (3.5. 1)$$

mit $r = |r|$, der Hamiltonoperator eines Teilchens in einem Zentralpotential, z.B. das Wasserstoffatom mit $V = -\frac{e^2}{r}$.

Das Eigenwertproblem lautet hier dann:

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (3.5. 2)$$

und für die Ortsdarstellung in Polarkoordinaten folgt:

$$\langle \vec{r} | \psi \rangle = \psi(\vec{r}) = \psi(r, \theta, \varphi) \quad (3.5. 3)$$

Da H mit \vec{L}^2 und L_z kommutiert, haben die drei Operatoren eine gemeinsame Eigenbasis:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = f_l(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (3.5. 4)$$

$$\vec{L}^2 \psi = \hbar^2 l(l+1) \psi \quad (3.5. 5)$$

$$L_z \psi = \hbar m \psi \quad (3.5. 6)$$

Wie aus der Übung bekannt ist, gilt: (???????)

$$\vec{L}^2 = \vec{r}^2 \vec{p}^2 - (\vec{r} \vec{p})^2 - \frac{\hbar}{i} (\vec{r} \vec{p}) \quad (3.5. 7)$$

mit:

$$\vec{r} \vec{p} = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial x} + y \frac{\partial}{\partial y} + z \frac{\partial}{\partial z} \right) = \frac{\hbar}{i} r \frac{\partial}{\partial r} \quad (3.5. 8)$$

Definition 3.5.1: Der **Radialimpuls** ist definiert als:

$$p_r = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \quad (3.5. 9)$$

Es gilt dann:

$$r p_r = \frac{\hbar}{i} r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hbar}{i} = \vec{r} \vec{p} + \frac{\hbar}{i} \quad (3.5. 10)$$

und mit $p_r r = r p_r + \frac{\hbar}{i}$ folgt:

$$\begin{aligned} (\vec{r} \vec{p})^2 + \frac{\hbar}{i} (\vec{r} \vec{p}) &= \left((\vec{r} \vec{p}) + \frac{\hbar}{i} \right) \vec{r} \vec{p} \\ &= r p_r \left(r p_r - \frac{\hbar}{i} \right) = r^2 p_r^2 \end{aligned} \quad (3.5. 11)$$

Somit folgt:

$$\vec{p}^2 = p_r^2 + \frac{\vec{L}^2}{r^2} \quad (3.5. 12)$$

Wir zeigen jetzt die Hermitizität von p_r :

$$\begin{aligned} 0 &= \langle \psi | p_r \psi \rangle - \langle \psi | p_r \psi \rangle^* \\ &= \underbrace{\int d\Omega |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2}_1 \int_0^\infty dr r^2 \left(f^* \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial r} f + \frac{f}{r} \right) + f \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial r} f^* + \frac{f^*}{r} \right) \right) \\ &= \frac{\hbar}{i} \int_0^\infty dr r^2 \left(\frac{\partial}{\partial r} (f^* f) + \frac{2}{r} f^* f \right) = \frac{\hbar}{i} \int_0^\infty dr \frac{\partial}{\partial r} (r f^*) (r f) \\ &= - \frac{\hbar}{i} |r f|^2 \Big|_{r=0}^\infty \end{aligned} \quad (3.5. 13)$$

Damit lauten die Bedingungen für die Hermitizität: $r f(r) \rightarrow 0$, wenn $r \rightarrow 0$ oder $f = \frac{y(r)}{r}$ mit $y(0) = 0$. Die stationäre Schrödingergleichung lautet mit Gleichung (3.5. 1), Gleichung (3.5. 4) und Gleichung (3.5. 12) dann:

$$H\psi(r, \theta, \varphi) = \left(\frac{p_r^2}{2m} + \frac{\vec{L}^2}{2mr^2} + V(r) \right) f_l(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) = E_l f_l(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (3.5. 14)$$

$$\left(\frac{p_r^2}{2m} + V_{eff}(r) \right) f_l(r) = E_l f_l(r) \quad (3.5. 15)$$

mit:

$$V_{eff}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \quad (3.5. 16)$$

$\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$ ist ein abstoßendes Zentrifugalpotential oder auch eine zentrifugale Barriere, die für $l \neq 0$ das Teilchen vom Zentrum fernhält.

Wir betrachten nun Potentiale, s. Abbildung (15), für die gilt:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} V(r) = 0 \quad (3.5. 17)$$

$V(r)$ geht schwächer gegen Null als $\frac{1}{r^2}$ für $r \rightarrow \infty$.

Es gibt dann im allgemeinen gebundene Zustände für $E < 0$. Für $E > 0$ gibt es nur ungebundene Zustände, Streuzustände, d.h. wir haben ein kontinuierliches Spektrum: $0 \leq E < \infty$.

Sei nun $E < 0$, dann gibt es zu jedem l ein diskretes Spektrum. Wir setzen jetzt mit n diskret:

$$E_l \rightarrow E_{nl} \quad (3.5. 18)$$

$$f_l \rightarrow f_{nl} = \frac{y_{nl}}{r} \quad (3.5. 19)$$

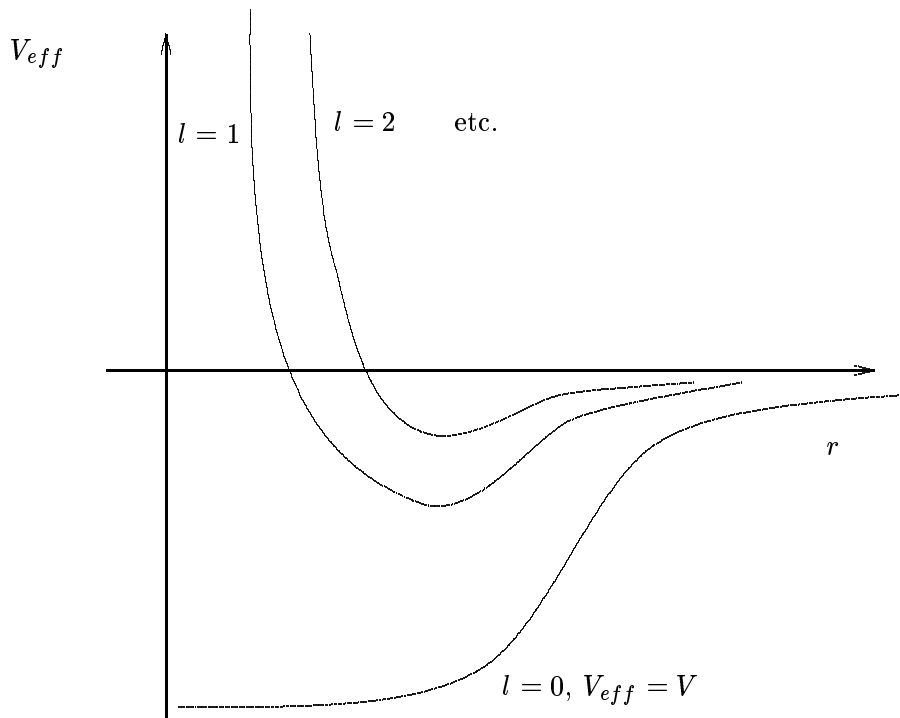


Abbildung 15:

$$p_r f = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \frac{y}{r} = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{y'}{r} - \frac{y}{r^2} + \frac{y}{r^2} \right) = \frac{\hbar}{i} \frac{y'}{r} \quad (3.5.20)$$

$$p_r^2 f = -\hbar^2 \frac{y''}{r} \quad (3.5.21)$$

Mit Gleichung (3.5.21) und $y_{nl}(0) = 0$ lautet Gleichung (3.5.15) dann:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} y_{nl} + V_{eff} y_{nl} = E_{nl} y_{nl} \quad (3.5.22)$$

3.5.1 Das Wasserstoffatom

Für das Wasserstoffatom lautet das Potential:

$$V(r) = -\frac{e^2}{r} \quad (3.5.23)$$

Wir führen nun folgende Größen ein:

1. Der Bohr-Radius:

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0.53 \cdot 10^{-8} \text{ cm} \quad (3.5.24)$$

2. Die Rydberg-Energie:

$$R = \frac{e^2}{2a_0} = \frac{me^4}{2\hbar^2} = 13.55 \text{ eV} \quad (3.5.25)$$

Wir setzen nun:

$$E = -\frac{R}{\nu^2} \quad (3.5. 26)$$

und:

$$x = \frac{2}{\nu} \frac{r}{a_0} \quad (3.5. 27)$$

mit

$$\nu > 0, \text{Zahl} \quad (3.5. 28)$$

Somit lautet die Schrödingergleichung:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{4}{\nu^2 a_0^2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{4\hbar^2 l(l+1)}{2m\nu^2 a_0^2} \frac{1}{x} - \frac{2e^2}{\nu a_0} \frac{1}{x} + \frac{R}{\nu^2} \right) y = 0 \quad (3.5. 29)$$

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - \frac{l(l+1)}{x^2} + \frac{\nu}{x} - \frac{1}{4} \right) y = 0 \quad (3.5. 30)$$

y ist normierbar und es gilt $y(0) = 0$.

Wir betrachten nun folgende Grenzfälle:

$$x \rightarrow 0 : \quad \left(\frac{d^2}{dx^2} - \frac{l(l+1)}{x^2} \right) y = 0 \Rightarrow y = x^{l+1} \quad (3.5. 31)$$

Die zweite Lösung $y = x^{-l}$ erfüllt nicht die Bedingung $y(0) = 0$.

$$x \rightarrow \infty : \quad \left(\frac{d^2}{dx^2} - \frac{1}{4} \right) y = 0 \Rightarrow y = e^{-\frac{1}{2}x} \quad (3.5. 32)$$

Die zweite Lösung $y = e^{\frac{1}{2}x}$ ist nicht normierbar.

Wir machen jetzt folgenden Ansatz:

$$y_l = x^{l+1} e^{-\frac{1}{2}x} v_l(x) \quad (3.5. 33)$$

$$y'_l = (l+1)x^l e^{-\frac{1}{2}x} v - \frac{1}{2}x^{l+1} e^{-\frac{1}{2}x} v + x^{l+1} e^{-\frac{1}{2}x} v' \quad (3.5. 34)$$

$$\begin{aligned} y'' &= l(l+1)x^{l-1} e^{-\frac{1}{2}x} v - (l+1)x^l e^{-\frac{1}{2}x} v + 2(l+1)x^l e^{-\frac{1}{2}x} v' \\ &\quad + \frac{1}{4}x^{l+1} e^{-\frac{1}{2}x} v - x^{l+1} e^{-\frac{1}{2}x} v' + x^{l+1} e^{-\frac{1}{2}x} v'' \end{aligned} \quad (3.5. 35)$$

Einsetzen in Gleichung (3.5. 30) liefert:

$$\left(x \frac{d^2}{dx^2} + (2l+2-x) \frac{d}{dx} - (l+1-\nu) \right) v_l(x) = 0 \quad (3.5. 36)$$

Die einzige Lösung der Gleichung (3.5. 36), die am Ursprung ($x = 0$) endlich ist, ist die konfluente hypergeometrische Reihe:

$$\frac{v_l}{a} = F(l+1-\nu|2l+2|x) = \sum_{p=0}^{\infty} \frac{\Gamma(l+1-\nu+p)}{\Gamma(l+1-\nu)} \frac{(2l+1)!}{(2l+1+p)!} \frac{x^p}{p!} \quad (3.5. 37)$$

Sei nun ν beliebig, dann gilt für $x \rightarrow \infty$:

$$F \sim \sum \frac{x^p}{p!} \sim e^x \quad (3.5. 38)$$

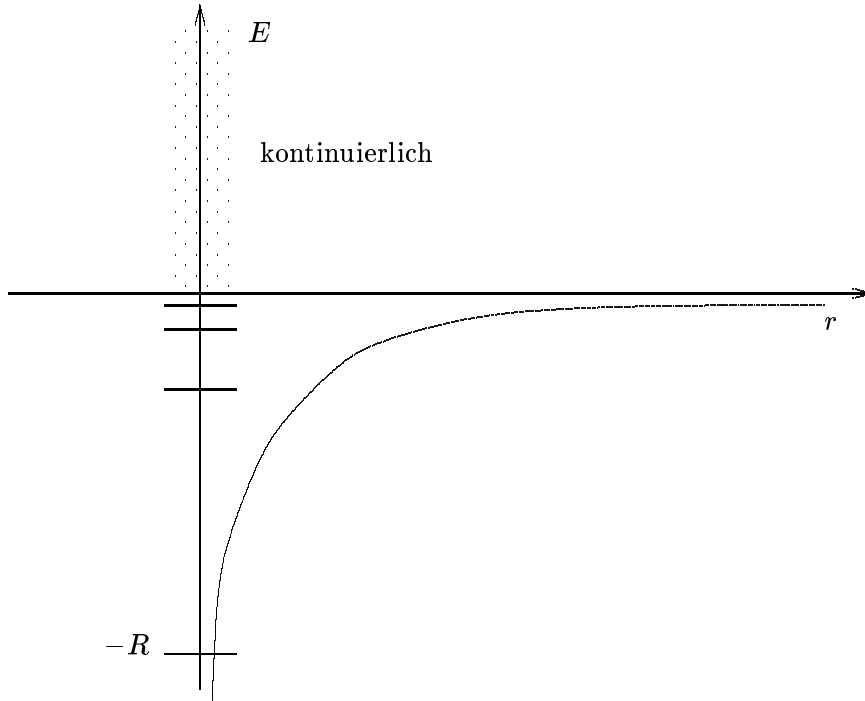


Abbildung 16: Effektives Potential $V_{eff}(l)$

$$y \sim x^{l+1} e^{\frac{1}{2}x} \rightarrow \infty \tag{3.5. 39}$$

Somit ist y nicht normierbar.

Ein Ausweg ist, zu setzen:

$$\nu = n = l + 1 + n_r^* \quad (n_r^* = 0, 1, 2, \dots) \tag{3.5. 40}$$

Mit dieser Wahl bricht dann die Reihe ab, da dann Gleichung (3.5. 37) lautet:

$$F(-n_r^* | 2l + 2 | x) = \sum_{p=0}^{n_r^*} (-1)^p \frac{n_r^*!(2l + 1)!}{(n_r^* - p)!(2l + 1 + p)!p!} x^p \tag{3.5. 41}$$

Gleichung (3.5. 41) ist ein Polynom n_r^* -ten Grades.

Für die Energieeigenwerte gilt dann:

$$E_n = -\frac{R}{n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots \tag{3.5. 42}$$

Mit n als Hauptquantenzahl und n_r^* als Radialquantenzahl.

Wegen $n_r^* + l + 1 = n$, $n_r^* = 0, 1, 2, 3, \dots$ gilt für ein gegebenes n :

$$0 \leq l \leq n - 1 \quad l = \text{Drehimpulsquantenzahl} \tag{3.5. 43}$$

Zu jedem l gibt es $(2l + 1)$ verschiedene Y_{lm} ($m =$ magnetische Quantenzahl).

Somit gilt für die Entartung von E_n :

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n + 2 \frac{n(n-1)}{2} = n^2 \tag{3.5. 44}$$

Die orthonormierten Eigenfunktionen lauten:

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = f_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \tag{3.5. 45}$$

$$f_{nl}(r) = \frac{1}{a_0^{\frac{3}{2}}} \frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{((n+l)!)^3}} F_{nl} \left(\frac{2r}{na_0} \right) \quad (3.5. 46)$$

$$\tilde{F}_{nl}(x) = x^l e^{-\frac{1}{2}x} L_{n-l-1}^{2l+1}(x) \quad (3.5. 47)$$

Hierbei sind die L die verallgemeinerten Laguerre-Polynome.

$$L_p^K = (-1)^K \frac{d^K}{dx^K} L_{p+K}^0(x) \quad (3.5. 48)$$

$$L_p^0 = e^x \frac{d^p}{dx^p} (e^{-x} x^p) \quad (3.5. 49)$$

Gleichung (3.5. 48) und Gleichung (3.5. 49) sind Polynome vom Grade p .

Für die (Ortho-)Normierung folgt:

$$\int_0^\infty dr r^2 f_{n'l}(r) f_{nl}(r) = \delta_{n'l} \quad (3.5. 50)$$

$$\int d^3r \psi_{n'l'm'}^* \psi_{nlm} = \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (3.5. 51)$$

Zusammenfassung:

Die Schrödingergleichung lautet hier:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{e^2}{r} \right) \psi(r, \theta, \varphi) = E \psi(r, \theta, \varphi) \quad (3.5. 52)$$

Für $E < 0$ gilt: Es existieren diskrete Eigenwerte $E_n = -\frac{R}{n^2}$ mit $n = 1, 2, 3, \dots$ (im allgemeinen: E_{nl} , für das H-Atom gilt: $n = 1 + l + n_r$). Die Eigenfunktionen lauten:

$$\psi_{nlm} = f_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad 0 \leq l \leq n-1 \quad -l \leq m \leq l \quad (3.5. 53)$$

Zu jedem n gibt es n^2 Zustände (Entartung). ψ_{nlm} ist die simultane Eigenfunktion zu H, \vec{L}^2, L_z .

Achtung: Die ψ_{nlm} bilden keine Basis, da sie nicht vollständig sind, weil noch Eigenwerte zu $E > 0$ fehlen.

Symbol	Eigenfunktion	Eigenwerte von H	\vec{L}^2	L_z
1s	ψ_{100}	$-R$	0	0
2s	ψ_{200}	$-\frac{R}{4}$	0	0
2p	ψ_{210}	$-\frac{R}{4}$	$2\hbar^2$	0
2p	ψ_{211}	$-\frac{R}{4}$	$2\hbar^2$	\hbar
2p	ψ_{21-1}	$-\frac{R}{4}$	$2\hbar^2$	$-\hbar$
3s	...			
⋮				

Man verwendet folgende Kennzeichnung:

$$\left. \begin{array}{l} l = 0, 1, 2, 3, \dots \rightarrow s - p - d - f - g \dots \\ n = 1, 2, 3, 4, \dots \end{array} \right\}$$

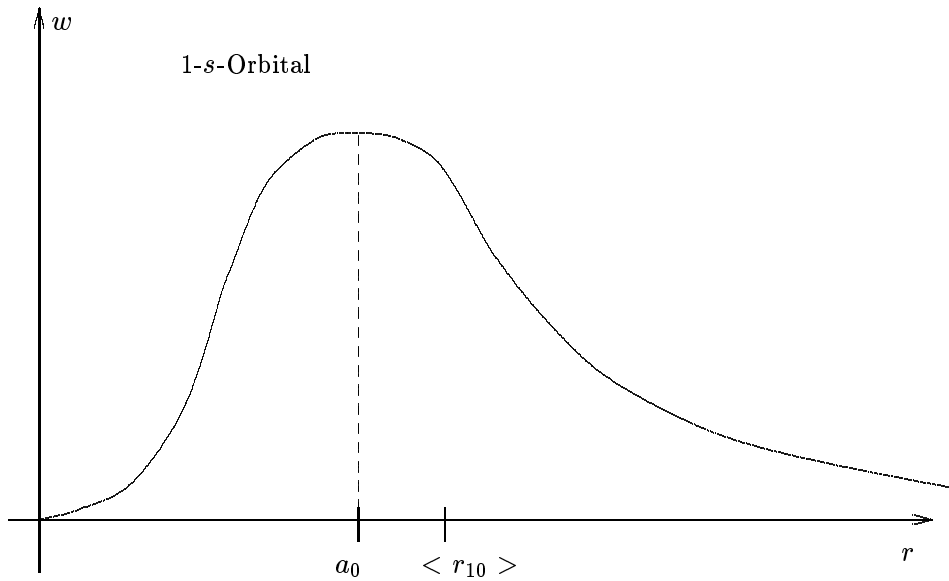


Abbildung 17: Aufenthaltswahrscheinlichkeit des 1s Orbitals

$$\rightarrow 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d, 4s, 4p, 4d, 4f, \dots \quad (3.5.54)$$

Nach der Magnetischen Quantenzahl m wird nicht klassifiziert, denn für beliebige Atome ist E_{nl} abhängig von n und l , aber nicht von m . Nur beim Wasserstoffatom (mit $\frac{e^2}{r}$) hängt E_{nl} nicht von l ab.

Allgemein: Atomare Zustände werden gekennzeichnet durch E_{nl} , $(2l + 1)$ -fach entartet, wenn kein Magnetfeld wirksam ist, das die Rotationsinvarianz aufhebt (all dies gilt nur vorläufig, da der *Spin* fehlt).

Für den Erwartungswert des radialen Abstandes gilt:

$$\langle r \rangle_{nl} = \frac{a_0}{2} (3n^2 - l(l + 1)) \quad (3.5.55)$$

Speziell:

$$\langle r \rangle_{10} = \frac{3}{2} a_0 \quad (3.5.56)$$

Der Grundzustand lautet:

$$\psi_{100} = f_{10}(r) Y_{00}(\theta, \varphi) = \frac{2}{\sqrt{a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}} \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad (3.5.57)$$

Für die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons in der Kugelschale zwischen r und $r + dr$ gilt, s. Abbildung (17):

$$W_{10}(r) dr = \int d\Omega |\psi_{100}|^2 r^2 dr = r^2 f_{10}^2(r) dr \quad (3.5.58)$$

$$W_{10}(r) = \frac{4r^2}{a_0^3} e^{-2\frac{r}{a_0}} \quad (3.5.59)$$

W_{10} ist maximal bei $\frac{d}{dr} W_{10} = 0$:

$$\frac{8r}{a_0^3} - \frac{8r^2}{a_0^4} = 0 \quad (3.5.60)$$

$$r = a_0 \quad (3.5.61)$$

Dieses Maximum entspricht der Bohrschen Bahn in der älteren Quantentheorie.

3.6 Normaler Zeeman-Effekt

Wir schalten zum Potential $V(r)$ noch ein homogenes Magnetfeld $\vec{\mathcal{H}}$ ein.

Somit lautet das Vektorpotential:

$$\vec{a} = \frac{1}{2}(\vec{\mathcal{H}} \times \vec{r}) \quad (3.6. 1)$$

$$\vec{\mathcal{H}} = \text{rot } \vec{a} \quad (3.6. 2)$$

Damit lautet dann der kinetische Impuls:

$$\vec{p} \rightarrow \vec{p} - \frac{e}{c}\vec{a} \quad (3.6. 3)$$

Mit Gleichung (3.6. 3) lautet dann der Hamiltonoperator:

$$H = \frac{1}{2m} \left(\hat{p} - \frac{e}{c}\vec{a} \right)^2 + V(r) \quad (3.6. 4)$$

$$= \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r) - \frac{e}{2mc} \left(\vec{a}\hat{p} + \hat{p}\vec{a} \right) + O(\mathcal{H}^2) \quad (3.6. 5)$$

Für schwache, d.h. technisch herstellbare Magnetfelder, kann der \mathcal{H}^2 -Term vernachlässigt werden.

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\nabla \quad (3.6. 6)$$

$$\hat{p}\vec{a} = \frac{\hbar}{i}\nabla\vec{a} = \frac{\hbar}{i}(\vec{a}\nabla + (\nabla\vec{a})) = \vec{a}\hat{p} \quad (3.6. 7)$$

da $\nabla\vec{a} = \text{div } \vec{a} = 0$.

$$\vec{a}\hat{p} = \frac{1}{2}(\vec{\mathcal{H}} \times \vec{r})\hat{p} = \frac{1}{2}\vec{\mathcal{H}}(\vec{r} \times \hat{p}) = \frac{1}{2}\vec{\mathcal{H}}\vec{L} = \frac{1}{2}|\vec{\mathcal{H}}|L_z \quad (3.6. 8)$$

mit $\vec{\mathcal{H}}$ in z -Richtung.

Mit Gleichung (3.6. 7) und Gleichung (3.6. 8) lautet dann der Hamiltonoperator:

$$H = H_0 - \frac{e}{mc}\vec{a}\hat{p} = H_0 - \frac{e|\vec{\mathcal{H}}|}{2mc}L_z = H_0 - \vec{\mu}\vec{\mathcal{H}} \quad (3.6. 9)$$

Hierbei ist $\vec{\mu} = \frac{e}{2mc}\vec{L}$ das magnetische Bahn-Moment.

Da L_z mit H_0 kommutiert, hat H die gleichen Eigenfunktionen wie H_0 . Die Eigenfunktionen lauteten abstrakt: $|nlm_l\rangle$, so daß:

$$\langle \vec{r}|nlm_l\rangle = \psi_{nlm_l}(r, \theta, \varphi) \quad (3.6. 10)$$

$$H_0|nlm_l\rangle = E_{nl}^0|nlm_l\rangle \quad (3.6. 11)$$

$$L_z|nlm_l\rangle = \hbar m_l|nlm_l\rangle \quad (3.6. 12)$$

Gleichung (3.6. 11) und Gleichung (3.6. 12) eingesetzt in Gleichung (3.6. 9) liefert:

$$H|nlm_l\rangle = \left(E_{nl}^0 - \frac{e\hbar|\vec{\mathcal{H}}|}{2mc}m_l \right) |nlm_l\rangle \quad (3.6. 13)$$

Es gilt also:

$$E_{nlm}(\vec{\mathcal{H}}) = E_{nl}^0 - \frac{e\hbar|\vec{\mathcal{H}}|}{2mc}m_l \quad (3.6. 14)$$

Jeder $(2l + 1)$ -fach entartete Eigenwert spaltet auf (somit ist die Entartung aufgehoben, s. Abbildung (18)) mit der Verschiebung:

$$\Delta E = \mu_B m_l |\vec{\mathcal{H}}| \quad (3.6. 15)$$

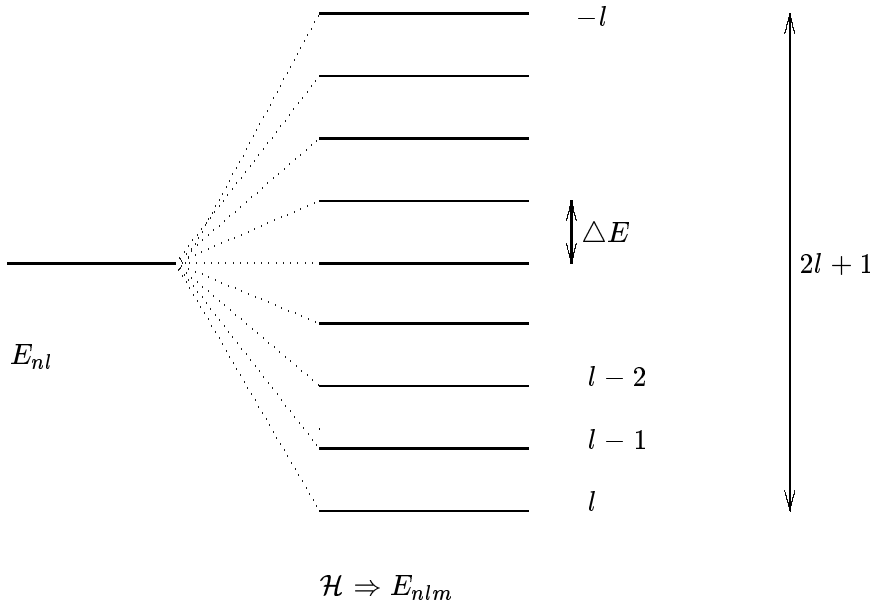


Abbildung 18: Auswirkung des Paritätsoperators

$$\mu_B = -\frac{e\hbar}{2mc} > 0 \quad \text{da } e < 0 \quad (3.6.16)$$

μ_B ist das Bohrsche Magneton, eine natürliche Maßeinheit für Magnetmomente.

Die Bohrsche Frequenzbedingung lautet: Bei Lichtabsorption oder Emission beobachtet man Übergänge zwischen den einzelnen Energieniveaus.

$$\omega_{nlm,n'l'm'} = \frac{E_{nlm} - E_{n'l'm'}}{\hbar} = \frac{E_{nl} - E_{n'l'}}{\hbar} + \frac{\mu_B |\vec{\mathcal{H}}|}{\hbar} (m - m') \quad (3.6.17)$$

Die Frequenz $\omega_L = \frac{\mu_B |\vec{\mathcal{H}}|}{\hbar} = \frac{|e|\hbar}{2mc}$ heißt Larmorfrequenz oder charakteristische Frequenz.

Die Auswahlregel lautet: Nur solche Übergänge sind erlaubt, für die gilt:

$$\Delta l = \pm 1 \quad (3.6.18)$$

$$\Delta m = -1, 0, +1 \quad (3.6.19)$$

Die wirkliche Linienbreite ist komplizierter, da sie auch vom Spin abhängt, dies wird beim anomalen Zeeman-Effekt behandelt.

3.7 Zweikörperproblem, kontinuierliches Spektrum

Wir betrachten nun zwei Teilchen mit gegenseitiger Wechselwirkung. Als Beispiel kommen das H-Atom, also ein leichtes Elektron mit einem schweren Proton in Frage.

Für solche Probleme lautet der Hamiltonoperator:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \quad (3.7.1)$$

$$\hat{p}_i = \frac{\hbar}{i} \Delta_{\vec{r}_i} \quad (i = 1, 2) \quad (3.7.2)$$

Natürlich kommutieren die \hat{p}_1, \vec{r}_1 mit \hat{p}_2, \vec{r}_2 (denn verschiedene Teilchen haben verschiedene Koordinaten, daher vertauschen ihre Operatoren).

Wir transformieren jetzt auf Schwerpunkts- und Relativkoordinaten:

$$M = m_1 + m_2 \quad (3.7. 3)$$

$$m = \frac{m_1 m_2}{M} \quad (3.7. 4)$$

$$\vec{R} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{M} \quad (3.7. 5)$$

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \quad (3.7. 6)$$

$$\vec{P}_{Sp} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 \quad (3.7. 7)$$

$$\vec{p}_{rel} = \frac{m_2 \vec{p}_1 - m_1 \vec{p}_2}{M} \quad (3.7. 8)$$

Man zeigt dann leicht, daß gilt:

$$[\hat{P}_i, \hat{R}_j] = \frac{\hbar}{i} \delta_{ij} \quad (3.7. 9)$$

$$[\hat{P}_i, \hat{p}_j] = [\hat{P}_i, \hat{r}_j] = [\hat{p}_i, \hat{R}_j] = 0 \quad (3.7. 10)$$

$$[\hat{p}_i, \hat{r}_j] = \frac{\hbar}{i} \delta_{ij} \quad (3.7. 11)$$

$$\frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{\vec{P}^2}{2M} \quad (3.7. 12)$$

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2M} + \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) = H_R + H_r \quad (3.7. 13)$$

mit:

$$H_R = \frac{\vec{P}^2}{2M} \quad (3.7. 14)$$

$$H_r = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \quad (3.7. 15)$$

Das Problem ist dann dynamisch entkoppelt, da gilt: $[H_R, H_r] = 0$.

Als Lösung ergibt sich:

$$H_R \phi(R) = E_R \phi(R) \quad (3.7. 16)$$

$$H_r \varphi(r) = E_r \varphi(r) \quad (3.7. 17)$$

$$\psi(R, r) = \phi(R) \varphi(r) \quad (3.7. 18)$$

$$\begin{aligned} H \psi(R, r) &= H \phi(R) \varphi(r) = (H_R \phi(R)) \varphi(r) + \phi(R) (H_r \varphi(r)) \\ &= \underbrace{(E_R + E_r)}_E \psi(R, r) \end{aligned} \quad (3.7. 19)$$

Dieses Problem ist durch Separation lösbar.

Der Schwerpunkt bewegt sich wie ein freies Teilchen (ebene Welle).

$$H_R \phi(R) = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_R \phi(R) = E_R \phi(R) \quad (3.7. 20)$$

$$E_R = \frac{\hbar^2 K^2}{2m} \quad (3.7. 21)$$

Das eigentliche Problem ist somit verschoben auf die Relativbewegung \vec{r} . Dies ist ein Ein-Teilchen-Problem.

Beim Wasserstoffproblem ergibt sich eine kleine Korrektur in der Rydbergenergie:

$$m_{el} \rightarrow m_{red.} = \frac{m_{el} m_{Prot.}}{m_{el} + m_{Prot.}} \simeq m_{el} \left(1 - \frac{1}{1860}\right) \quad (3.7. 22)$$

3.8 Kontinuierliches Spektrum für das Zentralproblem

Für $H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r})$, $\lim_{r \rightarrow \infty} V(\vec{r}) = 0$ betrachten wir nochmal das Eigenwertproblem in der Ortsdarstellung:

$$H\psi(r, \theta, \varphi) = E\psi(r, \theta, \varphi) \quad (3.8. 1)$$

$$\psi(r, \theta, \varphi) = f_l(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (3.8. 2)$$

$$f_l(r) = \frac{y_l(r)}{r} \quad \text{mit } y_l(0) = 0 \quad (3.8. 3)$$

Für $E > 0$ setzen wir:

$$E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m} \quad (3.8. 4)$$

$$V(\vec{r}) = \frac{\hbar^2}{2m} U(\vec{r}) \quad (3.8. 5)$$

$$\rho = Kr \quad (3.8. 6)$$

Die Radialgleichung lautet dann:

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} + 1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} - U(\rho) \right) y_l(\rho) = 0 \quad (3.8. 7)$$

bzw.

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} + 1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} - U(\rho) \right) f_l(\rho) = 0 \quad (3.8. 8)$$

mit $f_l = \frac{y_l}{\rho}$. Gleichung (3.8. 8) lautet für freie Teilchen:

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} + 1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) f_l = 0 \quad (3.8. 9)$$

Gleichung (3.8. 9) ist die sphärische Besselsche Differentialgleichung zweiter Ordnung.

Lösungen für Gleichung (3.8. 9) ergeben sich aus:

1. Sphärische Besselfunktion $j_l(\rho)$, sie ist regulär am Ursprung:

$$j_l \sim \rho^l \quad \text{für } \rho \rightarrow 0 \quad (3.8. 10)$$

2. Neumann-Funktion $n_l(\rho)$, sie ist singular am Ursprung:

$$n_l \sim \rho^{-l-1} \quad \text{für } \rho \rightarrow 0 \quad (3.8. 11)$$

Aus Gleichung (3.8. 10) und Gleichung (3.8. 11) ergibt sich (durch Linearkombination) die Hankelfunktion:

$$h_l^{(\pm)} = n_l \pm i j_l \quad (3.8. 12)$$

Für spezielle Werte von l gilt:

$$j_0(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho} \quad (3.8. 13)$$

$$n_0(\rho) = \frac{\cos \rho}{\rho} \quad (3.8. 14)$$

$$h_0^{(\pm)} = \frac{e^{\pm i\rho}}{\rho} \quad (3.8. 15)$$

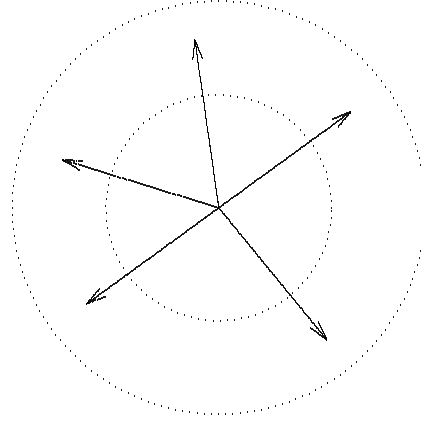


Abbildung 19: Auslaufende Kugelwelle

$$j_1(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho^2} - \frac{\cos \rho}{\rho} \quad (3.8. 16)$$

$$n_1 = \frac{\cos \rho}{\rho^2} + \frac{\sin \rho}{\rho} \quad (3.8. 17)$$

etc.

Der asymptotische Verlauf für $\rho \rightarrow \infty$ sieht wie folgt aus:

$$j_l \simeq \frac{1}{\rho} \sin\left(\rho - \frac{1}{2}l\pi\right) \quad (3.8. 18)$$

$$n_l \simeq \frac{1}{\rho} \cos\left(\rho - \frac{1}{2}l\pi\right) \quad (3.8. 19)$$

$$h_l^{(\pm)} \simeq \frac{1}{\rho} e^{\pm i(\rho - \frac{1}{2}l\pi)} \quad (3.8. 20)$$

Das Pluszeichen, bzw. das Minuszeichen, steht hier für eine auslaufende, bzw. einlaufende, Kugelwelle, s. Abbildung (19).

$$h_l^{(\pm)} \simeq \frac{1}{K} \frac{e^{\pm i(Kr - \frac{1}{2}l\pi)}}{r} = \frac{(-i)^l}{K} \frac{e^{\pm iKr}}{r} \quad (3.8. 21)$$

Für ein freies Teilchen gilt: Da $y_l = r f_l$ am Ursprung verschwinden muß, kommt als Lösung nur in Frage (Eigenwerte in Radial-Darstellung):

$$\psi_E(r, \theta, \varphi) = a_{lm}^{(E)} Y_{lm}(\theta, \varphi) j_l\left(\underbrace{Kr}_{\text{regulär bei } \rho=0}\right) \quad (3.8. 22)$$

Dies ist ein vollständiges System mit den Quantenzahlen ($E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m}, l, m$).

Andererseits existiert die ebene Welle als vollständiges System (eines durch das Andere darstellbar):

$$\psi_E(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad (3.8. 23)$$

mit den Quantenzahlen (K_x, K_y, K_z) mit $E = \frac{\hbar^2 \vec{K}^2}{2m}$.

Beide Systeme sind vollständig, d.h. wir können daher die ebene Welle $e^{i\vec{k}\vec{r}}$ zur festen Energie $E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m}$ entwickeln nach den $Y_{lm} j_l$ zur reellen Energie.

$$e^{i\vec{k}\vec{r}} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l a_{lm} Y_{lm}(\theta, \varphi) j_l(Kr) \quad (3.8. 24)$$

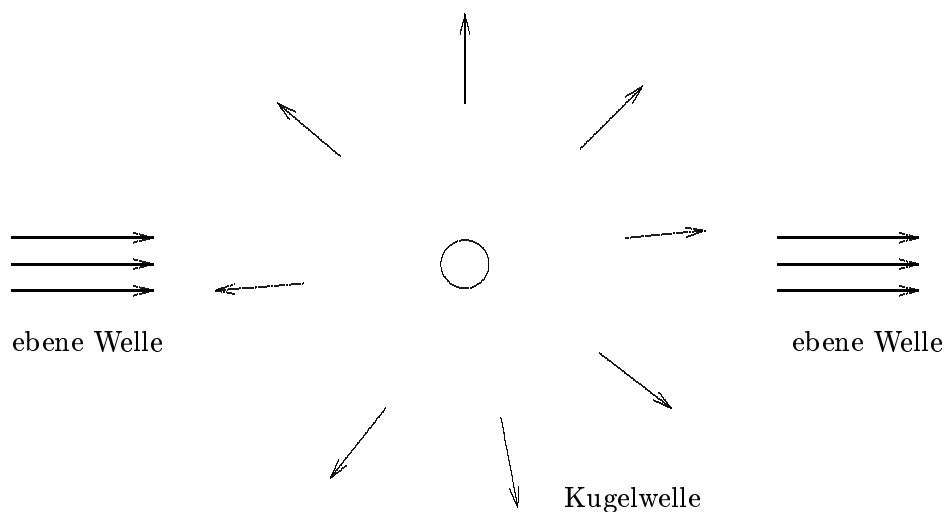


Abbildung 20: Kugelwelle, Streuung an einem Target

Wähle nun die z -Achse in Richtung von \vec{k} :

$$\vec{k}\vec{r} = Kr \cos \theta \quad (3.8. 25)$$

$$e^{i\vec{k}\vec{r}} = e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(Kr) P_l(\cos \theta) \quad (3.8. 26)$$

da nur $Y_{l,m=0} = A_l P_l(\cos \theta)$ auftreten darf.

4 Streutheorie

4.1 Streuquerschnitt, Partialwellen

Voraussetzung: $V(\vec{r})$ geht stärker gegen Null für $R \rightarrow \infty$ als $\frac{1}{r}$ (kein Coulombpotential). (Es scheint so zu sein, daß alle in der Physik (Kernphysik) auftretenden Potentiale diese Bedingung erfüllen; das Coulombpotential ist auf weite Entfernungen immer abgeschirmt.)

Für $E > 0$ hatten wir ein kontinuierliches Energiespektrum, keine normierbaren Lösungen oder gebundene Zustände.

Definition 4.1.1: Streuzustände sind Lösungen der Schrödingergleichung:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right) \psi_k(\vec{r}) = E \psi_k(\vec{r}), \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (4.1. 1)$$

mit dem asymptotischen Verhalten:

$$\psi_k(\vec{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\longrightarrow} \underbrace{e^{i\vec{k}\vec{r}}}_{\text{ebene Welle}} + f(\Omega) \underbrace{\frac{e^{ikr}}{r}}_{\text{ausl. Kugelw.}}, \quad \Omega = (\theta, \varphi) \quad (4.1. 2)$$

Die Idee dabei ist, daß wir Teilchen auf ein Streuzentrum schießen (Target) und daß vom Target aus Streuwellen in Form von Kugelwellen ausgehen, s. Abbildung (20); dabei hängt der Streuanteil von der Richtung ab.

Was messen wir bei einem Streuexperiment ? (s. Abbildung (21))

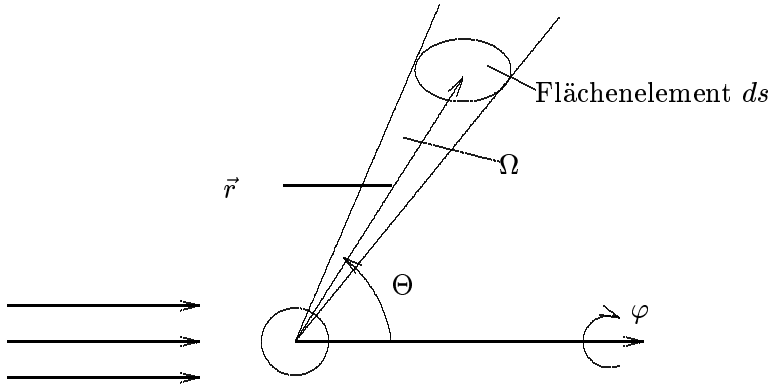


Abbildung 21: Streuexperiment

Einlaufender Strahl: Man hat die von der Quelle ausgehende Anzahl der Teilchen und ihre Geschwindigkeit:

$$j_{ein} = \text{einf. Stromdichte} = \text{Teilchendichte} \times \text{Geschw.} = \left[\frac{1}{\text{cm}^3} \frac{\text{cm}}{\text{sec}} \right] \quad (4.1. 3)$$

Streustrahl: Man beobachtet den Raumwinkel $d\Omega$ und zählt die pro Sekunde in den Zähler laufenden Teilchen.

$$\begin{aligned} j_r dS &= \text{Radialst.} \times \text{Oberfläche } dS = \text{Teilchend.} \times \text{Geschw.} \times \text{Fläche} \\ &= \left[\frac{1}{\text{cm}^3} \frac{\text{cm}}{\text{sec}} \text{cm}^2 \right] = \frac{1}{\text{sec}} \end{aligned} \quad (4.1. 4)$$

Für die Stromdichte gilt:

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2im} (\psi^* (\nabla \psi) - \psi (\nabla \psi^*)) \quad (4.1. 5)$$

Für eine ebene einfallende Welle gilt:

$$\psi_0 = e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad (4.1. 6)$$

$$j_{ein} = |\vec{j}_{ein}| = \left| \frac{\hbar}{2im} \left(e^{-i\vec{k}\vec{r}} i\vec{k} e^{i\vec{k}\vec{r}} - e^{i\vec{k}\vec{r}} (-i\vec{k}) e^{-i\vec{k}\vec{r}} \right) \right| = \left| \frac{\hbar \vec{k}}{m} \right| = \frac{\hbar k}{m} \quad (4.1. 7)$$

Für den Streustrom gilt mit \vec{n} = Einheitsvektor in Richtung Ω :

Wir setzen:

$$\psi_{Str.} = f(\Omega) \frac{e^{iKr}}{r} \quad (4.1. 8)$$

$$\begin{aligned} j_r &= (\vec{n} \cdot \vec{j}) = \frac{\hbar}{2im} \left(\psi_{Str.}^* \frac{\partial}{\partial r} \psi_{Str.} - \psi_{Str.} \frac{\partial}{\partial r} \psi_{Str.}^* \right) \\ &= \frac{\hbar}{2im} |f(\Omega)|^2 \left(\frac{e^{-iKr}}{r} \left(\frac{iK e^{iKr}}{r} - \frac{e^{iKr}}{r^2} \right) - \frac{e^{iKr}}{r} \left(\frac{-iK e^{iKr}}{r} - \frac{e^{-iKr}}{r} \right) \right) \\ j_r &= \frac{\hbar K}{m} \frac{|f(\Omega)|^2}{r^2} \end{aligned} \quad (4.1. 9)$$

$$j_1 dS = \frac{\hbar K}{m} |f(\Omega)|^2 d\Omega \quad (4.1. 10)$$

Definition 4.1.2: Der differentielle Streuquerschnitt:

$$d\sigma(\Omega) = \frac{j_r dS}{j_{ein}} \quad (4.1. 11)$$

$$d\sigma(\Omega) = d\sigma(\theta, \varphi) = |f(\Omega)|^2, \quad f(\Omega) = \text{Streuamplitude} \quad (4.1. 12)$$

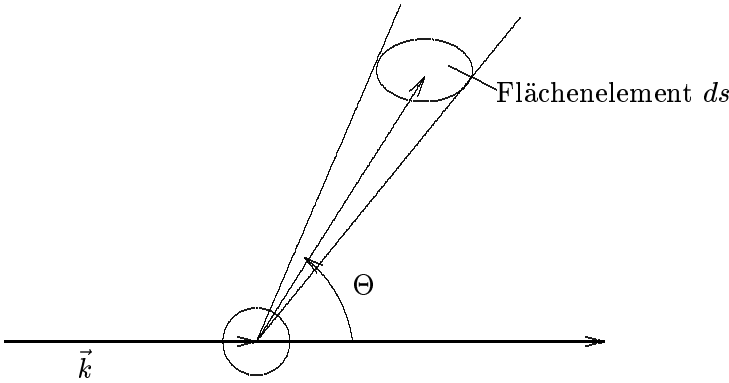


Abbildung 22:

Definition 4.1.3: Der totale Streuquerschnitt:

$$\sigma_{total} = \int d\sigma(\Omega) = \int d\Omega |f(\Omega)|^2 \quad (4.1. 13)$$

4.1.1 Partialwelle für ein Zentralpotential

Sei $V = V(r)$ ein Zentralpotential.

Offensichtlich ist das Problem rotationsinvariant um die \vec{k} -Achse, d.h. der Streuanteil hängt nicht von φ (Azimut) ab, s. Abbildung (22).

Die Zustandsfunktion für den Streuzustand lautet dann:

$$\psi_k(\vec{r}) = \psi_k(r, \theta) \quad (4.1. 14)$$

Der asymptotische Grenzfall lautet:

$$e^{i\vec{k}\vec{r}} + f(\theta) \frac{e^{iKr}}{r} \quad (4.1. 15)$$

Entwicklung nach der Kugelfunktion liefert, wobei $\psi_k(r, \theta)$ die feste Energie $E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m}$ hat:

$$\psi(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l a_{lm} \frac{y_l(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \underbrace{\frac{y_l(r)}{r} P_l(\cos \theta)}_{\text{Partialwelle}} \quad (4.1. 16)$$

Da ψ nicht von φ abhängt, tritt rechts nur $Y_{l,m=0} = \text{const } P_l$ auf.

Die Entwicklung der Streuamplitude lautet:

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} f_l P_l(\cos \theta) \quad (4.1. 17)$$

Bestimmung der Lösung der Radialgleichung $y_l(r)$:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right) y_l = E y_l \quad (4.1. 18)$$

Mit $E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m}$ und $V(r) = \frac{\hbar^2}{2m} U(r)$ folgt:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + K^2 - U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) y_l = 0, \quad y_l(0) = 0 \quad (4.1. 19)$$

Asymptotisches Verhalten der Lösung:

$$y_l(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} a_l \sin(Kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l) \quad (4.1. 20)$$

Dies gilt nur, wenn V stärker als $\frac{1}{r}$ bei $r \rightarrow \infty$ verschwindet, s. Gleichung (3.8. 18).

δ_l ist eine Phasenverschiebung durch Streuung an $U(r)$; $\delta_l = 0$ für $U(r) = 0$.

Aus der Asymptotik folgt:

$$\begin{aligned} \psi(r, \theta) &\xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos \theta) \frac{1}{r} a_l \sin(Kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l) \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{P_l(\cos \theta)}{r} \left(a_l \frac{e^{-\frac{i}{2}l\pi + \delta_l i}}{2i} e^{iKr} - a_l \frac{e^{\frac{i}{2}l\pi - \delta_l i}}{2i} e^{-iKr} \right) \end{aligned} \quad (4.1. 21)$$

Andererseits gilt:

$$\psi(r, \theta) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{i\vec{k}\vec{r}} + f(\theta) \frac{e^{iKr}}{r} = \sum_{l=0}^{\infty} \left(i^l (2l+1) j_l(Kr) + f_l \frac{e^{iKr}}{r} \right) P_l(\cos \theta) \quad (4.1. 22)$$

Da gilt:

$$j_l(Kr) \simeq \frac{1}{Kr} \sin \left(Kr - \frac{1}{2}l\pi \right) = \frac{1}{2iKr} \left(e^{iKr} e^{\frac{1}{2}l\pi i} - e^{-iKr} e^{-\frac{1}{2}l\pi i} \right) \quad (4.1. 23)$$

folgt:

$$\psi(r, \theta) \rightarrow \sum_{l=0}^{\infty} \frac{P_l(\cos \theta)}{r} \left(\left(f_l + \frac{2l+1}{2iK} \right) e^{iKr} + (-1)^{l+1} \frac{2l+1}{2iK} e^{-iKr} \right) \quad (4.1. 24)$$

Durch Vergleich von Gleichung (4.1. 21) und Gleichung (4.1. 24) folgt:

$$a_l = i^l \frac{2l+1}{K} e^{i\delta_l} \quad (4.1. 25)$$

$$\frac{2l+1}{2iK} + f_l = \frac{2l+1}{2iK} e^{2i\delta_l} \quad (4.1. 26)$$

$$f_l = \frac{2l+1}{2iK} \left(e^{2i\delta_l} - 1 \right) = \frac{2l+1}{K} e^{i\delta_l} \sin \delta_l \quad (4.1. 27)$$

Wir schreiben nochmals die erste Entwicklung hin und setzen a_l ein, Gleichung (4.1. 27) in Gleichung (4.1. 24):

$$\psi(r, \theta) \rightarrow \sum_{l=0}^{\infty} \frac{P_l(\cos \theta)}{r} \frac{2l+1}{2iK} \underbrace{\left(\underbrace{i^{2l} e^{-iKr}}_{\text{einlaufende}} + \underbrace{e^{2i\delta_l} e^{iKr}}_{\text{auslaufende}} \right)}_{\text{Kugelwelle}} \quad (4.1. 28)$$

Die Wirkung des Potentials besteht also darin, daß die auslaufende l -Welle eine Phasenverschiebung $2\delta_l$ gegenüber der einlaufenden l -Welle erhält.

Die Streuamplitude lautet dann:

$$f(\theta) = \frac{1}{K} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} f_l P_l(\cos \theta) \quad (4.1. 29)$$

und für den Streuquerschnitt gilt dann:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\Omega}\sigma(\theta) &= |f(\theta)|^2 \\ &= \sum_{l,l'=0}^{\infty} \frac{(2l+1)(2l'+1)}{K^2} \sin \delta_l \sin \delta_{l'} e^{i(\delta_l - \delta_{l'})} P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) \end{aligned} \quad (4.1. 30)$$

und für den totalen Streuquerschnitt:

$$\int d\Omega P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) = \delta_{ll'} \frac{4\pi}{2l+1} \quad (4.1. 31)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{total} &= \int d\sigma(\Omega) = \int d\Omega |f(\theta)|^2 \\ &= \frac{4\pi}{K^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l \end{aligned} \quad (4.1. 32)$$

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{K^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l \leq \frac{4\pi}{K^2} (2l+1) \quad (4.1. 33)$$

Gleichung (4.1. 33) liefert den größten Beitrag, wenn $\delta_l = \pi(n + \frac{1}{2})$, man sagt auch bei der maximalen Streuung liegt Resonanz im l -Kanal vor (l Partial Welle).

Ein Vergleich von Gleichung (4.1. 27) und Gleichung (4.1. 32) liefert mit

$$\text{Im } f_l = \frac{2l+1}{K} \sin^2 \delta_l = \frac{K}{4\pi} \sigma_l \quad (4.1. 34)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{total} &= \int d\Omega |f(\theta)|^2 = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l = \frac{4\pi}{K} \sum_{l=0}^{\infty} \text{Im } f_l \\ &= \text{Im } \frac{4\pi}{K} \sum_{l=0}^{\infty} f_l = \frac{4\pi}{K} \text{Im } f(\theta=0), \quad \text{wegen } P_l(1) = 1 \end{aligned} \quad (4.1. 35)$$

Diese Relation zwischen dem Gesamtquerschnitt und dem Imaginärteil der Vorwärtsstreuamplitude ist das Optische Theorem.

4.2 Berechnung der Streuphasen, Bornsche Näherung

Bei der Berechnung der Streuphasen geht man von den Lösungen der Radialgleichung aus.

Gegeben seien zwei Potentiale:

$$U(r) = \frac{2m}{\hbar^2} V(r) \quad (4.2. 1)$$

$$\bar{U}(r) = \frac{2m}{\hbar^2} \bar{V}(r) \quad (4.2. 2)$$

Eingesetzt in die Gleichung (4.1. 18) liefern die Radialgleichungen zur gleichen Energie $E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m}$ in der Integraldarstellung:

$$y_l'' + \left(K^2 - U - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) y_l = 0 \quad (4.2. 3)$$

$$\bar{y}_l'' + \left(K^2 - \bar{U} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \bar{y}_l = 0 \quad (4.2. 4)$$

mit der Asymptotik:

$$y_l(\infty) \simeq \sin(Kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l) \quad (4.2. 5)$$

$$\bar{y}_l(\infty) \simeq \sin\left(Kr - \frac{1}{2}l\pi + \bar{\delta}_l\right) \quad (4.2. 6)$$

Gleichung (4.2. 3) mit \bar{y}_l und Gleichung (4.2. 4) mit y_l multipliziert und subtrahiert, liefert:

$$y_l \bar{y}_l'' - \bar{y}_l y_l'' = \frac{d}{dr}(y_l \bar{y}_l' - \bar{y}_l y_l') = -(U - \bar{U})y_l \bar{y}_l \quad (4.2. 7)$$

Integration von 0 bis ∞ liefert:

$$-\int_0^\infty dr (U - \bar{U})y_l \bar{y}_l = \int_0^\infty dr \frac{d}{dr} W[y_l, \bar{y}_l] = W[y_l, \bar{y}_l]_\infty - \underbrace{W[y_l, \bar{y}_l]_0}_{=0}$$

da:

$$y_l(0) = \bar{y}_l(0) = 0 \quad (4.2. 8)$$

$$= (y_l(\infty)\bar{y}_l'(\infty) - \bar{y}_l(\infty)y_l'(\infty)) \quad (4.2. 9)$$

mit Gleichung (4.2. 5) und Gleichung (4.2. 6) folgt dann:

$$\begin{aligned} &= \left(\sin\left(Kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l\right) K \cos\left(Kr - \frac{1}{2}l\pi + \bar{\delta}_l\right) - (\delta \leftrightarrow \bar{\delta}) \right) \\ &= K \sin(\delta_l - \bar{\delta}_l) \end{aligned} \quad (4.2. 10)$$

$$\sin(\delta_l - \bar{\delta}_l) = -\frac{1}{K} \int_0^\infty dr (U - \bar{U})y_l \bar{y}_l = -\frac{2m}{K\hbar^2} \int_0^\infty dr (V - \bar{V})y_l \bar{y}_l \quad (4.2. 11)$$

Gültig für alle V, \bar{V} , die für $r \rightarrow \infty$ stärker als $\frac{1}{r}$ verschwinden.

Speziell für $\bar{V}(r) = 0$ gilt:

$$\bar{y}_l(r) = Kr j_l(Kr) \quad (4.2. 12)$$

und

$$\bar{\delta}_l = 0 \quad \text{da } j_l(Kr) \simeq \frac{\sin(Kr - \frac{1}{2}l\pi)}{Kr} \quad (4.2. 13)$$

$$\sin \delta_l = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty dr r V(r) j_l(Kr) y_l(r) \quad (4.2. 14)$$

Wir folgern daraus: Sei $U = \bar{U} + \Delta U$, ΔU klein und positiv: $y_l = \bar{y}_l + \Delta y_l$, $\delta_l = \bar{\delta}_l + \Delta \delta_l$:

$$\sin(\delta_l - \bar{\delta}_l) = \sin \Delta \delta_l \simeq \Delta \delta_l$$

und mit Gleichung (4.2. 11) folgt:

$$= -\frac{1}{K} \int_0^\infty dr \Delta U y_l (y_l - \Delta y_l) \quad (4.2. 15)$$

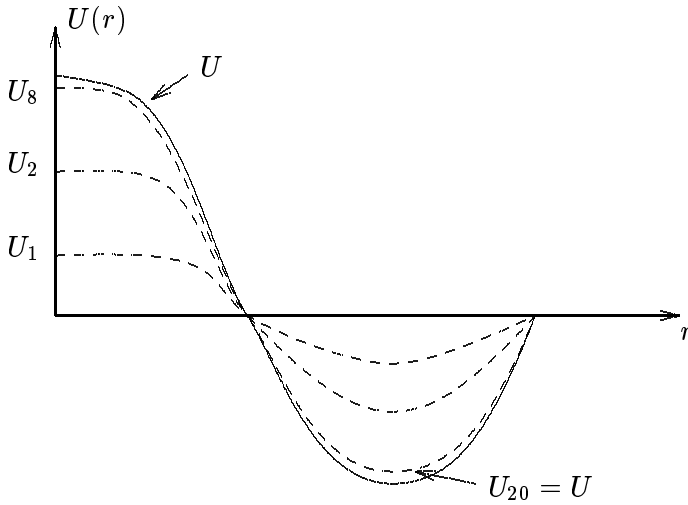
$$\Delta \delta_l \sim -\frac{1}{K} \int_0^\infty dr \Delta U y_l^2 < 0 \quad (4.2. 16)$$

Wenn also U zunimmt, dann nimmt δ ab. Wir können jetzt δ_l eindeutig festlegen, bisher unbestimmt bis auf $2\pi n$. Man beginnt mit $U = 0$, $\delta_l = 0$ und baut das endliche U aus infinitesimalen ΔU auf, s. Abbildung (23). Damit ergibt sich ein eindeutiges δ_l .

Insbesondere:

$$U < 0 \quad \text{überall} \rightarrow \delta_l > 0 \quad \text{anziehendes Pot.}$$

$$U > 0 \quad \text{überall} \rightarrow \delta_l < 0 \quad \text{abstoßendes Pot.}$$

Abbildung 23: Zerlegung von $U(r)$

Bornsche Näherung: Sei $|U| < K^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}$ und 1. Ordnung in V , dann ist U eine kleine Störung. Die Phasen δ_l sind klein und y_l wird nur unwesentlich von

$$y_l^0 = Kr j_l(Kr) \quad (4.2. 17)$$

abweichen. Gleichung (4.2. 17) eingesetzt in Gleichung (4.2. 14) liefert die Streuphase in erster Näherung in V :

$$\sin \delta_l \sim \delta_l = -\frac{2m}{\hbar^2} K \int_0^\infty dr r^2 j_l^2(Kr) V(r) \quad (4.2. 18)$$

Ebenso kann man V durch ein \bar{V} annähern, dessen Streuphase man kennt:

$$\delta_l = \bar{\delta}_l - \frac{2m}{K\hbar^2} \int_0^\infty dr \bar{y}_l^2(r) (V(r) - \bar{V}(r)) \quad (4.2. 19)$$

4.3 Potential endlicher Reichweite, Niederenergie-Streuung

Wir betrachten jetzt ein Potential endlicher Reichweite:

$$V(r) = 0 \quad \text{für } r \geq r_0 \quad (4.3. 1)$$

Anmerkung: Solche Potentiale sind in der Kernphysik von Interesse, extrem große Kräfte mit endlicher Reichweite: $r_0 \approx 10^{-13}$ cm. (s. Abbildung (24))

4.3.1 Klassische Streuung

Wir betrachten noch einmal die klassische Streuung. b sei der Stoßparameter. Es ist klar, daß für $b > r_0$ keine Streuung erfolgt. (s. Abbildung (25))

Der Drehimpuls lautet:

$$|\vec{L}| = |\vec{r} \times \vec{p}| = bp = b\hbar K \quad (4.3. 2)$$

Klassisch tritt keine Streuung auf, wenn $|\vec{L}| > \hbar K r_0$ oder mit $\vec{L}^2 = \hbar^2 l(l+1)$ gilt $|\vec{L}| = \hbar \sqrt{l(l+1)} \approx \hbar l$ und daraus folgt $l > K r_0$.

Quantenmechanisch haben wir etwa dasselbe Ergebnis.

Eine Abschätzung mit $r_0 \approx 10^{-13}$ cm liefert:

$$K r_0 = 1 \rightarrow K \approx 10^{13} \text{ cm}^{-1} \quad (4.3. 3)$$

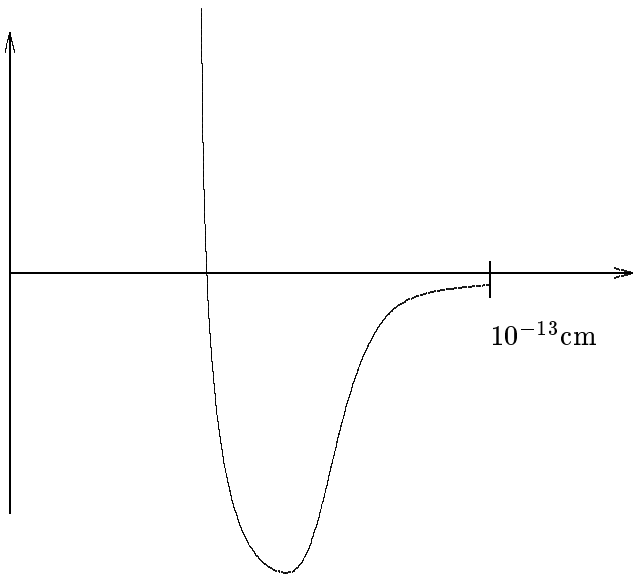


Abbildung 24: Potential endlicher Reichweite

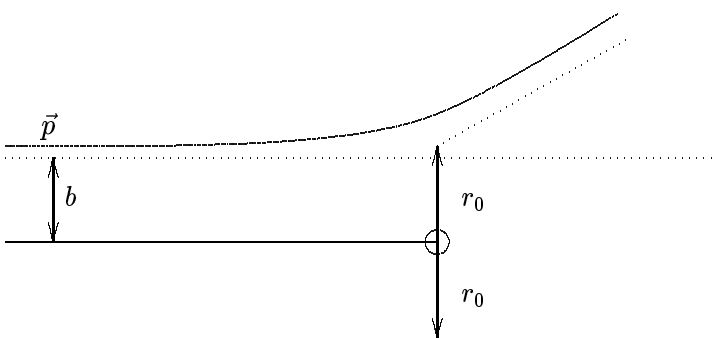


Abbildung 25: Klassische Streuung

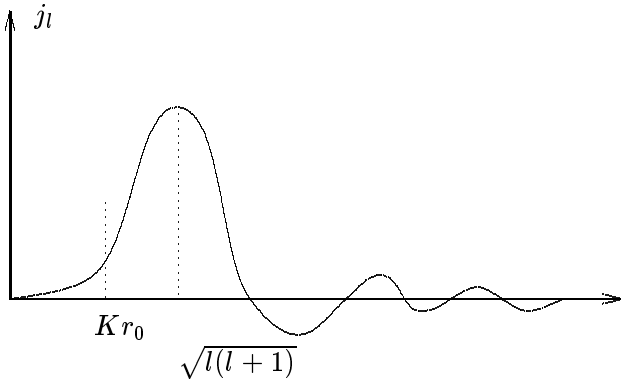


Abbildung 26: Sphärische Besselfunktion

$$E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m_{pr.}} \approx 10^8 \text{ eV} = 100 \text{ MeV Protonenenergie} \quad (4.3.4)$$

Wenn also die Protonenenergie kleiner 100 MeV ist sollte man im wesentlichen nur s -Wellenstreuung ($l = 0$) erwarten.

4.3.2 Quantenmechanische Streuung

In der Quantenmechanik ergibt sich:

$$\sin \delta_l = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^{r_0} dr r V(r) j_l(Kr) y_l(Kr) \quad (4.3.5)$$

j_l hat sein erstes Maximum bei $\sqrt{l(l+1)}$ (s. Abbildung (26)). Wenn also $l > Kr_0$, so genügt für $j_l(Kr)$ die asymptotische Entwicklung bei $Kr = 0$:

$$j_l(Kr) \simeq \frac{(Kr)^l}{(2l+1)!!} \quad \text{mit: } (2l+1)!! = 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot 7 \cdot \dots \cdot (2l+1) \quad (4.3.6)$$

Also gilt die Abschätzung für $l \gg Kr_0$, d.h. $\frac{Kr_0}{l} \rightarrow 0$:

$$|\sin \delta_l| \simeq \frac{2m}{\hbar^2} \frac{(Kr_0)^l}{(2l+1)!!} \underbrace{\left| \int_0^{r_0} dr r \left(\frac{r}{r_0}\right)^l V(r) y_l(r) \right|}_{\text{beschränkt}} \rightarrow 0 \quad (4.3.7)$$

Alle Streuphasen mit $l \gg Kr_0$ sind vernachlässigbar.

4.3.3 Niederenergie-Streuung

Für $E \rightarrow 0$, also $K \rightarrow 0$ gilt:

$$\sin \delta_l = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^{r_0} dr r V(r) j_l(r) y_l(r)$$

setze: $\rho = Kr$

$$= -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{K^2} \int_0^{\rho_0} d\rho \rho V\left(\frac{\rho}{K}\right) j_l(\rho) y_l(\rho) \quad (4.3.8)$$

Da $\rho_0 \rightarrow 0$ gilt, genügt im Integranden die asymptotische Entwicklung für j_l und y_l :

$$j_l(\rho) \simeq \frac{\rho^l}{(2l+1)!!} \quad \rho \rightarrow 0 \quad (4.3.9)$$

$$y_l(\rho) \simeq c \frac{\rho^{l+1}}{(2l+1)!!} \quad \rho \rightarrow 0, \quad c = \text{const} \quad (4.3. 10)$$

($V(r)$ schwächer als $\frac{1}{r^2}$ bei $r = a$)

Man erhält:

$$\sin \delta_l \simeq -\frac{2mc}{\hbar^2} \frac{K^{2l+1}}{((2l+1)!!)^2} \int_0^{r_0} dr r^{2l+2} V(r) \quad (4.3. 11)$$

Es gilt also:

$$\sin \delta_l \sim \delta_l \sim K^{2l+1} \quad (4.3. 12)$$

$$\lim_{K \rightarrow 0} \frac{\delta_l}{K} = \begin{cases} 0 & (l \neq 0) \\ -\frac{2mc}{\hbar^2} \int_0^{r_0} dr r^2 V(r) = -a & (l = 0) \end{cases} \quad (4.3. 13)$$

Allgemein gilt:

$$\lim_{K \rightarrow 0} \frac{\delta_0}{K} = -a \quad (4.3. 14)$$

$a = \text{Streulänge} \neq 0$ ($a > 0$ für $V > 0$, $a < 0$ für $V < 0$, $a = \pm\infty$ möglich). Damit ist nach G.(4.1. 27):

$$\lim_{K \rightarrow 0} f_l = \begin{cases} 0 & l \neq 0 \\ -a & l = 0 \end{cases} \quad (4.3. 15)$$

Die isotrope s -Streuung für $E \rightarrow 0$ folgt aus (s. G.(4.1. 29), G.(4.1. 33)):

$$\lim_{K \rightarrow 0} f(\theta) = (\lim f_0) P_0(\cos \theta) = -a \quad (4.3. 16)$$

$$\lim_{K \rightarrow 0} \sigma_l = \begin{cases} 0 & l \neq 0 \\ 4\pi a^2 & l = 0 \end{cases} \quad (4.3. 17)$$

Daraus folgt:

$$\lim_{K \rightarrow 0} \sigma_{total} \simeq \sum_{l=0}^{\infty} \lim \sigma_l \rightarrow 4\pi a^2 \quad (4.3. 18)$$

Das entspricht der Streuung eines klassischen Teilchens an einer Kugel vom Radius $2|a|$ ($|a| \neq r_0$).

4.4 Harte Kugel; s -Wellenstreuung am Potentialtopf; Resonanz

Das Konzept der Streuphase, das der asymptotischen Beschreibung für $r \rightarrow \infty$ entnommen ist, läßt sich auf das Problem der harten Kugel übertragen.

Für die harte Kugel gilt:

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r > r_0 \\ \infty & r \leq r_0 \end{cases} \quad (4.4. 1)$$

Wir gehen zurück zur Radialgleichung:

$$y_l'' + \left(K^2 - U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) y_l = 0 \quad (4.4. 2)$$

$$y_l'' + \left(K^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) y_l = 0 \quad \text{für } r > r_0 \quad (4.4. 3)$$

$$y_l = 0 \quad \text{für } r \leq r_0 \quad (4.4. 4)$$

Die Stetigkeitsbedingung für y_l bei $r = r_0$ erfordert, daß die Lösung der freien Gleichung für $r > r_0$ bei $r = r_0$ verschwindet.

Für $r > r_0$ folgt dann mit der Bessel- und Neumannfunktion:

$$y_l = K r (A j_l(Kr) + B n_l(Kr)) \quad (4.4. 5)$$

Mit der Asymptotik ergibt sich dann:

$$y_l(\infty) \simeq \sin(Kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l) = \cos \delta_l \sin(Kr - \frac{1}{2}l\pi) + \sin \delta_l \cos(Kr - \frac{1}{2}l\pi) \quad (4.4. 6)$$

Weiter folgt:

$$A = \cos \delta_l \quad (4.4. 7)$$

$$B = \sin \delta_l \quad (4.4. 8)$$

da gilt:

$$j_l \sim \frac{\sin(Kr - \frac{1}{2}l\pi)}{Kr} \quad (4.4. 9)$$

$$n_l \sim \frac{\cos(Kr - \frac{1}{2}l\pi)}{Kr} \quad (4.4. 10)$$

Die Stetigkeitsbedingung bei $r = r_0$ legt dann δ_l fest.

$$0 = y_l(r_0) = j_l(Kr_0) \cos \delta_l + n_l(Kr_0) \sin \delta_l \quad (4.4. 11)$$

$$\delta_l < 0 \quad \text{da } V > 0 \quad (4.4. 12)$$

$$\tan \delta_l = -\frac{j_l(Kr_0)}{n_l(Kr_0)} \quad (4.4. 13)$$

$$\sin^2 \delta_l = \frac{j_l^2(Kr_0)}{j_l^2(Kr_0) + n_l^2(Kr_0)} \quad (4.4. 14)$$

Also:

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{K^2}(2l+1) \sin^2 \delta_l = \frac{4\pi}{K^2}(2l+1) \frac{j_l^2(Kr_0)}{j_l^2(Kr_0) + n_l^2(Kr_0)} \quad (4.4. 15)$$

Spezialisierung für hohe Energien, d.h. $Kr_0 \gg l$ (setze $\rho = Kr_0$):

$$j_l(\rho) \simeq \frac{1}{\rho} \sin(\rho - \frac{1}{2}l\pi) \quad (4.4. 16)$$

$$n_l(\rho) \simeq \frac{1}{\rho} \cos(\rho - \frac{1}{2}l\pi) \quad (4.4. 17)$$

$$\sigma_l \simeq \frac{4\pi}{K^2}(2l+1) \sin^2(\rho - \frac{1}{2}l\pi) \rightarrow 0 \quad \text{für } K \rightarrow \infty \text{ wie } \frac{1}{K^2} \quad (4.4. 18)$$

Für kleine Energien, d.h. $Kr_0 \ll l$:

$$j_l(\rho) \simeq \frac{\rho^l}{(2l+1)!!} \quad (4.4. 19)$$

$$n_l(\rho) \simeq (2l-1)!! \rho^{-l-1} \quad (4.4. 20)$$

$$\sigma_l \simeq \frac{4\pi}{K^2}(2l+1) \frac{(\rho)^{4l+2}}{((2l+1)!!(2l-1)!!)^2} \rightarrow 0 \quad \text{für } l = 1, 2, 3, \dots \quad (4.4. 21)$$

Für $l = 0$ gilt exakt:

$$\sigma_0 = 4\pi r_0^2 \left(\frac{\sin \rho}{\rho} \right)^2 \quad (4.4. 22)$$

da $j_0 = \frac{\sin \rho}{\rho}$ und $n_0 = \frac{\cos \rho}{\rho}$.

$$\lim_{K \rightarrow 0} \sigma_0 = 4\pi r_0^2 \rightarrow r_0 = a = \text{Streulänge} \quad (4.4. 23)$$

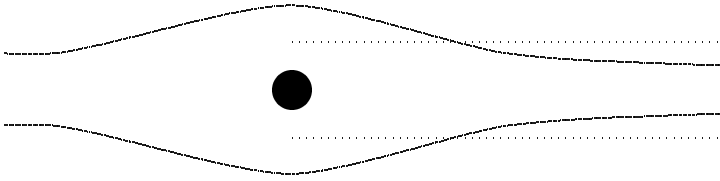


Abbildung 27: Schattenstreuung

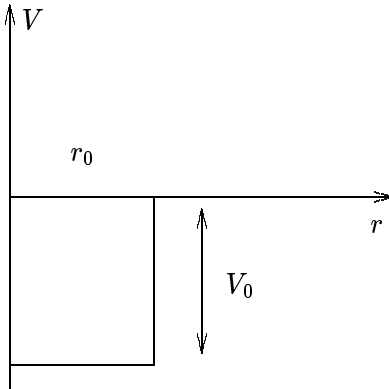


Abbildung 28: Potentialtopf

Man kann zeigen, daß für $K \rightarrow \infty$ gilt:

$$\lim_{K \rightarrow \infty} \sigma_{total} = 2\pi r_0^2 \quad (4.4. 24)$$

Für klassische Teilchen ist der totale Wirkungsquerschnitt unabhängig von der Energie:

$$\sigma_{klassisch} = \pi r_0^2 \quad (4.4. 25)$$

Quantenmechanisch ist der niederenergetische Streuquerschnitt $\sigma_{total}|_{K=0} = \sigma_0$ also $= 4\sigma_{kl.}$. Aber auch bei hohen Energien ist der quantenmechanische Streuquerschnitt immer noch doppelt so groß wie der Klassische. Der Wellenaspekt läßt sich also auch nicht für $K \rightarrow \infty$ vernachlässigen. Das hängt damit zusammen, daß das Potential sich bei $r = r_0$ abrupt ändert. Anschaulich kann eine Welle in den *Schatten* der Kugel eindringen, der ja für das klassische Teilchen verboten ist. (s. Abbildung (27))

Das gleiche Phänomen ist von der Beugung von Licht an der perfekt reflektierenden Kugel in der Optik bekannt. Wir sprechen daher auch von Schattenstreuung.

4.4.1 s-Wellen-Streuung am Potentialtopf

Sei (s. Abbildung (28)):

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r > r_0 \\ -V_0 & r < r_0 \end{cases} \quad (4.4. 26)$$

$$V_0 = \frac{\hbar^2}{2m} K_0^2, \quad K_0^2 = U_0$$

Die Radialgleichung für $l = 0$ lautet:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2 \right) y_0 = 0 \quad r > r_0 \quad (4.4. 27)$$

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + K^2 \right) y_0 = 0 \quad r < r_0 \quad (4.4. 28)$$

$$K^2 = K_0^2 + k^2, \quad \text{sei } k^2 \ll K_0^2 \quad (4.4. 29)$$

Als Lösung für die Radialgleichung ergibt sich:

$$y_0 = \begin{cases} \sin(kr + \delta_0) & r > r_0 \\ A \sin Kr & r < r_0 \end{cases} \quad (4.4. 30)$$

Stetigkeit von y und y' bei $r = r_0$ liefert:

$$\sin(kr_0 + \delta_0) = A \sin Kr_0 \quad (4.4. 31)$$

$$k \cos(kr_0 + \delta_0) = KA \cos Kr_0 \quad (4.4. 32)$$

$$\tan(kr_0 + \delta_0) = \frac{k}{K} \tan Kr_0 \quad (4.4. 33)$$

oder:

$$\delta_0 = -kr_0 + \arctan\left(\frac{k}{K} \tan Kr_0\right) \quad (4.4. 34)$$

$$A = \frac{k}{\sqrt{1 + K_0^2 \cos^2 Kr_0}} \quad (4.4. 35)$$

Wir betrachten jetzt einen hinreichend tiefen Topf mit $\frac{k}{K} \ll 1$ und $kr_0 \ll 1$:

1. Kr_0 nicht bei $(n + \frac{1}{2})\pi$, $n = 0, 1, 2, \dots$

$$\delta_0 \approx -kr_0 + \frac{k}{K} \tan Kr_0 = -kr_0 \left(1 - \frac{\tan Kr_0}{Kr_0}\right) \quad (4.4. 36)$$

$$\sigma_{total} \approx \sigma_0 = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0 \approx 4\pi r_0^2 \left(1 - \frac{\tan Kr_0}{Kr_0}\right)^2 \quad (4.4. 37)$$

Wenn $\tan Kr_0 = Kr_0$, so verschwindet σ : $\sigma_{total} \approx 0$.

Das erklärt den Ramsauer-Effekt, nämlich, daß ein Potential (Atom, Kern) für bestimmte Energien durchsichtig ist, d.h. es kommt zu keiner Streuung.

2. Sei $Kr_0 = \pi(n + \frac{1}{2})$ und $K_r \approx K$, $E_r = \frac{\hbar^2 k_r^2}{2m}$ die Resonanzenergie und $K_r^2 = K_0^2 + k_r^2$, dann liefert die Entwicklung um $K = K_r$:

$$\begin{aligned} \frac{K}{k} \cot Kr_0 &= \frac{K}{k} \cot(K_r r_0 - (K_r - K)r_0) \approx \frac{K_r}{k_r} \tan(K_r - K)r_0 \\ &= \frac{K_r}{k_r} (K_r - K)r_0 \approx \frac{K_r^2 - K^2}{2\frac{kr}{r_0}} = \frac{k_r^2 - k^2}{2k\frac{k_r}{r_0}} = \frac{E_r - E}{\frac{\Gamma}{2}} \end{aligned} \quad (4.4. 38)$$

mit

$$\Gamma = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{4k_r}{r_0} \quad (4.4. 39)$$

Mit $k_r r_0 \ll 1$ folgt:

$$\delta_0 \approx \arctan \frac{\frac{\Gamma}{2}}{E_r - E} \quad (4.4. 40)$$

oder:

$$\tan \delta_0 = \frac{\frac{\Gamma}{2}}{E_r - E} \quad (4.4. 41)$$

Es folgt:

$$e^{i\delta_0} \sin \delta_0 = \frac{\tan \delta_0}{1 - i \tan \delta_0} = \frac{\frac{\Gamma}{2}}{E_r - E - \frac{i\Gamma}{2}} = -\frac{\frac{\Gamma}{2}}{E - E_r + \frac{i\Gamma}{2}} \quad (4.4. 42)$$

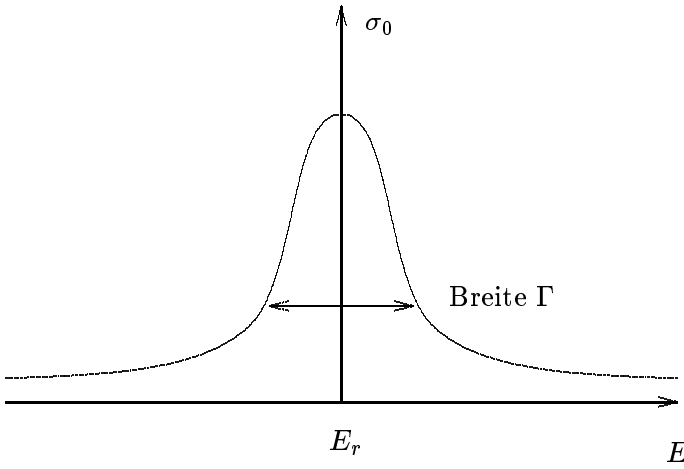


Abbildung 29: Lorentzkurve bei Resonanz

$$f_0 = \frac{1}{k} e^{i\delta_0} = -\frac{1}{kr} \frac{\frac{\Gamma}{2}}{E - E_r + i\frac{\Gamma}{2}} \quad (4.4. 43)$$

$$\sigma \approx \sigma_0 = \frac{4\pi}{kr^2} \sin^2 \delta_0 = \frac{\frac{\Gamma^2}{4}}{(E - E_r)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} \quad (4.4. 44)$$

In der Nähe der Resonanz wächst σ also plötzlich an, insbesondere, wenn Γ sehr klein ist. (s. Abbildung (29)) Die Streuphase δ_0 geht durch $\frac{\pi}{2}$.

Wie für s -Wellen kann man auch l -Wellen-Resonanz studieren.

Verallgemeinert gilt:

$$\delta_l = \arctan \frac{\frac{\Gamma}{2}}{E_r - E} \quad (4.4. 45)$$

wenn in der l -Welle bei E_r Resonanz auftritt.

Wir betrachten die Radialfunktion im Resonanzfall $r < r_0$:

$$y_0 = A \sin Kr \quad (4.4. 46)$$

$$\begin{aligned} A &= \frac{\sin(kr_0 + \delta_0)}{\sin Kr_0} \approx \frac{\sin \delta_0}{\sin Kr_0} = \sin \delta_0 \\ &= \text{sign}(E_r - E) \frac{\frac{\Gamma}{2}}{\sqrt{(E_r - E)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}}} \end{aligned} \quad (4.4. 47)$$

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Inneren ist proportional zu y_0^2 , also proportional zu:

$$A^2 = \frac{\frac{\Gamma^2}{4}}{(E_r - E)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} \quad (4.4. 48)$$

Beim Durchgang durch die Resonanz, wächst die Aufenthaltswahrscheinlichkeit also plötzlich stark an. Wenn wir mit einem nichtstationären Wellenpaket gerechnet hätten, so würden wir finden, daß das Teilchen im Resonanzfall besonders lang im Inneren des Potentials bleibt. Wir haben einen sogenannten quasistationären Zustand, ein virtuelles Niveau im Kontinuum oder Resonanz.

Im Gegensatz zu den echten stationären Zuständen mit der Zustandsfunktion

$$\psi(t) \sim e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \quad (4.4. 49)$$

haben wir es hier mit $E = E_r - \frac{i}{2}\Gamma$ zu tun.

$$\psi_{quasistat.}(t) \sim e^{-\frac{i}{\hbar}(E_r - \frac{i}{2}\Gamma)t} = e^{-i\frac{E_r}{\hbar}t - \frac{\Gamma t}{2\hbar}} \quad (4.4.50)$$

Die Wahrscheinlichkeit:

$$\rho = |\psi_{quasistat.}| \sim e^{-\frac{\Gamma}{\hbar}t} = e^{-\frac{t}{\tau}} \quad (4.4.51)$$

klingt exponentiell ab. $\tau = \frac{\hbar}{\Gamma}$ heißt Lebensdauer.

In diesem Sinne lassen sich radioaktive Zerfälle als Zerfälle eines quasistationären Zustandes deuten.

Anderes Beispiel: In der Kernphysik spricht man bei der Streuung von zwei Kernen A und B aneinander im Resonanzfall vom Compound-Kern: $(A + B)$ mit der Lebensdauer τ .

4.5 Beschreibung des Streuproblems mittels der Green'schen Funktion; elastische Streuung am Atom

Wir haben bisher nur die asymptotische Form der Streuzustände betrachtet; das reicht zur Betrachtung der Streuung an sich aus, aber nicht, wenn wir sukzessive Näherungen entwickeln wollen.

1. Ziel: Umformung der Schrödingergleichung in eine Integralgleichung.
2. Ziel (im nächsten Abschnitt): Verallgemeinerung des Streuproblems auf komplexe Stöße, d.h. Verallgemeinerung der Potentialstreuung.

Die Schrödingergleichung für den Streuzustand lautet:

$$\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta + K^2)\psi_k(\vec{r}) = V(r)\psi_k(\vec{r}), \quad E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m} > 0 \quad (4.5.1)$$

Die Lösung für $V = 0$ sind ebene Wellen:

$$\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta + K^2)\varphi_k(\vec{r}) = 0 \quad (4.5.2)$$

$$\langle \vec{r}' | \varphi_k \rangle = \varphi_k(\vec{r}') = \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}'}}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \quad (4.5.3)$$

Definition 4.5.1: Die Funktion $G_k(\vec{r}, \vec{r}')$ heißt Green'sche Funktion:

$$\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_{\vec{r}} + K^2)G_k(\vec{r}, \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (4.5.4)$$

$$\delta(\vec{r} - \vec{r}') = \int d^3k \frac{1}{(2\pi)^3} e^{i\vec{k}(\vec{r} - \vec{r}')} \quad (4.5.5)$$

Erklärung: $G_k(\vec{r}, \vec{r}')$ beschreibt die Ausbreitung von Wellen, die von einer Quelle bei \vec{r}' ausgehen. $G_k(\vec{r}, \vec{r}')$ heißt auch freier Propagator².

Wir wählen folgenden Ansatz, mit Hilfe der Green'schen Funktion läßt sich die Lösung von Gleichung (4.5.1) in der Form einer Integralgleichung schreiben:

$$\psi_k(\vec{r}) = \varphi_r(\vec{r}) + \int d^3r' G_k(\vec{r}, \vec{r}') V(\vec{r}') \psi_k(\vec{r}') \quad (4.5.6)$$

Dies ist geeignet für eine iterative Lösung.

²propagieren = ausbreiten

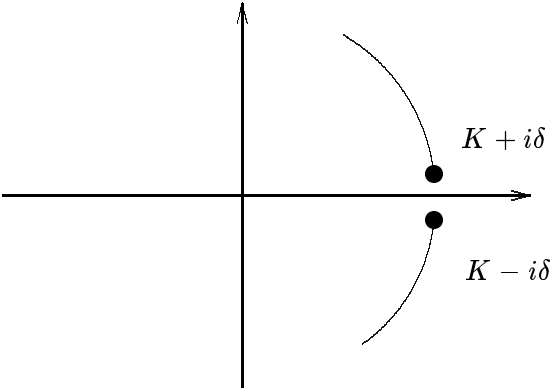


Abbildung 30: Randfunktionen

Beweis:

$$\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_{\vec{r}} + K^2)\psi_k(\vec{r}) = 0 + \int d^3 r' \delta(\vec{r} - \vec{r}') V(\vec{r}') \psi_k(\vec{r}') = V(\vec{r}) \psi_k(\vec{r}) \quad (4.5. 7)$$

Konstruktion: Da die Differentialgleichung für G_k translationsinvariant ist, folgt:

$$G_k(\vec{r} - \vec{r}') = \int d^3 q \frac{1}{(2\pi)^3} \tilde{G}_k(\vec{q}) e^{i\vec{q}(\vec{r} - \vec{r}')} \quad (4.5. 8)$$

$$\delta(\vec{r} - \vec{r}') = \int d^3 q \frac{1}{(2\pi)^3} e^{i\vec{q}(\vec{r} - \vec{r}')} \quad (4.5. 9)$$

$$\begin{aligned} \int d^3 q \frac{1}{(2\pi)^3} e^{i\vec{q}(\vec{r} - \vec{r}')} &= \int d^3 q \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{\hbar^2}{2m} (\Delta_{\vec{r}} + K^2) \tilde{G}_k(\vec{q}) e^{i\vec{q}(\vec{r} - \vec{r}')} \\ &= \int d^3 q \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{\hbar^2}{2m} (K^2 - \vec{q}^2) \tilde{G}_k(\vec{q}) e^{i\vec{q}(\vec{r} - \vec{r}')} \end{aligned} \quad (4.5. 10)$$

$$(K^2 - \vec{q}^2) \tilde{G}_k(\vec{q}) = \frac{2m}{\hbar^2} \quad (4.5. 11)$$

$$\tilde{G}_k(\vec{q}) = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{K^2 - \vec{q}^2} \quad (4.5. 12)$$

Vorsicht: Bei $K^2 = \vec{q}^2$ liegt eine Singularität vor.

Sei zunächst K komplex, dann ist $\tilde{G}_k(\vec{q})$ wohl definiert. Wir betrachten dann in der komplexen K -Ebene die Randfunktionen $G_k^{(\pm)}$ wenn K gegen die reelle Achse strebt. (s. Abbildung (30))

Definition 4.5.2:

$$G_k^{(\pm)}(\vec{q}) = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{(K \pm i\delta)^2 - \vec{q}^2} = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{K^2 \pm i\delta - \vec{q}^2} \quad (4.5. 13)$$

$$(K > 0 : (K + i0)^2 = K^2 + 2iK0_+ - 0_+^2 = K^2 + i0_+)$$

Wir zeigen jetzt, daß $G_k^{(+)}(\vec{q})$ uns die gewünschte asymptotische Form liefert.

$$\begin{aligned} G_k^{(+)}(\vec{r}) &= \int d^3 q \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{(K + i\delta)^2 - \vec{q}^2} e^{i\vec{q}\vec{r}} \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty q^2 dq \frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\pi (-) d(\cos \theta) \frac{e^{iqr \cos \theta}}{(K + i\delta)^2 - q^2} \end{aligned} \quad (4.5. 14)$$

$$- \int_0^\pi d(\cos \theta) e^{iqr \cos \theta} = \frac{e^{iqr} - e^{-iqr}}{iqr} \quad (4.5. 15)$$

Mit Gleichung (4.5. 15) lautet Gleichung (4.5. 14):

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{4\pi^2 ir} \int_0^\infty q dq \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^{iqr} - e^{-iqr}}{(K + i\delta)^2 - q^2} \\ &= \frac{1}{4\pi^2 ir} \int_{-\infty}^\infty dq \frac{2m}{\hbar^2} (-) \frac{qe^{iqr}}{(q - K - i\delta)(q + K + i\delta)} \\ &= -\frac{1}{2\pi r} \frac{2m}{\hbar^2} \operatorname{Res}_{q=K+i\delta} \frac{qe^{iqr}}{(q - K - i\delta)(q + K + i\delta)} \\ &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \underbrace{\frac{e^{iKr}}{r}}_{\text{ausl. Kugelw.}} \end{aligned} \quad (4.5. 16)$$

$$G_k^{(+)}(\vec{r} - \vec{r}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{iK|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (4.5. 17)$$

Die zu G gehörige Lösung nennen wir ψ :

$$\langle \vec{r} | \psi_k^{(+)} \rangle = \psi_k^{(+)}(\vec{r}) \quad (4.5. 18)$$

(+) weist auf auslaufende Kugelwellen hin.

$$\psi_k^{(+)}(\vec{r}) = \varphi_k(\vec{r}) - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3 r' \frac{e^{iK|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} V(\vec{r}') \psi_k^{(+)}(\vec{r}') \quad (4.5. 19)$$

Gleichung (4.5. 19) ist die Integralgleichung für den Streuzustand $\psi_k^{(+)}(\vec{r})$.

Für die Asymptotik gilt: V sei so beschaffen, daß wir $\lim_{r \rightarrow \infty}$ mit dem Integral vertauschen können (d.h. $V(\vec{r})$ stärker als $\frac{1}{r}$ für $r \rightarrow \infty$).

$$|\vec{r} - \vec{r}'| = r \sqrt{1 + \left(\frac{r'}{r}\right)^2 - \frac{2\pi\vec{r}'}{r^2}} \quad (4.5. 20)$$

$$r \left(1 - \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{r^2}\right) = r - \frac{\vec{r}\vec{r}'}{r} \quad (4.5. 21)$$

Sei: $\vec{k}' = K \frac{\vec{r}}{r}$, $|k'| = K$, dann gilt: (s. Abbildung (31))

$$\frac{e^{iK|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \simeq \frac{e^{iKr}}{r} e^{-i\vec{k}'\vec{r}'} \quad (4.5. 22)$$

$$\begin{aligned} \psi_k^{(+)}(\vec{r}) &\simeq \varphi_k(\vec{r}) - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{iKr}}{r} \int d^3 r' e^{-i\vec{k}'\vec{r}'} V(\vec{r}') \psi_k^{(+)}(\vec{r}') \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \left(e^{i\vec{k}\vec{r}} + f(k', k) \frac{e^{iKr}}{r} \right) \end{aligned} \quad (4.5. 23)$$

mit:

$$f(\theta, \varphi) = f(k', k) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \int d^3 r' \frac{e^{-i\vec{k}'\vec{r}'}}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} V(\vec{r}') \psi_k^{(+)}(\vec{r}') \quad (4.5. 24)$$

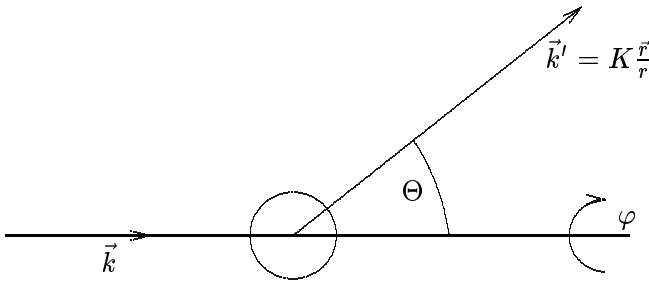


Abbildung 31:

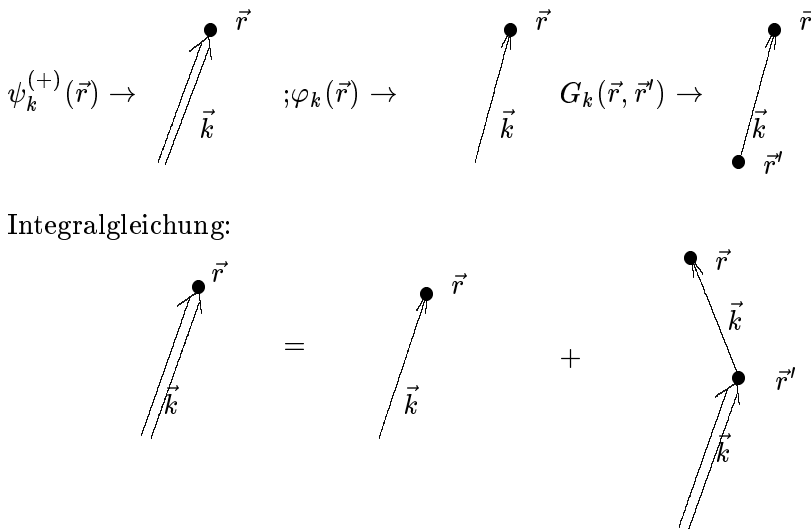


Abbildung 32: Graphische Deutung der Integralgleichung

Gleichung (4.5. 24) ist unsere alte Streuamplitude. In einer abstrakten Darstellung sieht Gleichung (4.5. 24) wie folgt aus:

$$f(k', k) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle \varphi_{k'} | V | \psi_k^{(+)} \rangle \tag{4.5. 25}$$

denn:

$$\begin{aligned} \langle \varphi_{k'} | V | \psi_k^{(+)} \rangle &= \int d^3 r \langle \varphi_{k'} | V | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \psi_k^{(+)} \rangle \\ &= \int d^3 r V(\vec{r}) \langle \varphi_{k'} | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \psi_k^{(+)} \rangle = \int d^3 r \varphi_{k'}^*(\vec{r}) V(\vec{r}) \psi_k^{(+)}(\vec{r}) \end{aligned} \tag{4.5. 26}$$

4.5.1 Bornsche Näherung, Diagramme

Diagrammatische Deutung der Integralgleichung: (s.Abbildung (32))

$$\psi_k^{(+)}(\vec{r}) = \varphi_k(\vec{r}) + \int d^3 r' G_k^{(+)}(\vec{r}, \vec{r}') V(\vec{r}') \psi_k^{(+)}(\vec{r}') \tag{4.5. 27}$$

Dabei wird über die inneren Punkte \vec{r}' integriert.

Innere Punkte (Vertex): An jedem Vertex \vec{r}' kommt ein Faktor $V(\vec{r}')$ hinzu.

Die Iteration liefert für die:

0. Näherung: (s. Abbildung (33))

$$\psi_k^{(+)\ 0} = \varphi_k \tag{4.5. 28}$$

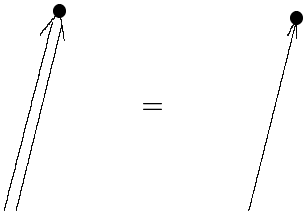


Abbildung 33: 0. Näherung

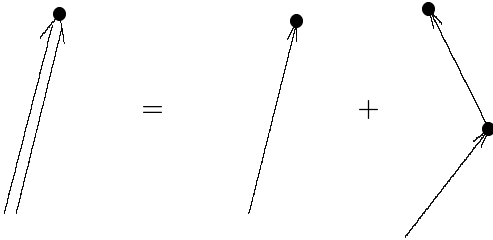


Abbildung 34: 1. Näherung (Bornsche Näherung)

1. Näherung: (s. Abbildung (34))

$$\psi_k^{(+1)}(\vec{r}) = \varphi_k(\vec{r}) + \int d^3 r' G_k(\vec{r}, \vec{r}') V(\vec{r}') \varphi_k(\vec{r}') \tag{4.5. 29}$$

2. Näherung: (s. Abbildung (35))

$$\begin{aligned} \psi_k^{(+2)}(\vec{r}) &= \varphi_k + \int d^3 r' G_k(\vec{r}, \vec{r}') V(\vec{r}') \varphi_k(\vec{r}') \\ &+ \int d^3 r' d^3 r'' G_k(\vec{r}, \vec{r}') V(\vec{r}') G_k(\vec{r}', \vec{r}'') V(\vec{r}'') \varphi_k(\vec{r}'') \end{aligned} \tag{4.5. 30}$$

n -te Näherung: (s. Abbildung (36))

$$\psi_k^{(+n)}(\vec{r}) = \varphi + GV\varphi + GVG\varphi + \dots + \underbrace{GVGVGV \dots GV}_{n\text{-mal}}\varphi + \dots \tag{4.5. 31}$$

Die erste Bornsche Näherung für die Streuamplitude lautet:

$$\begin{aligned} f_B(k', k) &= -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle \varphi_{k'} | V | \varphi_k \rangle = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3 r e^{-i\vec{k}'\vec{r}} V(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}} \\ &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3 r V(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\vec{r}} \Big|_{\vec{q}=\vec{k}'-\vec{k}} \\ &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \tilde{V}(\vec{q}) \Big|_{\vec{q}=\vec{k}'-\vec{k}} \end{aligned} \tag{4.5. 32}$$

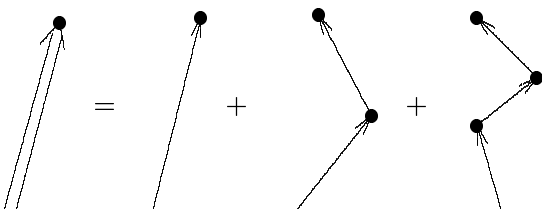
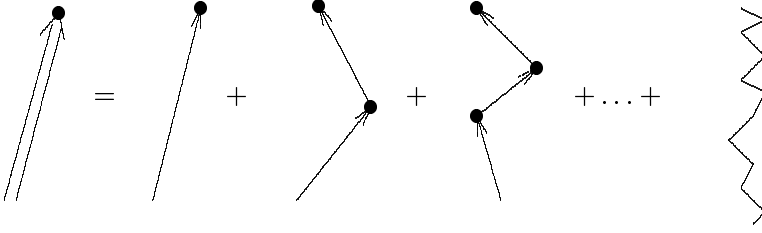


Abbildung 35: 2. Näherung

Abbildung 36: n -te Näherung

$$\begin{aligned} \vec{q}^2 &= |\vec{k}' - \vec{k}|^2 = K^2 + K'^2 - 2KK' \cos \theta \Big|_{K=K'} \\ &= 2K^2(1 - \cos \theta) = 4K^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \end{aligned} \quad (4.5. 33)$$

Beispiel: Die elastische Streuung von Elektronen am Atom. (Die Bornsche Näherung ist gerechtfertigt für schnelle Elektronen)

Der Kern des Atoms mit Z -Protonen befinde sich am Ort $\vec{r} = 0$.

Für die Elektronenverteilung $\rho(\vec{r})$ um $\vec{r} = 0$ gilt:

$$\int d^3r \rho(\vec{r}) = Z \quad (4.5. 34)$$

$$\rho_{total}(\vec{r}) = Z\delta(\vec{r}) - \rho_{el} \quad (4.5. 35)$$

$$\rho_{el}(\vec{r}) = |\psi_{el}(\vec{r})|^2 \quad (4.5. 36)$$

und für das Potential:

$$\Delta\varphi(\vec{r}) = -4\pi e \rho_{total}(\vec{r}) = -4\pi e (Z\delta(\vec{r}) - \rho(\vec{r})) \quad (4.5. 37)$$

$$V(\vec{r}) = -e\varphi(\vec{r}) \quad (4.5. 38)$$

Wir bilden jetzt die Fourier-Transformierte von $\varphi(\vec{r})$ und $\rho(\vec{r})$:

$$\varphi(\vec{r}) = \int d^3q \frac{1}{(2\pi)^3} \tilde{\varphi}(\vec{q}) e^{i\vec{q}\vec{r}} \quad (4.5. 39)$$

$$\tilde{\varphi}(\vec{r}) = \int d^3r \varphi(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\vec{r}} \quad (4.5. 40)$$

$$\rho(\vec{r}) = \int d^3q \frac{1}{(2\pi)^3} F(\vec{q}) e^{i\vec{q}\vec{r}} \quad (4.5. 41)$$

$$\tilde{\rho}_{el}(q) = F(q) = \int d^3r \rho(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\vec{r}} \approx Z + O(q^2) \quad \text{für } q^2 \rightarrow 0 \quad (4.5. 42)$$

$$-q^2 \tilde{\varphi}(q) = -4\pi e (Z - F(q)) \quad (4.5. 43)$$

$$\tilde{V}(q) = -e\tilde{\varphi}(q) = -\frac{4\pi e^2}{q^2} (Z - F(q)) \quad (4.5. 44)$$

Die Streuamplitude lautet dann mit dem Bohr-Radius, s. Gleichung (3.5. 24):

$$f_B(k', k) = \frac{2me^2}{\hbar^2} \frac{Z - F(q)}{q^2} \Big|_{\vec{q}=\vec{k}'-\vec{k}} \quad (4.5. 45)$$

und für den differentiellen Streuquerschnitt gilt dann:

$$\frac{d\sigma^B}{d\Omega} = |f(k', k)|^2 = \frac{4m^2 e^4}{\hbar^4} \left(\frac{Z - F(q)}{q^2} \right)^2 \Big|_{\vec{q}=\vec{k}'-\vec{k}} \quad (4.5. 46)$$

$F(q)$ ist der Formfaktor.

Wenn wir $F(q)$ vergessen und $q^2 = 4K^2 \sin^2 \frac{\Theta}{2}$ einsetzen, so erhalten wir die Rutherford-Streuformel:

$$|f_B|^2 = \left(\frac{d}{d\Omega} \sigma^B \right)_{Rutherford} = \frac{m^2 Z^2 e^4}{4\hbar^2} \frac{1}{K^2} \frac{1}{\sin^4 \frac{\Theta}{2}} \quad (4.5. 47)$$

Bei $\Theta = 0$ tritt Divergenz auf.

Das entspräche der Streuung an einem reinen Coulombpotential. Tatsächlich liegt bei Atomen als elektrisch neutrale Gebilde keine solche Divergenz vor, da (s. Gleichung (4.5. 42) und Gleichung (4.5. 45)):

$$F^B(k', k) = \frac{2}{a_0} \underbrace{\frac{O(q^2)}{q^2}}_{O(1)} \quad q \rightarrow 0 \quad (4.5. 48)$$

Dagegen: Für große Θ , also $|\vec{q}| = 2K \left| \sin \frac{\Theta}{2} \right|$ groß, so gilt $F(q) \approx 0$. Dann ist die Rutherfordformel berechtigt.

Betrachte speziell das Wasserstoffatom im Grundzustand ($Z = 1$):

$$\rho(\vec{r}) = \left| \psi_{100}^{Wasserstoff}(\vec{r}) \right|^2 = \frac{1}{\pi a_0^3}, \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \quad (4.5. 49)$$

$$F(q) = \frac{1}{\left(1 + \frac{a_0^2 q^2}{4} \right)^2} \quad (4.5. 50)$$

Somit folgt:

$$\frac{d}{d\Omega} \sigma^B = \frac{\left(2 + \frac{1}{4} a_0^2 q^2 \right)^2 a_0^2}{\left(1 + \frac{1}{4} a_0^2 q^2 \right)^4} \frac{1}{4} \quad (4.5. 51)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{tot.}^B &= \int d\Omega \left(\frac{d}{d\Omega} \sigma^B \right) \\ &= \frac{\pi}{K^2} \left(\frac{7}{3} - \frac{1}{1 + a_0^2 K^2} - \frac{1}{(1 + a_0^2 K^2)^2} - \frac{1}{3} \frac{1}{(1 + a_0^2 K^2)^3} \right) \end{aligned} \quad (4.5. 52)$$

Es gilt dann für die Streulänge:

$$a^B = a_0 f^B \quad (4.5. 53)$$

$$\lim_{K \rightarrow 0} \sigma_{tot.}^B = 4\pi a_0^2 \quad (4.5. 54)$$

4.6 Komplexe Streuungen, Abstrakte Formulierungen

Wir hatten bisher: die Streuung eines Teilchens an einem starren Potential, damit haben wir aber auch den Fall:

- a) Elastische Streuung zweier Teilchen aneinander erledigt.

Denn, wie wir schon gesehen hatten, können wir das Zweiteilchenproblem

$$H = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \quad (4.6. 1)$$

auf ein Einteilchenproblem reduzieren. (Einführung von Relativ- und Schwerpunktskoordinaten und Separation des Problems.)

Im allgemeinen haben aber Teilchen innere Freiheitsgrade:

1. Elementarteilchen: innerer Freiheitsgrad **Spin** (s. Kapitel(6))
2. Komplexe Teilchen: Atome, Ionen und Kerne, sie bestehen aus Elementarteilchen; Möglichkeit in angeregten Zuständen zu existieren; innere Quantenzahl (z.B. $|nlm\rangle$ für Atome)

Im allgemeinen lassen sich drei Arten von Streuung unterscheiden:

1. Elastische Streuung: $A + B \rightarrow A + B$ Streuung von A an B , ohne daß sich die inneren Quantenzahlen ändern (Beispiel: Potentialstreuung, Elektronenstreuung am Atom, ohne daß das Atom angeregt wird).
2. Inelastische Streuung: $A + B \rightarrow A' + B'$ Streuung von A an B , wobei innere Anregungen auftreten können (Beispiel: Atom geht in einen angeregten Zustand über).
3. Reaktion: $A + B \rightarrow C + D + (E + \dots)$ A und B gehen in zwei andere Teilchen über (z.B. $\pi_{Meson}^- + \text{Proton} \rightarrow \pi_{Meson}^0 + \text{Neutron}$).

Im allgemeinen ist also die Wechselwirkung zwischen zwei Teilchen in solche Übergänge wie unter (2) und (3) zu beschreiben.

4.6.1 Verallgemeinerung unserer Beschreibung

$|\psi_a^{(+)}\rangle$ ist der Streuzustand; a charakterisiert den Ausgangszustand vor der Streuung mit der Energie E_a .

($|\psi_a^{(+)}\rangle$ geht in $|\psi_k^{(+)}\rangle$ über, wenn der Impuls $\hbar\vec{k}$ zur Beschreibung ausreicht.)

$|\varphi_a\rangle$ ist der Zustand ohne Wechselwirkung ($|\varphi_a\rangle$ geht in $|\varphi_k\rangle$ (ebene Welle) über, wenn k ausreicht.)

Der Hamiltonoperator lautet dann:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \quad (4.6. 2)$$

(V beschreibt die Wechselwirkung)

$$H|\psi_a^{(+)}\rangle = E_a|\psi_a^{(+)}\rangle \quad (4.6. 3)$$

E_a im Kontinuum ($E_a \rightarrow E_k = \frac{\hbar^2 K^2}{2m}$ für die Potentialstreuung).

$$H_0|\varphi_a\rangle = E_a|\varphi_a\rangle \quad (4.6. 4)$$

Somit lautet die Integralgleichung für $|\psi_a\rangle$ (Lippmann-Schwinger-Gleichung):

$$|\psi_a^{(+)}\rangle = |\varphi_a\rangle + \frac{1}{E_a + i\delta - H_0} V |\psi_a^{(+)}\rangle \quad (4.6. 5)$$

Beweis:

$$(H_0 - E_a)|\psi_a^{(+)}\rangle = \underbrace{(H_0 - E_a)|\varphi_a\rangle}_{=0} - V|\psi_a^{(+)}\rangle \quad (4.6. 6)$$

Der Operator $\frac{1}{E_a + i\delta - H_0}$ entspricht der Greenschen Funktion bei der Potentialstreuung.

Definition 4.6.1: Die Green'sche Funktion:

$$G_a^{(+)} = \frac{1}{E_a + i\delta - H_0} \quad (4.6. 7)$$

Rechtfertigung: Aus der Potentialstreuung wissen wir:

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \quad \text{mit } H_0|\vec{q}\rangle = \frac{\hbar^2\vec{q}^2}{2m}|\vec{q}\rangle \quad (4.6. 8)$$

$$E_a = \frac{\hbar^2 K^2}{2m} \quad (4.6. 9)$$

In der Ortsdarstellung gilt:

$$\langle \vec{r}|\psi_a^{(+)}\rangle = \langle \vec{r}|\varphi_a\rangle + \int d^3 r' \langle \vec{r}|\frac{1}{E_a + i\delta - H_0}V|\vec{r}'\rangle \langle \vec{r}'|\psi_a^{(+)}\rangle \quad (4.6. 10)$$

$$\psi_a^{(+)}(\vec{r}) = \varphi_a(\vec{r}) + \int d^3 r' G_a(\vec{r}, \vec{r}')V(\vec{r}')\psi_a^{(+)}(\vec{r}') \quad (4.6. 11)$$

Gesucht ist jetzt $G_a(\vec{r}, \vec{r}')$:

$$\begin{aligned} G_a(\vec{r}, \vec{r}') &= \langle \vec{r}|\frac{1}{E_a + i\delta - H_0}|\vec{r}'\rangle = \int d^3 q \langle \vec{r}|\frac{1}{E_a + i\delta - H_0}|q\rangle \langle q|\vec{r}'\rangle \\ &= \int d^3 q \langle \vec{r}|q\rangle \frac{1}{\frac{\hbar^2 K^2}{2m} - \frac{\hbar^2 q^2}{2m} + i\delta} \langle q|\vec{r}'\rangle = \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3 q \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{e^{iq(\vec{r}-\vec{r}')}}{K^2 + i\delta - q^2} \end{aligned} \quad (4.6. 12)$$

Gleichung (4.6. 12) entspricht unserer alten Definition.

5 Stationäre Näherungsverfahren

Nur wenige Probleme der Quantenmechanik können exakt gelöst werden. In den meisten Fällen von praktischer Bedeutung sind wir auf Näherungsverfahren angewiesen. Wir wollen uns in diesem Kapitel mit der angenäherten Berechnung von Energieeigenwerten und den zugehörigen stationären Zuständen beschäftigen. Diese Verfahren sind in erster Linie wichtig bei der Deutung der Feinstruktur von Spektren in der Atom-, Molekül- und Kernphysik. Wir haben schon im vorherigen Abschnitt 4.3 die Bornsche Näherung in der Streutheorie kennengelernt. Das werden wir später nochmals aufgreifen in einem allgemeinen Kapitel über die *Theorie der Quantenübergänge* (s. Kapitel 7), wo wir einen zeitabhängigen Formalismus kennenlernen werden.

5.1 Rayleigh-Schrödinger Störungsentwicklung, nichtentarteter Fall

Wir nehmen an, daß der zeitunabhängige Hamiltonoperator H unseres Systems aufgespalten werden kann:

$$H = H_0 + V \quad (5.1. 1)$$

Dabei sei H_0 vollkommen bekannt, d.h. wir kennen die Eigenwerte und Eigenzustände. V sei eine kleine Störung der Form:

$$V = \lambda W \quad (5.1. 2)$$

λ sei ein reeller Parameter (Kopplungskonstante), W sei ein hermitescher Operator.

Für das Spektrum von H_0 gilt:

$$H_0|E_i^0, \alpha\rangle = E_i^0|E_i^0, \alpha\rangle \quad (5.1. 3)$$

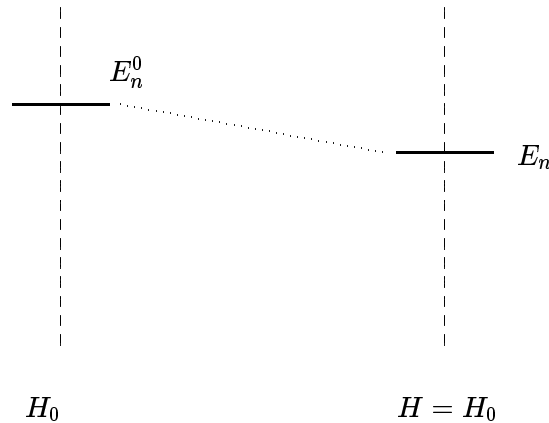


Abbildung 37:

Die Quantenzahl α soll zwischen den verschiedenen Zuständen unterscheiden, die bezüglich H_0 entartet sind, z.B. H -Atom:

$$H_0 |n \underbrace{lm}_{\alpha} \rangle = E_n |n \underbrace{lm}_{\alpha} \rangle \quad (5.1. 4)$$

Das Spektrum von H wird stetig mit λ variieren, so daß für $\lambda = 0$ die Spektren von H und H_0 zusammenfallen.

Wenn das Spektrum von H_0 entartet ist, so tritt beim Einschalten der Störung V meistens eine Aufhebung der Entartung ein (Aufspaltung des Energieniveaus). (s. Abbildung (37)) Das ist unmittelbar verständlich. Entartungen hängen immer mit Symmetrien zusammen, z.B. atomare Energieeigenwerte hängen nicht ab von der magnetischen Quantenzahl m wegen der Rotationssymmetrie. Beim Einschalten einer Störung, die einen geringeren Symmetriegrad als H_0 besitzt, erwarten wir dabei zumindest eine teilweise Aufspaltung, da der reelle Hamiltonoperator geringe Symmetrie besitzt.

Betrachte zunächst ein diskretes, nichtentartetes Niveau E_n^0 . Es gilt also:

$$(H_0 - E_n^0) |E_n^0 \rangle = 0 \quad (5.1. 5)$$

Da $|E_n^0 \rangle$ einfach, ist eine weitere Quantenzahl α zur Charakterisierung überflüssig. E_n^0 und $|E_n^0 \rangle$ sind bekannt.

Gesucht wird jetzt:

$$(H - E_n) |E_n \rangle = 0 \quad (5.1. 6)$$

so daß gilt:

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} E_n = E_n^0 \quad (5.1. 7)$$

und

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} |E_n \rangle = |E_n^0 \rangle \quad (5.1. 8)$$

$$\begin{aligned} 0 &= \langle E_n^0 | H - E_n | E_n \rangle = \langle E_n^0 | H_0 + V - E_n | E_n \rangle = \langle E_n^0 | E_n^0 - E_n + V | E_n \rangle \\ &= (E_n^0 - E_n) \langle E_n^0 | E_n \rangle + \langle E_n^0 | V | E_n \rangle \end{aligned} \quad (5.1. 9)$$

$$\Delta E_n = E_n - E_n^0 = \frac{\langle E_n^0 | V | E_n \rangle}{\langle E_n^0 | E_n \rangle} \quad (5.1. 10)$$

Der Projektionsoperator lautet hier:

$$P_n = |E_n^0 \rangle \langle E_n^0| \quad (5.1. 11)$$

mit

$$H_0 P_n = E_n^0 |E_n^0\rangle \langle E_n^0| = E_n^0 P_n = P_n E_n^0 = P_n H_0 \quad (5.1. 12)$$

Es gilt:

$$Q_n = 1 - P_n \quad (5.1. 13)$$

mit

$$Q_n(H_0 - E_n^0) = H_0 - E_n^0 - P_n(H_0 - E_n^0) = H_0 - E_n^0 \quad (5.1. 14)$$

Schreibe für Gleichung (5.1. 6):

$$(H_0 - E_n^0)|E_n\rangle = (\Delta E_n - V)|E_n\rangle \quad (5.1. 15)$$

Multiplikation mit Q_n liefert:

$$(H_0 - E_n^0)|E_n\rangle = Q_n(\Delta E_n - V)|E_n\rangle \quad (5.1. 16)$$

Für den Anfang gilt:

$$|E_n\rangle = |E_n^0\rangle + \frac{Q_n}{H_0 - E_n^0}(\Delta E_n - V)|E_n\rangle \quad (5.1. 17)$$

Dies ist äquivalent mit Gleichung (5.1. 16), so daß $\lim_{\lambda \rightarrow 0} |E_n\rangle = |E_n^0\rangle$.

$$\frac{Q_n}{H_0 - E_n^0} = \sum_{m \neq n} \frac{|E_m^0\rangle \langle E_m^0|}{E_m^0 - E_n^0} \quad (5.1. 18)$$

Gleichung (5.1. 18) ist nichtsingulär, da wir Entartung ausgeschlossen hatten.

Da gilt:

$$\langle E_n^0 | Q_n = \langle E_n^0 | (1 - |E_n^0\rangle \langle E_n^0|) = 0 \quad (5.1. 19)$$

folgt, wegen $\langle E_n^0 | E_n^0 \rangle = 1$ (Normierung):

$$\langle E_n^0 | E_n \rangle = \langle E_n^0 | E_n^0 \rangle = 1 \quad (5.1. 20)$$

$|E_n\rangle$ ist daher noch nicht richtig normiert, nicht auf eins normiert. Gleichung (5.1. 20) in Gleichung (5.1. 10) eingesetzt liefert:

$$\Delta E_n = \langle E_n^0 | V | E_n \rangle \quad (5.1. 21)$$

Setzen wir Gleichung (5.1. 17) in Gleichung (5.1. 21) ein, so folgt:

$$\Delta E_n = \underbrace{\langle E_n^0 | V | E_n^0 \rangle}_{O(\lambda)} + \underbrace{\langle E_n^0 | V \frac{Q_n}{H_0 - E_n^0} (\Delta E_n - V) | E_n \rangle}_{O(\lambda^2)} \quad (5.1. 22)$$

Für die erste Ordnung in λ (bzw. V) gilt:

$$\Delta E_n^{(1)} = \langle E_n^0 | V | E_n^0 \rangle \quad (5.1. 23)$$

Dies ist der Erwartungswert der Störung zwischen den ungestörten Zuständen.

Da $Q_n |E_n^0\rangle = 0$ gilt:

$$|E_n\rangle^{(1)} = |E_n^0\rangle + \frac{Q_n}{H_0 - E_n^0} (\Delta E_n^{(1)} - V) |E_n^0\rangle \quad (5.1. 24)$$

$$|E_n\rangle^{(1)} = \left(1 + \frac{Q_n}{E_n^0 - H_0} V \right) |E_n^0\rangle \quad (5.1. 25)$$

Indem man Gleichung (5.1. 25) in Gleichung (5.1. 23) einsetzt, erhält man $|E_n\rangle^{(2)}$ und sukzessive weiter.

Somit gilt für die k -te Näherung von ΔE_n :

$$\Delta E_n^{(k)} = \langle E_n^0 | V | E_n \rangle^{(k-1)} \quad (5.1. 26)$$

Für die zweite Ordnung gilt:

$$\begin{aligned} \Delta E_n^{(2)} &= \langle E_n^0 | V | E_n \rangle^{(1)} \\ &= \langle E_n^0 | V | E_n^0 \rangle + \langle E_n^0 | V \frac{Q_n}{E_n^0 - H_0} V | E_n^0 \rangle \\ &= \Delta E_n^{(1)} + \sum_{m(\neq n)} \frac{\langle E_n^0 | V | E_m^0 \rangle \langle E_m^0 | V | E_n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0} \\ &= \Delta E_n^{(1)} + \sum_{m(\neq n)} \frac{|\langle E_n^0 | V | E_m^0 \rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0} \end{aligned} \quad (5.1. 27)$$

Für den Einfluß von E_m^0 auf E_n^0 gilt:

$$\left. \begin{array}{l} E_m^0 > E_n^0 \quad \text{Absenkung} \\ E_m^0 < E_n^0 \quad \text{Erhöhung} \end{array} \right\} \Rightarrow \quad (5.1. 28)$$

Niveau-Abstoßung (das Spektrum zieht sich auseinander)

Die Berechnung von höheren Näherungen ist möglich, aber praktisch nicht von allzu großem Interesse. Die zweite Näherung ist jedoch besonders wichtig, wenn die erste Näherung verschwindet, was häufig passiert: Die Störung hat dann kein Diagonalelement im Zustand $|E_n^0\rangle$.

Speziell gilt für den Grundzustand: mit $E_1^0 < E_m^0$ ($m = 2, 3, \dots$)

$$\Delta E_n^{(2)} - \Delta E_n^{(1)} = \sum_{m(\neq n)} \frac{|\langle E_1^0 | V | E_m^0 \rangle|^2}{E_1^0 - E_m^0} < 0 \quad (5.1. 29)$$

d.h. Absenkung in zweiter Näherung für den Grundzustand.

Konvergenz: Im allgemeinen läßt sich über die Konvergenz der Entwicklung wenig sagen. Ein Maß für die Güte der Näherung ist jedoch die Überlappung des Zustandes $|E_n\rangle^{(1)}$ mit dem ungestörten Zustand $|E_m^0\rangle$ ($m \neq n$):

$$\langle E_m^0 | E_n \rangle^{(1)} = \langle E_m^0 | \frac{Q_n}{E_n^0 - H_0} V | E_n^0 \rangle = \frac{\langle E_m^0 | V | E_n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0} \quad (5.1. 30)$$

Somit lautet die notwendige Bedingung für die Konvergenz:

$$\left| \frac{\langle E_m^0 | V | E_n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0} \right| \ll 1 \quad (5.1. 31)$$

Beispiel: Grundzustand des Heliumatoms, bzw. von Z -2-fach ionisierten Atomen ($\text{Li}^+, \text{Be}^{++}, \dots$).

$$H = \underbrace{\frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2}}_{H_0} + \underbrace{\frac{e^2}{r_{12}}}_V \quad (5.1. 32)$$

$Z = 2$ für He. $r_1 = |\vec{r}_1|$, $r_2 = |\vec{r}_2|$, $r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$.

Dieses Drei-Körperproblem (Kern + zwei Elektronen) ist nicht exakt lösbar. Sei V die Störung, dann beschreibt H_0 das Wasserstoffproblem für zwei nichtwechselwirkende Elektronen. Für den Grundzustand gilt:

$$E_1 = -2Z^2 \frac{me^4}{2\hbar^2} = 2Z^2 R(\text{ydberg}) = -2Z^2 \cdot 13,6 \text{ eV} \quad (5.1. 33)$$

Für die Wellenfunktion folgt:

$$|E_1^0\rangle \rightarrow \varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\pi a^3} e^{-\frac{1}{a}(r_1+r_2)}, \quad a = \frac{a_0}{Z} = \frac{\hbar^2}{Zme^2} \quad (5.1.34)$$

Für die Störung in erster Ordnung gilt:

$$\begin{aligned} \Delta E_1^{(1)} &= \langle E_1^0 | V | E_1^0 \rangle = (\pi a^3)^{-2} \int d^3 \vec{r}_1 d^3 \vec{r}_2 e^{-\frac{2}{a}(r_1+r_2)} \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \\ &= \frac{8e^2}{a} \int_0^\infty dr_1 r_1^2 e^{-2(r_1+r_2)} \int_0^\pi \frac{\sin \Theta d\Theta}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \Theta}} \\ &= \frac{8e^2}{a} \int_0^\infty dr_1 r_1 \int_0^\infty dr_2 r_2 e^{-2(r_1+r_2)} \left(\sqrt{(r_1+r_2)^2} - \sqrt{(r_1-r_2)^2} \right) \\ &= \frac{16e^2}{a} 2 \int_0^\infty dr_1 r_1^2 e^{-2r_1} \int_{r_1}^\infty dr_2 r_2 e^{-2r_2} = \frac{5}{8} \frac{e^2}{a} = \frac{5}{3} \frac{Zme^4}{2\hbar^2} = \frac{5}{4} ZR \end{aligned} \quad (5.1.35)$$

Ein Vergleich von Gleichung (5.1.33) und Gleichung (5.1.35) liefert für Helium ($Z = 1$):

$$E_1^0 = -108,8 \text{ eV} \quad (5.1.36)$$

$$\Delta E_1^{(1)} = 34 \text{ eV} \quad (5.1.37)$$

$$E_1^{(1)} = -74,8 \text{ eV} \quad \text{in erster Ordnung} \quad (5.1.38)$$

$$E_1^{exp.} = -78,6 \text{ eV} \quad (5.1.39)$$

Die Annäherung an das experimentelle Ergebnis ist schon recht gut.

5.2 Störungsrechnung im Falle von Entartung bzw. Fastentartung

Wenn die Bedingung:

$$\left| \langle E_m^0 | V | E_n^0 \rangle \right| \ll \left| E_n^0 - E_m^0 \right| \begin{cases} = 0 & \text{entartet} \\ \ll 1 & \text{fast entartet} \end{cases} \quad (5.2.1)$$

nicht erfüllt ist, ist die Störungstheorie im allgemeinen nicht anwendbar. Wir können jedoch im folgenden Spezialfall die Störungsentwicklung modifizieren. Das Spektrum von H_0 zerfalle in Gruppen von endlich vielen dicht beieinander liegenden Niveaus, während die Gruppen sehr weit auseinander liegen. (s. Abbildung (38))

Für das H_0 -Spektrum gilt E_{Kn}^0 , mit $|E_{Kn}^0\rangle$, dabei sei K der Gruppenindex und $n = 1, 2, \dots, g_K$ durchlaufe die g_K Niveaus einer Gruppe.

Wir sprechen dann von Fastentartung. Dieser Fall umfaßt den Fall der Entartung. Dann ist g_K der Entartungsgrad und alle E_{Kn}^0 zu festen K sind gleich.

Beispiel: Für das Wasserstoffatom gilt E_n mit $|nlm\rangle$ und somit ist die Entartung n^2 -fach.

Die Störung sei klein im Vergleich zu dem Abstand zweier benachbarter Gruppen.

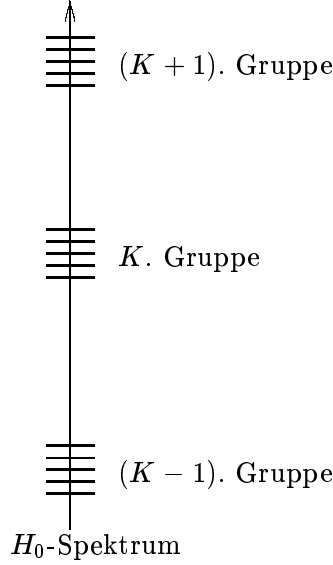
Der Projektionsoperator:

$$P_K = \sum_{n=1}^{g_K} P_{Kn} = \sum_{n=1}^{g_K} |E_{Kn}^0\rangle \langle E_{Kn}^0| \quad (5.2.2)$$

projiziert auf die K -te Gruppe, bzw. den zugehörigen Unterraum des Gesamthilbertraumes.

Wegen der Vollständigkeit von H_0 gilt:

$$1 = \sum_K P_K \quad (5.2.3)$$

Abbildung 38: H_0 -Spektrum

V lässt sich zerlegen wie folgt:

$$V = 1 \cdot V \cdot 1 = \sum_{KK'} P_K V P_{K'} = \sum_K P_K V P_K + \sum_{K \neq K'} P_K V P_{K'} = V_0 + V' \quad (5.2. 4)$$

V_0 verknüpft nur Zustände innerhalb einer Gruppe miteinander, während V' nur Zustände aus verschiedenen Gruppen verknüpft. V' kann daher wie im Abschnitt(5.1) störungstheoretisch behandelt werden, da es verschiedene Gruppen miteinander verknüpft, und die Energieniveaus $\frac{1}{E_{K_n} - E_{K'_n}}$ ($K \neq K'$) groß sind.

V_0 dagegen ist relativ groß, da die entsprechenden Energieniveaus zwei Energien der gleichen Gruppe umfassen, deren Abstand klein ist.

Da V_0 jedoch nur innerhalb einer Gruppe wirkt, können wir $H_0 + V_0$ nach der Matrixmethode in jedem Unterraum (Gruppe) mit der Dimension g_K diagonalisieren.

Betrachte:

$$H_1 = H_0 + V_0 \quad (5.2. 5)$$

$$H_0 |E_{K_n}^0\rangle = E_{K_n}^0 |E_{K_n}^0\rangle \quad (5.2. 6)$$

$$\langle E_{K'_n}^0 | V_0 | E_{K_n}^0 \rangle = \langle E_{K'_n}^0 | P_K V P_K | E_{K_n}^0 \rangle = \delta_{KK'} \langle E_{K_n}^0 | V | E_{K_n}^0 \rangle \quad (5.2. 7)$$

Die Eigenzustände von H_1 können also als Linearkombination der Zustände $|E_{K_n}^0\rangle$ aus jeweils einer Gruppe aufgebaut werden.

$$H_1 |E_K^{(1)}\rangle = E_K^{(1)} |E_K^{(1)}\rangle \quad (5.2. 8)$$

$$|E_K^{(1)}\rangle = \sum_{n=1}^{g_K} a_n^K |E_{K_n}^0\rangle \quad (5.2. 9)$$

$$\langle E_{K_n}^0 | E_K^{(1)} \rangle = a_n^K \quad (5.2. 10)$$

$$\begin{aligned} E_K^{(1)} a_n^K &= \langle E_{K_n}^0 | E_K^{(1)} | E_K^{(1)} \rangle \\ &= \langle E_{K_n}^0 | \left(H_0 + \sum_{K'} P_{K'} V P_{K'} \right) \sum_{m=1}^{g_K} a_m^K |E_{K_m}^0\rangle \\ &= E_{K_n}^0 a_n^K + \sum_{m=1}^{g_K} \langle E_{K_n}^0 | V | E_{K_m}^0 \rangle a_m^K \end{aligned} \quad (5.2. 11)$$

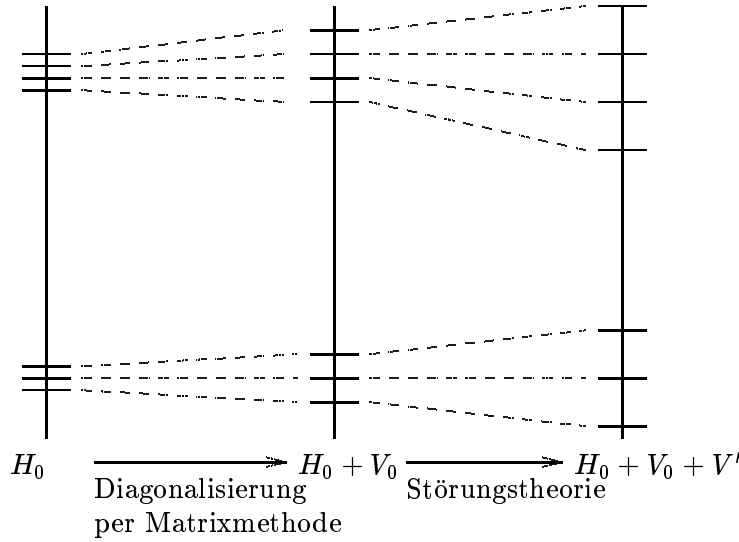


Abbildung 39: Aufspaltung des H_0 -Spektrums

Die Lösungsbedingung für das lineare Gleichungssystem (5.2. 11) lautet:

$$\det \left(\langle E_{Kn}^0 | V | E_{Km}^0 \rangle + \delta_{nm} \left(E_{Kn}^0 - E_K^{(1)} \right) \right) = 0 \quad (5.2. 12)$$

Diese Gleichung G_K -ten Grades in $E_K^{(1)}$ liefert g_K Lösungen: $E_{Kn}^{(1)}$ mit den Zuständen $|E_{Kn}^{(1)}\rangle$, so daß gilt:

$$H_1 |E_{Kn}^{(1)}\rangle = E_{Kn}^{(1)} |E_{Kn}^{(1)}\rangle \quad (5.2. 13)$$

Damit ist H_1 diagonalisiert. Wir können dann die Reststörung V' störungstheoretisch behandeln.

$$H = H_1 + V' \quad (5.2. 14)$$

Aus:

$$\langle E_{Kn}^{(1)} | V' | E_{Km}^{(1)} \rangle = \sum_{K' \neq K''} \langle E_{Kn}^{(1)} | P_{K'} V P_{K''} | E_{Km}^{(1)} \rangle = 0 \quad (5.2. 15)$$

folgt, da $K' \neq K''$, nur eine Korrektur zweiter Ordnung:

$$E_{Kn}^{(2)} = E_{Kn}^{(1)} + \sum_{K'(\neq K), n'} \frac{|\langle E_{K'n'}^{(1)} | V' | E_{Kn}^{(1)} \rangle|^2}{E_{Kn}^{(1)} - E_{k'n'}^{(1)}} \quad (5.2. 16)$$

Zum Schema siehe Abbildung (39).

Beispiel: Der Starkeffekt am H -Atom mit elektrischen Feld in z -Richtung:

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r} \quad (5.2. 17)$$

$$V = -eFz = -eFr \cos \Theta \quad (5.2. 18)$$

Dies ist die potentielle Energie im elektrischen Feld, mit $\vec{F} = (0, 0, F)$ und F sehr klein.

$$\langle \vec{r} | nlm \rangle = \psi_{nlm}(\vec{r}) = f_{nl}(r) Y_{lm}(\Theta, \varphi) \quad (5.2. 19)$$

Wegen $V(\vec{r}) = -V(-\vec{r})$ folgt mit Gleichung (5.2. 19):

$$\psi_{nlm}(\vec{r}) = (-1)^l \psi_{nlm}(-\vec{r}) \quad (5.2. 20)$$

$$\begin{aligned}
\langle nlm|V|n'l'm' \rangle &= \int d^3r \psi_{nlm}^*(\vec{r}) V(\vec{r}) \psi_{n'l'm'}(\vec{r}) \\
&= - \int d^3r (-1)^l \psi_{nlm}^*(-\vec{r}) V(-\vec{r}) \psi_{n'l'm'}(-\vec{r}) \\
&= (-1)^{l+l'+1} \delta_{mm'} + \int d^3r \psi_{nlm}^*(\vec{r}) V(\vec{r}) \psi_{n'l'm'}(\vec{r}) \tag{5.2. 21}
\end{aligned}$$

$$= 0 \quad \text{wenn } l, l' \text{ beide gerade, bzw. ungerade} \tag{5.2. 22}$$

$$= 0 \quad \text{wenn } m \neq m' \text{ da } V(\vec{r}) \text{ unabhängig vom Azimut } \varphi \tag{5.2. 23}$$

Grundzustand: Da $|100\rangle$ nichtentartet ist, folgt:

$$\langle 100|V|100\rangle = 0 \rightarrow (\Delta E)_{\text{Grundzust.}} = O(F^2) \quad \text{quadratischer Starkeffekt} \tag{5.2. 24}$$

Der zweite Eigenwert $E_2^0 = -\frac{R}{4}$ ist vierfach entartet. Für die Zustände gilt:

$$\begin{aligned}
\psi_{200}(\vec{r}) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{1}{(2a_0)^{\frac{3}{2}}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}} = \varphi_1 \\
\psi_{210}(\vec{r}) &= -\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \Theta \frac{1}{\sqrt{24a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} = \varphi_2 \\
\psi_{211}(\vec{r}) &= \dots = \varphi_3 \\
\psi_{21-1}(\vec{r}) &= \dots = \varphi_4
\end{aligned}$$

Wegen der Entartung müssen wir erst in diesem Unterraum $H_0 + V$ diagonalisieren, bevor wir per Störungstheorie Korrekturen durch Beimischung anderer Zustände mit $n = 1, 3, 4, \dots$ vornehmen können.

$$V_{mn} = \langle \varphi_m | V | \varphi_n \rangle = \begin{pmatrix} 0 & V_{12} & 0 & 0 \\ V_{21} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{5.2. 25}$$

$$V_{12} = \langle \varphi_1 | V | \varphi_2 \rangle = \frac{eF}{8a_0^4} \int_0^\infty dr r^4 \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{a_0}} \int d\Omega \frac{1}{4\pi} \cos^2 \Theta \tag{5.2. 26}$$

Mit:

$$\int d\Omega \frac{1}{4\pi} \cos^2 \Theta = \frac{1}{2} \int_0^\pi d\Theta \sin \Theta \cos^2 \Theta = \frac{1}{3} \tag{5.2. 27}$$

folgt für Gleichung (5.2. 26):

$$= \frac{1}{24} eF a_0 \int_0^\infty dx x^4 (2-x) e^{-x} = -3eF a_0 = V_{21} \tag{5.2. 28}$$

$$0 = \det \left(V_{mn} + \delta_{mn} (E_2^{(0)} - \underbrace{E_2^{(1)}}_{=\varepsilon}) \right) \tag{5.2. 29}$$

$$0 = \begin{vmatrix} E_2^{(0)} - \varepsilon & -3eF a_0 \\ -3eF a_0 & E_2^{(0)} - \varepsilon \end{vmatrix} \tag{5.2. 30}$$

$$\varepsilon_1 = E_2^{(0)} + 3eF a_0 \tag{5.2. 31}$$

$$\varepsilon_2 = E_2^{(0)} - 3eF a_0 \tag{5.2. 32}$$

$$\varepsilon_3 = E_2^{(0)} \tag{5.2. 33}$$

$$\varepsilon_4 = E_2^{(0)} \tag{5.2. 34}$$

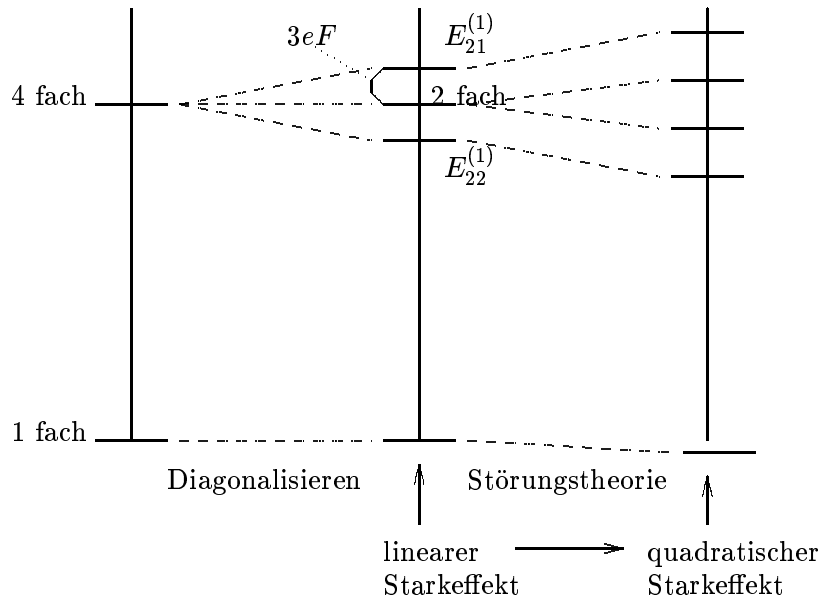


Abbildung 40:

Für die zugehörigen Zustände gilt:

$$E_{21}^{(1)} = E_2^{(0)} + 3eF a_0 \quad (5.2. 35)$$

$$E_{22}^{(1)} = E_2^{(0)} - 3eF a_0 \quad (5.2. 36)$$

$$E_{23}^{(1)} = E_{24}^{(1)} = E_2^{(0)} \quad (5.2. 37)$$

$$\varphi_1^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_1 - \varphi_2) \quad (5.2. 38)$$

$$\varphi_2^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_1 + \varphi_2) \quad (5.2. 39)$$

$$\varphi_3^{(1)} = \varphi_3 \quad (5.2. 40)$$

$$\varphi_4^{(1)} = \varphi_4 \quad (5.2. 41)$$

Zur schematischen Darstellung der Aufspaltung siehe Abbildung (40).

5.3 Variationsverfahren

Die Methode, Variationsverfahren zur angenäherten Berechnung von Energieeigenwerten und Eigenzuständen zu benutzen, beruht auf folgendem Theorem:

Theorem: Sei $|\psi\rangle$ beliebig aus dem Hilbertraum und H der Hamiltonoperator. Sei $E[\psi] = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$ der Energiemittelwert.

Jeder Zustandsvektor, für den der Mittelwert stationär ist bezüglich Variationen des Zustandsvektors, ist ein Eigenzustand von H . Der Eigenwert ist der stationäre Wert des Funktionals $E[\psi]$.

Beweis: Ausgehend von $|\psi\rangle$ betrachten wir Variationen $|\delta\psi\rangle$. Dabei haben wir $|\psi\rangle$ und $\langle\psi|$ unabhängig variiert, denn:

$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle + i|\psi_2\rangle \rightarrow \langle\psi| = \langle\psi_1| - i\langle\psi_2| \quad (5.3. 1)$$

Statt $|\psi_1\rangle$ und $|\psi_2\rangle$ als unabhängig anzusehen, können wir auch $\langle\psi|$ und $|\psi\rangle$ als unabhängig ansehen.

Die Variation liefert:

$$\delta E[\psi] = \frac{\langle \delta\psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} - \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \frac{\langle \delta\psi | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = 0 \quad (5.3. 2)$$

$$\langle \delta\psi | H | \psi \rangle = E \langle \delta\psi | \psi \rangle \quad (5.3. 3)$$

da $\langle \delta\psi |$ willkürlich, folgt:

$$H | \psi \rangle = E | \psi \rangle \quad (5.3. 4)$$

Lemma: Für jedes $|\psi\rangle$ gilt:

$$E[\psi] = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \geq E_0, \quad \text{Grundzustand} \quad (5.3. 5)$$

Beweis: Sei $H|u_n\rangle = E_n|u_n\rangle$ und $\sum_n |u_n\rangle\langle u_n| = 1$.

$$\begin{aligned} E[\psi] &= \frac{\sum_n \langle \psi | H | u_n \rangle \langle u_n | \psi \rangle}{\sum_n \langle \psi | u_n \rangle \langle u_n | \psi \rangle} \\ &= \frac{\sum_n E_n |\langle u_n | \psi \rangle|^2}{\sum_n |\langle u_n | \psi \rangle|^2} \geq \frac{\sum_n E_0 |\langle u_n | \psi \rangle|^2}{\sum_n |\langle u_n | \psi \rangle|^2} = E_0 \end{aligned} \quad (5.3. 6)$$

Anwendung: Sei $H = H_0 + V$, $H_0|\varphi_0\rangle = E_0^{(0)}|\varphi_0\rangle$, $\langle \varphi_0 | \varphi_0 \rangle = 1$.

$$E_0 \leq E[\varphi_0] = \frac{\langle \varphi_0 | H_0 + V | \varphi_0 \rangle}{\langle \varphi_0 | \varphi_0 \rangle} = E_0^{(0)} + \langle \varphi_0 | V | \varphi_0 \rangle \quad (5.3. 7)$$

D.h. der Wert, der sich in störungstheoretischer Ordnung ergibt, liegt oberhalb des exakten Wertes.

5.3.1 Variationsverfahren für den Grundzustand

Wenn der Grundzustand von H nicht exakt gefunden werden kann, so kann man von einem Ansatz $\psi = \psi(\alpha, \beta, \gamma, \dots)$ für den Grundzustand ausgehen und Parameter einbauen. Durch Aufsuchen des Minimums von $E = E(\psi(\alpha, \beta, \gamma, \dots))$ gewinnt man den bestmöglichen Wert für E_0 im Rahmen dieser Variationszustände.

Anmerkung: Dieses Verfahren eignet sich zur Bestimmung von E_0 sehr gut. Der Variationszustand $|\psi(\alpha, \beta, \gamma, \dots)\rangle$ ist jedoch nur mit Vorsicht als gute Näherung für das exakte $|\psi_0\rangle$ anzusehen.

Beispiel: Der Grundzustand des Heliumatoms.

$$H = \left(\frac{p_1^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_1} \right) + \left(\frac{p_2^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_2} \right) + \frac{e^2}{r_{12}} \quad (5.3. 8)$$

Als Grundzustandsansatz wählen wir:

$$\phi_a(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\pi a^3} e^{-\frac{1}{a}(r_1+r_2)} \quad (5.3. 9)$$

Wir wählen jedoch nicht wie bei der störungstheoretischen Rechnung $a = \frac{a_0}{Z}$ sondern setzen: $a = \frac{a_0}{Z'}$ und variieren Z' .

Rechnung:

$$\int dr_1 dr_2 |\phi_0|^2 = 1 \quad (5.3. 10)$$

$$\left\langle \frac{p_1^2}{2m} \right\rangle = \frac{1}{\pi a^3} \int d^3 r_1 e^{-\frac{r_1}{a}} \frac{-\hbar^2 \Delta}{2m} e^{-\frac{r_1}{a}} = Z'^2 R \quad (5.3. 11)$$

$$\left\langle -\frac{Ze^2}{r_1} \right\rangle = -2ZZ'R \quad (5.3.12)$$

$$\left\langle \frac{e^2}{r_{12}} \right\rangle = \frac{5}{4}Z'R \quad (5.3.13)$$

Dann gilt:

$$E(Z') = \frac{\langle \phi_{Z'} | H | \phi_{Z'} \rangle}{\langle \phi_{Z'} | \phi_{Z'} \rangle} = 2R \left(Z'^2 - 2 \left(Z - \frac{5}{16} \right) Z' \right) \quad (5.3.14)$$

Der störungstheoretische Ausdruck von $Z' = Z$ lautet:

$$E(Z) = 2R \left(-Z^2 + \frac{5}{8}Z \right) \quad (5.3.15)$$

Die Variation liefert dann:

$$\frac{\partial}{\partial Z'} E(Z') = 0 \quad (5.3.16)$$

$$Z' = Z - \frac{5}{16} \quad (5.3.17)$$

$$E_{\text{Variation}} = -2R \left(Z - \frac{5}{16} \right)^2 < E(Z) \quad (5.3.18)$$

Für $Z = 2$ gilt dann:

$$E_{\text{Störungsth.}} = -\frac{11}{2}R = -74,8 \text{ eV} \quad (5.3.19)$$

$$E_{\text{Variation}} = -2 \left(\frac{27}{16} \right)^2 R = -76,6 \text{ eV} \quad (5.3.20)$$

$$E_{\text{exp.}} = -78,6 \text{ eV} \quad (5.3.21)$$

Durch Erweiterung des Ansatzes für die Wellenfunktion mit bis zu acht Parametern kann man den experimentellen Wert beliebig genau verifizieren.

6 Spin (des Elektrons)

6.1 Spin und Spinoren

Die bisher besprochene Quantenmechanik steht in Analogie zur klassischen Mechanik. Hamiltonoperator, Impuls, Drehimpuls, etc. können wir aus der klassischen Mechanik per Korrespondenzprinzip übernehmen. Wir werden uns jetzt mit zwei Faktoren beschäftigen, die kein klassisches Analogon haben. Zunächst der Spin des Elektrons und allgemein der Spin von Elementarteilchen. Später kommt noch das Pauliprinzip hinzu.

Für ein Atom mit Z Elektronen gilt:

$$H_0 = \sum_{i=1}^Z \left(\frac{p_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_i} \right) + \sum_{i<j} \frac{e^2}{r_{ij}}, \quad r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j| \quad (6.1.1)$$

\vec{p}_i, \vec{r}_i sind der Impuls und die Koordinate des i -ten Elektrons.

Mit einem homogenen Magnetfeld gilt:

$$\vec{p}_i \rightarrow \vec{p}_i - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}_i) \quad (6.1.2)$$

mit:

$$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{1}{2}\vec{\mathcal{H}} \times \vec{r}, \quad \vec{\mathcal{H}} = \text{const} \quad (6.1. 3)$$

Der Hamiltonoperator lautet dann, wie schon behandelt:

$$H = H_0 - \frac{e}{2mc}\vec{\mathcal{H}}\vec{L} + O(\mathcal{H}^2) \quad (6.1. 4)$$

$$\vec{L} = \sum_{i=1}^Z \underbrace{\vec{L}_i}_{\text{Bahndrehimpuls}} = \sum_{i=1}^Z \vec{r}_i \times \vec{p}_i \quad \text{Gesamtdrehimpuls} \quad (6.1. 5)$$

Wir stellen uns vor, jedes Elektron besitzt ein magnetisches Moment, das Bahnmoment, mit:

$$\vec{\mu}_i = \frac{e}{2mc}\vec{L}_i \quad (6.1. 6)$$

$$\vec{M} = \frac{e}{2mc}\vec{L} \quad \text{Gesamtmoment} \quad (6.1. 7)$$

$$H = H_0 - \vec{M}\vec{\mathcal{H}} \quad (6.1. 8)$$

Da H_0 rotationsinvariant ist, gilt:

$$[H_0, L^{x,y,z}] = 0 \quad (6.1. 9)$$

$$[H_0, L^2] = 0 \quad (6.1. 10)$$

Da H_0 mit $L^z = \sum_i L_i^z$ und L^2 vertauscht, folgt:

$$|\psi\rangle = |nLM\rangle \quad (6.1. 11)$$

mit:

$$H_0|nLM\rangle = E_0^{nL}|nLM\rangle \quad (6.1. 12)$$

$$L^z|nLM\rangle = \hbar M|nLM\rangle \quad (6.1. 13)$$

$$L^2|nLM\rangle = \hbar^2 L(L+1)|nLM\rangle \quad (6.1. 14)$$

\vec{L} ist die Summe von Einzelbahndrehimpulsen, damit ergeben sich folgende mögliche L -Werte: $L = 0, 1, 2, 3, \dots$ (ganzzahlig) und mögliche M -Werte: $M = -L, -L+1, \dots, L$ für jedes L .

Jeder Eigenwert E_0^{nL} ist $(2L+1)$ -fach entartet.

Für die Eigenwerte von $H = H_0 - \frac{e}{2mc}(\vec{\mathcal{H}}\vec{L})$, mit $\vec{\mathcal{H}}$ in z -Richtung gilt:

$$E^{nLM} = E_0^{nL} + M|\vec{\mathcal{H}}|\mu_B, \quad \mu_B = -\frac{e\hbar}{2mc} > 0 \quad (6.1. 15)$$

Man erwartet:

1. Aufspaltung in $(2L+1)$ Werte (s. Abbildung (41)), Gesamtzahl $2L+1$ ungerade, da L ganzzahlig.

2.

$$\langle \Delta E \rangle = 0 \quad (6.1. 16)$$

3. Abstand benachbarter Niveaus $= \mu_B|\vec{\mathcal{H}}|$ unabhängig vom Atom.

Experimenteller Befund:

1. Wenn Z ungerade ist, dann sind alle Multipletts gerade und somit ist L halbzahlig $(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots)$.

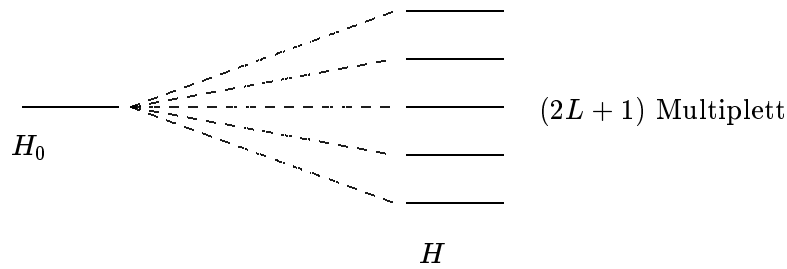


Abbildung 41: Multipllett

2. $\langle \Delta E \rangle \neq 0$ normalerweise.

3. Abstand benachbarter Niveaus = $g\mu_B|\mathcal{H}|$, g ist der Landé-Faktor, hängt vom speziellen Atom ab.

Aus (1) schließen wir, z.B. Stern-Gerlach-Experiment, daß neben dem Bahndrehimpuls, der nur ungerade Multipletts mit L ganzzahlig zuläßt, noch Eigendrehimpuls vorhanden sind, die mit einem Eigen-Magnetmoment verknüpft sind.

Bezeichnung: Der Eigendrehimpuls wird **Spin** genannt.

Der Spin des Elektrons ergibt sich automatisch aus der relativistischen Theorie des Elektrons nach Dirac (Dirac-Gleichung).

Hypothese (Uhlenbach-Goudsmit 1925):

1. Jedes Elektron besitzt einen Spin \vec{s} (inneres Bahnmoment) der Größe $\frac{\hbar}{2}$, d.h. $\vec{s} \rightarrow \vec{J}$ mit $\vec{J}^2 \Rightarrow \hbar^2 j(j+1)$, $j = \frac{1}{2}$. Wir schreiben:

$$\vec{s}^2 = \hbar^2 s(s+1), \quad s = \frac{1}{2} \quad (6.1.17)$$

$$s^z = \hbar m \quad (m = \pm \frac{1}{2}) \quad (6.1.18)$$

2. Mit dem Spin ist ein magnetisches Moment assoziiert:

$$\vec{\mu}_s = g_s \frac{e}{2mc} \vec{s} \quad (6.1.19)$$

Dabei ist:

$$g_s = \underbrace{2}_{(a)} + \underbrace{\frac{\alpha}{2\pi} + O(\alpha^2)}_{(b)} \quad (6.1.20)$$

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137} = \text{Feinstrukturkonstante} \quad (6.1.21)$$

Wobei (a) das normale Moment und (b) das anomale magnetische Moment, relativistischen Ursprungs ist.

Wir werden im folgenden $g_s = 2$ setzen.

Verallgemeinerung: Nukleonen (Protonen und Neutronen) haben ebenfalls den Spin $\frac{1}{2}$. Die zugehörigen magnetischen Momente sind im wesentlichen anomal. Alle Elementarteilchen haben diesen Spin.

1. Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$ (bzw. $\frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \text{etc.}$): Fermi-Dirac-Teilchen.
2. Teilchen mit Spin $0, 1, 2, 3, \dots$: Bose-Teilchen.

Zustände: Die Spinzustände folgen aus unseren Untersuchungen des Drehimpulses.

Mit $j = \frac{1}{2}$, $m_j = \pm\frac{1}{2}$ folgt:

$$|+\rangle = \left|\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\right\rangle \rightarrow \vec{s}^2|\pm\rangle = \hbar^2\frac{3}{4}|\pm\rangle \quad (6.1. 22)$$

$$|-\rangle = \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle \rightarrow s_z|\pm\rangle = \hbar\left(\pm\frac{1}{2}\right)|\pm\rangle \quad (6.1. 23)$$

Da $\vec{s}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2$, also $j = \frac{1}{2}$, festliegt, brauchen wir dies nicht besonders zu kennzeichnen. Nehmen wir $|\pm\rangle$ als Basis, so folgt in der Eigendarstellung für einen beliebigen Spinzustand:

$$|\psi\rangle = |+\rangle\langle +|\psi\rangle + |-\rangle\langle -|\psi\rangle = \psi_+|+\rangle + \psi_-|-\rangle \quad (6.1. 24)$$

Wir führen folgende Projektoren ein:

$$P_+ = |+\rangle\langle +| \quad (6.1. 25)$$

$$P_- = |-\rangle\langle -| \quad (6.1. 26)$$

Wir setzen $\vec{s} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$ und erhalten in der Eigendarstellung die Pauli-Matrizen:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (6.1. 27)$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (6.1. 28)$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (6.1. 29)$$

Das ist die Standarddarstellung, in der σ_z diagonal ist.

Eigenschaften:

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1 \quad (6.1. 30)$$

$$\sigma_x\sigma_y = -\sigma_y\sigma_x = i\sigma_z \quad \text{und zyklisch} \quad (6.1. 31)$$

$$\text{Spur } \sigma_{x,y,z} = 0 \quad (6.1. 32)$$

$$\det \sigma_{x,y,z} = -1 \quad (6.1. 33)$$

Antikommutator:

$$\sigma_x\sigma_y + \sigma_y\sigma_x = 0 \quad (6.1. 34)$$

$$s_x s_y + s_y s_x = 0 \quad \text{und zyklisch} \quad (6.1. 35)$$

Observable und Zustände:

1. Bahn-Observable: $\vec{r}, \vec{p}, \vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$, etc.

2. Spin-Observable: \vec{s}

Für die Vertauschungsrelationen gilt:

$$[x_i, p_j] = i\delta_{ij}\hbar \quad (\text{Korrespondenzprinzip}) \quad (6.1. 36)$$

$$[s_i, s_j] = i\varepsilon_{ijk}s_k\hbar \quad \text{Allg. Drehimpulsvert. Relation} \quad (6.1. 37)$$

Der Raum der Zustandsfunktionen setzt sich zusammen aus dem tensoriellen Produkt aus dem Hilbertraum der Bahnzustände und dem zweidimensionalen Hilbertraum der Spinzustände.

Sei $|\mu\rangle = \{|+\rangle, |-\rangle\}$ dann gilt:

$$|\vec{r}, \mu\rangle = |\vec{r}\rangle |\mu\rangle \quad (6.1. 38)$$

Für einen allgemeinen Zustand $|\psi\rangle$ folgt:

$$\psi(\vec{r}, \mu) = \langle \vec{r}\mu | \psi \rangle = \text{Funktion von } \vec{r} = x, y, z \text{ und von } \mu = \pm \frac{1}{2} \quad (6.1. 39)$$

Wir schreiben auch:

$$\psi(\vec{r}, \pm \frac{1}{2}) = \psi_{\pm}(\vec{r}) \quad (6.1. 40)$$

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} = \psi_+(\vec{r})\alpha + \psi_-(\vec{r})\beta \quad (6.1. 41)$$

$$\alpha = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Die Zustandsfunktion $\psi(\vec{r})$ ist also zweikomponentig $\begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix}$ oder auch ein **Spinor**.

Für den Gesamtdrehimpuls gilt:

$$\vec{j} = \vec{L} + \vec{s} \quad (6.1. 42)$$

und weiterhin gilt:

$$[L_i, s_j] = 0 \quad (6.1. 43)$$

$$[L_i, L_j] = i\varepsilon_{ijk} L_k \quad (6.1. 44)$$

$$[s_i, s_j] = i\varepsilon_{ijk} s_k \quad (6.1. 45)$$

$$[j_i, j_j] = i\varepsilon_{ijk} j_k \hbar \quad (6.1. 46)$$

Die Pauli-Matrizen wirken auf die Spinoren α, β wie folgt:

$$\sigma^x \alpha = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \beta \quad (6.1. 47)$$

$$\sigma^z \alpha = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \alpha \quad (6.1. 48)$$

$$\sigma^x \beta = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \alpha \quad (6.1. 49)$$

$$\sigma^z \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} = -\beta \quad (6.1. 50)$$

etc.

6.1.1 Verallgemeinerung auf N Elektronen

Jedes Elektron i besitzt \vec{r}_i, \vec{p}_i und \vec{s}_i , so daß für die Basis gilt:

$$|\vec{r}_i, \mu_i\rangle, \quad \mu_i = \pm \frac{1}{2} \quad (6.1. 51)$$

Der Hilbertraum ist dann das Tensorprodukt von N Einteilchenhilberträumen. Der Basis-Zustand sieht dann wie folgt aus:

$$|\vec{r}_1\mu_1, \vec{r}_2\mu_2, \dots, \vec{r}_N\mu_N\rangle = |\vec{r}_1\mu_1\rangle |\vec{r}_2\mu_2\rangle \dots |\vec{r}_N\mu_N\rangle = |\vec{r}_i\mu_i\rangle \quad (6.1. 52)$$

bzw.:

$$\langle \vec{r}_i \mu_i | \psi \rangle = \psi(\vec{r}_1 \mu_1, \vec{r}_2 \mu_2, \dots, \vec{r}_N \mu_N) \quad (6.1. 53)$$

Der Gesamt-Bahndrehimpuls lautet dann:

$$\vec{L} = \sum_i \vec{L}_i = \sum_i \vec{r}_i \times \vec{p}_i \quad (6.1. 54)$$

und für den Gesamt-Spin gilt:

$$\vec{S} = \sum_i \vec{s}_i \quad (6.1. 55)$$

Somit lautet der Gesamtdrehimpuls:

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad (6.1. 56)$$

6.2 Spinabhängige Wechselwirkungen

Für ein Atom in einem schwachen Magnetfeld gilt:

$$H = H_0 - \underbrace{\frac{e}{2mc} (\vec{\mathcal{H}} \vec{L})}_{\text{Bahnmoment}} - \sum_i \underbrace{\vec{\mu}_{s_i}}_{\text{Spinmoment}} \vec{\mathcal{H}} + O(\mathcal{H}^2) \quad (6.2. 1)$$

Es gilt also:

$$H - H_0 = -\frac{e}{2mc} \vec{\mathcal{H}} (\vec{L} + 2\vec{S}) \quad \text{mit } g_s \simeq 2 \quad (6.2. 2)$$

denn:

$$\sum_i \vec{\mu}_{s_i} = g_s \frac{e}{2mc} \sum_i \vec{s}_i \simeq \frac{e}{mc} \vec{S} \quad (6.2. 3)$$

Neben dem Bahndrehimpuls \vec{L} tritt also der Spin \vec{S} zweimal auf. Daneben gibt es relativistische Korrekturen, die aus der Dirac-Gleichung folgen wie die Spin-Bahnkopplung für ein Elektron.

$$H_{S-B} = -\frac{1}{2} \vec{\mu}_s \left(\mathcal{E}_{Atom} \times \frac{\vec{v}}{c} \right) \quad (6.2. 4)$$

mit \mathcal{E} als elektrisches Feld und $\vec{v} = \frac{1}{m} \vec{p}$.

Interpretation: Vom Elektron aus gesehen bewegt sich der Kern des Atoms. Eine bewegte Ladung (Feld \mathcal{E}) erzeugt also ein Magnetfeld $\frac{\vec{v}}{c} \times \mathcal{E}$, an das das Spinmoment ankoppelt.

Der Faktor $\frac{1}{2}$ (Thomasfaktor) ist klassisch nicht zu verstehen, ergibt sich aber zwanglos aus der Dirac-Theorie.

Berücksichtigen wir nur das Feld des Kerns (und nicht der übrigen Elektronen), so folgt:

$$e\mathcal{E} = -\frac{\vec{r}}{r} \frac{d}{dr} V \quad (6.2. 5)$$

$$\mathcal{E} \times \frac{\vec{v}}{c} = -\frac{1}{ecr} \frac{d}{dr} V \left(\vec{r} \times \frac{\vec{p}}{m} \right) = -\frac{1}{emcr} \frac{d}{dr} V \vec{L} \quad (6.2. 6)$$

$$H_{Spin-Bahn} = \frac{1}{2m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} V (\vec{L}_i \vec{s}_i) \quad (6.2. 7)$$

$$H_{Spin-Bahn}^{Gesamt} = \frac{1}{2m^2 c^2} \sum_i \frac{1}{r_i} \frac{d}{dr_i} V (\vec{L}_i \vec{s}_i) \quad (6.2. 8)$$

Es folgt:

$$H = H_0 - \frac{e}{2mc} \vec{\mathcal{H}} (\vec{L} + 2\vec{S}) + H_{Spin-Bahn} + H_{rel.}^{Kin.} \quad (6.2. 9)$$

Für die relativistische Korrektur zur kinetischen Enrgie gilt:

$$\begin{aligned} H_{rel.}^{Kin.} &= \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4} - mc^2 = mc^2 \left(\sqrt{1 + \frac{p^2}{m^2 c^2}} - 1 \right) \\ &\approx mc^2 \left(\frac{1}{2} \frac{p^2}{m^2 c^2} - \frac{1}{8} \left(\frac{p^2}{m^2 c^2} \right)^2 + \dots \right) = \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3 c^2} + O\left(\frac{1}{c^4}\right) \end{aligned} \quad (6.2. 10)$$

6.3 Addition von Drehimpulsen

Das Problem eines Elektrons im Zentralfeld und äußerem Magnetfeld ist jetzt gegeben durch:

$$H = \frac{1}{2m_0} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + V(r) - \vec{\mu}_s \vec{\mathcal{H}} + H_{S-B} + H_{rel.} \quad (6.3. 1)$$

mit:

$$H_{S-B} = \frac{1}{2m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} V(\vec{L} \vec{S}) \quad (6.3. 2)$$

und:

$$H_{rel.} = -\frac{p^4}{8m^3 c^2} \quad (6.3. 3)$$

oder bei einem schwachen Magnetfeld, mit $\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{\mathcal{H}} \times \vec{r}$:

$$H = \frac{p^2}{2m_0} + V(r) - \frac{e}{2mc} \vec{\mathcal{H}} (\vec{L} + 2\vec{S}) + H_{S-B} + H_{rel.} + O(\mathcal{H}^2) \quad (6.3. 4)$$

Neben den drei Bahnquantenzahlen (z.B. nlm beim H-Atom) haben wir eine weitere Quantenzahl für den Spin: $S_z = \pm \frac{\hbar}{2}$ Projektion auf eine vorgegebene z -Achse.

Wir setzen $\vec{\mathcal{H}} = 0$:

$$H = \underbrace{\frac{p^2}{2m_0} + V(r)}_{H_0} + H_{S-B} + H_{rel.} = H_0 + H_{S-B} \quad (6.3. 5)$$

Wenn $H_{S-B} = 0$, dann vertauschen folgende Operatoren mit H :

$$L^2 \rightarrow \hbar^2 l(l+1) \quad (6.3. 6)$$

$$L_z \rightarrow \hbar m_l, \quad m_l = -l, -l+1, \dots, l \quad (6.3. 7)$$

$$S^2 \rightarrow \hbar^2 \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) = \hbar^2 \frac{3}{4} \quad (6.3. 8)$$

$$S_z \rightarrow \hbar m_s, \quad m_s = \pm \frac{1}{2} \quad (6.3. 9)$$

S^2 gibt keine interessante Quantenzahl, da $S^2 = \frac{3}{4} \hbar^2$ festliegt. Wenn $H_{S-B} \neq 0$, fällt die Quantenzahl m_l weg, denn es gilt $[H, L_z] \neq 0$, wegen $[H_{S-B}, L] \neq 0$.

Ebenso fällt m_s weg, da $[H_{S-B}, S_z] \neq 0$.

Wir haben vielmehr folgende mit H vertauschbare Operatoren:

$$\vec{L}^2 \rightarrow l(l+1) \hbar^2 \quad (6.3. 10)$$

$$\vec{S}^2 \rightarrow \frac{3}{4} \hbar^2 \quad (6.3. 11)$$

$$\vec{J}^2 \rightarrow J(J+1)\hbar^2 \quad (6.3. 12)$$

$$J_z \rightarrow M\hbar = (m_l + m_s)\hbar^2 \quad (6.3. 13)$$

Da $\vec{J}^2 = \vec{L}^2 + \vec{S}^2 + 2(\vec{L}\vec{S})$ mit H vertauschen ($[H_0, \vec{J}^2] = 0$, $[H_{S-B}, \vec{J}^2] = 0$), ist J eine gute Quantenzahl. Weiterhin vertauschen alle Komponenten J_x, J_y, J_z mit H . Da die $J_{x,y,z}$ nicht untereinander vertauschen, liefert jedenfalls J_z eine gute Quantenzahl.

Es existiert also für H, \vec{L}^2, \vec{J}^2 und J_z (und $\vec{S}^2 = \hbar^2 \frac{3}{4}$) eine gemeinsame Eigenbasis.

Wir werden also auf das Problem geführt, die Eigenzustände des Gesamtdrehimpulses $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ aufzusuchen. Verallgemeinerung:

6.3.1 Addition von $\vec{J}_1 + \vec{J}_2 = \vec{J}$

\vec{J}_1, \vec{J}_2 seien unabhängig voneinander:

$$[J_{1i}, J_{2j}] = 0 \quad (6.3. 14)$$

Die zugehörigen Eigenzustände sind:

1. $|j_1 m_1 \rangle$ mit:

$$\vec{J}_1^2 |j_1 m_1 \rangle = \hbar^2 j_1(j_1 + 1) |j_1 m_1 \rangle \quad (6.3. 15)$$

$$J_{1z} |j_1 m_1 \rangle = \hbar m_1 |j_1 m_1 \rangle \quad (6.3. 16)$$

2. $|j_2 m_2 \rangle$ mit:

$$\vec{J}_2^2 |j_2 m_2 \rangle = \hbar^2 j_2(j_2 + 1) |j_2 m_2 \rangle \quad (6.3. 17)$$

$$J_{2z} |j_2 m_2 \rangle = \hbar m_2 |j_2 m_2 \rangle \quad (6.3. 18)$$

Seien j_1, j_2 fest, dann haben wir $(2j_1 + 1)$ Zustände $|j_1 m_1 \rangle$ und $(2j_2 + 1)$ Zustände $|j_2 m_2 \rangle$. O.B.d.A. gelte $j_1 \geq j_2$. Wiederum sei der Hilbertraum das Tensorprodukt der Einzelhilberträume.

Für die Zustände gilt:

$$|j_1 m_1, j_2 m_2 \rangle = |j_1 m_1 \rangle |j_2 m_2 \rangle \quad (6.3. 19)$$

so daß:

$$\vec{J}_1^2 |j_1 m_1, j_2 m_2 \rangle = \hbar^2 j_1(j_1 + 1) |j_1 m_1, j_2 m_2 \rangle \quad (6.3. 20)$$

usw.

Dies sind offenbar auch Eigenzustände zu $J_z = J_{1z} + J_{2z}$:

$$J_z |j_1 m_1, j_2 m_2 \rangle = \hbar M |j_1 m_1, j_2 m_2 \rangle, \quad M = m_1 + m_2 \quad (6.3. 21)$$

aber im allgemeinen keine Eigenzustände von \vec{J}^2 . Die Anwendung von \vec{J}^2 führt allerdings nicht aus dem Raum der $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ -Zustände heraus, da die Komponenten $J_{x,y,z}$ nicht herausführen.

Gesucht sind die Eigenzustände zu \vec{J}^2, J_z : $|j_1 j_2 JM \rangle$ so daß gilt:

$$\vec{J}^2 |JM \rangle = \hbar^2 J(J+1) |JM \rangle \quad (6.3. 22)$$

$$J_z |JM \rangle = \hbar M |JM \rangle \quad (6.3. 23)$$

Offenbar gilt:

$$\begin{aligned} |JM \rangle &= \sum_{m_1 m_2} |j_1 m_1, j_2 m_2 \rangle \langle j_1 m_1, j_2 m_2 | JM \rangle \\ &= \sum_{m_1, m_2 (M=m_1+m_2)} C_{j_1 j_2} (JM | m_1 m_2) |j_1 m_1, j_2 m_2 \rangle \end{aligned} \quad (6.3. 24)$$

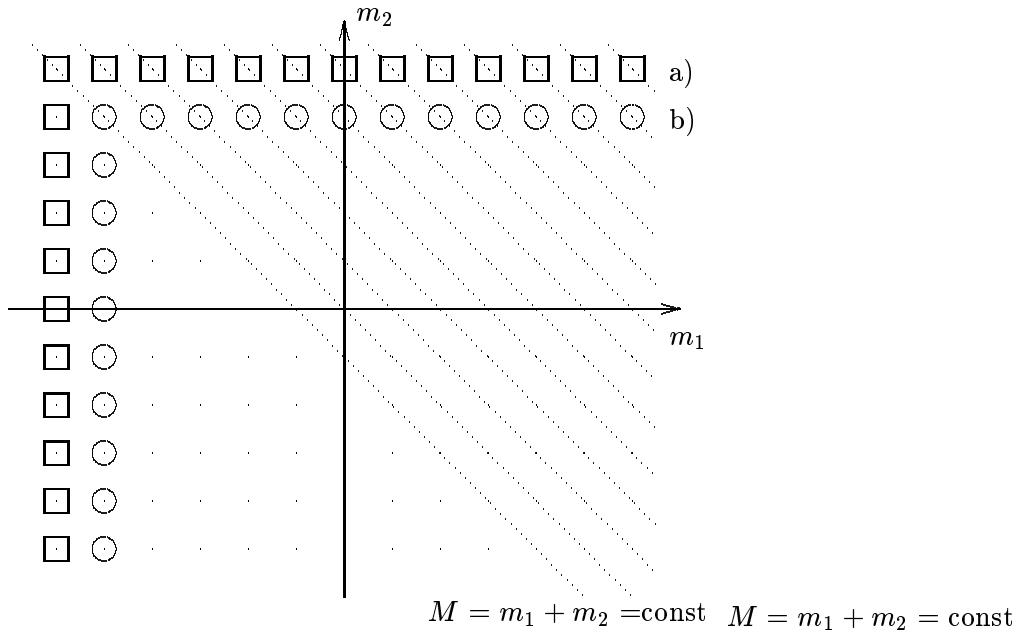


Abbildung 42:

Die $C_{j_1 j_2}(JM|m_1 m_2)$ heißen Clebsch-Gordan-Koeffizienten (tabelliert).

Anwendung von J_z auf beide Seiten liefert sofort: $M = m_1 + m_2$, andernfalls verschwindet $C_{j_1 j_2}$. Das heißt, jedes $|JM\rangle$ ist eine Linearkombination derjenigen $|j_1 m_1, j_2 m_2\rangle$ für die $m_1 + m_2 = M$ ist.

Welche Werte von J kommen jetzt in Frage?

1. Betrachte maximales $M = m_1 + m_2$:

$$M_{max} = \bar{J} = j_1 + j_2 \tag{6.3. 25}$$

Dazu gehört ein Zustand: $|j_1 j_1, j_2 j_2\rangle$ daraus folgt dann $M = j_1 + j_2$ und $\bar{J} = j_1 + j_2$, denn J^2 und J_z kommutieren, haben daher gemeinsame Eigenzustände. Da $|j_1 j_1, j_2 j_2\rangle$ einfach bezüglich J_z folgt der Eigenzustand von \bar{J}^2 .

Also:

$$|j_1 j_1, j_2 j_2\rangle = |\bar{J}, M = \bar{J}\rangle \tag{6.3. 26}$$

mit:

$$\bar{J}^2 |\bar{J}\bar{J}\rangle = (J_z^2 + J_z + J_- J_+) |\bar{J}\bar{J}\rangle \quad \text{s.G. (3.3. 11)} \tag{6.3. 27}$$

Mit $J_+ |\bar{J}\bar{J}\rangle = 0$ gilt:

$$= (J_z^2 + J_z) |\bar{J}\bar{J}\rangle = \hbar^2 \bar{J}(\bar{J} + 1) |\bar{J}\bar{J}\rangle \tag{6.3. 28}$$

In diesem maximalen $\bar{J} = j_1 + j_2$ konstruieren wir in üblicher Weise durch Anwendung des Absteigeoperators $J_- = J_{1-} + J_{2-}$ die übrigen Zustände (s. Abbildung (42)) mit:

$$\bar{J}^2 |\bar{J}M\rangle = \hbar^2 \bar{J}(\bar{J} + 1) |\bar{J}M\rangle \tag{6.3. 29}$$

$$J_z |\bar{J}M\rangle = \hbar M |\bar{J}M\rangle \tag{6.3. 30}$$

Das liefert $2\bar{J} + 1 = 2(j_1 + j_2) + 1$ Zustände.

2. Sei:

$$M = \bar{J} - 1 = j_1 + j_2 - 1 \quad (6.3. 31)$$

Dazu gehören zwei Zustände:

$$|j_1 m_1 = j_1 - 1, j_2 j_2 \rangle \quad (6.3. 32)$$

und:

$$|j_1 j_1, j_2 m_2 = j_2 - 1 \rangle \quad (6.3. 33)$$

Eine Linearkombination davon wurde bereits in (1) verbraucht nämlich $J_- |\bar{J}\bar{J}\rangle$. Die andere, dazu orthogonale $|\chi\rangle$, ist dann Eigenzustand zu \bar{J}^2 mit $J = \bar{J} - 1$, denn einerseits gilt:

$$\langle \chi | J_- | \bar{J}\bar{J} \rangle = 0 \quad (6.3. 34)$$

also folgt:

$$\langle \bar{J}\bar{J} | J_+ | \chi \rangle = 0 \quad (6.3. 35)$$

andererseits gilt:

$$J_+ | \chi \rangle = \alpha | \bar{J}\bar{J} \rangle \quad (6.3. 36)$$

Es folgt $\alpha = 0$ und damit gilt:

$$\begin{aligned} \bar{J}^2 | \chi \rangle &= (J_z^2 + J_z + J_- J_+) | \chi \rangle = \hbar^2 \left((\bar{J} - 1)^2 + \bar{J} - 1 \right) | \chi \rangle \\ &= \hbar^2 (\bar{J} - 1) \bar{J} | \chi \rangle \end{aligned} \quad (6.3. 37)$$

Somit folgt:

$$| \bar{J} - 1, \bar{J} - 1 \rangle \quad (6.3. 38)$$

Denn da $M = \bar{J} - 1$ gilt, kann J nur gleich $\bar{J} - 1$ oder \bar{J} sein. \bar{J} fällt aber aus, da alle Zustände mit $J = \bar{J}$ schon erfaßt sind.

Ausgehend von $| \bar{J} - 1, \bar{J} - 1 \rangle$ (s. Abbildung (42)) konstruieren wir mit J_- alle Zustände für die gilt:

$$\bar{J}^2 | \bar{J} - 1, M \rangle = \hbar^2 (\bar{J} - 1) (\bar{J} - 1 + 1) | \bar{J} - 1, M \rangle \quad (6.3. 39)$$

$$J_z | \bar{J} - 1, M \rangle = \hbar M | \bar{J} - 1, M \rangle \quad (6.3. 40)$$

Insgesamt bekommen wir $2(\bar{J} - 1) + 1 = 2\bar{J} - 1$ Zustände.

3. Sei $M = \bar{J} - 2$ dann erhalten wir drei Zustände:

(a)

$$m_1 = j_1, \quad m_2 = j_2 - 2 \quad (6.3. 41)$$

(b)

$$m_1 = j_1 - 1, \quad m_2 = j_2 - 1 \quad (6.3. 42)$$

(c)

$$m_1 = j_1 - 2, \quad m_2 = j_2 \quad (6.3. 43)$$

Davon sind schon zwei Linearkombinationen verbraucht, die dritte gehört zu:

$$J = \bar{J} - 2 \quad (6.3. 44)$$

Somit erhalten wir $2(\bar{J} - 2) + 1$ Zustände.

Wir sehen also, daß J die Werte $\bar{J}, \bar{J} - 1, \bar{J} - 2, \dots$ annehmen kann. Wir bezeichnen das minimale J mit \underline{J} . Offensichtlich muß gelten:

$$\sum_{J=\bar{J}}^{\underline{J}} (2J+1) = (2j_1+1)(2j_2+1) = A \quad (6.3.45)$$

$$\begin{aligned} A &= \sum_{J=0}^{\bar{J}} (2J+1) - \sum_{J=0}^{\underline{J}-1} (2J+1) \\ &= (\underline{J}+1)^2 - \underline{J}^2 = (j_1+j_2+1)^2 - \underline{J}^2 = (2j_1+1)(2j_2+1) \end{aligned} \quad (6.3.46)$$

$$\underline{J} = |j_1 - j_2| = j_1 - j_2 \quad (6.3.47)$$

da gelten soll $j_1 \geq j_2$.

Zusammenfassung:

$$|JM\rangle = \sum_{m_1+m_2=M} C_{j_1 j_2}(JM|m_1 m_2)|m_1 m_2\rangle \quad (6.3.48)$$

mit:

$$J = \begin{array}{c} j_1 + j_2 \\ j_1 + j_2 - 1 \\ \vdots \\ j_1 - j_2 \end{array} \quad (6.3.49)$$

und jeweils $(2J+1)$ -Zuständen.

Beispiel: Zwei Spin($\frac{1}{2}$)-Systeme (zwei Elektronen bzw. Nukleonen) mit den Spins:

$$\vec{s}_1, \vec{s}_2 \quad (6.3.50)$$

und den Zuständen:

$$|+1+2\rangle, |+1-2\rangle, |-1+2\rangle, |-1-2\rangle \quad (6.3.51)$$

Der Gesamttraum besteht aus vier Zuständen. Aus:

$$j_1 = j_2 = \frac{1}{2} \quad (6.3.52)$$

folgt:

$$J = 1 \quad \text{oder} \quad J = 0 \quad (6.3.53)$$

Für die Triplettzustände des Gesamtspins gilt:

$$\vec{S} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2 \quad (6.3.54)$$

$$\vec{S}^2 = \hbar^2 J(J+1) = 2\hbar^2 \quad (6.3.55)$$

Dazu gehört:

$$S_z = \hbar M \quad (6.3.56)$$

mit:

$$M = 1 \quad : \quad |J=1, M=1\rangle = |++\rangle \quad (6.3.57)$$

$$M = 0 \quad : \quad |1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle) \quad (6.3.58)$$

$$M = -1 \quad : \quad |1,-1\rangle = |--\rangle \quad (6.3.59)$$

Für den Singlett-Zustand des Gesamtspins gilt:

$$\vec{S} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2 \quad (6.3.60)$$

$$\vec{S}^2 = 0 \quad (6.3. 61)$$

Dazu gehört:

$$S_z = \hbar M = 0 \quad (6.3. 62)$$

mit:

$$|J = 0, M = 0\rangle = |0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle - |-+\rangle) \quad (6.3. 63)$$

6.4 Feinstruktur der Atome, speziell des Wasserstoffs

Schauen wir uns jetzt die Verschiebung der Energieeigenwerte im Atom durch den Spin-Bahn-Term an.

Für ein Elektron gilt:

$$H = \underbrace{\frac{p^2}{2m} + V(r)}_{H_0} - \frac{1}{2mc^2} \left(\frac{p^2}{2m} \right)^2 + \underbrace{H_{S-B}}_{s.Gleichung(6.2.7)} + \underbrace{H_{rel.}^{Kin.}}_{s.Gleichung(6.2.10)} \quad (6.4. 1)$$

H_0 vertauscht mit folgenden Operatoren $\vec{L}^2, L_z, \vec{S}^2, S_z$.

Mit H vertauschen dann die Operatoren:

$$\vec{L}^2 \rightarrow \hbar^2 l(l+1) \quad \text{Quantenzahl } l \quad (6.4. 2)$$

$$\vec{J}^2 \rightarrow \hbar^2 j(j+1) \quad \text{Quantenzahl } j \quad (6.4. 3)$$

$$J_z \rightarrow \hbar m_j \quad \text{Quantenzahl } m_j \quad (6.4. 4)$$

$$\vec{S}^2 \rightarrow \hbar^2 s(s+1) \quad \text{Quantenzahl } s \quad (6.4. 5)$$

Dann gilt für den Gesamtdrehimpuls:

$$\vec{J}^2 \rightarrow j(j+1) \quad \text{mit } j = l \pm \frac{1}{2} \quad (6.4. 6)$$

und für die Eigenzustände:

$$|\psi\rangle = |nljm_j\rangle \quad (6.4. 7)$$

Für die Energieeigenwerte folgt: H_0 liefert die Energie $E_{nl}^{(0)}$.

$$E_{nlj}^{(1)} = E_{nl}^{(0)} + \langle H_{S-B} \rangle \quad \text{Störungstheorie 1. Ordnung} \quad (6.4. 8)$$

$$\vec{L}\vec{s} = \frac{1}{2} (\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{s}^2) \rightarrow \frac{\hbar^2}{2} \left(j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right) \quad (6.4. 9)$$

Also gilt:

$$E_{nlj}^{(1)} = E_{nl}^{(0)} + \frac{\hbar^2}{(2mc)^2} \left\langle \frac{1}{r} \frac{d}{dr} V \right\rangle_{nl} \left(j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right)$$

mit:

$$j = l \pm \frac{1}{2} \\ = E_{nl}^{(0)} + \frac{\hbar^2}{(2mc)^2} \left\langle \frac{1}{r} \frac{d}{dr} V \right\rangle_{nl} \begin{cases} l & (j = l + \frac{1}{2}) \\ -(l+1) & (j = l - \frac{1}{2}) \end{cases} \quad (6.4. 10)$$

Das ist die wohlbekannte Dublettaufspaltung, z.B. der Alkaliatome, die gelbe Natriumlinie. Termcharakterisierung: $nl_j \rightarrow 1s_{\frac{1}{2}}, 2s_{\frac{1}{2}}, 2p_{\frac{1}{2}}, 2p_{\frac{3}{2}}, \text{ etc.}$

Wir betrachten speziell das H-Atom, wo wir zur Erklärung der vollen Feinstruktur auch die relativistische Korrektur der kinetischen Energie mitnehmen wollen.

Wir führen die Feinstrukturkonstante ein:

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137} \quad (6.4.11)$$

und es sei:

$$E_n^0 = -\frac{R}{n^2} = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2} = -mc^2 \frac{\alpha^2}{2n^2} \quad (6.4.12)$$

$$V = -\frac{e^2}{r} \quad (6.4.13)$$

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} V = \frac{e^2}{r^3} \quad (6.4.14)$$

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl} = \frac{1}{a_0^3} \frac{2}{l(l+1)(2l+1)n^3} \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \quad (6.4.15)$$

$$\begin{aligned} \langle H_{S-B} \rangle &= \frac{\hbar^2 e^2}{4m^2 c^2} \frac{m^3 e^6}{\hbar^6} \frac{2}{n^3 (2l+1)} \begin{cases} \frac{1}{l+1} & (j = l + \frac{1}{2}) \\ -\frac{1}{l} & (j = l - \frac{1}{2}) \end{cases} \\ &= -E_n^{(0)} \frac{\alpha^2}{n(2l+1)} \begin{cases} \frac{1}{l+1} & (j = l + \frac{1}{2}) \\ -\frac{1}{l} & (j = l - \frac{1}{2}) \end{cases} \end{aligned} \quad (6.4.16)$$

Der relativistische kinetische Energie-Korrekturterm lautet dann:

$$\langle H_{rel.}^{kin.} \rangle = -\frac{1}{2mc^2} \left\langle \left(\frac{p^2}{2m} \right)^2 \right\rangle_{nl} \quad (6.4.17)$$

Mit:

$$\frac{p^2}{2m} = H_0 + \frac{e^2}{r} + O\left(\frac{1}{c^2}\right) \quad (6.4.18)$$

$$\langle H_0 \rangle = E_n^{(0)} \quad \langle H_0^2 \rangle = E_n^{(0)2} \quad (6.4.19)$$

folgt dann:

$$\begin{aligned} &-\frac{1}{2mc^2} \left\langle H_0^2 + 2H_0 \frac{e^2}{r} + \frac{e^4}{r^2} \right\rangle \\ &= -\frac{1}{2mc^2} \left(E_n^{(0)2} + 2e^2 E_n^{(0)} \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nl} + e^4 \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_{nl} \right) \\ &= -\frac{1}{2mc^2} \left(E_n^{(0)2} + 2E_n^{(0)} \frac{e^2}{a_0 n^2} + \frac{2e^4}{a_0^2 n^3 (2l+1)} \right) \\ &= E_n^{(0)} \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{l + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \end{aligned} \quad (6.4.20)$$

Die korrekte relativistische Entwicklung der Wasserstoffeigenwerte ist dann:

$$E_{nlj} = E_{nl}^{(0)} \left(1 + \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{l + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} - \frac{n}{2l+1} \left(\frac{1}{l+1} \right) \right) \right) \begin{matrix} (j = l + \frac{1}{2}) \\ (j = l - \frac{1}{2}) \end{matrix} \quad (6.4.21)$$

Für $j = l + \frac{1}{2}$ gilt:

$$\begin{aligned} \frac{n}{l + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} - \frac{n}{(2l+1)(l+1)} &= \frac{n}{2l+1} \left(2 - \frac{1}{l+1} \right) - \frac{3}{4} \\ &= \frac{n}{l+1} - \frac{3}{4} = \frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \end{aligned} \quad (6.4.22)$$

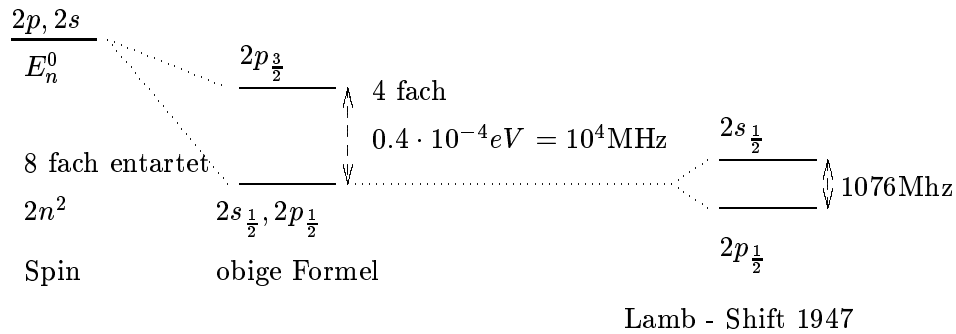


Abbildung 43: Termschema für $n = 2$

und für $j = l - \frac{1}{2}$ gilt:

$$\frac{n}{l + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} + \frac{n}{(2l + 1)l} = \frac{n}{2l + 1} \left(2 + \frac{1}{l} \right) - \frac{3}{4} = \frac{n}{l} - \frac{3}{4} = \frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \quad (6.4. 23)$$

Es gilt also:

$$E_{nlj} = E_n^{(0)} + \langle H_{S-B} \rangle + \langle H_{rel.}^{kin.} \rangle + O\left(\frac{1}{c^4}\right) \\ = E_n^{(0)} \left(1 + \underbrace{\frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right)}_{\text{Feinstruktur}} + O(\alpha^4) \right) \quad (6.4. 24)$$

Die Aufspaltung ist in Abbildung (43) dargestellt.

Die Aufspaltung des $2s_{\frac{1}{2}}, 2p_{\frac{1}{2}}$ Niveaus wird erst in der Quantenelektrodynamik klar, d.h. Wechselwirkung vom Elektron mit quantisierter Strahlung (Vakuumfluktuationen). Dies wurde 1947 von Lamb gemessen und von Bethel berechnet.

6.5 Anomaler Zeeman-Effekt, Landé-Faktor

Wir gehen von einem schwachen Magnetfeld in z -Richtung aus.

$$H = H_{\mathcal{H}=0} - \frac{e}{2mc} |\mathcal{H}| (L_z + 2S_z) = H_{\mathcal{H}=0} + \mu_B |\mathcal{H}| \underbrace{\frac{1}{\hbar} (L_z + 2S_z)}_{=J_z+S_z} \quad (6.5. 1)$$

$$H = H_0 + \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} V \underbrace{\vec{L}\vec{S}}_{=\frac{1}{2}(J^2-L^2-S^2)} \quad (6.5. 2)$$

$$H = H_0 - \frac{e}{2mc} \mathcal{H}^z \underbrace{(L_z + 2S_z)}_{=(J_z+S_z)} \quad (6.5. 3)$$

vertauschbare Quantenzahlen
Operatoren

für G.(6.5. 2) gilt: $L^2 S^2 J^2 J_z \rightarrow l, s = \frac{1}{2}, j, m_j$
für G.(6.5. 3) gilt: $L^2 S^2 L_z S_z \rightarrow l, s = \frac{1}{2}, m_l, m_s$

Der anomale Zeeman-Effekt ist eine schwache Magnetfeldkorrektur bei dominanter Spin-Bahn-Kopplung.

Die Verschiebung im Magnetfeld ist gegeben durch:

$$\Delta E_{nlj} = \mu_B |\mathcal{H}| \frac{1}{\hbar} \langle J_z + s_z \rangle \quad (6.5.4)$$

$$\langle J_z + s_z \rangle = \langle nljm_j | J_z + s_z | nljm_j \rangle = gm_j \hbar \quad (6.5.5)$$

$$\Delta E_{nlj} = gm_j \mu_B |\mathcal{H}| \quad (\text{anstelle von } m - l \mu_B |\mathcal{H}| \text{ ohne Spin}) \quad (6.5.6)$$

g ist hierbei der Landé-Faktor.

Rechnung:

$$J_z |nljm_j\rangle = \hbar m_j |nljm_j\rangle \quad (6.5.7)$$

$$g = 1 + \frac{\langle s_z \rangle}{\hbar m_j} \quad (6.5.8)$$

Die Rechnung ist etwas langwierig und sei ohne lange Kommentare durchgeführt.

1.

$$(\vec{L}\vec{s}) |nljm_j\rangle = \frac{1}{2} \left(\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \frac{3}{4} \hbar^2 \right) |nljm_j\rangle = a |nljm_j\rangle \quad (6.5.9)$$

mit:

$$a = \frac{\hbar^2}{2} \left(j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right) \quad (6.5.10)$$

2.

$$[J_{x,y,z}, \vec{L}\vec{s}] = 0 \quad (6.5.11)$$

3.

$$\begin{aligned} & \langle [\vec{s} \times \vec{J}, (\vec{L}\vec{s})] \rangle \\ &= \langle (\vec{s} \times \vec{J}) \underbrace{(\vec{L}\vec{s})}_{\text{s.G(6.5.9)}} - \underbrace{(\vec{L}\vec{s})}_{\text{s.G(6.5.9)}} (\vec{s} \times \vec{J}) \rangle = 0 \end{aligned} \quad (6.5.12)$$

4.

$$[s_j, s_m] = \varepsilon_{jmn} i \hbar s_n \quad (6.5.13)$$

5.

$$\begin{aligned} (\vec{s}\vec{J}) |nljm_j\rangle &= \frac{1}{2} \left(\vec{J}^2 + \vec{s}^2 - \vec{L}^2 \right) |nljm_j\rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{2} \left(j(j+1) + \frac{3}{4} - l(l+1) \right) |nljm_j\rangle \end{aligned} \quad (6.5.14)$$

6.

$$\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{jmn} = \varepsilon_{jki} \varepsilon_{jmn} = \delta_{km} \delta_{in} - \delta_{kn} \delta_{im} \quad (6.5.15)$$

7.

$$\vec{L}\vec{J} = (\vec{J} - \vec{s}) \vec{J} = \vec{J}^2 - \vec{s}\vec{J} \quad (6.5.16)$$

$$\left[\left(\vec{s} \times \vec{L} \right)_i, \vec{L} \vec{s} \right] = \varepsilon_{ijk} \left[s_j J_k, \left(\vec{L} \vec{s} \right)_i \right]$$

Mit Gleichung (6.5. 11) folgt:

$$\begin{aligned} &= \varepsilon_{ijk} [s_j, s_m L_m] J_k \\ &= \varepsilon_{ijk} [s_j, s_m] L_m J_k \end{aligned}$$

Wegen Gleichung (6.5. 13) gilt:

$$= i\hbar \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{jmn} s_n L_m J_k$$

Mit Gleichung (6.5. 15) folgt:

$$\begin{aligned} &= i\hbar (\delta_{nm} \delta_{in} - \delta_{kn} \delta_{im}) s_n L_m J_k \\ &= i\hbar \left(s_i \left(\vec{L} \vec{J} \right) - L_i \left(\vec{s} \vec{J} \right) \right) \end{aligned}$$

Mit Gleichung (6.5. 16) gilt:

$$= i\hbar \left(s_i \vec{J}^2 - J_i \left(\vec{s} \vec{J} \right) \right) \quad (6.5. 17)$$

speziell gilt dies für $i = z$.

Aus Gleichung (6.5. 12) und Gleichung (6.5. 17) folgt dann:

$$\langle s_z \vec{J}^2 \rangle = \langle J_z \left(\vec{s} \vec{J} \right) \rangle \quad (6.5. 18)$$

$$\langle s_z \vec{J}^2 \rangle = \hbar^2 j(j+1) \langle s_z \rangle = \frac{\hbar^2}{2} \left(j(j+1) + \frac{3}{4} - l(l+1) \right) \underbrace{\langle J_z \rangle}_{\hbar m_j} \quad (6.5. 19)$$

Somit folgt für den Landé-Faktor:

$$g = 1 + \frac{\langle s_z \rangle}{\hbar m_j} = 1 + \frac{j(j+1) + \frac{3}{4} - l(l+1)}{2j(j+1)} = 1 + \begin{cases} \frac{1}{2l+1} & j = l + \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2l+1} & j = l - \frac{1}{2} \end{cases} \quad (6.5. 20)$$

7 Theorie der Quantenübergänge (Allgemeine zeitabhängige Entwicklungen)

Der zeitabhängige Formalismus, den wir besprechen wollen, ist das wichtigste Verfahren zur Beschreibung von Übergängen in der Quantenmechanik, eignet sich aber ebensogut für störungstheoretische Entwicklungen in der Theorie von Vielteilchensystemen (Diagramme).

Ein quantenmechanisches System sei beschrieben durch H_0 . Für die stationären Zustände $|\varphi_a\rangle$ gilt:

$$H_0 |\varphi_a\rangle = E_a |\varphi_a\rangle \quad (7.0. 21)$$

Das Spektrum von E_a ist kontinuierlich und (oder) diskret.

Sei $V(t)$ eine zeitabhängige Störung, die Übergänge des quantenmechanischen Systems vom Ausgangszustand $|\varphi_a\rangle$ zum Endzustand $|\varphi_b\rangle$ bewirkt.

Für $V(t)$ gibt es zwei Möglichkeiten:

1. $V(t)$ ist explizit zeitabhängig, somit ist $|\varphi_a\rangle$ diskret bzw. kontinuierlich, womit $|\varphi_b\rangle$ ebenso diskret bzw. kontinuierlich ist.

Sei A der Operator der *Anknüpfung ans System* und $F(t)$ ein zeitabhängiges Äußeres Feld aber *kein* Operator, dann gilt:

$$V(t) = AF(t) \quad (7.0. 22)$$

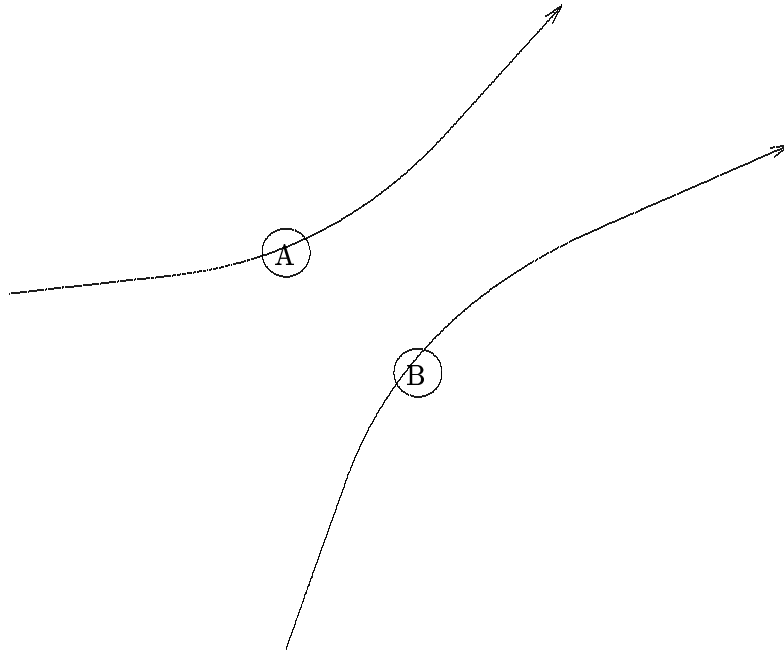


Abbildung 44: Streuung zweier Teilchen

Beispiel:

$$V(t) = -exE(t) \quad (7.0. 23)$$

$E(t)$ ist hier das äußere elektrische Feld. Dies gilt z.B. für Absorption und Emission von Strahlung (optische Spektroskopie), aber auch für die Neutronenspektroskopie etc.

$$V(t) = \begin{cases} V(t) & t_1 < t < t_2 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (7.0. 24)$$

Das System befindet sich also unter dem Einfluß der Störung im Zeitintervall zwischen t_1 und t_2 , und wir messen die Übergangrate von $|\varphi_a\rangle$ nach $|\varphi_b\rangle$.

2. $V(t)$ ist zeitunabhängig, woraus Streuvorgänge folgen.

Das System besteht aus zwei Teilchen (A) und (B) (s. Abbildung (44)), bei dem die Teilchen für $t \rightarrow -\infty$ entkoppelt sind, da sie sehr weit voneinander entfernt sind. Dann findet eine Streuung statt und für $t \rightarrow \infty$ sind die Teilchen wieder sehr weit voneinander entfernt, also entkoppelt. $|\varphi_a\rangle$ beschreibt das entkoppelte Gesamtsystem für $t \rightarrow -\infty$, $|\varphi_b\rangle$ das entkoppelte Gesamtsystem für $t \rightarrow \infty$.

Es gibt drei mögliche Fälle für die Streuung:

$$\begin{array}{ll} & |\varphi_a\rangle & & |\varphi_b\rangle \\ \text{(a) Elastische Streuung:} & (A) + (B) & \rightarrow & (A) + (B) \\ \text{(b) Inelastische Streuung:} & (A) + (B) & \rightarrow & (A') + (B') \\ \text{(c) Reaktion:} & (A) + (B) & \rightarrow & (C) + (D) \end{array}$$

Formal setzt man:

$$V(t) = Ve^{-\delta|t|} \quad (7.0. 25)$$

δ ist infinitesimal (adiabatisches Einschalten der Störung).

Wir beschreiben beide Fälle mit dem gleichen Formalismus.

7.1 Wechselwirkungsbild (Dirac bzw. Tomanaga-Bild)

Der Hamiltonoperator sei:

$$H = H_0 + V(t) \quad (7.1. 1)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle \quad |\psi(t)\rangle = |\psi_S(t)\rangle \quad (7.1. 2)$$

Definition 7.1.1: Wechselwirkungsbild

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} |\psi_S(t)\rangle \quad (7.1. 3)$$

$$\tilde{A}(t) = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} A e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \quad (7.1. 4)$$

Im Falle $V = 0$ gilt:

$$|\tilde{\psi}\rangle = |\psi_{\text{Heisenberg}}\rangle \quad (7.1. 5)$$

Die Bewegungsgleichung lautet dann:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\tilde{\psi}(t)\rangle &= e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} (-H_0 + H_0 + V(t)) e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} |\psi_S(t)\rangle \\ &= \tilde{V}(t) |\tilde{\psi}(t)\rangle \end{aligned} \quad (7.1. 6)$$

Der Zustand ändert sich also nur unter dem Einfluß der Störung mit:

$$\tilde{V}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} V(t) e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} \quad (7.1. 7)$$

Die Anfangsbedingung lautet:

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} |\tilde{\psi}(t)\rangle = |\tilde{\psi}(t = -\infty)\rangle = |\varphi_a\rangle \quad (7.1. 8)$$

Dies ist ein stationärer Zustand von H_0 .

Die Endbedingung lautet:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} |\tilde{\psi}(t)\rangle = |\tilde{\psi}(t = \infty)\rangle = |\varphi_b\rangle \quad (7.1. 9)$$

Dies ist ein stationärer Zustand von H_0 .

Gesucht wird jetzt die Übergangswahrscheinlichkeit W_{ba} .

Seien U, \tilde{U} die unitären Operatoren, so daß gilt:

$$|\psi_S(t_2)\rangle = U(t_2, t_1) |\psi_S(t_1)\rangle \quad (7.1. 10)$$

und im Wechselwirkungsbild:

$$|\tilde{\psi}(t_2)\rangle = \tilde{U}(t_2, t_1) |\tilde{\psi}(t_1)\rangle \quad (7.1. 11)$$

Zusammenhang U, \tilde{U} :

$$\begin{aligned} \tilde{U}(t_2, t_1) |\tilde{\psi}(t_1)\rangle &= e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t_2} |\psi_S(t_2)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t_2} U(t_2, t_1) |\psi_S(t_1)\rangle \\ &= \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t_2} U(t_2, t_1) e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t_1}}_{\tilde{U}} |\tilde{\psi}(t_1)\rangle \end{aligned} \quad (7.1. 12)$$

Somit hängen U und \tilde{U} wie folgt zusammen:

$$\tilde{U}(t_2, t_1) = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t_2} U(t_2, t_1) e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t_1} \quad (7.1. 13)$$

Speziell gilt für $V(t) = V$:

$$U(t_2, t_1) = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t_2-t_1)} \quad \text{von früher bekannt} \quad (7.1.14)$$

$$\tilde{U}(t_2, t_1) = e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t_2} e^{-\frac{i}{\hbar}H(t_2-t_1)} e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t_1} \quad (7.1.15)$$

Die Differentialgleichung für \tilde{U} lautet:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\tilde{\psi}(t)\rangle &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{U}(t, t_1) |\tilde{\psi}(t_1)\rangle \\ &= \tilde{V}(t) |\tilde{\psi}(t)\rangle = \tilde{V}(t) \tilde{U}(t, t_1) |\tilde{\psi}(t_1)\rangle \end{aligned} \quad (7.1.16)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{U}(t, t_1) = \tilde{V}(t) \tilde{U}(t, t_1) \quad \text{mit } \tilde{U}(t_1, t_1) = 1 \quad (7.1.17)$$

Die Integralgleichung lautet dann:

$$\tilde{U}(t, t_1) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^t d\tau \tilde{V}(\tau) \tilde{U}(\tau, t_1) \quad (7.1.18)$$

Die Lösung erhält man durch Iteration (Störungstheorie):

$$\begin{aligned} &= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n \int_{t_1}^t d\tau_1 \int_{t_1}^{\tau_1} d\tau_2 \dots \int_{t_1}^{\tau_{n-1}} d\tau_n \tilde{V}(\tau_1) \tilde{V}(\tau_2) \dots \tilde{V}(\tau_n) \\ &\quad t \geq \tau_1 \geq \tau_2 \geq \dots \geq \tau_n \geq t_1 \quad \text{geordnete Zeit} \end{aligned} \quad (7.1.19)$$

Formal folgt:

$$\begin{aligned} \tilde{U}(t, t_1) &= T e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^t d\tau \tilde{V}(\tau)} \\ &= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n \frac{1}{n!} \int_{t_1}^t \dots \int_{t_1}^t d\tau_1 \dots d\tau_n T \left(\tilde{V}(\tau_1) \dots \tilde{V}(\tau_n) \right) \end{aligned} \quad (7.1.20)$$

T (Zeitordnungssymbol) bedeutet die Anordnung der zeitlichen Reihenfolge.

$$T(A(\tau_1)B(\tau_2)) = \begin{cases} A(\tau_1)B(\tau_2) & \tau_1 > \tau_2 \\ B(\tau_2)A(\tau_1) & \tau_2 > \tau_1 \end{cases} \quad (7.1.21)$$

Das Integrationsgebiet $t_1 \leq \tau_1, \tau_2, \dots, \tau_n \leq t$ zerfällt in $n!$ Gebiete mit definierter Zeitordnung:

$$t_1 \leq \tau_{i_1} \leq \tau_{i_2} \leq \dots \leq \tau_{i_n} \leq t \quad (7.1.22)$$

Jedes Gebiet liefert bei der Integration den gleichen Beitrag.

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = \tilde{U}(t, t_1) |\tilde{\psi}(t_1)\rangle$$

Sei t_1 beliebig, somit kann man auch setzen $t_1 = -\infty$:

$$= \tilde{U}(t, -\infty) |\tilde{\psi}(-\infty)\rangle = \tilde{U}(t, -\infty) |\varphi_a\rangle \quad (7.1.23)$$

Denn für unendlich ferne Zeiten ist das System im Zustand $|\varphi_a\rangle$ mit $H_0|\varphi_a\rangle = E_a|\varphi_a\rangle$.

$$\langle \varphi_b | \tilde{\psi}(t) \rangle = \langle \varphi_b | \tilde{U}(t, -\infty) | \varphi_a \rangle \quad (7.1.24)$$

Dies ist die Wahrscheinlichkeit, daß das System zur Zeit t in den Zustand $|\varphi_b\rangle$ übergegangen ist.

Die Übergangswahrscheinlichkeit lautet dann:

$$W_{a \rightarrow b}(t) = |\langle \varphi_b | \tilde{U}(t, -\infty) | \varphi_a \rangle|^2 \quad (7.1.25)$$

Die Gesamtübergangswahrscheinlichkeit während der Zeitdauer der Störung lautet dann, für $\lim_{t \rightarrow \infty}$:

$$W_{a \rightarrow b} = |\langle \varphi_b | \tilde{U}(\infty, -\infty) | \varphi_a \rangle|^2 \quad (7.1.26)$$

Definition 7.1.2: Streumatrix:

$$S_{ba} = \langle \varphi_b | \tilde{U}(\infty, -\infty) | \varphi_a \rangle \quad (7.1. 27)$$

$$W_{a \rightarrow b} = |S_{ba}|^2 \quad (7.1. 28)$$

Definition 7.1.3: Streuoperator:

$$S = \tilde{U}(\infty, -\infty) \quad (7.1. 29)$$

Dies ist derjenige Operator, der a in b überführt.

7.2 Kleine Störung, erste Näherung, Goldene Regel

Sei $a \neq b$, d.h. $\langle \varphi_b | \varphi_a \rangle = 0$.

$$\tilde{U}(t, t_1) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^t d\tau \tilde{V}(\tau) + O(V^2) \quad (7.2. 1)$$

$$\begin{aligned} W_{a \rightarrow b}(t) &= \left| \langle \varphi_b | 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t d\tau \tilde{V}(\tau) | \varphi_a \rangle \right|^2 \\ &= \frac{1}{\hbar^2} \left| \langle \varphi_b | \int_{-\infty}^t d\tau \tilde{V}(\tau) | \varphi_a \rangle \right|^2 + \underbrace{\left| \langle \varphi_b | \varphi_a \rangle \right|^2}_{=0} \end{aligned} \quad (7.2. 2)$$

1. Sei $V(t)$ explizit zeitabhängig, d.h.

$$V(t) = AF(t) = A \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{1}{2\pi} \bar{F}(\omega) e^{-i\omega t} \quad (7.2. 3)$$

$F(t)$ sei das äußere Feld, z.B. das elektrische Feld, damit $F(t)$ reell ist, gilt $F^*(\omega) = F(-\omega)$.

$$\begin{aligned} \langle \varphi_b | \tilde{V}(\tau) | \varphi_a \rangle &= \langle \varphi_b | e^{\frac{i}{\hbar} E_b \tau} A F(\tau) e^{-\frac{i}{\hbar} E_a \tau} | \varphi_a \rangle \\ &= \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar} (E_b - E_a) \tau} F(\tau)}_{\tau\text{-abhängig}} \langle \varphi_b | A | \varphi_a \rangle \end{aligned} \quad (7.2. 4)$$

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{\frac{i}{\hbar} (E_b - E_a) \tau} F(\tau) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{1}{2\pi} F(\omega) \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i\tau \left(\frac{E_b - E_a}{\hbar} - \omega \right)} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega F(\omega) \delta(\omega - \omega_{ba}) = F(\omega_{ba}) \end{aligned} \quad (7.2. 5)$$

mit:

$$\omega_{ba} = \frac{1}{\hbar} (E_b - E_a) \quad (7.2. 6)$$

Es folgt für $t \rightarrow \infty$:

$$W_{a \rightarrow b}^{1. \text{ Ordnung}} = \left| \langle \varphi_b | \tilde{U}(\infty, -\infty) | \varphi_a \rangle \right|_{1. \text{ Ordnung}}^2 \quad (7.2. 7)$$

$$W_{a \rightarrow b} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \langle \varphi_b | A | \varphi_a \rangle \right|^2 |\bar{F}(\omega_{ba})|^2 \quad (7.2. 8)$$

Es wird also genau die Differenzfrequenz ω_{ba} dem Feld $F(t)$ entnommen.

$\omega_{ba} > 0$: Absorption, das äußere Feld gibt Energie an das System ab.

$\omega_{ba} < 0$: Emission, das System gibt Energie an das äußere Feld ab.

$F(\omega)$ ist die Amplitude des äußeren Feldes und $|F(\omega)|^2$ entspricht der Intensität der Feldkomponente der Frequenz ω . $W_{a \rightarrow b}$ ist proportional zur Intensität des äußeren Feldes.

Das Matrixelement $\langle \varphi_b | A | \varphi_a \rangle$ ist charakteristisch für die Ankopplung der Störung, dies liefert die Auswahlregeln.

2. Sei $V(t)$ zeitunabhängig, d.h. Übergänge im Kontinuum:

$$V(t) = V e^{-\delta|t|} \quad \delta \text{ infinitesimal} \quad (7.2.9)$$

$$\langle \varphi_b | \tilde{V}(\tau) | \varphi_a \rangle = e^{\frac{i}{\hbar}(E_b - E_a)\tau} \langle \varphi_b | V | \varphi_a \rangle \quad (7.2.10)$$

Definition 7.2.1: Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit oder Übergangsrate:

$$W_{a \rightarrow b} \left(\frac{T}{2}, -\frac{T}{2} \right) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \langle \varphi_b | \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} d\tau \tilde{V}(\tau) | \varphi_a \rangle \right|^2 \quad (7.2.11)$$

$$\begin{aligned} w_{a \rightarrow b} &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{W_{a \rightarrow b} \left(\frac{T}{2}, -\frac{T}{2} \right)}{T} \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{\hbar^2} \left| \langle \varphi_b | V | \varphi_a \rangle \right|^2 \underbrace{\frac{\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} d\tau e^{\frac{i}{\hbar}(E_b - E_a)\tau}}{T}}_{1 \text{ wegen } \delta(E_b - E_a)} \underbrace{\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} d\tau e^{-\frac{i}{\hbar}(E_b - E_a)\tau}}_{2\pi\hbar\delta(E_b - E_a)} \end{aligned} \quad (7.2.12)$$

$$w_{a \rightarrow b} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \varphi_b | V | \varphi_a \rangle \right|^2 \delta(E_b - E_a) \quad \text{Goldene Regel von Fermi} \quad (7.2.13)$$

Die δ -Funktion drückt aus, daß bei zeitunabhängiger Störung (Streuung) nur Übergänge mit Energierhaltung stattfinden, d.h. nur Übergänge mit gleicher Energie.

Interpretation der δ -Funktion:

Da es sich um Übergänge im Kontinuum handelt, ist:

$$\langle \varphi_b | \varphi_a \rangle = \delta(b - a) \quad (7.2.14)$$

z.B. $\langle \varphi_{\vec{k}} | \varphi_{\vec{k}'} \rangle = \delta^3(\vec{k} - \vec{k}')$ bei elastischer Teilchenstreuung an einem Potential.

Bei der Messung der Übergänge, können wir nicht scharf den Zustand $|\varphi_b\rangle$ beobachten, wegen des endlichen Auflösungsvermögens unserer Apparatur zur Messung der Energie. Wir messen vielmehr alle Zustände $b \in B$ so daß $E \leq E_b \leq E + \Delta E$.

Die Übergangswahrscheinlichkeit in diesem Bereich ist daher:

$$w_{a \rightarrow B} = \sum_{b \in B} w_{a \rightarrow b} = \int_E^{E+\Delta E} \rho(E_b) dE_b \omega_{a \rightarrow b} \quad (7.2.15)$$

$\rho(E)$ ist die Energiezustandsdichte und $\rho(E)\Delta E$ die Zahl der Zustände zwischen $E, E + \Delta E$.

$$w_{a \rightarrow B} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \varphi_b | V | \varphi_a \rangle \right|^2 \rho(E_a) \quad (7.2.16)$$

$$\rho(E_a) = \int_E^{E+\Delta E} \rho(E_b) \delta(E_b - E_a) dE_b \quad (7.2. 17)$$

Beispiel: Potentialstreuung:

$$\begin{aligned} V &= V(\vec{r}) \\ |\varphi_a\rangle &= |\vec{k}\rangle, |\varphi_b\rangle = |\vec{k}'\rangle \\ E_a = E_b &= \frac{\hbar^2 K^2}{2m} \quad |\vec{k}| = K \end{aligned}$$

Die Zustandsdichte lautet dann.

$$d^3\vec{k} \frac{1}{(2\pi)^3} = \frac{K^2 dK d\Omega}{(2\pi)^3} = \rho(E) dE = \rho(E) \frac{\hbar^2 K}{m} dK \quad (7.2. 18)$$

$$\rho(E) = \frac{mK}{8\pi^3 \hbar^2} d\Omega \quad (7.2. 19)$$

j_{ein} ist die einfallende Stromdichte, oder die Teilchenzahl pro Zeiteinheit und pro Flächeneinheit.

$$|\vec{k}\rangle \rightarrow j_{ein} = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{\hbar K}{m} \quad (7.2. 20)$$

(bereits behandelt in der Streutheorie)

Der differentielle Streuquerschnitt lautet dann:

$$d\sigma = \frac{w_{a \rightarrow b}}{j_{ein}} = \frac{\text{Zahl der Streuteilchen / Zeiteinheit}}{\text{Zahl der einfallenden Teilchen / Zeit} \times \text{Fläche}} \quad (7.2. 21)$$

$$d\sigma = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle \right|^2 \frac{mK}{8\pi^3 \hbar^2} d\Omega \frac{8\pi^3 m}{\hbar K} \quad (7.2. 22)$$

$$\frac{d\sigma(\Omega)}{d\Omega} = \left| f(\vec{k}', \vec{k}) \right|^2 = \frac{2\pi m^2}{\hbar^4} \left| \langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle \right|^2 \quad (7.2. 23)$$

(entspricht der alten Formel in Bornscher Näherung)

7.3 Exakte Streutheorie, S-Matrix, T-Matrix

Sei $V(t) = V e^{-\delta|t|}$.

$$\begin{aligned} \tilde{U}(t_2, t_1) &= e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t_2} e^{-\frac{i}{\hbar} H(t_2 - t_1)} e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t_1} \\ &= e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t_2} e^{-\frac{i}{\hbar} H t_2} e^{\frac{i}{\hbar} H t_1} e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t_1} \\ &= \tilde{U}(t_2, 0) \tilde{U}(0, t_1) \end{aligned} \quad (7.3. 1)$$

Definition 7.3.1:

$$|\psi_a^+\rangle = \tilde{U}(0, -\infty) |\varphi_a\rangle \quad (7.3. 2)$$

$|\psi_a^+\rangle$ entwickelt sich aus $|\varphi_a\rangle$ bis zur Zeit $t = 0$. Da bei $t = 0$ $V(t) = V$ gilt, sollte $|\psi_a^+\rangle$ ein exakter Zustand von $H = H_0 + V$ zur Energie E_a sein.

Also da:

$$H_0 |\varphi_a\rangle = E_a |\varphi_a\rangle \quad (7.3. 3)$$

gilt:

$$H |\psi_a^+\rangle = E_a |\psi_a^+\rangle \quad H = H_0 + V \quad (7.3. 4)$$

Wir suchen jetzt eine Gleichung für $|\psi_a^+\rangle$:

$$\tilde{U}(0, t) = 1 + \frac{i}{\hbar} \int_t^0 d\tau \tilde{V}(\tau) \tilde{U}(\tau, t) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_t^0 d\tau \tilde{V}(\tau) \tilde{U}(\tau, 0) \tilde{U}(0, t) \quad (7.3. 5)$$

Damit folgt die Lippmann-Schwinger-Gleichung:

$$|\psi_a^+\rangle = |\varphi_a\rangle + \frac{1}{E_a + i\delta - H_0} V |\psi_a^+\rangle \quad (7.3. 6)$$

$|\psi_a^+\rangle =$ exakt einlaufender Zustand.

$|\psi_a^-\rangle = |\varphi_a\rangle + \frac{1}{E_a - i\delta - H_0} V |\psi_a^-\rangle =$ exakt auslaufender Zustand.

$$(H_0 - E_a) |\psi_a^\pm\rangle = -V |\psi_a^\pm\rangle \quad (7.3. 7)$$

$$(H - E_a) |\psi_a^\pm\rangle = 0 \quad (7.3. 8)$$

Definition 7.3.2: Übergangsmatrix (bzw. Operator)

$$V |\psi_a^+\rangle = T(E_a + i\delta) |\varphi_a\rangle \quad (7.3. 9)$$

Es gilt:

$$V |\psi_a^+\rangle = V |\varphi_a\rangle + V \frac{i}{E_a + i\delta - H_0} V |\psi_a^+\rangle \quad (7.3. 10)$$

Da:

$$V |\psi_a^+\rangle = T |\varphi_a\rangle \quad (7.3. 11)$$

folgt:

$$T = V + V \frac{1}{E_a + i\delta - H_0} T \quad (7.3. 12)$$

Sei:

$$G_0 = \frac{1}{E_a + i\delta - H_0} \quad (7.3. 13)$$

dann gilt:

$$T = V + V G_0 T \quad (7.3. 14)$$

$$T = V + V G_0 V + V G_0 V G_0 V + \dots = V + T G_0 V \quad (7.3. 15)$$

Wir betrachten die Übergangswahrscheinlichkeit:

$$W_{a \rightarrow b} = \left| \langle \varphi_b | \tilde{U}(t, -\infty) | \varphi_a \rangle \right|^2 \quad (7.3. 16)$$

Wenn $W_{a \rightarrow b}(t)$ für $t \rightarrow \infty$ linear mit der Zeit t anwächst, so ist:

$$w_{a \rightarrow b} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{d}{dt} W_{a \rightarrow b}(t) \quad (7.3. 17)$$

die Übergangswahrscheinlichkeit über lange Zeit pro Zeiteinheit.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{U}(t, -\infty) = \tilde{V}(t) \tilde{U}(t, -\infty) \quad (7.3. 18)$$

$$\begin{aligned}
w_{a \rightarrow b} &= \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{d}{dt} \left(\langle \varphi_b | \tilde{U}(t, -\infty) | \varphi_a \rangle^* \langle \varphi_b | \tilde{U}(t, -\infty) | \varphi_a \rangle \right) \\
&= \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{i\hbar} \left(\langle \varphi_b | \tilde{V} \tilde{U} | \varphi_a \rangle \langle \varphi_b | \tilde{U} | \varphi_a \rangle^* \right. \\
&\quad \left. - \langle \varphi_b | \tilde{V} \tilde{U} | \varphi_a \rangle^* \langle \varphi_b | \tilde{U} | \varphi_a \rangle \right) \\
&= \frac{2}{\hbar} \lim_{t \rightarrow \infty} \text{Im} \langle \varphi_b | \tilde{V}(t) \tilde{U}(t, 0) \tilde{U}(0, -\infty) | \varphi_a \rangle \\
&\quad \cdot \langle \varphi_b | \tilde{U}(t, 0) \tilde{U}(0, -\infty) | \varphi_a \rangle^* \\
&= \frac{2}{\hbar} \lim_{t \rightarrow \infty} \text{Im} \langle \varphi_b | \tilde{V}(t) \tilde{U}(t, 0) | \psi_a^+ \rangle \langle \varphi_b | \tilde{U}(t, 0) | \psi_a^+ \rangle^* \\
&= \frac{2}{\hbar} \lim_{t \rightarrow \infty} \text{Im} \langle \varphi_b | e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} V \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t}}_1 e^{-\frac{i}{\hbar} H t} | \psi_a^+ \rangle \\
&\quad \cdot \langle \varphi_b | e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} e^{-\frac{i}{\hbar} H t} | \psi_a^+ \rangle^* \tag{7.3. 19}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{2}{\hbar} \lim_{t \rightarrow \infty} \text{Im} \langle \varphi_b | e^{\frac{i}{\hbar} E_b t} V e^{-\frac{i}{\hbar} E_a t} | \psi_a^+ \rangle \langle \varphi_b | e^{\frac{i}{\hbar} E_b t} e^{-\frac{i}{\hbar} E_a t} | \psi_a^+ \rangle^* \\
&= \frac{2}{\hbar} \text{Im} \langle \varphi_b | V | \psi_a^+ \rangle \langle \varphi_b | \psi_a^+ \rangle^* \tag{7.3. 20}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle \varphi_b | \psi_a^+ \rangle &= \langle \varphi_b | \varphi_a \rangle + \langle \varphi_b | \frac{1}{E_a + i\delta - E_b} V | \psi_a^+ \rangle \\
&= \delta(b - a) + \frac{\langle \varphi_b | T | \varphi_a \rangle}{E_a - E_b + i\delta} \tag{7.3. 21}
\end{aligned}$$

Mit Gleichung (7.3. 21) folgt für Gleichung (7.3. 20):

$$= \frac{2}{\hbar} \delta(b - a) \text{Im} \langle \varphi_a | T | \varphi_a \rangle + \frac{2}{\hbar} \text{Im} \frac{|\langle \varphi_b | T | \varphi_a \rangle|^2}{E_a - E_b - i\delta} \tag{7.3. 22}$$

$$\text{Im} \frac{1}{x - i\delta} = \text{Im} \frac{i\delta}{x^2 + \delta^2} = \frac{\delta}{x^2 + \delta^2} \Rightarrow \pi \delta(x) \tag{7.3. 23}$$

$$\text{Im} \frac{1}{x + i\delta} \Rightarrow -\pi \delta(x) \tag{7.3. 24}$$

Dann folgt mit Gleichung (7.3. 23) und Gleichung (7.3. 24) aus Gleichung (7.3. 22):

$$\begin{aligned}
w_{a \rightarrow b} &= \frac{2}{\hbar} \delta(b - a) \text{Im} \langle \varphi_a | T | \varphi_a \rangle \\
&\quad + \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \varphi_b | T | \varphi_a \rangle|^2 \delta(E_a - E_b) \tag{7.3. 25}
\end{aligned}$$

Sei $b \neq a$:

$$w_{a \rightarrow b} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \varphi_b | T | \varphi_a \rangle|^2 \delta(E_a - E_b) \tag{7.3. 26}$$

Das ist die alte Formel mit V ersetzt durch T .

Rechengang: Berechne $T_{ba} = \langle \varphi_b | T | \varphi_a \rangle$ wobei T definiert ist aus:

$$T = V + V \frac{1}{E_a + i\delta - H_0} T \tag{7.3. 27}$$

7.3.1 S -Matrix und T -Matrix

$$W_{a \rightarrow b} = | \langle \varphi_b | \tilde{U}(\infty, -\infty) | \varphi_a \rangle |^2 = |S_{ba}|^2 \quad S = \tilde{U}(\infty, -\infty) \quad (7.3. 28)$$

Allgemein gilt: $\tilde{U}(t, t')$ ist unitär, d.h. $\tilde{U}(t, t')\tilde{U}^\dagger(t, t') = 1$, insbesondere $SS^\dagger = S^\dagger S = 1$.

Daher gilt:

$$\begin{aligned} \sum_b W_{a \rightarrow b}(t) &= \sum_b | \langle \varphi_b | \tilde{U}(t, -\infty) | \varphi_a \rangle |^2 \\ &= \sum_b \langle \varphi_a | \tilde{U}^\dagger(t, -\infty) | \varphi_b \rangle \langle \varphi_b | \tilde{U}(t, -\infty) | \varphi_a \rangle \\ &= \langle \varphi_a | \underbrace{\tilde{U}^\dagger(t, -\infty)\tilde{U}(t, -\infty)}_1 | \varphi_a \rangle = \langle \varphi_a | 1 | \varphi_a \rangle = 1 \end{aligned} \quad (7.3. 29)$$

Und somit folgt:

$$\sum_b w_{a \rightarrow b} = \sum_b \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{d}{dt} W_{a \rightarrow b}(t) = 0 \quad (7.3. 30)$$

Im Kontinuum gilt dann:

$$\sum_b \rightarrow \int db \quad (7.3. 31)$$

Daher lautet das **optische Theorem**:

$$\text{Im} \langle \varphi_a | T | \varphi_a \rangle = -\pi \int db \delta(E_a - E_b) | \langle \varphi_b | T | \varphi_a \rangle |^2 \quad (7.3. 32)$$

oder:

$$\text{Im} T_{aa} = -\pi \int db \delta(E_a - E_b) |T_{ba}|^2 \quad (7.3. 33)$$

7.3.2 Verknüpfung von S - und T -Matrix

Es gilt:

$$| \psi_a^- \rangle = \tilde{U}(0, \infty) | \varphi_a \rangle \quad (7.3. 34)$$

Durch wiederholen der Regel für $| \psi_a^+ \rangle$ erhält man:

$$| \psi_a^\pm \rangle = | \varphi_a \rangle + \frac{1}{E_a \pm i\delta - H_0} V | \psi_a^\pm \rangle = | \varphi_a \rangle + \frac{1}{E_a \pm i\delta - H} V | \varphi_a \rangle \quad (7.3. 35)$$

$$\tilde{U}(t, 0)\tilde{U}(0, t) = 1 \quad (7.3. 36)$$

$$\tilde{U}(t, 0) = \tilde{U}(0, t)^{-1} = \tilde{U}^\dagger(0, t) \quad (7.3. 37)$$

$$\begin{aligned} \langle \varphi_b | \tilde{U}(\infty, 0) &= \langle \varphi_b | \tilde{U}^\dagger(0, \infty) \\ &= \left(\tilde{U}(0, \infty) | \varphi_b \rangle \right)^\dagger = | \psi_b^- \rangle^\dagger = \langle \psi_b^- | \end{aligned} \quad (7.3. 38)$$

$$S_{ba} = \langle \varphi_b | \tilde{U}(\infty, -\infty) | \varphi_a \rangle = \langle \varphi_b | \tilde{U}(\infty, 0)\tilde{U}(0, -\infty) | \varphi_a \rangle \quad (7.3. 39)$$

Mit Gleichung (7.3. 38) folgt dann:

$$S_{ba} = \langle \psi_b^- | \psi_a^+ \rangle \quad (7.3. 40)$$

d.h. die Streumatrix ist die Transformation von exakt einlaufenden Zuständen auf auslaufende Zustände, denn:

$$1 = \sum_b | \psi_b^- \rangle \langle \psi_b^- | = \sum_a | \psi_a^+ \rangle \langle \psi_a^+ | \quad (7.3. 41)$$

$$|\psi_a^+ \rangle = \sum_b |\psi_b^- \rangle \langle \psi_b^- | \psi_a^+ \rangle = \sum_b |\psi_b^- \rangle S_{ba} \quad (7.3. 42)$$

$$\langle \psi_b^- | = \langle \psi_b^+ | - 2\pi i \langle \varphi_b | V \delta(E_b - H) \quad (7.3. 43)$$

Mit Gleichung (7.3. 43) folgt:

$$\begin{aligned} S_{ba} &= \langle \psi_b^- | \psi_a^+ \rangle = \langle \psi_b^+ | \psi_a^+ \rangle - 2\pi i \langle \varphi_b | V \delta(E_b - H) | \psi_a^+ \rangle \\ &= \delta(b - a) - 2\pi i \delta(E_b - E_a) \langle \varphi_b | \underbrace{V | \psi_a^+ \rangle}_{T | \psi_a^+ \rangle} \end{aligned} \quad (7.3. 44)$$

$$S_{ba} = \delta(b - a) - 2\pi i \delta(E_b - E_a) T_{ba} \quad (7.3. 45)$$

7.4 Allgemeiner linearer Response

Die Reaktion eines Systems auf eine äußere Störung bezeichnet man als Response (Antwort). Bei schwacher Störung genügt eine lineare Beziehung und wir sprechen von *linearem Response*.

Sei:

$$H = H_0 + AF(t) \quad (7.4. 1)$$

$$F(t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{1}{2\pi} F(\omega) e^{-i\omega t} \quad (7.4. 2)$$

Die lineare Näherung lautet:

$$\tilde{U}(t, -\infty) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t d\tau \tilde{A}(\tau) F(\tau) \quad (7.4. 3)$$

$$\tilde{A}(\tau) = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 \tau} A e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 \tau} \quad (7.4. 4)$$

$$|\tilde{\psi}(t) \rangle = \tilde{U}(t, -\infty) |\tilde{\psi}(-\infty) \rangle = \tilde{U}(t, -\infty) |\psi_a \rangle \quad (7.4. 5)$$

$$H_0 |\varphi_a \rangle = E_a |\varphi_a \rangle \quad (7.4. 6)$$

Für den Mittelwert eines Operators B folgt:

$$\begin{aligned} \bar{B}_a(t) &= \langle \psi_S(t) | B | \psi_S(t) \rangle = \langle \tilde{\psi}(t) | \tilde{B}(t) | \tilde{\psi}(t) \rangle \\ &= \langle \varphi_a | \left(1 + \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t d\tau \tilde{A}(\tau) F(\tau) \right) \tilde{B}(t) \left(1 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t d\tau \tilde{A}(\tau) F(\tau) \right) | \varphi_a \rangle \\ &= \langle \varphi_a | \tilde{B} | \varphi_a \rangle + \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t d\tau F(\tau) \langle \varphi_a | \tilde{A}(\tau) \tilde{B}(t) - \tilde{B}(t) \tilde{A}(\tau) | \varphi_a \rangle + O(F^2) \end{aligned} \quad (7.4. 7)$$

$$\langle \varphi_a | \tilde{B}(t) | \varphi_a \rangle = \langle \varphi_a | e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} B e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} | \varphi_a \rangle = \langle \varphi_a | B | \varphi_a \rangle = B_a^0 \quad (7.4. 8)$$

Definition 7.4.1: Responsefunktion:

$$X_{BA}(t - \tau) = \frac{i}{\hbar} \langle \varphi_a | \tilde{A}(\tau) \tilde{B}(t) - \tilde{B}(t) \tilde{A}(\tau) | \varphi_a \rangle \Theta(t - \tau) \quad (7.4. 9)$$

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1 & x > 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases} \quad (7.4. 10)$$

X ist eine Funktion von $t - \tau$ oder auch j .

Der retardierte Kommutator lautet:

$$X_{BA}(t) = \frac{i}{\hbar} \Theta(t) \langle \varphi_a | [A, \bar{B}(t)] | \varphi_a \rangle \quad (7.4. 11)$$

$$X_{BA}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{1}{2\pi} \chi_{BA}(\omega) e^{-i\omega t} \quad (7.4. 12)$$

Die verallgemeinerte Suszeptibilität lautet dann:

$$\chi_{BA}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} X_{BA}(t) \quad (7.4. 13)$$

Wir setzen dann für das verallgemeinerte induzierte Moment:

$$\Delta B_a(t) = \bar{B}_a(t) - B_a^0 = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{1}{2\pi} \Delta B_a(\omega) e^{-i\omega t} \quad (7.4. 14)$$

$$\Delta B_a(t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau F(\tau) X_{BA}(t - \tau) \quad (7.4. 15)$$

$$\begin{aligned} \Delta B_a(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt \Delta B_a(t) e^{i\omega t} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{1}{2\pi} F(\omega') e^{-i\omega' t} \\ &\quad \cdot \int_{-\infty}^{\infty} d\omega'' \frac{1}{2\pi} \chi_{BA}(\omega'') e^{-i\omega''(t-\tau)} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' d\omega'' F(\omega') \chi_{BA}(\omega'') \Delta(\omega - \omega'') \Delta(\omega' - \omega'') = F(\omega) \chi_{BA}(\omega) \end{aligned} \quad (7.4. 16)$$

$$\Delta B_a(\omega) = \chi_{BA}(\omega) F(\omega) \quad (7.4. 17)$$

Damit ist das induzierte Moment das Produkt aus der Suszeptibilität und der äußeren Ursache.

Beispiele:

1. Sei:

$$V = -PE \quad (P = ex) \quad (7.4. 18)$$

$$A = -P \quad B = P \quad (7.4. 19)$$

$$\Delta \vec{P}_a(\omega) = \chi_{PP}(\omega) \vec{E}(\omega) \quad (7.4. 20)$$

$$\vec{D} = \vec{E} + 4\pi \vec{P} = (1 + 4\pi \chi_{PP}) \vec{E} \quad (7.4. 21)$$

$$\varepsilon(\omega) = 1 + 4\pi \chi_{PP} \quad (7.4. 22)$$

2. Sei:

$$V = -\vec{\mu} \vec{H} \quad (7.4. 23)$$

$$A = -\vec{\mu} \quad B = \vec{\mu} \quad (7.4. 24)$$

$$\Delta \vec{\mu}(\omega) = \chi_{\vec{\mu}\vec{\mu}}(\omega) \vec{H}(\omega) \quad (7.4. 25)$$

3. Sei:

$$V = -\vec{P} \vec{E} \quad (7.4. 26)$$

$$A = -\vec{P} \quad B = \vec{j} \quad (7.4. 27)$$

$$\Delta \vec{j}(\omega) = \chi_{\vec{j}\vec{P}}(\omega) \vec{E}(\omega) \quad \text{Ohmsches Gesetz} \quad (7.4. 28)$$

$$\sigma(\omega) = \chi_{\vec{j}\vec{P}}(\omega) \quad (7.4. 29)$$

Dies ist die frequenzabhängige Leitfähigkeit.

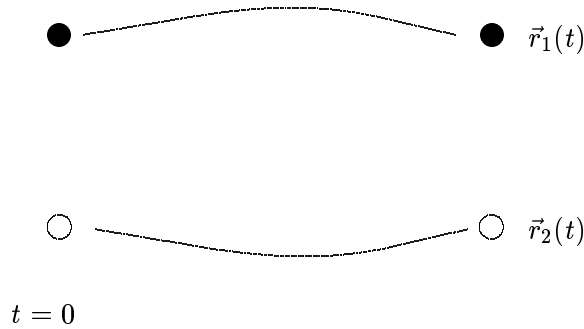


Abbildung 45: Zwei identische Teilchen klassisch

8 Identische Teilchen, Vielkörperproblem

Der Hamiltonoperator eines Systems von N identischen Teilchen ist symmetrisch in allen Teilchen:

$$H = \sum_{i=1}^N \left(\frac{p_i^2}{2m} + V(\vec{r}_i) \right) + \sum_{i<j} W(\vec{r}_i - \vec{r}_j) + H_{Spin-Bahn} + \text{äußerer Feldterm} \quad (8.0. 30)$$

$$H = H(1, 2, 3, \dots, N) = H(2, 1, 3, \dots, N) = \text{etc.} \quad (8.0. 31)$$

Ein Teilchen wird durch \vec{r}_i, \vec{p}_i und \vec{s}_i charakterisiert.

$$\text{Hilbertraum: } \mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2 \times \dots \times \mathcal{H}_N \quad (8.0. 32)$$

Für eine abstrakte Basis gilt dann:

$$|\vec{r}_1 \vec{s}_1, \vec{r}_2 \vec{s}_2, \dots, \vec{r}_N \vec{s}_N \rangle = |\vec{r}_1 \vec{s}_1 \rangle |\vec{r}_2 \vec{s}_2 \rangle \dots |\vec{r}_N \vec{s}_N \rangle \quad (8.0. 33)$$

und für einen beliebigen Zustand gilt:

$$|\psi(t) \rangle \rightarrow \psi(\vec{r}_1 \vec{s}_1, \vec{r}_2 \vec{s}_2, \dots, \vec{r}_N \vec{s}_N; t) \quad (8.0. 34)$$

8.1 Nichtunterscheidbarkeit von identischen Teilchen

Klassisch kann man zwei identische Teilchen voneinander unterscheiden. Bei einer ersten Messung finden wir die Teilchen an verschiedenen Orten. Wir bezeichnen die beiden Teilchen dann als 1 und 2 und verfolgen ihre Bahn. (s. Abbildung (45))

Quantenmechanisch können wir bei einer ersten Messung noch die beiden Teilchen feststellen und das am Ort \vec{r}_1 gemessene mit 1 und das am Ort \vec{r}_2 gemessene mit 2 bezeichnen. Zu jedem späteren Zeitpunkt haben aber beide Teilchen eine nichtverschwindende Wahrscheinlichkeit irgendwo zu sein, so daß wir bei einer erneuten Messung nicht mehr sagen können, welches Teilchen Nummer 1 und welches Nummer 2 ist. (s. Abbildung (46)) Das Anheften der Kennzeichen 1 und 2 bei der ersten Messung liefert uns also keine Information über das zukünftige Verhalten.

Als weiteres Beispiel können wir ein Streuexperiment betrachten (s. Abbildung (47)). Das in der ersten Quelle erzeugte Teilchen läßt sich bei der Auswertung des Experimentes von der in der zweiten Quelle erzeugten Teilchen nicht unterscheiden. Wir können nicht sagen, ob das im ersten Zähler beobachtete Teilchen von Quelle eins oder Quelle zwei kommt.

Folgerung: Identische Teilchen sind prinzipiell nicht unterscheidbar.

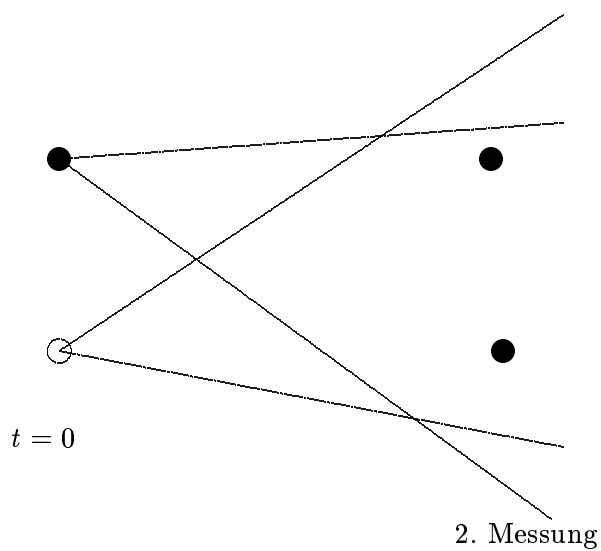


Abbildung 46: Zwei identische Teilchen quantenmechanisch

(A)

1. Zähler

(B)

2. Zähler

Abbildung 47: Streuexperiment

8.2 Permutationen

Definition: Jede Umordnung der Reihenfolge $(1, 2, \dots, N)$ in $(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N)$ mit $(\alpha_i = 1, 2, \dots, N)$ heißt Permutation.

Speziell: Transposition:

$$P_{ij}(1, 2, \dots, i, \dots, j, \dots, N) = (1, 2, \dots, j, \dots, i, \dots, N) \quad (8.2. 1)$$

Nachbar-Transposition:

$$P_{12}(1, 2, \dots, N) = (2, 1, \dots, N) \quad \text{ebenso } P_{i,i+1} \quad i = 1, 2, \dots, N - 1 \quad (8.2. 2)$$

Satz: Jede Permutation, speziell Transposition, läßt sich auffassen als eine Hintereinanderschaltung von Nachbartranspositionen.

Beispiel:

$$P(123) = (321) \quad (123) \rightarrow (213) \rightarrow (231) \rightarrow (321) \quad (8.2. 3)$$

Definition 8.2.1: Eine Permutation heißt:

$$(-1)^P = \begin{cases} +1 & \text{gerade, wenn die Anzahl der Nachbartransp. gerade ist} \\ -1 & \text{ungerade, wenn die Anzahl der Nachbartransp. ungerade ist} \end{cases} \quad (8.2. 4)$$

Beispiel:

$$P(123) = (321) \quad \text{ungerade} \quad (8.2. 5)$$

$$P(123) = (213) \quad \text{ungerade} \quad (123) \rightarrow (213) \quad (8.2. 6)$$

$$P(123) = (231) \quad \text{gerade} \quad (123) \rightarrow (213) \rightarrow (231) \quad (8.2. 7)$$

Satz: Jede Transposition

$$P_{ij}(1, \dots, i, \dots, j, \dots, N) = (1, \dots, j, \dots, i, \dots, N) \quad (8.2. 8)$$

ist ungerade. Beweis:

$$i(\alpha)j \rightarrow (\alpha)ij \quad \alpha \text{ Nachbartr.} \quad (8.2. 9)$$

$$(\alpha)ji \quad (\alpha + 1) \text{ Nachbartr.} \quad (8.2. 10)$$

$$j(\alpha)i \quad (2\alpha + 1) \text{ Nachbartr.} \quad (8.2. 11)$$

Den Permutationen lassen sich Operatoren zuordnen, die wir ebenfalls mit P bezeichnen.

$$P\psi(1, 2, \dots, N) = \psi(\alpha_1, \dots, \alpha_N) \quad (8.2. 12)$$

P ist linear und hermitesch.

Es gibt $N!$ solcher Permutationsoperatoren, die Einheit mitgerechnet.

Alle P kommutieren mit H , denn:

$$PH(1, 2, \dots, N) = H(1, 2, \dots, N)P \quad \text{bzw. } PHP^{-1} = H \quad (8.2. 13)$$

$$[P, H] = 0 \quad P \text{ ist eine Erhaltungsgröße} \quad (8.2. 14)$$

Speziell gilt:

$$[P_{ij}, H] = 0 \quad (8.2. 15)$$

Für die Eigenwerte von P_{ij} folgt:

$$P_{ij}^2 = 1 \quad (8.2. 16)$$

$$P_{ij} = \pm 1 \quad (8.2. 17)$$

Aber die P kommutieren nicht alle miteinander, z.B.:

$$[P_{12}, P_{23}] \neq 0 \quad (8.2. 18)$$

Sei $|\lambda\rangle$ eine Basis im Einteilchenhilbertraum, dann gilt für die Basis im Hilbertraum \mathcal{H} :

$$|\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N\rangle = |\lambda_1\rangle_1 |\lambda_2\rangle_2 \dots |\lambda_N\rangle_N \quad (8.2. 19)$$

$|\lambda_i\rangle_i$ ist das i -te Teilchen im Zustand λ_i .

Für einen beliebigen Zustand folgt:

$$|\psi\rangle = \sum_{\{\lambda\}} |\lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_N\rangle \underbrace{\langle \lambda_1 \dots \lambda_N | \psi \rangle}_{\psi(\lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_N)} \quad (8.2. 20)$$

Wir betrachten jetzt den Fall für $N = 2$. Es gilt dann $|\lambda_1 \lambda_2\rangle$ und $|\lambda_2 \lambda_1\rangle$ mit den Permutationen 1 und P_{12} . Für die Eigenwerte von P_{12} gilt:

$$|\lambda_1 \lambda_2\rangle_S = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\lambda_1 \lambda_2\rangle + |\lambda_2 \lambda_1\rangle) \quad P_{12} = 1 \quad (8.2. 21)$$

$$|\lambda_1 \lambda_2\rangle_A = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\lambda_1 \lambda_2\rangle - |\lambda_2 \lambda_1\rangle) \quad P_{12} = -1 \quad (8.2. 22)$$

S bedeutet hier symmetrischer und A antisymmetrischer Fall.

Für einen allgemeinen Zustand gilt:

$$|\psi_S\rangle = \sum_{\lambda_1 \lambda_2} C(\lambda_1 \lambda_2) |\lambda_1 \lambda_2\rangle_S \quad P_{12} |\psi_S\rangle = |\psi_S\rangle \quad (8.2. 23)$$

$$|\psi_A\rangle = \sum_{\lambda_1 \lambda_2} C(\lambda_1 \lambda_2) |\lambda_1 \lambda_2\rangle_A \quad P_{12} |\psi_A\rangle = -|\psi_A\rangle \quad (8.2. 24)$$

Wir betrachten jetzt den Fall für $N = 3$. Es gibt $3! = 6$ linear unabhängige Zustände:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2 \times \mathcal{H}_3 \quad (8.2. 25)$$

$$|\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3\rangle, |\lambda_1 \lambda_3 \lambda_2\rangle, |\lambda_2 \lambda_1 \lambda_3\rangle, |\lambda_2 \lambda_3 \lambda_1\rangle, |\lambda_3 \lambda_1 \lambda_2\rangle, |\lambda_3 \lambda_2 \lambda_1\rangle \quad (8.2. 26)$$

die sich alle aus $|\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3\rangle$ durch Permutationen ergeben.

Es gibt genau einen total symmetrischen Zustand S und einen total antisymmetrischen Zustand A :

$$|\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3\rangle_{S,A} = \frac{1}{\sqrt{3!}} (|\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3\rangle \pm |\lambda_2 \lambda_1 \lambda_3\rangle \pm |\lambda_1 \lambda_3 \lambda_2\rangle + |\lambda_2 \lambda_3 \lambda_1\rangle + |\lambda_3 \lambda_1 \lambda_2\rangle \pm |\lambda_3 \lambda_2 \lambda_1\rangle) \quad (8.2. 27)$$

so daß bei Transpositionen gilt:

$$\left. \begin{matrix} P_{12} \\ P_{13} \\ P_{23} \end{matrix} \right\} |\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3\rangle_{S,A} = \pm |\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3\rangle_{S,A} \quad (8.2. 28)$$

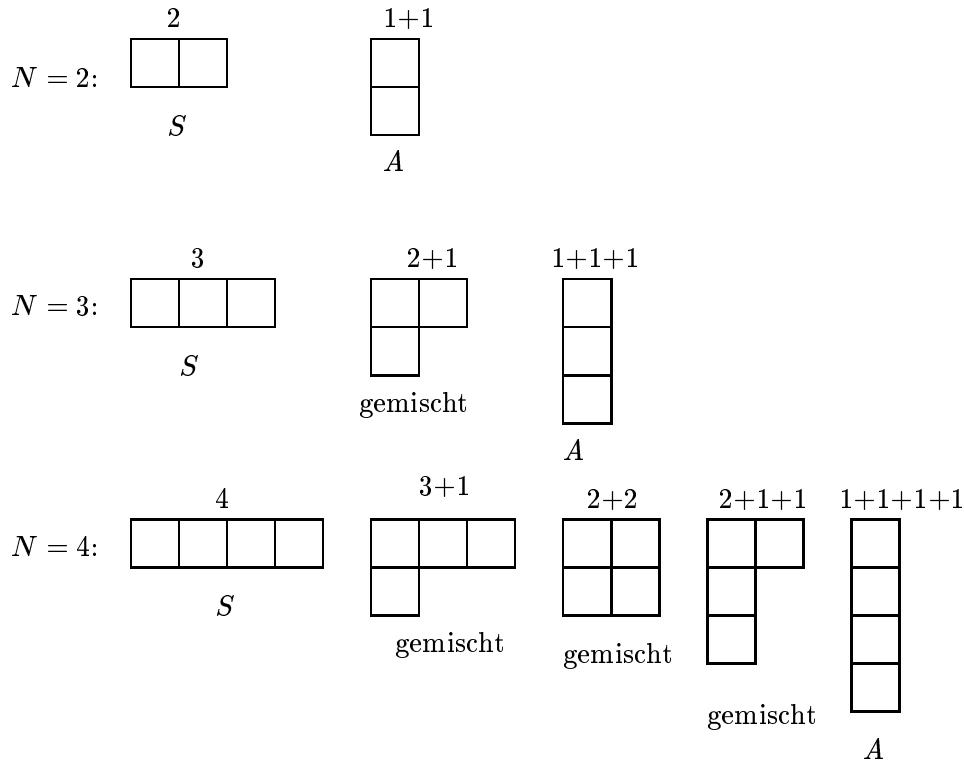


Abbildung 48: Young-Tableaus

Danach gibt es vier Zustände $|\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 \rangle_n$ ($n = 1, 2, 3, 4$) die orthogonal auf $|\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 \rangle_{S,A}$ stehen und kompliziertere Symmetrieeigenschaften haben.

Zur Charakterisierung dienen die sogenannten **Young-Tableaus**: Man zerlege N in alle möglichen Summen $N = N_1 + N_2 + N_3 + \dots$ von natürlichen Zahlen. Zur graphischen Darstellung siehe Abbildung (48). Die Kästchen werden den Teilchen $1, \dots, N$ zugeordnet mit der Maßgabe, daß in jeder Reihe symmetrisiert wird und in jeder Spalte antisymmetrisiert. Das Verfahren läßt sich fortsetzen. Es ist klar, daß jeweils ein total symmetrischer und ein total antisymmetrischer Zustand möglich ist.

Für beliebige Permutationen gilt:

$$P|\lambda_1 \dots \lambda_N \rangle_S = |\lambda_1 \dots \lambda_N \rangle_S \tag{8.2. 29}$$

$$P|\lambda_1 \dots \lambda_N \rangle_A = (-1)^P |\lambda_1 \dots \lambda_N \rangle_A \tag{8.2. 30}$$

mit:

$$(-1)^P = \begin{cases} 1 & \text{wenn } P \text{ gerade} \\ -1 & \text{wenn } P \text{ ungerade} \end{cases} \tag{8.2. 31}$$

Definition 8.2.2: Für Transpositionen:

$$P_{ij}|\lambda_1 \dots \lambda_N \rangle_S = |\lambda_1 \dots \lambda_N \rangle_S \tag{8.2. 32}$$

$$P_{ij}|\lambda_1 \dots \lambda_N \rangle_A = -|\lambda_1 \dots \lambda_N \rangle_A \tag{8.2. 33}$$

Daraus folgt die $|\lambda \rangle_{S,A}$ sind Eigenzustände zu allen P_{ij} mit Eigenwert ± 1 .

Alle anderen $|\lambda_1 \dots \lambda_N \rangle_K$ ($K = 1, \dots, N! - 2$) haben kompliziertere Symmetrieeigenschaften.

Zur Konstruktion:

1.

$$|\lambda_1 \dots \lambda_N \rangle_S = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P P |\lambda_1 \dots \lambda_N \rangle \quad (8.2.34)$$

mit:

$$\begin{aligned} P' |\lambda \rangle_S &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \underbrace{P' P}_{P''} |\lambda_1 \dots \lambda_N \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{P''} P'' |\lambda_1 \dots \lambda_N \rangle = |\lambda \rangle_S \end{aligned} \quad (8.2.35)$$

2.

$$|\lambda_1 \dots \lambda_N \rangle_A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P P |\lambda_1 \dots \lambda_N \rangle \quad (8.2.36)$$

mit:

$$\begin{aligned} P' |\lambda \rangle_A &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P \underbrace{P' P}_{P''} |\lambda_1 \dots \lambda_N \rangle \\ &= (-1)^{P'} \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{P''} (-1)^{P''} P'' |\lambda_1 \dots \lambda_N \rangle = (-1)^{P'} |\lambda \rangle_A \end{aligned} \quad (8.2.37)$$

Wobei folgendes verwendet wurde:

$$P_{ger} P'_{ger} = P''_{ger} \quad P_{ung} P'_{ung} = P''_{ger} \quad (8.2.38)$$

$$P_{ger} P'_{ung} = P''_{ung} \quad (8.2.39)$$

$$(-1)^{P+P'} = (-1)^{P''} \quad (8.2.40)$$

Insbesondere gilt bei Transpositionen:

$$P_{ij} |\lambda \rangle_A = -|\lambda \rangle_A \quad (8.2.41)$$

Der Gesamthilbertraum stellt sich jetzt wie folgt dar:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2 \times \dots \times \mathcal{H}_N = \mathcal{H}_S + \mathcal{H}_A + \mathcal{H}_K \quad (8.2.42)$$

 \mathcal{H}_S = Unterraum der symmetrischen Zustände. \mathcal{H}_A = Unterraum der antisymmetrischen Zustände.Sei A eine Observable, die symmetrisch ist in allen Teilchen $1, \dots, N$.**Definition 8.2.3:** Wir definieren dann die Einteilchenobservable als:

$$A^{(1)} = \sum_{i=1}^N A(\vec{r}_i) \quad (8.2.43)$$

z.B.:

$$\vec{L} = \sum_i L_i \quad (8.2.44)$$

und die Zweiteilchenobservable:

$$A^{(2)} = \sum_{i \neq j} A(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \quad (8.2.45)$$

z.B.:

$$V = \sum_{i < j} V(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \quad (8.2.46)$$

etc.

Es gilt:

$$A\mathcal{H}_{S,A} \subseteq \mathcal{H}_{S,A} \quad (8.2. 47)$$

d.h. durch Anwendung von A auf einen Zustand $|\psi_S\rangle$ oder $|\psi_A\rangle$ ergibt sich wieder ein Zustand $|\psi_S\rangle$ oder $|\psi_A\rangle$.

Beweis:

$$[A, P_{ij}] = 0 \quad \text{bzw.} \quad P_{ij}AP_{ij}^{-1} = A \quad (8.2. 48)$$

$$P_{ij}A|\psi_{S,A}\rangle = P_{ij}AP_{ij}^{-1}P_{ij}|\psi_{S,A}\rangle = A(\pm)|\psi_{S,A}\rangle = \pm A|\psi_{S,A}\rangle \quad (8.2. 49)$$

Insbesondere bleibt ein Zustand symmetrisch bzw. antisymmetrisch in der zeitlichen Entwicklung.

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle \quad U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \quad (8.2. 50)$$

Da $[P_{ij}, H] = 0$ folgt $[P_{ij}, U] = 0$.

Postulat: Die Zustände eines quantenmechanischen Systems von N identischen Teilchen sind entweder total antisymmetrisch oder total symmetrisch. Gemischte symmetrische Zustände sind in der Natur nicht realisiert (Erfahrung).

Teilchen mit symmetrischen Zuständen nennt man **Bosonen**, nach der Bose-Einstein Statistik, und Teilchen mit antisymmetrischen Zuständen **Fermionen**, nach der Fermi-Dirac Statistik.

Theorem von Pauli: Teilchen mit halbzahligen Spin sind Fermionen und Teilchen mit ganzzahligen Spin sind Bosonen. (Zusammenhang zwischen Spin und Statistik) Der Beweis erfolgt in der Quantenfeldtheorie.

	Fermionen (Spin $\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$)	Bosonen (Spin 0 oder 1)
	Neutrinos	Photon ($S = 1$)
	Elektronen	π , K-Mesonen ($S = 0$)
Beispiele:	μ -Meson	
	Nukleon (Proton, Neutron)	
	Quarks	
	ung ger-Kerne	ger ger u. ung ung Kerne
	Komplexe mit einer ungeraden Anzahl von Fermionen	Komplexe mit einer geraden Anzahl von Fermionen

Pauliprinzip: Zwei Fermionen können nicht im gleichen Zustand sein.

Beweis:

$$|\lambda_1 \dots \lambda_i \dots \lambda_j \dots \lambda_N\rangle_A = -|\lambda_1 \dots \lambda_j \dots \lambda_i \dots \lambda_N\rangle_A \quad (8.2. 51)$$

Wenn $i \neq j$ aber auch $\lambda_i = \lambda_j$ dann gilt:

$$|\lambda\rangle_A = -|\lambda\rangle_A = 0 \quad (8.2. 52)$$

Daraus folgt der Aufbau der Atome, die Atomfunktion lautet $|nlms\rangle$. Jeder Quantenzustand ist einfach besetzt.

Die **Slaterdeterminante** für Fermionen lautet:

$$|\lambda_1 \dots \lambda_N\rangle_A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} |\lambda_1\rangle_1 & |\lambda_1\rangle_2 & \dots & |\lambda_1\rangle_N \\ |\lambda_2\rangle_1 & |\lambda_2\rangle_2 & \dots & |\lambda_2\rangle_N \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ |\lambda_N\rangle_1 & |\lambda_N\rangle_2 & \dots & |\lambda_N\rangle_N \end{vmatrix} \quad (8.2. 53)$$

Durch Anwendung von P_{ij} vertauschen zwei Spalten, woraus ein Vorzeichenwechsel folgt.

Der entscheidende Unterschied in der Statistik ist, daß jeder Einteilchenzustand bei Fermionen nur mit keinem bzw. einem Teilchen besetzt sein kann. Bei Bosonen haben wir die Besetzungszahlen:

$$n_\lambda = 0, 1, 2, \dots \rightarrow \infty \quad (8.2. 54)$$

Beispiel: Wir betrachten das He-Atom als Zweifermionensystem:

$$H(12)\varphi(\vec{r}_1\vec{s}_1, \vec{r}_2\vec{s}_2) = E\varphi(\vec{r}_1\vec{s}_1, \vec{r}_2\vec{s}_2) \quad (8.2. 55)$$

$$\varphi(\vec{r}_1\vec{s}_1, \vec{r}_2\vec{s}_2) = -\varphi(\vec{r}_2\vec{s}_2, \vec{r}_1\vec{s}_1) \quad (8.2. 56)$$

Sei H spinunabhängig (Vernachlässigung der Spin-Bahn-Kopplung):

$$H = \frac{\vec{p}_1^2}{2m} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m} + V(\vec{r}_1) + V(\vec{r}_2) + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \quad (8.2. 57)$$

Da H spinunabhängig, können wir separieren:

$$\varphi = \phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\chi(\vec{s}_1, \vec{s}_2) \quad (8.2. 58)$$

Es gibt zwei Möglichkeiten:

1.

$$\varphi_1 = \phi_S\chi_A \quad \text{Parazustand} \quad (8.2. 59)$$

2.

$$\varphi_2 = \phi_A\chi_S \quad \text{Orthozustand} \quad (8.2. 60)$$

Für den Parazustand gilt:

$$\vec{S} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2 \quad (8.2. 61)$$

$$\chi_A(\vec{s}_1, \vec{s}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_1\beta_2 - \alpha_2\beta_1) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle) \quad (8.2. 62)$$

$$\alpha = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |+\rangle \quad \beta = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |-\rangle$$

Da $\vec{S}^2 = 0$ und $S_z = 0$ folgt daraus der Singlettzustand $\downarrow\uparrow$.

Für den Orthozustand (Spintriplett) gilt:

$$\chi_S(\vec{s}_1\vec{s}_2) = \begin{cases} \alpha_1\alpha_2 & s = 1 & M = 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_1\beta_2 + \alpha_2\beta_1) & s = 1 & M = 0 \\ \beta_1\beta_2 & s = 1 & M = -1 \end{cases} \quad (8.2. 63)$$

In der Störungstheorie betrachten wir $\frac{e^2}{r_{12}}$ als Störung:

$$V(\vec{r}) = -\frac{2e^2}{r} \quad (8.2. 64)$$

Die Eigenzustände zu $H_{Wasser} = \frac{p^2}{2m} - \frac{2e^2}{r}$ lauten:

$$\varphi_{nlm}(\vec{r}) \quad \text{mit} \quad E_{nl} = -\frac{4}{n^2}R \quad (8.2. 65)$$

$$E^0 = E_{n_1l_1} + E_{n_2l_2} \quad (8.2. 66)$$

Für den Grundzustand gilt:

$$\phi_S = \varphi_{100}(\vec{r}_1)\varphi_{100}(\vec{r}_2) \quad (8.2. 67)$$

nur symmetrisch möglich.

Der Grundzustand vom Heliumatom ist der Parazustand, daran ändert die Störungstheorie auch nichts mehr.

8.3 2. Quantisierung

Die Einteilchenzustände $|\lambda\rangle$ werden charakterisiert durch die Quantenzahlen, die wir uns angeordnet vorstellen:

$$\lambda_1 < \lambda_2 < \lambda_3 < \dots \quad (8.3. 1)$$

z.B.:

$$\lambda = (nlms) \quad \text{im atomaren Fall} \quad (8.3. 2)$$

$$\lambda = (K_x, K_y, K_z, s) \quad \text{für freie Teilchen} \quad (8.3. 3)$$

Im Falle von N identischen Teilchen haben wir den Gesamthilbertraum:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2 \times \dots \times \mathcal{H}_N \quad (8.3. 4)$$

In der Natur werden aber nur die Zustände mit symmetrischer oder antisymmetrischer Wellenfunktion verwirklicht:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_S + \mathcal{H}_A + \underbrace{\mathcal{H}_{Rest}}_{\text{unrealistisch}} \quad (8.3. 5)$$

Wir skizzieren kurz den Formalismus, der uns gestattet, systematisch die symmetrischen bzw. antisymmetrischen Zustände sukzessive aufzubauen.

8.3.1 Besetzungszahldarstellung

Sei:

$$|\lambda_1, \lambda_2, \dots\rangle_{S,A} \equiv |N_1, N_2, \dots\rangle \quad (8.3. 6)$$

ein orthonormiertes System. Diesen riesigen Hilbertraum nennt man auch Fockraum. N_i ist die Anzahl der Teilchen im Zustand λ_i , so daß $\sum_i \hat{N}_i = \hat{N}$ fest ist.

Symmetrischer Fall: $N_i = 0, 1, 2, 3, \dots, \infty$ Bosonen

Antisymmetrischer Fall: $N_i = 0, 1$ Fermionen (Pauli Prinzip)

Wir betrachten jetzt den symmetrischen Fall (Bosonen):

Definition 8.3.1:

$$a_i |N_1, \dots, N_i, \dots\rangle = \sqrt{N_i} |N_1, \dots, N_i - 1, \dots\rangle \quad (8.3. 7)$$

Der Operator a_i heißt Vernichter eines Teilchens im Zustand i . Die Gesamtzahl wird um eins verringert.

Das einzige, nichtverschwindende Matrixelement von a_i ist:

$$\langle N_1, \dots, N_i - 1, \dots, | a_i | N_1, \dots, N_i, \dots \rangle = \sqrt{N_i} \quad (8.3. 8)$$

Der dazu adjungierte Operator lautet:

Definition 8.3.2:

$$\langle N_i, \dots, N_i, \dots | a_i^+ | N_1, \dots, N_i - 1, \dots \rangle = \sqrt{N_i} \quad (8.3. 9)$$

$$a_i^+ |N_1, \dots, N_i, \dots\rangle = \sqrt{N_i + 1} |N_1, \dots, N_i + 1, \dots\rangle \quad (8.3. 10)$$

Der adjungierte Operator ist dann der Erzeuger.

Zu der Algebra der Operatoren:

Man zeigt sofort, daß gilt:

$$[a_i, a_j] = [a_i^+, a_j^+] = 0 \quad (8.3. 11)$$

da $a_i a_j = a_j a_i$, es gilt ebenso:

$$[a_i, a_j^+] = 0 \quad \text{für } i \neq j \quad (8.3. 12)$$

Es gilt jedoch:

$$a_i^+ a_i | \dots N_i \dots \rangle = a_i^+ \sqrt{N_i} | \dots N_i - 1 \dots \rangle = N_i | \dots N_i \dots \rangle \quad (8.3. 13)$$

$$a_i a_i^+ | \dots N_i \dots \rangle = \sqrt{N_i + 1} a_i | \dots N_i + 1 \dots \rangle = (N_i + 1) | \dots N_i \dots \rangle \quad (8.3. 14)$$

$$a_i a_i^+ - a_i^+ a_i = [a_i, a_i^+] = 1 \quad (8.3. 15)$$

$$[a_i, a_j^+] = \delta_{ij} \quad (8.3. 16)$$

Dies ist die Kommutatoralgebra der Erzeuger und Vernichter (der Bosonen).

$\hat{N}_i = a_i^+ a_i$ ist der Operator der Teilchenzahl im Zustand λ_i .

$$\sum_i a_i^+ a_i | N_1, N_2, \dots \rangle = \underbrace{(N_1 + N_2 + \dots)}_N | N_1, N_2, \dots \rangle \quad (8.3. 17)$$

$$N_{op} = \sum_i a_i^+ a_i \quad (8.3. 18)$$

Der Zustand ohne Teilchen oder im Vakuum lautet:

$$|0\rangle = |N_1 = 0, N_2 = 0, 0, 0, \dots\rangle \quad (8.3. 19)$$

mit $a_i |0\rangle = 0$ für alle i .

Ausgehend von $|0\rangle$ kann man alle Zustände aufbauen:

$$a_i^+ |0\rangle = |0, 0, \dots, N_i = 1, \dots\rangle \quad (8.3. 20)$$

$$a_i^+ a_j^+ |0\rangle = |0, 0, \dots, N_i = 1, \dots, N_j = 1, \dots, 0\rangle \quad i \neq j \quad (8.3. 21)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} a_i^{+2} |0\rangle = |0, 0, \dots, N_i = 2, \dots, 0\rangle \quad (8.3. 22)$$

Allgemein:

$$|N_1, N_2, \dots\rangle = \frac{(a_1^+)^{N_1}}{\sqrt{N_1!}} \frac{(a_2^+)^{N_2}}{\sqrt{N_2!}} \dots |0\rangle \quad (8.3. 23)$$

Dieser Zustand ist automatisch total symmetrisch, da bei einer Vertauschung von $\lambda_i \leftrightarrow \lambda_j$ nur a_i^+ mit a_j^+ den Platz vertauscht. Die a^+ kommutieren aber miteinander.

Wir betrachten jetzt den antisymmetrischen Fall.

Definition 8.3.3: Vernichter:

$$c_i |N_1, \dots, N_i, \dots\rangle = (-1)^{s_i} N_i |N_1, \dots, N_i - 1, \dots\rangle \quad (8.3. 24)$$

$$s_i = \sum_{k=1}^{i-1} N_k \quad (8.3. 25)$$

Der adjungierte Operator ist der Erzeuger:

$$c_i^+ |N_1, \dots, N_i, \dots\rangle = (-1)^{s_i} (1 - N_i) |N_1, \dots, N_i + 1, \dots\rangle \quad (8.3. 26)$$

Wenn $N_i = 0$ dann folgt:

$$c_i |0_i\rangle = 0 \quad (8.3. 27)$$

und wenn $N_i = 1$ dann folgt:

$$c_i^+ |1_i\rangle = 0 \quad (8.3. 28)$$

d.h. jeder Zustand kann höchstens einfach besetzt sein.

Zu der Algebra der Kommutatoren:

$$[c_i, c_j]_+ = [c_i^+, c_j^+]_+ = 0 \quad c_i c_j = -c_j c_i \quad (8.3. 29)$$

$$\text{mit } [A, B]_+ \equiv AB + BA \quad (8.3. 30)$$

$$[c_i, c_j^+]_+ = \delta_{ij} \quad \text{Antikommutatoralgebra} \quad (8.3. 31)$$

Insbesondere gilt:

$$0 = [c_i^+, c_i^+]_+ = 2(c_i^+)^2 \quad (8.3. 32)$$

Somit ist nur Einfacherzeugung möglich.

Diese Operatoren heißen Fermioperatoren.

$c_i^+ c_i$ ist auch hier der Anzahloperator für den Zustand i . ($= 0, 1$)

$$N_{op} = \sum_i c_i^+ c_i \quad (8.3. 33)$$

Im Vakuum oder ohne Teilchen gilt mit $c_i |0\rangle = 0$:

$$c_i^+ |0\rangle = |0, 0, \dots, 1_i, \dots, 0\rangle \quad (8.3. 34)$$

$$c_j^+ c_i^+ |0\rangle = |0, 0, \dots, 1_j, \dots, 1_i, \dots, 0\rangle \quad (8.3. 35)$$

$$c_k^+ c_j^+ c_i^+ |0\rangle = |0, \dots, 1_k, \dots, 1_j, \dots, 1_i, \dots, 0\rangle \quad (8.3. 36)$$

usw.

$$c_{i_1}^+ c_{i_2}^+ \dots |0\rangle = |\dots, 1_{i_1}, \dots, 1_{i_2}, \dots\rangle \quad (8.3. 37)$$

Diese Zustände sind automatisch antisymmetrisch, da die c^+ antikommutieren.

8.3.2 Darstellung der Operatoren

Wir wählen als Einteilchenobservable:

$$A^{(1)} = \sum_{i=1}^N A(\vec{r}_i) \quad (8.3. 38)$$

Sei A_{ij} die Darstellung von $A(\vec{r}_i)$, d.h.

$$A_{ij} = \langle \lambda_i | A | \lambda_j \rangle = \int d\vec{r}_i \varphi_{\lambda_i}^*(\vec{r}_i) A(\vec{r}_i) \varphi_{\lambda_j}(\vec{r}_i) \quad (8.3. 39)$$

Eine Einteilchenobservable verknüpft zwei Zustände miteinander, indem sie den Zustand eines Teilchens verändert.

Die allgemeine Darstellung lautet dann:

$$A^{(1)} = \sum_{ij} A_{ij} c_i^\dagger c_j \quad (8.3. 40)$$

Für eine Zweiteilchenobservable folgt dann:

$$A^{(2)} = \sum_{i_1 i_2 i_3 i_4} A_{i_1 i_2 i_3 i_4} c_{i_1}^\dagger c_{i_2}^\dagger c_{i_3} c_{i_4} \quad (8.3. 41)$$

mit:

$$A_{i_1 i_2 i_3 i_4} = \int dr dr' \varphi_{\lambda_{i_1}}(\vec{r}) \varphi_{\lambda_{i_2}}(\vec{r}') A(\vec{r} - \vec{r}') \varphi_{\lambda_{i_3}}(\vec{r}') \varphi_{\lambda_{i_4}}(\vec{r}) \quad (8.3. 42)$$

Index

- Absorbtion, 113, 117
- Absorption, 2
- Absteigeoperator, 48
- Absteiger, 17
- Alkaliatome, 108
- Anknüpfung ans System, 112
- Antikommutator, 100
- Antikommutatoralgebra, 134
- Anzahloperator, 134
- Atomphysik, 1
- Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte, 22
- Aufsteigeoperator, 48
- Aufsteiger, 17
- Ausbreitungsvektor, 1
- Austrittsarbeit, 2
- Auswahlregel, 117

- Bahndrehimpuls, 47
- Barriere
 - zentrifugale, 54
- Basiswechsel, 31
- Besetzungszahldarstellung, 132
- Besetzungszahlen, 131
- Besselfunktion
 - sphärische, 73
- Besselsche Differentialgleichung
 - sphärische
 - zweiter Ordnung, 63
- Bethel, 110
- Beugung, 2
 - am Spalt, 4
- Beugungsbild, 3
- Bohr-Radius, 55, 84
- Bohrsche Frequenzbedingung, 61
- Bohrsche Magneton, 61
- Bornsche Näherung, 69, 71, 82
- Bose-Teilchen, 99
- Bosonen, 130–133
- Bra-Vektor, 27

- Clebsch-Gordan-Koeffizienten, 105
- Compound-Kern, 79
- Comptoneffekt, 2
- Comptonwellenlänge
 - Comptonwellenlänge, 3
- Coulombpotential, 65, 85

- Darstellungswechsel, 31
- Davisson, 3, 4
- De Broglie, 4

- de Broglie, 4
- δ -Funktions-Normierung, 35
- Differentialoperator, 6
- Dirac, 27
- Dirac'sche δ -Funktion, 23
- Dirac-Bild, 114
- Dirac-Formalismus, 26
- Dirac-Gleichung, 99
- Distribution, 23
- Doppelspalt, 5
- Drehimpuls, 47
- Drehimpulsquantenzahl, 57
- Drei-Körperproblem, 90
- Dublettaufspaltung, 108

- Ehrenfest
 - Satz von, 9
- Eigenwerte, 10
- Eigenwertgleichung, 10
- Eigenwertproblem, 32
- Einheitsoperator, 29
- Elektron
 - leichtes, 61
- Elektronenbeugung, 4
- Elektronenstrahl, 4
- Emission, 2, 113, 117
- Energiesatz, 2
- Entartung, 33, 91
- Entartungsgrad, 91
- entkoppelt
 - dynamisch, 62
- Erzeuger, 132, 134
- Euler-Winkel, 42
- Evolutionoperator, 40

- Fastentartung, 91
- Feinstruktur, 87, 108, 109
- Feinstrukturkonstante, 99, 109
- Fermi, 117
- Fermi-Dirac-Teilchen, 99
- Fermionen, 130–132
- Fermioperatoren, 134
- Fockraum, 132
- Fourierintegral, 23
- Fouriertransformierte, 23
- Funktionenklasse, 10

- gerade, 126
- Germer, 3, 4
- Gitter, 3

- Goldene Regel, 116, 117
- Green'sche Funktion, 79, 87
- Grenzfall
 - asymptotischer, 67
- Grundzustand, 17
 - normierter, 17
- Hamiltonfunktion, 6
- Hamiltonoperator, 6
- Hankelfunktion, 63
- harte Kugel, 74
- Hauptquantenzahl, 57
- He-Atom, 131
- Heisenberg, 39, 114
- Heisenbergbild, 40, 41
- Heliumatom, 90, 96, 131
- Hermite-Polynome, 18
- Hilbertraum, 27
- Impulsdarstellung, 22, 26
- Impulsmittel, 9
- Impulssatz, 2
- Intensität, 5
- Intensitätsverteilung, 5
- Interferenz, 2
- isotrop, 74
- Ket-Vektor, 26
- Ket-Vektoren, 27
- Kommutator
 - retardierter, 123
- Kommutatoralgebra
 - der Erzeuger und Vernichter, 133
- Kontinuitätsgleichung, 7, 8
- Kopplungskonstante, 87
- Korrespondenzprinzip, 6
- Kreisfrequenz, 1
- Kronecker-Symbol, 30
- Kugelflächenfunktion, 52
- Kugelfunktion, 67
- Kugelfunktionen, 51
- Kugelwelle, 68
- Laguerre-Polynome, 58
- Lamb, 110
- Landé-Faktor, 99, 110–112
- Larmorfrequenz, 61
- Legendre-Polynom, 52
- Lichtbeugung, 3, 4
- Lichtquanten, 2
- Lichtwellen, 1
- Linienspektrum, 34
 - reines, 35
- Lippmann-Schwinger-Gleichung, 86, 119
- Matrixmethode, 92
- Maxwell Gleichung, 5
- Maxwell-Gleichungen, 1
- Meßgrößen
 - physikalische, 11
- Mittelwert, 9
- Mittelwerte, 7
- Moment
 - magnetisches, 60
- Multiplett, 98
- Nachbar-Transposition, 126
- Neutronenspektroskopie, 113
- Newtonschen Gleichungen, 1
- Niederenergie-Streuung, 71, 73
- Niveau-Abstoßung, 90
- Normierung, 5
- Nukleon, 99
- Operator, 6
 - absteige-, 17
 - aufsteige-, 17
- Operatoren, 11
 - adjungierte, 29
 - hermitesche, 11, 29
 - im Hilbertraum, 28
 - unitäre, 29
- Operatorprodukt, 30
- optisches Theorem, 121
- Orthonormierung, 30
- Orthozustand, 131
- Ortsdarstellung, 26
- Ortsmittel, 9
- Oszillator
 - harmonischer, 32
 - linearer, harmonischer, 15
- Parazustand, 131
- Paritätsoperator, 43, 52
- Partialwelle, 67
- Partialwellen, 65
- Pauli
 - Theorem von, 130
- Pauli Prinzip, 132
- Pauli-Matrizen, 101
- Pauliprinzip, 130
- Permutation, 126
- Permutationsoperator, 126
- Phasenverschiebung, 68
- Photoeffekt, 2
- Photon, 3

- Photonen, 2
- Planck'sches Wirkungsquantum, 1
- Potential
 - endlicher Reichweite, 71
- Potentialtopf, 19
 - unendlich hoher, 13, 14
- Projektionsoperator, 29, 35, 37
- Propagator
 - freier, 79
- Proton
 - schweres, 61
- Protonenenergie, 73
- Punktspektrum, 34
 - reines, 34

- Quantelung des Drehimpulses, 49
- Quantenelektrodynamik, 3
- Quantenübergänge, 112
- Quantenzahl, 26
 - magnetische, 57

- Radialquantenzahl, 57
- Ramsauer-Effekt, 77
- Raum
 - dualer, 27
- Raumwinkel, 66
- Rayleigh-Schrödinger, 87
- Reaktion, 113
- Reflexionskoeffizient, 21
- Relativkoordinaten, 62
- Resonanz, 74
 - im l -Kanal, 69
- Response, 122
 - allgemeiner linearer, 122
 - linearer, 122
- Responsefunktion, 122
- Rheihe
 - konfluente hypergeometrische, 56
- Richtungsquantelung, 49
- Röntgenlichtbeugung, 3
- Rotationsinvarianz, 44
- Rutherford-Streuformel, 85
- Rydberg-Energie, 55

- S -Matrix, 121
- s -Wellenstreuung
 - am Potentialtopf, 74, 76
- Statistik
 - Fermi-Dirac, 130
- Schattenstreuung, 76
- Schmidt
 - Erhard, 33
- Schrödingerbild, 40, 41
- Schrödingergleichung, 6
 - allgemeine, 7
 - für N Teilchen, 7
 - freies Teilchen, 6
- Schwankungsquadrat, 39
- Schwarzsche Ungleichung, 28, 40
- Schwerpunktskoordinaten, 62
- separabel, 28
- Singlett-Zustand, 107
- Singlettzustand, 131
- Skalarprodukt, 10, 27
- Slaterdeterminante, 130
- Spektraldarstellung, 34, 35
- Spektroskopie
 - optische, 113
- Spektrum
 - diskretes, 20, 54
 - kombiniertes, 37
 - kontinuierliches, 54, 61
 - rein diskretes, 34
 - rein kontinuierliches, 34
- Spiegelinvarianz, 43
- Spin, 39, 97, 99, 130
- Spin-Bahn-Kopplung, 110, 131
- Spin-Bahn-Term, 108
- Spinor, 97
- Spintriplett, 131
- Starkeffekt, 1, 93
 - quadratischer, 94
- Statistik
 - Bose-Einstein, 130
- Stern-Gerlach-Experiment, 99
- Stoßparameter, 71
- Streuamplitude, 67
- Streumatrix, 116
- Streuoperator, 116
- Streuquerschnitt, 65
 - differentieller, 66
 - totaler, 67
- Streuresonanz, 22
- Streustrom, 66
- Streuung
 - elastische, 86, 113
 - inelastische, 86, 113
 - klassische, 71
- Streuzustand, 21
- Stromdichte, 66
- Summenkonvention
 - Einsteinsche, 45
- Superposition, 7
- Superpositionsprinzip, 5
- Suszeptibilität, 123

- Symmetriegrad, 88
- Symmetrietransformation, 43
- Symmetrietransformationen, 42
- Symmetrisierung, 12
- System
 - dynamisches, 40
- T -Matrix, 121
- Teilchen
 - freie, 132
 - komplexe, 86
- Teilchendichte, 66
- Tensorprodukt, 101
- Theorem
 - optisches, 69
- Tomanaga-Bild, 114
- Translationsinvarianz, 44
- Transmissionskoeffizient, 21
- Transmissionskoeffizienten, 23
- Transposition, 126

- Übergangsmatrix, 119
- Übergangsrate, 117
- Übergangswahrscheinlichkeit, 114, 115
- Uhlenbach-Goudsmit, 99
- ungerade, 126
- Unschärferelation, 15
 - allgemeine, 39
 - Heisenbergschen, 39

- Vakuum, 133, 134
- Vakuumfluktuationen, 110
- Variationsverfahren, 95, 96
- Variationszustand, 96
- Vektor
 - dualer, 27
- Vernichter, 132, 133
- Vertauschungsregel, 12
- Vertauschungsrelation, 25
- Vertauschungsrelationen
 - fundamentale, 38
- Vielteilchensystemen, 112

- Wahrscheinlichkeit, 5
- Wahrscheinlichkeitsamplitude, 5
- Wahrscheinlichkeitsdichte, 8, 26
- Wahrscheinlichkeitsstrom, 8
- Wasserstoffatom, 53, 55, 85, 91
- Wechselwirkungsbild, 114
- Welle
 - ebene, 1, 37
- Wellen
 - stehende, 14

- Wronski-Determinante, 21
- Young-Tableaus, 128

- Zeeman-Effekt, 1
 - anomaler, 61, 110
 - normaler, 60
- Zeitordnungssymbol, 115
- Zentrifugalpotential
 - abstoßendes, 54
- Zustände
 - Stationäre, 10
- Zustand, 5, 26
- Zustandsfunktion, 5
- Zustandsvektor, 26
- Zweikörperproblem, 61