

Vorlesungsskript
Prof. Nierste, SS 2009

Quantenmechanik I

Florian Keller Tobias Mayer

22. April 2009

zuletzt aktualisiert am 24. August 2009

Inhaltsverzeichnis

1	Grundbegriffe	5
1.1	Ursprung der Quantenphysik	6
1.2	Zustände, Observable, Operatoren	8
1.3	Ort, Impuls, Energie	27
1.4	Tensorprodukt	42
1.5	Zeitentwicklung	44
2	Teilchen im Potenzial	50
2.1	$V = 0$ (freies Teilchen)	50
2.2	Kastenpotential = Potentialtopf	53
2.3	Harmonischer Oszillator	58
3	Drehungen, Drehimpuls, Spin	68
3.1	Drehungen und ihre Erzeuger	68
3.2	Eigenwerte des Drehimpulsoperators	73
4	Wasserstoffatom	84
4.1	Zentralpotentiale	84
4.2	Wasserstoffatom	88
5	Zeitabhängige Störungstheorie	93
5.1	Nicht entartete Störungstheorie	93
5.2	Entartete Störungstheorie	96
5.3	Anwendung: Feinstruktur des Wasserstoffspektrums	99
6	Streutheorie	103

Literatur

J.J. Sakurai: Modern Quantum Mechanics

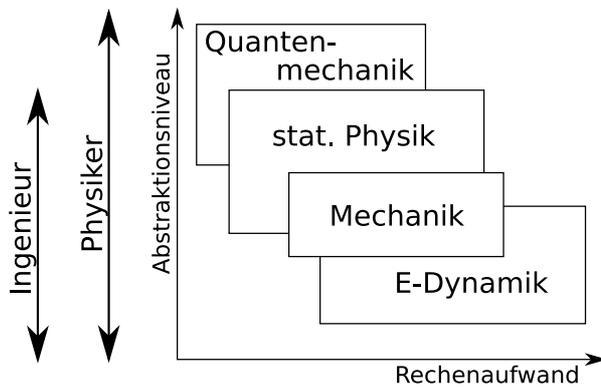
H. Mitter: Quantentheorie

A. Messiah: Quantenmechanik 1,2

C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloe: Quantenmechanik 1,2

F. Schwabl: Quantenmechanik
Quantenmechanik für Fortgeschrittene

G. Münster: Quantentheorie



Welcome, my friends, to the show
that never ends.

(Emerson, Lake and Palmer)

Wenn Sie die Quantenmechanik
nicht schaffen, können Sie
immernoch Diplomingenieur
werden.

(Nierste)

1 Grundbegriffe

Die klassische Physik beschreibt folgende Phänomene nicht korrekt:

- a) ... in der Physik makroskopischer Systeme
 - Energieverteilung der Schwarzkörperstrahlung
 - spez. Wärme bei niedrigen Temperaturen
 - Kondensation
 - Suprafluidität
 - Kohäsion von Festkörpern und Flüssigkeiten
 - Gitterschwingungen (Phononen)
 - el. Leitfähigkeit (Normal-, Halb-, Supraleitung)
 - Ferromagnetismus
- b) ... in der Atom- und Molekülphysik
 - Größe und Stabilität der Atome
 - Ladungsverteilungen
 - Spektren
 - Wechselwirkung mit Licht (z.B. Photoeffekt)
 - Molekülschwingung
 - chem. Bindungen (z.B. van-der-Waals-Bindung)
- c) ... in der Kernphysik
 - Größe und Stabilität der Kerne
 - Wechselwirkung von γ -Strahlen der Kerne
 - radioaktiver Zerfall
 - Kernspaltung und -fusion
- d) ... in der Elementarteilchenphysik
 - Masse, Ladung, Drehimpuls, magn. Moment der Elementarteilchen
 - Wechselwirkung mit Strahlung (z.B. Comptoneffekt)
 - Streuung und Zerfall
 - Teilchenerzeugung

⇒ Die Quantenmechanik bildet die Grundlage des Verständnisses dieser Phänomene.

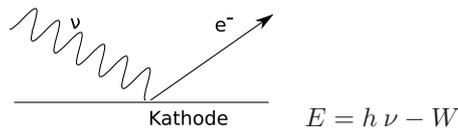
1.1 Ursprung der Quantenphysik

1901 **Max Planck**: Schwarzkörperstrahlung

$$E = h \nu = \hbar \omega \quad \text{mit} \quad \hbar = \frac{h}{2\pi} \quad (1)$$

h ist das Plancksche Wirkungsquantum: $h \approx 6,6 \cdot 10^{-34} \text{Js} = 4 \cdot 10^{-15} \text{eVs}$

1905 **Einstein**: Deutung des Photoeffekts (1886 H. Hertz und W. Hallwachs, Karlsruhe)



Die Energie E ist unabhängig von der Lichtintensität I . W ist die Austrittsarbeit.
Interpretation: Lichtquant = Lichtteilchen = Photon mit Energie

$$E = h \nu$$

$$I \propto \text{Zahl der Photonen}$$

1924 **Compton-Effekt**

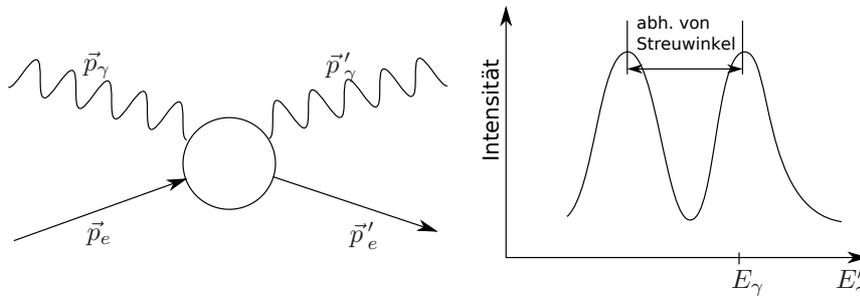
Impuls \vec{p} der Photonen:

$$\text{spez. Relativitätstheorie: } 0 = mc^2 = \sqrt{E^2 - \vec{p}^2 c^2}$$

$$\Rightarrow \quad \hbar c |\vec{k}| = \hbar \omega = E = |\vec{p}| c$$

Vermutung:

$$|\vec{p}| = \hbar |\vec{k}| \quad \text{mit } \vec{k}, \text{ dem Wellenzahlvektor} \quad (2)$$



$$E_\gamma + E_e = E'_\gamma + E'_e$$

$$\vec{p}_e + \vec{p}_\gamma = \vec{p}'_e + \vec{p}'_\gamma, \quad \text{wobei } \vec{p}_e = 0 \text{ und } E_e = mc^2$$

klass. Physik: Elektron wird kontinuierlich beschleunigt, ΔE (aus Dopplereffekt) wächst mit der Zeit.

heute: z.B. 400 Photonen pro cm^3 im Weltall aus kosmischer Hintergrundstrahlung

1923 L-V de Broglie

Hypothese: Wellennatur der Teilchen: Teilchen mit Impuls \vec{p} hat Wellenzahlvektor \vec{k}

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

also

$$\lambda = \frac{h}{|\vec{p}|} \quad (\text{de Broglie-Wellenlänge})$$

$$\lambda \approx \frac{12,2}{\sqrt{E/eV}} \text{ \AA} \quad (\text{nichtrel. Teilchen})$$

1927 Davidson, Gerner: Streuung von e^- an Einkristall, Laue-Diagramm

1928 G. P. Thomson, Rupp: Debye-Scherrer

1905 Rydberg-Ritz-Formel für Spektrallinien des H-Atoms

$$\nu = R \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad \text{mit } n, m \in \mathbb{N}, m > n$$

R ist die Rydbergkonstante

1913 N. Bohr: Energie-Quantisierung

$$E_n = -h \frac{R}{n^2} \quad n \in \mathbb{N}$$

Bohr-Sommerfeld-Quantisierung: klass. Bahn des e^- um Atomkern, Hamiltonfunktion $H(p, q) = \text{const.}$

Annahme:

$$\oint_{\Gamma} p \, dq = n h \quad n = 1, 2, \dots, \infty; \Gamma \text{ ist eine Bahn im Phasenraum}$$

”Ad-hoc-Quantisierung”

1.2 Zustände, Observable, Operatoren

klass. Physik	QM
Welle Teilchen	Zustand

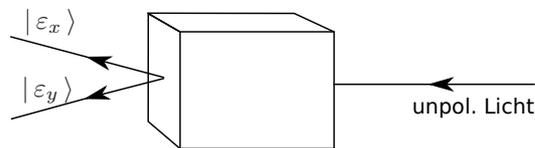
Photon mit Wellenzahlvektor \vec{k} und Polarisation ε , wobei $\begin{cases} \varepsilon = \varepsilon_x \\ \varepsilon = \varepsilon_y \end{cases}$ der Polarisation in $\begin{cases} x- \\ y- \end{cases}$ Richtung entspricht.

$$\text{Zustand: } |\vec{k}, \varepsilon\rangle \quad (3)$$

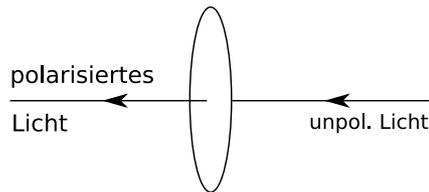
Durch die Parameter ist das Photon vollständig charakterisiert: z.B. $\vec{p} = \hbar |\vec{k}|$, $E = \hbar c |\vec{k}|$

Betrachte zunächst nur die Polarisation

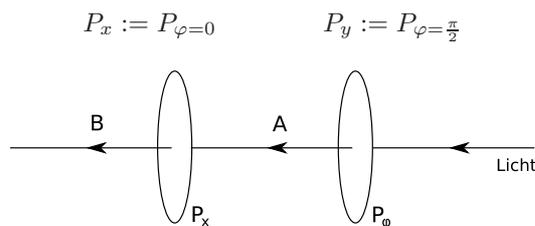
Doppelbrechender Kristall: Kalkspat



Polarisationsfilter P_φ



Polarisiert in Richtung $\vec{e}_x \cos \varphi + \vec{e}_y \sin \varphi$.



Beobachtung:

Intensität ist bei B gegenüber A um $\cos^2 \varphi$ abgeschwächt $\hat{=}$ klass. Wellenbild.

Teilchenbild:

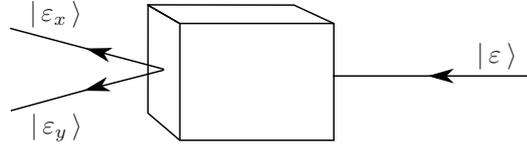
Könnte die Photonenenergie abgeschwächt sein?

\implies Nein $E = h \nu$ ist gleich.

Statistische Interpretation

Die Wahrscheinlichkeit, dass ein in φ -Richtung polarisiertes Photon den Filter P_x passiert ist $\cos^2 \varphi$.

Kalkspat:



$$\text{Komponentenzerlegung: } |\varepsilon\rangle = \alpha |\varepsilon_x\rangle + \beta |\varepsilon_y\rangle \quad (4)$$

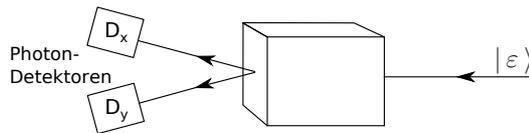
math. Beschreibung: Zustände bilden einen komplexen Vektorraum \mathcal{H} .

Polarisationszustände $\longrightarrow \dim \mathcal{H} = 2$

Zustandsvektoren nennt man auch **Kets**.

$|\varepsilon_\varphi\rangle =$ Zustand eines in $\vec{e}_x \cos \varphi + \vec{e}_y \sin \varphi$ -Richtung linear polarisierten Photons.

Experiment zur statistischen Interpretation der QM



$$|\varepsilon\rangle = \cos \varphi |\varepsilon_x\rangle + \sin \varphi |\varepsilon_y\rangle \quad (5)$$

Beobachtung:

- Es klickt entweder D_x oder D_y .
- Welcher Detektor anspricht ist nicht vorhersehbar.
- Wiederholt man das Experiment oft, so findet man, dass bei N Versuchen D_x etwa $N \cdot \cos^2 \varphi$ -mal und D_y etwa $N \cdot \sin^2 \varphi$ -mal anspricht.

Die Polarisationsfilter und der Kalkspatkristall vermitteln Abbildungen $\mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$, z.B.

$$P_x : |\varepsilon_\varphi\rangle := \cos \varphi |\varepsilon_x\rangle + \sin \varphi |\varepsilon_y\rangle \longrightarrow \cos \varphi |\varepsilon_x\rangle \quad (6)$$

Man schreibt:

$$P_x |\varepsilon_\varphi\rangle := |P_x \varepsilon_\varphi\rangle = \cos \varphi |\varepsilon_x\rangle \quad (7)$$

und nennt P_x einen Operator auf dem Vektorraum \mathcal{H} .

$$P_\varphi : \left\{ \begin{array}{l} P_\varphi |\varepsilon_x\rangle = \cos \varphi |\varepsilon_\varphi\rangle \\ P_\varphi |\varepsilon_y\rangle = \sin \varphi |\varepsilon_\varphi\rangle \end{array} \right\} \quad (8)$$

check:

$$P_\varphi |\varepsilon_\varphi\rangle \stackrel{(6)}{=} P_\varphi [\cos \varphi |\varepsilon_x\rangle + \sin \varphi |\varepsilon_y\rangle] \\ \stackrel{?}{=} \cos \varphi P_\varphi |\varepsilon_x\rangle + \sin \varphi P_\varphi |\varepsilon_y\rangle \quad (9)$$

$$\stackrel{(8)}{=} \cos^2 \varphi |\varepsilon_\varphi\rangle + \sin^2 \varphi |\varepsilon_\varphi\rangle \\ = |\varepsilon_\varphi\rangle \quad (10)$$

\implies (9) macht Sinn $\implies P_\varphi$ ist ein linearer Operator.

Allgemein definieren wir für (zunächst) $\dim \mathcal{H} = N < \infty$:

1. Skalarprodukt:

Abb: $|\psi\rangle, |\chi\rangle \in \mathcal{H} \longrightarrow \langle \psi | \chi \rangle \in \mathbb{C}$ mit:

$$\bullet \langle \psi | \lambda_1 \chi_1 + \lambda_2 \chi_2 \rangle = \lambda_1 \langle \psi | \chi_1 \rangle + \lambda_2 \langle \psi | \chi_2 \rangle \text{ mit } \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C} \quad (11)$$

$$\bullet \langle \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2 | \chi \rangle = \lambda_1^* \langle \psi_1 | \chi \rangle + \lambda_2^* \langle \psi_2 | \chi \rangle \quad (12)$$

$$\bullet \langle \psi | \psi \rangle = \begin{cases} 0 & \text{für } |\psi\rangle = 0 \\ > 0 & \text{für } |\psi\rangle \neq 0 \end{cases} \quad (13)$$

$$\bullet \| |\psi\rangle \| = \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle} \quad \text{Norm von } |\psi\rangle$$

Gilt $\langle \psi | \chi \rangle = 0$, so heißen $|\psi\rangle$ und $|\chi\rangle$ zueinander orthogonal. $\langle \chi | \psi \rangle = \langle \psi | \chi \rangle^*$

2. Orthonormalbasis (ONB) $\{|e_1\rangle, \dots, |e_N\rangle\}$

$$\langle e_i | e_j \rangle = \delta_{ij} \quad (14)$$

3. linearer Operator A

Abb: $|\psi\rangle \in \mathcal{H} \longrightarrow A |\psi\rangle = |A \psi\rangle \in \mathcal{H}$

mit

$$A |\lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2\rangle = \lambda_1 |A \psi_1\rangle + \lambda_2 |A \psi_2\rangle \quad (15)$$

4. Zu A hermitesch konjugierter oder adjungierter Operator A^\dagger

$$\langle \chi | A |\psi\rangle = \langle \chi | A \psi \rangle =: \langle A^\dagger \chi | \psi \rangle = \langle \psi | A^\dagger \chi \rangle^*$$

für alle $|\chi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}$.

5. Ein hermitescher oder selbstadjungierter Operator A

ist ein Operator, der $A = A^\dagger$ erfüllt. (17)

6. Eigenket oder Eigenvektor von A

$|\psi_\lambda\rangle$ heißt Eigenket oder Eigenvektor zum Eigenwert λ von A, wenn

$$A |\psi_\lambda\rangle = \lambda |\psi_\lambda\rangle \quad \lambda \in \mathbb{C} \quad (18)$$

gilt.

7. Existiert ein Operator A^{-1} so, dass

$$A^{-1} A |\psi\rangle = A A^{-1} |\psi\rangle = |\psi\rangle \quad (19)$$

für alle $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ gilt, so ist A invertierbar, und es heißt A^{-1} der zu A **inverse Operator**.

8. Gilt $U^{-1} = U^\dagger$ (also $U^\dagger U = U U^\dagger = 1$),
so heißt U **unitär**.

$$\langle U \chi | U \psi \rangle = \langle \chi | U^\dagger U |\psi\rangle = \langle \chi | \psi \rangle$$

9. **Matrixdarstellung**

Betrachte ONB $\{|e_1\rangle, \dots, |e_N\rangle\}$:

$$a_{ij} := \langle e_i | A | e_j \rangle \quad 1 < i, j < N \quad (20)$$

definiert $a \in \mathbb{C}^{N \times N}$ die Matrixdarstellung von A bezüglich $\{|e_1\rangle, \dots, |e_N\rangle\}$.

Wiederholung

- Zustände (z.B. $|\vec{k}, \varepsilon\rangle$) bilden komplexen Vektorraum \mathcal{H}
- Operatoren Abbildungen $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$
- Skalarprodukt $\langle \psi | \chi \rangle \in \mathbb{C}$
- Eigenket $A |\psi_\lambda\rangle = \lambda |\psi_\lambda\rangle$
- Matrixdarstellung $a_{ij} = \langle e_i | A | e_j \rangle$

Eigenschaften

a) $\langle \chi | \psi \rangle = \langle \psi | \chi \rangle^*$ (21)

b) **Dreiecksungleichung**

$$\| |\chi\rangle + |\psi\rangle \| \leq \| |\chi\rangle \| + \| |\psi\rangle \| \quad (22)$$

Gleichheit für $|\psi\rangle, |\chi\rangle$ linear abhängig

Schwarz'sche Ungleichung

$$|\langle \psi | \chi \rangle| \leq \| |\psi\rangle \| \cdot \| |\chi\rangle \| \quad (23)$$

c) Mit A und B ist auch $\lambda_1 A + \lambda_2 B$ ein linearer Operator, wobei

$$(\lambda_1 A + \lambda_2 B) |\psi\rangle := \lambda_1 |A\psi\rangle + \lambda_2 |B\psi\rangle$$

d) Für $A \cdot B$, definiert durch $(A \cdot B) |\psi\rangle = A|B\psi\rangle$ gilt, i.A.

$$AB \neq BA$$

e) Mit der **Basiszerlegung**

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_{n=1}^N c_n |e_n\rangle \\ |\chi\rangle &= \sum_{k=1}^N d_k |e_k\rangle \end{aligned} \quad (24)$$

gilt

$$\langle \chi | A | \psi \rangle = \sum_{k,n=1}^N d_k^* c_n \underbrace{\langle e_k | A | e_n \rangle}_{a_{kn}} = d^\dagger a c \quad (25)$$

wobei $c = \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix}$ $d = \begin{pmatrix} d_1 \\ \vdots \\ d_N \end{pmatrix}$

f) Aus (25) folgt:

- a^{-1} ist Matrixdarstellung von A^{-1}
- a^\dagger ist Matrixdarstellung von A^\dagger
- $a \cdot b$ ist Matrixdarstellung von $A \cdot B$

- mit $|\psi_\lambda\rangle = \sum_{n=1}^N l_n |e_n\rangle$ in (18) ist $\begin{pmatrix} l_1 \\ \vdots \\ l_N \end{pmatrix}$ EV von a zum Eigenwert λ

g) **Unitärer Basiswechsel** $U^\dagger U = 1$ $|e'_i\rangle = U|e_i\rangle$
 $\Rightarrow \langle e'_i | e'_j \rangle = \langle Ue_i | Ue_j \rangle = \langle e_i | \underbrace{U^\dagger U}_1 | e_j \rangle = \langle e_i | e_j \rangle = \delta_{ij}$
 $\Rightarrow \{|e'_1\rangle, \dots, |e'_n\rangle\}$ ist auch ONB

Wegen f) haben hermitesche Operatoren A die selben Spektraleigenschaften wie hermitesche $N \times N$ Matrizen

(i) Es gibt ONB aus Eigenkets $\{|e_1\rangle, \dots, |e_n\rangle\}$

$$A|e_i\rangle = \lambda_i |e_i\rangle \quad (26)$$

(ii) Alle Eigenwerte λ_i sind reell

Eigenschaft (i) schreibt man üblicherweise als

$$A = \sum_{j=1}^N \lambda_j |e_j\rangle \langle e_j| \quad (27)$$

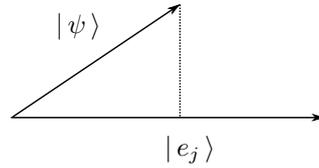
Matrix $a = \sum_{j=1}^N \lambda_j e^{(j)} e^{(j)\dagger}$, wobei $e^{(j)} = \begin{pmatrix} e_1^{(j)} \\ \vdots \\ e_N^{(j)} \end{pmatrix}$ EV zu a

Dabei ist

$$P_j = |e_j\rangle \langle e_j| \quad (28)$$

ein **Projektionsoperator**.

$$P_j |\psi\rangle = |e_j\rangle \langle \psi | e_j \rangle = \langle \psi | e_j \rangle \langle e_j |$$



$$P_j^2 = |e_j\rangle \langle e_j | e_j \rangle \langle e_j | = |e_j\rangle \langle e_j | = P_j$$

$P_j^\dagger = P_j$, wie aus der Matrixdarstellung

$$P = \begin{pmatrix} 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & & & \vdots \\ \vdots & & 1 & & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \end{pmatrix} \leftarrow \text{j-te Zeile} \tag{29}$$

$$[\alpha |\psi\rangle \langle \chi|]^\dagger = \alpha^* |\chi\rangle \langle \psi| \text{ für } \alpha \in \mathbb{C}$$

Zuordnung

$$\mathbf{ket} |\psi\rangle \leftrightarrow \mathbf{bra} \langle \psi | \tag{30}$$

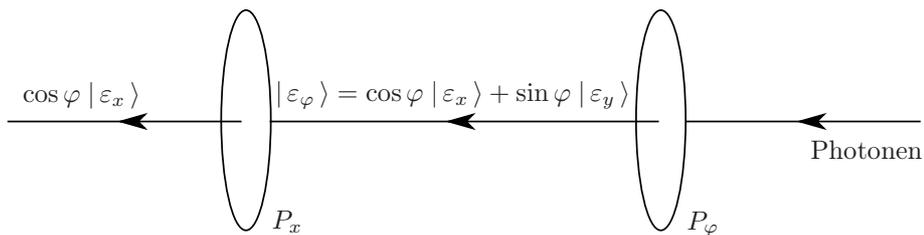
Entsprechung im \mathbb{C}^n

Spaltenvektor $c \leftrightarrow$ Zeilenvektor c^\dagger

aus dem englischen bra(c)ket = Klammer

Aus (6) und (8) finden wir für unsere Polarisationsoperatoren

$$P_\varphi^2 = P_\varphi, \quad P_\varphi^\dagger = P_\varphi \quad \Rightarrow P_\varphi \text{ ist Projektor}$$



P_φ präpariert Photonzustand $|\varepsilon_\varphi\rangle$ mit Polarisation ε_φ , P_x misst die x-Komponente der Polarisation von $|\varepsilon_\varphi\rangle$.

Statistische Interpretation

Wahrscheinlichkeit, dass für $|\varepsilon_\varphi\rangle$ die Polarisation P_x gemessen wird

$$W_x = \cos^2 \varphi \stackrel{(7)}{=} \|\langle \varepsilon_\varphi | \varepsilon_x \rangle\|^2 \stackrel{(21)}{=} \langle \varepsilon_\varphi | \varepsilon_x \rangle \langle \varepsilon_x | \varepsilon_\varphi \rangle = \langle \varepsilon_\varphi | P_x | \varepsilon_\varphi \rangle \quad (31)$$

wobei die Normierung $\langle \varepsilon_\varphi | \varepsilon_\varphi \rangle = 1$ verwendet wurde.

Ersetzt man P_x durch P_y , so findet man

$$W_y = \sin^2 \varphi = \langle \varepsilon_\varphi | P_y | \varepsilon_\varphi \rangle \quad (32)$$

$W_y + W_x = 1$, was in $P_x + P_y = \mathbb{1}$ und

$$P_x P_y = P_y P_x = 0 \quad (33)$$

begründet ist.

Messpostulate der Quantenmechanik

- i) **Observable** (= messbare physikalische Größe) werden durch selbstadjungierte Operatoren beschrieben.
- ii) Wiederholt man eine Messung mehrfach an im Zustand $|\psi\rangle$ präpariertes Teilchen, so ist der Mittelwert der durch den Operator A beschriebenen Observable durch den **Erwartungswert von A im Zustand $|\psi\rangle$**

$$W = \frac{\langle \psi | A | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (34)$$

gegeben.

- iii) Die statistische **Varianz** der wiederholten Messungen ist

$$\begin{aligned} \sigma^2 &= \frac{\langle \psi | (A - W\mathbb{1})^2 | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \\ &= \frac{\langle \psi | A^2 | \psi \rangle - 2W\langle \psi | A | \psi \rangle + W^2\langle \psi | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \\ &= \frac{\langle \psi | A^2 | \psi \rangle - \langle \psi | A | \psi \rangle^2}{\langle \psi | \psi \rangle} \end{aligned} \quad (35)$$

Die **Standardabweichung** $\sigma := \sqrt{\sigma^2}$ heißt **Unschärfe von A im Zustand $|\psi\rangle$**

Kurzschreibweise

$$\frac{\langle \psi | A | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} =: \langle A \rangle \quad \sigma =: \Delta A \quad (36)$$

Im Fall der Polarisation P_x sind die möglichen Messwerte

0 (kein Ansprechen des Detektors)

und 1 (Detektor spricht an)

Erwartungswert

$$\langle P_x \rangle \langle \varepsilon_\varphi | P_x | \varepsilon_\varphi \rangle = \cos^2 \varphi \quad (37)$$

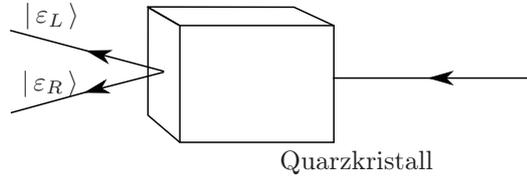
Unschärfe

$$\begin{aligned}
|\Delta P_x|^2 &= \langle \varepsilon_\varphi | P_x^2 | \varepsilon_\varphi \rangle - \cos^4 \varphi \\
&= \cos^2 \varphi - \cos^4 \varphi \\
&= \cos^2 \varphi \sin^2 \varphi \\
&= \frac{1}{4} \sin^2(2\varphi)
\end{aligned} \tag{38}$$

$$\left. \begin{array}{l} \varphi = 0 \quad \Delta P_x = 0 \quad | \varepsilon_{\varphi=0} \rangle = | \varepsilon_x \rangle \\ \varphi = \frac{\pi}{2} \quad \Delta P_x = 0 \quad | \varepsilon_{\varphi=\frac{\pi}{2}} \rangle = | \varepsilon_y \rangle \end{array} \right\} \text{Zustand minimaler Unschärfe}$$

$$\left(\text{EV von } P_x \text{ zum EW } \begin{Bmatrix} 1 \\ 0 \end{Bmatrix} \right)$$

$$\varphi = \frac{\pi}{4} \implies \Delta P_x = \frac{1}{2} \text{ Zustand maximaler Unschärfe}$$

Zirkular polarisierte Photonen

$$\text{linkshändiges Photon: } | \varepsilon_L \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} | \varepsilon_x \rangle + \frac{i}{\sqrt{2}} | \varepsilon_y \rangle \tag{39}$$

$$\text{rechtshändiges Photon: } | \varepsilon_R \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} | \varepsilon_x \rangle - \frac{i}{\sqrt{2}} | \varepsilon_y \rangle \tag{40}$$

$$\text{Orthogonal: } \langle \varepsilon_R | \varepsilon_L \rangle = \frac{1}{2} \langle \varepsilon_x + i \varepsilon_y | \varepsilon_x + i \varepsilon_y \rangle = \frac{1}{2} \langle \varepsilon_x | \varepsilon_x \rangle + \frac{i^2}{2} \langle \varepsilon_y | \varepsilon_y \rangle = 0 \tag{42}$$

Operatoren:

$$\left. \begin{array}{l} P_L = | \varepsilon_L \rangle \langle \varepsilon_L | \\ P_R = | \varepsilon_R \rangle \langle \varepsilon_R | \end{array} \right\} \text{misst } \left\{ \begin{array}{l} \text{links-} \\ \text{rechts-} \end{array} \right\} \text{zirkulare} \tag{42}$$

Polarisation bzw. präpariert $\left\{ \begin{array}{l} \text{links-} \\ \text{rechts-} \end{array} \right\}$ zirkulare Photonen aus unpolarisiertem Lichtstrahl.

Basiswechsel:

$$\begin{aligned}
P_L &= | \varepsilon_L \rangle \langle \varepsilon_L | = \frac{1}{2} (| \varepsilon_x \rangle + i | \varepsilon_y \rangle) \cdot (\langle \varepsilon_x | - i \langle \varepsilon_y |) \\
&= \frac{1}{2} P_x + \frac{1}{2} P_y + \frac{i}{2} | \varepsilon_y \rangle \langle \varepsilon_x | - \frac{i}{2} | \varepsilon_x \rangle \langle \varepsilon_y |
\end{aligned} \tag{44}$$

\implies Matrixdarstellung bzgl. $\{ | \varepsilon_x \rangle, | \varepsilon_y \rangle \}$

$$p_L = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix} \tag{44}$$

links-zirkularer Polarisationsfilter
(→ Jones-Formalismus in der Optik)

$$P_R = \frac{1}{2} P_x + \frac{1}{2} P_y - \frac{i}{2} |\varepsilon_y\rangle \langle \varepsilon_x| + \frac{i}{2} |\varepsilon_x\rangle \langle \varepsilon_y|$$

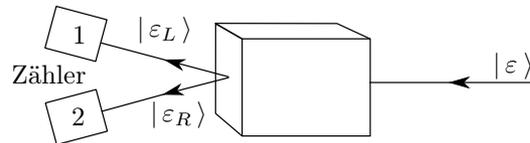
$$P_R = P_L^* = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix} \quad (45)$$

Bemerkte:

$$P_L = P_L^\dagger, \quad P_R = P_R^\dagger$$

weil $[\alpha|\psi\rangle\langle\chi|]^\dagger = \alpha^*|\chi\rangle\langle\psi|$

Messung der zirkularen Polarisation



1. $|\varepsilon\rangle = |\varepsilon_L\rangle$:

$$\langle \varepsilon_L | P_L | \varepsilon_L \rangle \stackrel{(42)}{=} \langle \varepsilon_L | \varepsilon_L \rangle \langle \varepsilon_L | \varepsilon_L \rangle = 1$$

$$\langle \varepsilon_L | P_R | \varepsilon_L \rangle = \langle \varepsilon_L | \varepsilon_R \rangle \langle \varepsilon_R | \varepsilon_L \rangle = 0$$

⇒ Zähler 1 klickt immer, Zähler 2 nie.

check: Ergebnis in $\{|\varepsilon_x\rangle, |\varepsilon_y\rangle\}$ -Basis

$$(39) (40) \implies \langle \varepsilon_L | P_L | \varepsilon_L \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (1 \quad -i) \underbrace{\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix}}_{P_L} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{4} (1 \quad -i) \begin{pmatrix} 2 \\ 2i \end{pmatrix} = 1$$

$$\langle \varepsilon_L | P_R | \varepsilon_L \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (1 \quad -i) \underbrace{\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix}}_{=0} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$$

$$= 0$$

Unschärfe:

$$\langle \varepsilon_L | \underbrace{(\Delta P_{L,R})^2}_{P_{L,R}^2 - \langle P_{L,R} \rangle^2} | \varepsilon_L \rangle = 0$$

2. $|\varepsilon\rangle = |\varepsilon_\varphi\rangle$, Basis $\{|\varepsilon_x\rangle, |\varepsilon_y\rangle\}$

$$\begin{aligned}
 (6) (44) \implies \langle \varepsilon_\varphi | P_L | \varepsilon_\varphi \rangle &= (\cos \varphi \quad \sin \varphi) \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \varphi \\ \sin \varphi \end{pmatrix} \\
 &= (\cos \varphi \quad \sin \varphi) \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{-i\varphi} \\ ie^{-i\varphi} \end{pmatrix} \\
 &= \frac{1}{2} e^{-i\varphi} (\cos \varphi \quad \sin \varphi) \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} = \frac{1}{2}
 \end{aligned} \tag{46}$$

$$\text{Ebenso: } \langle \varepsilon_\varphi | P_R | \varepsilon_\varphi \rangle = \frac{1}{2} \tag{47}$$

\implies Jeder der beiden Zähler spricht in 50% der Fälle an.

Unschärfe:

$$\begin{aligned}
 \langle \varepsilon_\varphi | (\Delta P_{L,R})^2 | \varepsilon_\varphi \rangle &= \langle \varepsilon_\varphi | P_{L,R}^2 | \varepsilon_\varphi \rangle - \langle \varepsilon_\varphi | P_{L,R} | \varepsilon_\varphi \rangle^2 \\
 &= \frac{1}{2} - \frac{1}{4} = \frac{1}{4}
 \end{aligned}$$

$$\Delta P_{L,R}(\varepsilon_\varphi) = \sqrt{\frac{1}{4}} = \frac{1}{2} \tag{48}$$

Kopenhagener Interpretation des Messprozesses

Messungen verändern das physikalische Objekt, das der Messung unterzogen wird. Hat die Messung der Observable A den Wert λ ergeben, so befindet sich das Objekt **nach** der Messung in einem Eigenzustand von A mit EW λ („Spontane Zustandsreduktion“).

Erwartungswerte selbstadj. Operatoren A sind reell.

$$\begin{aligned}
 \langle \psi | A | \psi \rangle^* &= \langle \psi | A^\dagger | \psi \rangle \\
 &= \langle \psi | A | \psi \rangle
 \end{aligned} \tag{49}$$

antiselbstadjungierte Operatoren \longrightarrow imaginäre EW

$$\text{Kommutator} \quad [A, B] := AB - BA \tag{50}$$

$$\text{Anti-Kommutator} \quad \{A, B\} := AB + BA \tag{51}$$

$$A = A^\dagger \quad B = B^\dagger \quad \implies \quad [A, B]^\dagger = -[A, B] \tag{52}$$

$$\{A, B\}^\dagger = \{A, B\} \tag{53}$$

Betrachte Zustand $|\psi\rangle$ mit $\langle A \rangle := \langle \psi | A | \psi \rangle$ und $\langle \psi | \psi \rangle = 1$

$$\begin{aligned}
 \overline{A} &= A - \langle A \rangle \\
 \overline{B} &= B - \langle B \rangle
 \end{aligned} \tag{54}$$

Schwarz'sche Ungleichung (23)

$$\begin{aligned}
\| |\bar{A}\psi\rangle \| \cdot \| |\bar{B}\psi\rangle \| &\geq |\langle \bar{A}\psi | \bar{B}\psi \rangle| \\
&= |\langle \psi | \overline{AB} | \psi \rangle| \quad , \text{ da } \bar{A}^\dagger = \bar{A} \\
&= \frac{1}{2} \left| \underbrace{\langle \psi | [\bar{A}, \bar{B}] | \psi \rangle}_{\text{imagiär}} + \underbrace{\langle \psi | \{\bar{A}, \bar{B}\} | \psi \rangle}_{\text{reell, wg (49)}} \right| \\
&\geq \frac{1}{2} |\langle \psi | [\bar{A}, \bar{B}] | \psi \rangle| \quad , \text{ da } |z| \geq |\text{Im } z| \text{ für } z \in \mathbb{C} \\
&\stackrel{(54)}{=} \frac{1}{2} |\langle \psi | [A, B] | \psi \rangle| \tag{55}
\end{aligned}$$

Unschärfe:

$$\begin{aligned}
(\Delta A)^2 &= \langle \psi | (A - \langle A \rangle)^2 | \psi \rangle \\
&= \langle \bar{A}\psi | \bar{A}\psi \rangle = \| |\bar{A}\psi\rangle \|^2 \\
(55) \iff \Delta A \cdot \Delta B &\geq \frac{1}{2} |\langle \psi | [A, B] | \psi \rangle| \tag{56}
\end{aligned}$$

\implies **Unschärferektion**

Gilt $[A, B] = 0$, so nennt man A und B **kommensurabel** (= „gemeinsam messbar“) oder kompatibel.

Es gibt dann eine Basis aus gemeinsamen Eigenkets

$$|\alpha_i \beta_j\rangle \quad \alpha_i, \beta_j \in \mathbb{R},$$

so dass

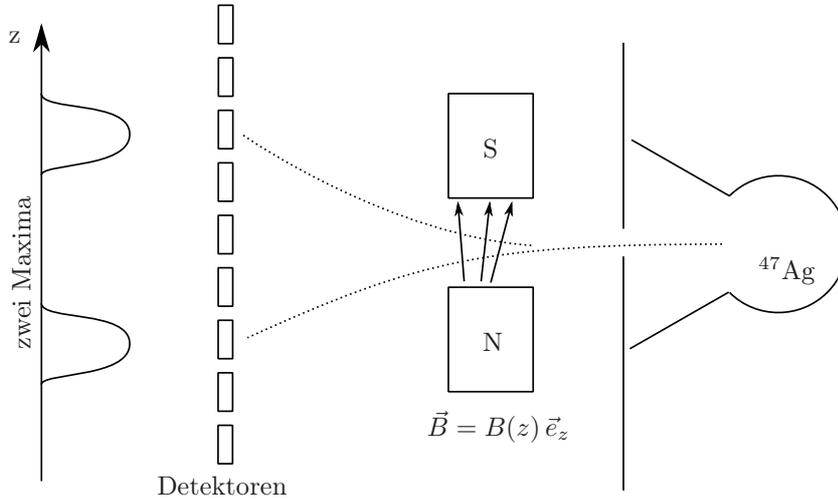
$$\begin{aligned}
A |\alpha_i \beta_j\rangle &= \alpha_i |\alpha_i \beta_j\rangle \\
B |\alpha_i \beta_j\rangle &= \beta_j |\alpha_i \beta_j\rangle
\end{aligned}$$

Für diese Zustände ist $\Delta A = \Delta B = 0$. Die Eigenwerte α_i, β_j nennt man auch **Quantenzahlen** von $|\alpha_i \beta_j\rangle$ zu A und B .

Stern-Gerlach-Versuch

1922 O. Stern, W. Gerlach

Silber-Atome: paramagnetisch mit magn. Moment $\vec{\mu}$.



klassisch:

$$\text{pot. Energie } V = -\vec{\mu} \vec{B}$$

$$\text{Kraft } \vec{F} = -\nabla V$$

$$F_z = \mu_z \frac{\partial B}{\partial z}$$

Atome können mit jedem Winkel nach oben oder unten abgelenkt werden, abhängig von μ_z .

1925: Goudsmit und Uhlenbeck entdecken den **Elektronenspin** (=Eigendrehimpuls)

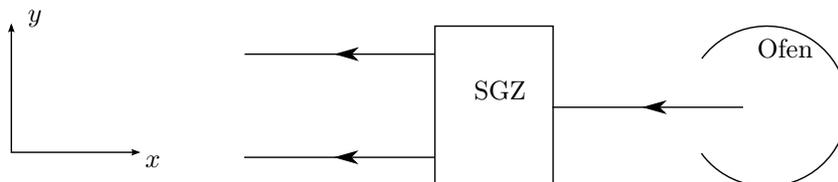
$$\vec{\mu} = -\frac{e}{m_e} \vec{S}; \quad e > 0 \quad (57)$$

Silberatom ^{47}Ag : $\vec{\mu}$ aus dem 47. Elektron (in der 5s-Schale).

Die Maxima entsprechen den Werten

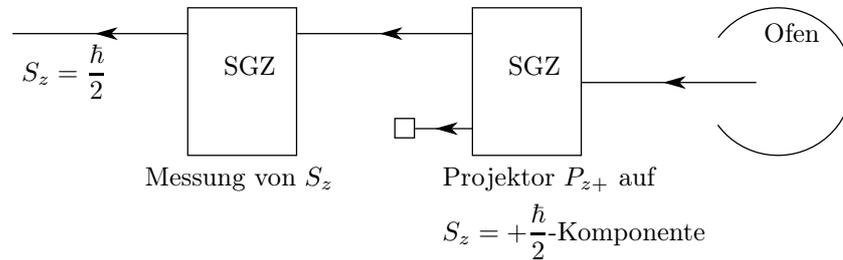
$$S_z = \pm \frac{\hbar}{2}$$

Schematisch:



Zwei SG-Apparate:

a)

Elektron mit $S_z = \frac{\hbar}{2}$: $|S_z+\rangle$

$$\Rightarrow \left. \begin{matrix} P_{z+} \\ P_{z-} \end{matrix} \right\} |S_z+\rangle = \begin{cases} |S_z+\rangle \\ 0 \end{cases}, \quad \langle S_z- | S_z+\rangle = 0$$

Spin-Operator:

$$\begin{aligned} S_z |S_z+\rangle &= \frac{\hbar}{2} |S_z+\rangle \\ S_z |S_z-\rangle &= -\frac{\hbar}{2} |S_z-\rangle \end{aligned} \quad (58)$$

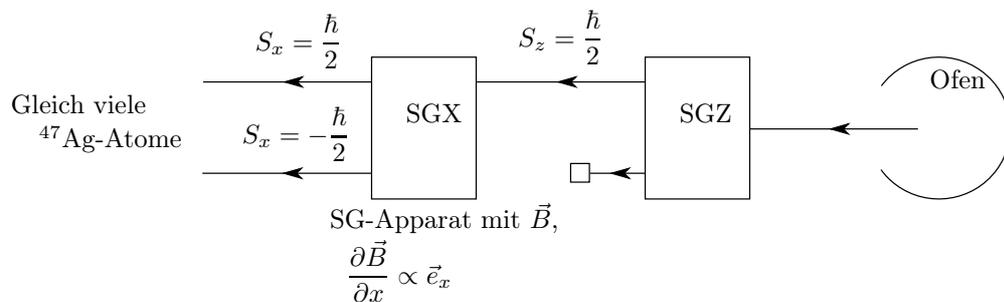
Erwartungswert:

$$\langle S_z+ | S_z | S_z+\rangle = \frac{\hbar}{2} \quad (59)$$

Unschärfe:

$$\langle S_z+ | S_z^2 - \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 | S_z+\rangle = 0$$

b)



$$\Rightarrow |S_x+\rangle = \frac{\alpha}{\sqrt{2}} |S_z+\rangle + \frac{\beta}{\sqrt{2}} |S_z-\rangle$$

$$\langle S_x+ | S_x+ \rangle = 1 \Rightarrow |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 2$$

Experiment \Rightarrow gleich große Komponenten

$$\Rightarrow |\alpha| = |\beta| = 1$$

Allgemein: $|\psi\rangle$ und $e^{i\varphi}|\psi\rangle$ beschreiben den selben physikalischen Zustand, denn für alle A gilt:

$$\langle \psi | A | \psi \rangle = \langle e^{i\varphi} \psi | A | e^{i\varphi} \psi \rangle$$

\Rightarrow o.B.d.A. wählen Phasen von $|S_z+\rangle, |S_z-\rangle$ so, dass $\alpha = \beta = 1$ ist

$$\begin{aligned} |S_x+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|S_z+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|S_z-\rangle \\ |S_x-\rangle &= -\frac{1}{\sqrt{2}}|S_z+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|S_z-\rangle \end{aligned} \quad (60)$$

Projektoren:

$$\begin{aligned} P_{x\pm} &= |S_x\pm\rangle\langle S_x\pm| \\ &= \frac{1}{2}|S_z+\rangle\langle S_z+| \pm \frac{1}{2}|S_z+\rangle\langle S_z-| \pm \frac{1}{2}|S_z-\rangle\langle S_z+| + \frac{1}{2}|S_z-\rangle\langle S_z-| \end{aligned} \quad (61)$$

\Rightarrow Matrixdarstellung bzgl. $\{|S_z+\rangle, |S_z-\rangle\}$

$$p_{x\pm} = \begin{pmatrix} 1 & \pm 1 \\ \pm 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (62)$$

Spin-Operator:

$$S_x |S_x\pm\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} |S_x\pm\rangle \quad (63)$$

Darstellung bzgl. $\{|S_z+\rangle, |S_z-\rangle\}$: Invertiere (60):

$$\begin{aligned} |S_z+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|S_x+\rangle - |S_x-\rangle) \\ |S_z-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|S_x+\rangle + |S_x-\rangle) \end{aligned} \quad (64)$$

$$\begin{aligned} \langle S_z+ | S_x | S_z+\rangle &= \frac{1}{2} (\langle S_x+ | S_x | S_x+\rangle - \langle S_x- | S_x | S_x+\rangle - \\ &\quad - \langle S_x+ | S_x | S_x-\rangle + \langle S_x- | S_x | S_x-\rangle) \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar}{2} - \frac{\hbar}{2} \right) \\ &= 0 \end{aligned}$$

Ebenso:

$$\langle S_z- | S_x | S_z-\rangle = 0$$

\Rightarrow Erwartungswert = 0

Klar: Gleich viele ^{47}Ag - Atome mit $S_x = \frac{\hbar}{2}$ und $S_x = -\frac{\hbar}{2}$ beobachtet.

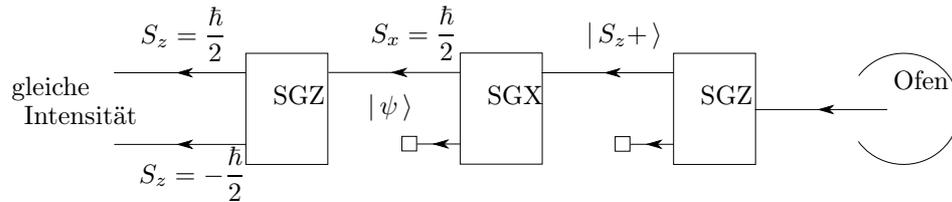
$$\begin{aligned} \langle S_z\pm | S_x | S_z\mp\rangle &= \frac{1}{2} (\langle S_x+ | \mp \langle S_x- |) S_x (|S_x+\rangle \pm |S_x-\rangle) \\ &= \frac{1}{2} \left[\frac{\hbar}{2} - \left(-\frac{\hbar}{2} \right) \right] \\ &= \frac{\hbar}{2} \end{aligned} \quad (65)$$

⇒ Matrixdarstellung bzgl. $\{|S_z+\rangle, |S_z-\rangle\}$:

$$s_x = \begin{pmatrix} \langle S_z+ | S_x | S_z+\rangle & \langle S_z+ | S_x | S_z-\rangle \\ \langle S_z- | S_x | S_z+\rangle & \langle S_z- | S_x | S_z-\rangle \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (66)$$

(65) entspricht: $\langle S_z+ | S_x | S_z-\rangle = (1 \ 0) \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}$

c)



check:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= P_{x+} |S_z+\rangle \\ &= |S_{x+}\rangle \langle S_{x+} | S_z+\rangle \\ &\stackrel{(61)}{=} \frac{1}{2} |S_z+\rangle + \frac{1}{2} |S_z-\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} |S_{x+}\rangle \end{aligned}$$

Nun: **SGY** (Apperatur drehen)

x -Achse und y -Achse gleichberechtigt

Also (59a):

$$\begin{aligned} |S_{y+}\rangle &= \frac{\alpha}{\sqrt{2}} |S_z+\rangle + \frac{\beta}{\sqrt{2}} |S_z-\rangle \\ |S_{y-}\rangle &= \frac{\alpha}{\sqrt{2}} |S_z+\rangle - \frac{\beta}{\sqrt{2}} |S_z-\rangle \end{aligned} \quad (67)$$

mit $|\alpha| = |\beta| = 1 \Leftrightarrow \langle S_{y\pm} | S_z | S_{y\pm}\rangle = 0$

$$\langle S_{y+} | S_{y-}\rangle = \frac{1}{2} (|\alpha|^2 - |\beta|^2) = 0$$

Weiter:

$$\begin{aligned} 0 &= \langle S_{y\pm} | S_x | S_{y\pm}\rangle \\ &= \frac{1}{2} (\alpha^*, \pm\beta^*) \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \pm\beta \end{pmatrix} \\ &= \pm \frac{\hbar}{4} (\alpha^* \beta + \beta^* \alpha) \\ &= \pm \frac{\hbar}{2} \text{Re}(\alpha^* \beta) \end{aligned} \quad (68)$$

Zyklische Vertauschung $(x, y, z) \rightarrow (z, x, y)$

$$\begin{aligned}
 & \langle S_y \pm | S_x | S_y \mp \rangle \\
 &= \langle S_x \pm | S_z | S_x \mp \rangle \\
 &\stackrel{(60)}{=} \frac{1}{2} \left(\mp \frac{\hbar}{2} \mp \frac{\hbar}{2} \right) \\
 &= \mp \frac{\hbar}{2}
 \end{aligned} \tag{69}$$

Andererseits mit (67):

$$\begin{aligned}
 & \langle S_y \pm | S_x | S_y \mp \rangle \\
 &= \frac{1}{2} (\alpha^*, \pm \beta^*) \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \mp \beta \end{pmatrix} \\
 &= \pm \frac{\hbar}{4} (-\alpha^* \beta + \beta^* \alpha) \\
 &= \mp \frac{\hbar}{2} \text{Im}(\alpha^* \beta)
 \end{aligned} \tag{70}$$

(68)-(70) bedeuten:

$$\text{Re}(\alpha^* \beta) = 0 \wedge \text{Im}(\alpha^* \beta) = 1$$

Lösung z.B. $\alpha = 1, \beta = i$

Also:

$$|S_y \pm \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |S_z + \rangle \pm \frac{i}{\sqrt{2}} |S_z - \rangle \tag{71}$$

Inverse:

$$\begin{aligned}
 |S_z + \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|S_y + \rangle + |S_y - \rangle) \\
 |S_z - \rangle &= \frac{i}{\sqrt{2}} (-|S_x + \rangle + |S_x - \rangle)
 \end{aligned} \tag{72}$$

Matrixdarstellung von S_y bzgl. $\{|S_z + \rangle, |S_z - \rangle\}$ (analog zu (66)):

$$s_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \tag{73}$$

Pauli-Matrizen:

$$\sigma_1 = \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{74}$$

Spin-Operator:

$$S_j = \frac{\hbar}{2} \sigma_j \tag{75}$$

Eigenschaften der Pauli-Matrizen (siehe Aufgabe 6)

$$\begin{aligned}
 \sigma_j \sigma_k &= \delta_{jk} \mathbb{1} + \sum_{l=1}^3 i \epsilon_{jkl} \sigma_l \\
 [\sigma_j, \sigma_k] &= 2i \sum_{l=1}^3 \epsilon_{jkl} \sigma_l
 \end{aligned} \tag{76}$$

wobei ϵ_{jkl} das Levi-Civita-Symbol ist.

$$\sigma_j = \sigma_j^\dagger; \quad \text{tr } \sigma_j = 0 \quad (77)$$

Jede hermitesche 2×2 -Matrix M lässt sich schreiben als

$$M = a_0 \mathbb{1} + \sum_{l=1}^3 a_l \sigma_l \quad (78)$$

Aus (77) folgt:

$$a_0 = \frac{1}{2} \text{tr } M, \quad \text{da } \text{tr } \mathbb{1} = 2 \quad (79)$$

Aus (76) folgt:

$$\begin{aligned} \text{tr } [M, \sigma_n] &= \sum_{l=1}^3 a_l \text{tr } [\sigma_l, \sigma_n] \\ &= \sum_{l=1}^3 a_l \delta_{ln} \text{tr } \mathbb{1} \\ &= 2a_n \\ a_l &= \frac{1}{2} \text{tr } [M, \sigma_l] \end{aligned} \quad (80)$$

(75)/(76) implizieren die **Vertauschungsrelation für Spinoperatoren**

$$[S_j, S_k] = i\hbar \sum_{l=1}^3 \epsilon_{jkl} S_l \quad (81)$$

Wegen $[S_j, S_k] \neq 0$ für $j \neq k$ sind verschiedene Spinoperatoren inkommensurabel. Wegen (siehe (76)) $\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \sigma_3^2 = \mathbb{1}$ ist jedoch

$$\vec{S}^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = 3 \frac{\hbar^2}{4} \cdot \mathbb{1} \quad (82)$$

Damit ist:

$$[\vec{S}^2, S_j] = 0 \quad \text{für } j = 1, 2, 3 \quad (83)$$

\Rightarrow Der **Gesamtspin** \vec{S}^2 ändert sich durch Messungen von S_x , S_y oder S_z nicht

Seltsame Analogie:

Elektron		Photon	
$\uparrow S_z+\rangle$	(58)	$ \varepsilon_x\rangle$	(5)
$\downarrow S_z-\rangle$	(59)	$ \varepsilon_y\rangle \dots$	(5)
$ S_z\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\pm S_z+\rangle + S_z-\rangle)$	(60)	$ \varepsilon_{\varphi=\frac{\pi}{4}}\rangle$	(5)
$ S_y\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(S_z+\rangle \pm i S_z-\rangle)$	(71)	$ \varepsilon_{\varphi=\frac{3\pi}{4}}\rangle$	(39)/(40)
		$ \varepsilon_{L,R}\rangle$	

üblich Schreibweise

$$\begin{aligned} |S_z+\rangle &=: |\uparrow\rangle && \text{“spin up”} \\ |S_z-\rangle &=: |\downarrow\rangle && \text{“spin down”} \end{aligned} \quad (84)$$

Basiswechsel

$$|e'_j\rangle = |Ue_j\rangle, \quad j = 1, \dots, N \text{ mit } U^\dagger U = \mathbb{1} \quad (85)$$

$A = A^\dagger$

$$A|e_j\rangle = \lambda_j|e_j\rangle \quad \text{mit } |e_j\rangle \text{ Eigenkets} \quad (86)$$

Welcher Operator entspricht A in der Basis $\{|e'_j\rangle\}$?

$$(86) \Rightarrow \underbrace{U A U^\dagger U}_{\mathbb{1}} |e_j\rangle = U \lambda_j |e_j\rangle$$

$$(85) \Rightarrow \begin{aligned} U A U^\dagger |e'_j\rangle &= \lambda_j |e'_j\rangle \\ A' |e'_j\rangle &= \lambda_j |e'_j\rangle \end{aligned}$$

mit

$$A' = U A U^\dagger \quad (87)$$

A und A' sind **unitär äquivalent**. Sie beschreiben die selbe Physik, insbesondere haben sie das selbe Spektrum $\{\lambda_j\}$

Bsp:

$$U S_x U^\dagger = S_z$$

Matrixdarstellung von U bzgl. $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ (siehe Aufgabe 6a):

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ i & -i \end{pmatrix}$$

$\Rightarrow S_z$ und S_x sind physikalisch äquivalent (EW $-\frac{\hbar}{2}, \frac{\hbar}{2}$)

basisunabhängige **Spur** eines Operators A :

$$\text{tr } A := \sum_{j=1}^N \langle e_j | A | e_j \rangle \quad (88)$$

Beweis der Basisunabhängigkeit:

Vollständigkeitsrelation: $\sum_{k=1}^N |e'_k\rangle\langle e'_k| = 1$

$$\begin{aligned}
 \text{tr } A &:= \sum_{j,k,l=1}^N \langle e_j | e'_k \rangle \langle e'_k | A | e'_l \rangle \langle e'_l | e_j \rangle \\
 &= \sum_{j,k,l=1}^N \langle e'_k | A | e'_l \rangle \langle e'_l | e_j \rangle \langle e_j | e'_k \rangle \\
 &= \sum_{k,l=1}^N \langle e'_k | A | e'_l \rangle \underbrace{\langle e'_l | e'_k \rangle}_{\delta_{lk}} \\
 &= \sum_{k=1}^N \langle e'_k | A | e'_k \rangle \\
 \text{tr } A &= \sum_{j=1}^N \lambda_j \quad \text{Summe der Eigenwerte} \tag{89}
 \end{aligned}$$

ebenso basisunabhängig:

$$\text{tr } A^n = \sum_{j=1}^N \lambda_j^n, \quad n \in \mathbb{Z} \tag{90}$$

1.3 Ort, Impuls, Energie

de Broglie: Elektronen verhalten sich wie Wellen, wobei $\vec{p} = \hbar\vec{k}$.

Ket für Elektronen mit Impuls \vec{p} :

$$|\vec{p}\rangle \hat{=} e^{i\vec{k}\vec{x}} = e^{i\frac{\vec{p}\vec{x}}{\hbar}} \quad (\text{ebene Welle}) \quad (91)$$

Eigenwertgleichung:

$$P_j |\vec{p}\rangle = p_j |\vec{p}\rangle \quad (= \hbar k_j |\vec{p}\rangle) \quad (92)$$

mit p_j , der j-ten Komponente von \vec{p}

Idee:

$$P_j e^{i\frac{\vec{p}\vec{x}}{\hbar}} = p_j e^{i\frac{\vec{p}\vec{x}}{\hbar}}$$

mit P_j Operator und p_j Eigenwert

$$P_j = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \quad (93)$$

P_j ist ein **Differentialoperator!**

Bildet eine Menge von Funktionen $f : x \rightarrow f(x)$ einen Vektorraum, so spricht man von einem Funktionenraum.

(Standard-)Beispiele:

1. $C[a, b]$ = Menge der auf $[a, b]$ stetigen Funktionen $f : x \in [a, b] \rightarrow f(x)$
 $C[\mathbb{R}^n]$ = Menge der auf dem \mathbb{R}^n stetigen Funktionen
 allgemein $C[T]$ wobei T eine beliebige Teilmenge des \mathbb{R}^n ist
 Klar: mit f, g ist auch $\alpha f + \beta g$ mit $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ stetig $\Rightarrow C[\dots]$ ist Vektorraum
2. $C^n[T]$ = Menge der n -mal stetig differenzierbaren Funktionen $f : x \in [T] \rightarrow f(x)$
 $C^\infty[T]$ = Menge der ∞ -mal stetig differenzierbaren Funktionen $f : x \in [T] \rightarrow f(x)$
3. Schwartz-Raum: umfasst Funktionen, die selbst und deren Ableitungen für $|x| \rightarrow \infty$ schneller abfallen als jede Potenz:

$$\mathcal{S} = \mathcal{S}[\mathbb{R}] := \left\{ f \in C^\infty[\mathbb{R}] : \max \left[\left| x^p \frac{d^k f}{dx^k} \right| \right] < \infty, \quad \text{für alle } p, k \in \mathbb{N}_0 \right\}$$

Bemerkung: $e^{-\alpha x^2} \in \mathcal{S}$

$$\mathcal{S}[\mathbb{R}^n] := \left\{ f \in C^\infty[\mathbb{R}^n] : \max \left[\left| x^p \frac{\partial^{k_1 + \dots + k_n} f}{\partial x_1^{k_1} \dots \partial x_n^{k_n}} \right| \right] < \infty, \quad \text{für alle } p, k_1, \dots, k_n \in \mathbb{N}_0 \right\}$$

4. $\mathcal{L}^2[T]$: Menge aller Funktionen, für die

$$\int_T |f(x)|^2 dx$$

existiert $\hat{=}$ Vektorraum der **quadratintegriblen Funktionen**.

Es gilt:

- $C^\infty[a, b] \subset C^n[a, b] \subset \dots \subset C[a, b] \subset \mathcal{L}^2[a, b]$
- $\mathcal{S}[\mathbb{R}^n] \subset C^\infty[\mathbb{R}^n] \subset \dots \subset C^n[\mathbb{R}^n] \subset C[\mathbb{R}^n]$
aber weder $C[\mathbb{R}^n] \supset \mathcal{L}^2[\mathbb{R}^n]$ noch
 $C[\mathbb{R}^n] \subset \mathcal{L}^2[\mathbb{R}^n]$!

Skalarprodukt (Innenprodukt)

$$\langle f | g \rangle = \int_T f^*(x) g(x) dx \quad (94)$$

sinnvoll für 1-3.

Die Definitionseigenschaft (13) ist jedoch für $\mathcal{L}^2[T]$ verletzt, siehe z.B. für $\mathcal{L}^2[\mathbb{R}]$

$$f(x) = \begin{cases} 1 & x = 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (95)$$

$$\|f\|^2 = \langle f | f \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx = 0, \text{ aber } f \neq 0$$

Trick: f und g heißen **äquivalent**, $f \sim g$, wenn

$$\int_T |f(x) - g(x)|^2 dx = 0 = \|f - g\|^2 \quad (96)$$

Die **Äquivalenzklassen** erfüllen dann auch (13).

Also: Zwei Funktionen f, g , die (96) erfüllen, werden identifiziert, sie beschreiben die selbe Physik. z.B: f aus (95) erfüllt $f \sim 0$ (Nullfunktion)

5. $L^2[T]$ = Menge aller Äquivalenzklassen bzgl. (96) in $\mathcal{L}^2[T]$. (97)
(94) ist ein Skalarprodukt in $L^2[T]$.

Räume, auf denen ein Skalarprodukt definiert ist, heißen **unitäre Räume**, oder **Innenproduktträume**.

D.h. die in 1,2,3,5 behandelten Räume sind unitäre Räume.

Es ist V ein unitärer Raum und $(f_n) = (f_1, f_2, \dots)$ eine Folge in V .

(f_n) heißt **Cauchyfolge**, wenn es für jedes $\varepsilon > 0$ ein $N \in \mathbb{N}$ gibt, so dass für alle $m, n \geq N$

$$\|f_m - f_n\|^2 < \varepsilon \quad (98)$$

ist.

Naiv: (f_n) konvergiert gegen ein f .

Problem: f muss nicht unbedingt in V liegen!

Besitzt eine Cauchyfolge (f_n) einen Grenzwert f in V , so heißt V vollständig.

Bsp mit Zahlenfolgen

$$\mathbb{Q} \ni \left\{ 1, \frac{14}{10}, \frac{141}{100}, \frac{1414}{1000}, \dots \right\} \longrightarrow \sqrt{2} \notin \mathbb{Q}$$

\mathbb{Q} ist nicht vollständig

\mathbb{R} ist vollständig

Gibt es eine Basis von V , die aus höchstens abzählbar vielen Basisvektoren besteht, so heißt V **separabel**.

Ein **vollständiger, separabler, unitärer Vektorraum** heißt **Hilbertraum**.

Quantenmechanische Zustände entsprechen immer Vektoren (Kets) in einem **Hilbertraum**.

Die drei wichtigsten Hilberträume

1. Jeder **endlichdimensionale, unitäre** Vektorraum ist Hilbertraum.
2. $L^2[T]$ mit Skalarprodukt (94), siehe (97), $\dim L^2 = \infty$
3. quadratisch summierbare Zahlenfolgen

$$l^2 = \left\{ (a_n) : \sum_{n=0}^{\infty} |a_n|^2 < \infty \right\}$$

mit Skalarprodukt

$$\langle (a_n) | (b_n) \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} a_n^* b_n \quad (99)$$

$\dim l^2 = \infty$

Hilberträume gleicher Dimension sind **isomorph**, insbesondere $L^2[T] \simeq l^2$.

$$\text{QM} : \begin{cases} \text{math. Beschreibung in } L^2 : & \text{Wellenmechanik} \\ & \text{(Schrödinger)} \\ \text{math. Beschreibung in } l^2 : & \text{Matrizenmechanik} \\ & \text{(Heisenberg, Bord, Jordan)} \end{cases}$$

Basis in $L^2[T] =$ vollst. orthonormalisiertes Funktionalsystem $\{f_0(x), f_1(x), \dots\}$, also

a)

$$\langle f_j | f_k \rangle = \int_T d^n x f_j^*(x) f_k(x) = \delta_{jk} \quad (100)$$

b) Jedes $f \in L^2[T]$ lässt sich entwickeln, als

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k f_k(x) \quad \text{mit } a_k \in \mathbb{C} \quad (101)$$

Nun ist

$$\int_T d^n x f_j^*(x) f(x) = \langle f_j | f \rangle = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \underbrace{\langle f_j | f_k \rangle}_{\delta_{jk}} = a_j \quad (102)$$

und

$$\|f\|^2 = \langle f | f \rangle \stackrel{(101)}{=} \sum_{k,n=0}^{\infty} a_k^* a_n \langle f_k | f_n \rangle = \sum_{k=0}^{\infty} |a_k|^2 \quad (103)$$

Also:

$$f \in L^2[T] \iff \langle f | f \rangle < \infty \iff \sum_{k=0}^{\infty} |a_k|^2 < \infty \iff (a_n) \in l^2$$

(a_n) ist also der ∞ -große Koeffizientenvektor von f bzgl. der Basis $\{f_n(x)\}$.

Analog:

$$g(x) = \sum_{n=0}^{\infty} b_n f_n(x)$$

$$\langle f | g \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} a_n^* b_n \quad (104)$$

Lineare Operatoren im Hilbertraum \mathcal{H}

$$A : \quad f \in \underbrace{\mathcal{D}(A)}_{\text{Def-Bereich}} \subset \mathcal{H} \longrightarrow Af \in \mathcal{H} \quad (105)$$

z.B: P_j in (93) ist nicht für alle $f \in L^2$ definiert, f muss fast überall differenzierbar sein.

$$\begin{aligned} \langle g | P_j f \rangle &= \int_T d^n x \, g^*(x) P_j f(x) \\ &= \int_T d^n x \, g^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} f(x) \end{aligned}$$

sinnvoll für $f \in \mathcal{D}(P_j)$ und $g \in L^2$.

Physikalische Zustände $\psi(x) \in L^2$ heißen **Wellenfunktionen**.
Erwartungswert einer Messung von P_j

$$\langle \psi | P_j | \psi \rangle = \int_T d^n x \, \psi^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} \psi(x) \quad (106)$$

Impulsoperator

$$\vec{P} = \frac{\hbar}{i} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{i} \nabla \quad (107)$$

Ortsoperator

$$\vec{\mathcal{X}} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \text{ bzw. } \mathcal{X}_j = x_j \quad (108)$$

wobei

$$\mathcal{X}_j : \psi(x) \in \mathcal{D}(\mathcal{X}_j) \subset L^2[T] \longrightarrow \mathcal{X}_j \psi(x) \quad (109)$$

\mathcal{X}_j, P_j sind lineare Operatoren, z.B.

$$\mathcal{X}_j (\alpha \psi(x) + \beta \chi(x)) = \alpha \mathcal{X}_j \psi(x) + \beta \mathcal{X}_j \chi(x)$$

Heisenbergsche Vertauschungsrelation

$$[\mathcal{X}_j, P_k] = i \hbar \delta_{jk} \mathbb{1} \text{ auf } \mathcal{D}(\mathcal{X}_j) \cap \mathcal{D}(P_k) \quad (110)$$

auch:

$$[\mathcal{X}_j, \mathcal{X}_k] = 0 = [P_j, P_k] \quad (111)$$

(dies folgt aus dem Satz von Schwarz $\frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial x_j}$)
 Beweis von (110)

$$\begin{aligned}
 [\mathcal{X}_j, P_k] \psi(x) &= (\mathcal{X}_j P_k - P_k \mathcal{X}_j) \psi(x) \\
 &= \frac{\hbar}{i} \left[\mathcal{X}_j \frac{\partial}{\partial x_k} \psi(x) - \frac{\partial}{\partial x_k} (\mathcal{X}_j \psi(x)) \right] \\
 &= \frac{\hbar}{i} \left[\mathcal{X}_j \frac{\partial}{\partial x_k} \psi(x) - \underbrace{\left(\frac{\partial}{\partial x_k} x_j \right)}_{\delta_{jk}} \psi(x) - \mathcal{X}_j \frac{\partial}{\partial x_k} \psi(x) \right] \\
 &= -\frac{\hbar}{i} \delta_{jk} \psi(x) \\
 &= i\hbar \delta_{jk} \psi(x) \\
 \implies [\mathcal{X}_j, P_k] &= i\hbar \delta_{jk}
 \end{aligned}$$

Beschreibt man einen physikalischen Zustand durch eine Wellenfunktion $\psi(x)$ mit $\vec{P}, \vec{\mathcal{X}}$ in (107),(108), so spricht man von der **Ortsdarstellung**.

Für $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ ist der Eigenwert der Ortsmessung gegeben durch

$$\begin{aligned}
 \langle \psi | \vec{\mathcal{X}} | \psi \rangle &= \begin{pmatrix} \langle \psi | \mathcal{X}_1 | \psi \rangle \\ \langle \psi | \mathcal{X}_2 | \psi \rangle \\ \langle \psi | \mathcal{X}_3 | \psi \rangle \end{pmatrix} \\
 &= \int_T d^n x \psi^*(x) \vec{x} \psi(x) \\
 &= \int_T d^n x |\psi|^2 \vec{x} \\
 &= \text{Schwerpunkt einer Dichteverteilung } |\psi|^2.
 \end{aligned} \tag{112}$$

Wahrscheinlichkeit, das Elektron im Volumen V zu finden:

$$P(V) = \int_V d^n x |\psi(x)|^2 \tag{113}$$

Für den zu A adjungierten Operator A^\dagger gilt

$$\langle A^\dagger f | g \rangle = \langle f | A g \rangle \tag{114}$$

für alle $f \in \mathcal{D}(A^\dagger)$ und $g \in \mathcal{D}(A)$.

A heißt **hermitesch** (oder **symmetrisch**), wenn

$$\langle A f | g \rangle = \langle f | A g \rangle \tag{115}$$

für $f, g \in \mathcal{D}(A)$, d.h. „ $A = A^\dagger$ “ für $f, g \in \mathcal{D}(A)$. Gilt (115) und $\mathcal{D}(A^\dagger) = \mathcal{D}(A)$, so heißt A selbstadjungiert, also „ $A = A^\dagger$ “.

Es kann passieren, dass (115) erfüllt ist, aber $\mathcal{D}(A^\dagger) \not\subseteq \mathcal{D}(A)$ und $A^\dagger \neq A$, d.h. (113) ist verletzt für $f \notin \mathcal{D}(a)$, $f \in \mathcal{D}(A^\dagger)$. Dann ist A **hermitesch**, aber **nicht selbstadjungiert**. **Impulsoperator** in $L^2[\mathbb{R}]$:

$$\begin{aligned} \langle f | P g \rangle &= \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} dx f^*(x) \frac{d}{dx} g(x) \\ &= -\frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{d f^*(x)}{dx} g(x) + \frac{\hbar}{i} \underbrace{\left[f^*(x) g(x) \right]_{-\infty}^{\infty}}_{=0} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx (P f)^* g(x) \\ &= \langle P f | g \rangle \end{aligned}$$

$\implies P$ ist hermitesch.

Und wegen

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx (P f)^* g(x) = \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx g^*(x) P f(x) \right]^*$$

ist $\mathcal{D}(P) = \mathcal{D}(P^\dagger)$.

$\implies P$ ist selbstadjungiert.

Ebenso: \mathcal{X} ist selbstadjungiert in $L^2[\mathbb{R}]$.

A heißt beschränkt, wenn es eine Zahl $K > 0$ gibt, so dass

$$\| A f \| \leq K \| f \| \quad (116)$$

für alle $f \in \mathbb{R}$.

Bsp: U unitär:

$$\| U f \| = \| f \| \quad \longrightarrow \quad K = 1$$

\mathcal{X} und P sind in $L^2[\mathbb{R}]$ unbeschränkt.

Das **Spektrum** σ eines Operators A besteht aus allen $\lambda \in \mathbb{C}$, für die

$$A - \lambda \mathbb{1}$$

kein beschränktes Inverses besitzt.

Für $\lambda \notin \sigma$ ist die **Resolvente**

$$R_\lambda(A) = (A - \lambda \mathbb{1})^{-1} \quad (117)$$

definiert und beschränkt.

Jeder Eigenwert λ gehört zu σ .

$$(A - \lambda \mathbb{1}) f = 0 \quad \implies \quad (A - \lambda \mathbb{1})^{-1} \text{ existiert nicht.}$$

Für $A = A^\dagger$ (d.h. selbstadjungiert) gilt:

1. $\sigma = \sigma_p \cup \sigma_c$, wobei das **Punktspektrum** bzw. **diskretes Spektrum** σ_p die Menge der Eigenwerte bezeichnet und σ_c **kontinuierliches Spektrum** heißt.
2. σ enthält nur **reelle** λ , für $\text{Im } \lambda \neq 0$.

$$\|R(\lambda)\| \leq \frac{1}{|\text{Im } \lambda|}$$

(Die Norm $\|A\|$ eines Operators ist die kleinste Zahl $K > 0$, die $\|Af\| \leq K\|f\|$ erfüllt.)

3. Zu $\lambda \in \sigma_c$ kann man beliebig genaue **approximative Eigenvektoren** finden:
Zu $\varepsilon > 0$ gibt es ein $f_\varepsilon \in \mathcal{H}$ mit

$$\|(A - \lambda \mathbb{1}) f_\varepsilon\| < \varepsilon \quad (118)$$

$$\left(\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \|(A - \lambda \mathbb{1}) f_\varepsilon\| = 0 \iff \lim_{\varepsilon \rightarrow \infty} \|R_\lambda f_\varepsilon\| = \infty \right)$$

Veranschaulichung:

1. **Ortsoperator** \mathcal{X} in $L^2[\mathbb{R}]$:

$$\mathcal{X}\psi(x) = x\psi(x) \neq \lambda\psi(x) \quad \text{für } \psi(x) \neq 0$$

$$\longrightarrow \sigma_p = \emptyset$$

Inverses von

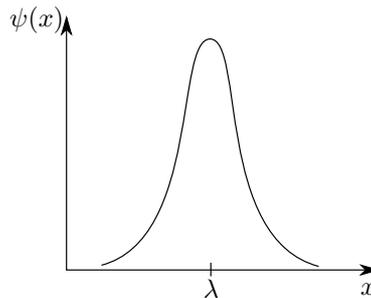
$$R_\lambda(x) = \mathcal{X} - \lambda$$

$$R_\lambda : \quad \psi(x) \longrightarrow \frac{1}{x - \lambda} \psi(x)$$

wohldefiniert für $\lambda \notin \mathbb{R}$.

Für $\lambda \in \mathbb{R}$ betrachte Wellenpakete (Aufgabe 8)

$$\psi_\varepsilon(x - \lambda) := (\pi \varepsilon^2)^{-\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{(x - \lambda)^2}{2\varepsilon^2}\right) \in L^2[\mathbb{R}] \quad (119)$$



$$\text{und } \|R_\lambda \psi_\varepsilon(x - \lambda)\| \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \infty \quad \text{für alle } \lambda \in \mathbb{R}.$$

$$\implies \sigma = \sigma_c = \mathbb{R}$$

Approximative Eigenfunktion von \mathcal{X}

$$\text{„ } x\psi_\varepsilon(x - \lambda) \approx \lambda\psi_\varepsilon(x - \lambda) \text{ “}$$

denn

$$\begin{aligned} \|(x - \lambda) \psi_\varepsilon(x - \lambda)\|^2 &= (\pi \varepsilon)^{-\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} dx (x - \lambda)^2 \exp\left(-\frac{(x - \lambda)^2}{\varepsilon^2}\right) \\ &= \frac{\varepsilon^2}{2} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0 \end{aligned}$$

\implies Die Wellenpakete $\psi_\varepsilon(x - \lambda)$ sind approximative Eigenfunktionen von \mathcal{X} zu $\lambda \in \mathbb{R}$.

2. Impulsoperator:

$$P = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \quad \text{in } L^2[\mathbb{R}]$$

$$\psi_p(x) = \exp\left(i \frac{p}{\hbar} x\right)$$

$$(91), (93) \quad \implies \quad P \psi_p(x) = p \psi_p(x)$$

jedoch:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_p^*(x) \psi_p(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx 1 = \infty$$

$$\implies \quad \psi_p(x) \notin L^2[\mathbb{R}]$$

Eigenfunktionen sind nicht normierbar.

Approx. Eigenfunktion zu $p \in \mathbb{R}$:

Breite **Wellenpakete**:

$$\begin{aligned} \psi_{p\varepsilon}(x) &= \psi_{1/\varepsilon}(x) \exp\left(i \frac{p}{\hbar} x\right) \\ &= \exp\left(i \frac{p}{\hbar} x\right) \frac{\sqrt{\varepsilon}}{\pi^{\frac{1}{4}}} \exp\left(-\varepsilon^2 \frac{x^2}{2}\right) \in L^2[\mathbb{R}] \end{aligned} \quad (120)$$

$$\|\psi_{p\varepsilon}\| = 1$$

$$\begin{aligned} P \psi_{p\varepsilon}(x) &= p \psi_{p\varepsilon}(x) + \frac{\hbar}{2} \exp\left(i \frac{p}{\hbar} x\right) \left(\frac{\varepsilon^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} (-\varepsilon^2 x) \exp\left(-\frac{\varepsilon^2 x^2}{2}\right) \\ &= p \psi_{p\varepsilon}(x) + \mathcal{O}(\sqrt{\varepsilon} \varepsilon^2) \end{aligned}$$

$$\implies \quad \sigma_c = \mathbb{R}$$

Ein Operator U heißt **unitär**, wenn er folgende Eigenschaften erfüllt:

$$1. \quad \mathcal{D}(U) = \mathcal{H} \quad (121)$$

$$2. \quad \text{Der Wertebereich von } U \text{ ist } \mathcal{H}, \text{ d.h. zu jedem } f \in \mathcal{H} \text{ gibt es ein } g \text{ mit } U g = f. \quad (122)$$

3. Längen- und Winkeltreue

$$\langle U f | U g \rangle = \langle f | g \rangle \quad \forall f, g \in \mathcal{H} \quad (123)$$

Zu 3. äquivalent ist, dass $\langle Uf | Uf \rangle = \langle f | f \rangle$ für alle $f \in \mathcal{H}$ erfüllt ist. Beweis:

$$\begin{aligned} \|f\|^2 + \|g\|^2 + 2\operatorname{Re}\langle f | g \rangle &= \|f + g\|^2 \\ &= \|U(f + g)\|^2 + \|Uf\|^2 + \|Ug\|^2 + 2\operatorname{Re}\langle Uf | Ug \rangle \\ \implies \operatorname{Re}\langle f | g \rangle &= \operatorname{Re}\langle Uf | Ug \rangle \end{aligned}$$

Mit $\|f + ig\|$ analog: $\operatorname{Im}\langle f | g \rangle = \operatorname{Im}\langle Uf | Ug \rangle$

Für einen unitären Operator gilt

$$U^{-1} = U^\dagger$$

und U^\dagger ist auch unitär (d.h. auch (121),(122) sind erfüllt).

Stetige lineare Abbildungen $\varphi : V \rightarrow \mathbb{C}$ heißen **Linearformen, lineare Funktionale, Kovektoren oder Bras**.

$$\langle \varphi | \alpha f + \beta g \rangle = \alpha \langle \varphi | f \rangle + \beta \langle \varphi | g \rangle \quad (124)$$

\implies Die Bras bilden einen Vektorraum, den **Dualraum** V^* .

Ist V ein Hilbertraum \mathcal{H} mit Basis $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots\}$, so gibt es eine Basis $\{\langle e_1|, \langle e_2|, \dots\}$ in \mathcal{H}^* mit

$$\langle e_j | e_k \rangle = \delta_{jk}$$

und $\mathcal{H} \simeq \mathcal{H}^*$ mit

$$\sum_j \alpha_j |e_j\rangle \longleftrightarrow \sum_j \alpha_j^* \langle e_j| \quad (125)$$

Für $L^2[\mathbb{R}]$ bedeutet dies:

Jede Linearform $\varphi : f \in L^2[\mathbb{R}] \rightarrow \varphi[f] \in \mathbb{C}$ lässt sich schreiben als

$$\varphi[f] = \langle \varphi | f \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \tilde{\varphi}^*(x) f(x) \quad (126)$$

wobei $\varphi[f]$ eine Funktion aus $L^2[\mathbb{R}]$ abbildet und $\tilde{\varphi}^*(x)$ eine Funktion in L^2 ist.

Ist V kein Hilbertraum, so gilt dies nicht:

Bsp: $V = \mathcal{S}[\mathbb{R}]$
 $\delta : f \in \mathcal{S}[\mathbb{R}] \rightarrow \delta[f] := f(0)$

Punktauswertungsfunktional, linear und stetig.

symbolische Schreibweise wie in (126):

$$\delta[f] := \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x) f(x) = f(0)$$

mit $\delta(x)$, der δ -Distribution.

Dualraum zu $\mathcal{S}[\mathbb{R}]$: $\mathcal{S}^*[\mathbb{R}] =$ Vektorraum der **gemäßigten Distributionen**
 (tempered distributions, auch temperierte Distributionen)

$(\mathcal{S}^*[\mathbb{R}], L^2[\mathbb{R}], \mathcal{S}[\mathbb{R}])$ ist ein Beispiel für ein **Gel'fandsches Raumtripel**.

$$\mathcal{S}^*[\mathbb{R}] \supsetneq L^2[\mathbb{R}] \supsetneq \mathcal{S}[\mathbb{R}] \quad (127)$$

Mehr Bras, Bras \leftrightarrow Kets, weniger Kets

Vorteil: In $\mathcal{S}^*[\mathbb{R}]$ können wir für $A = A^\dagger$ jedem $\lambda \in \sigma(A)$ eine **Eigendistribution** finden.

z.B. $\psi_p(x) = \exp\left(i\frac{p}{\hbar}x\right) \notin L^2[\mathbb{R}]$
 aber: $\psi_p^*(x) \longleftrightarrow \langle p |$ mit $\langle p | P = \langle p | \cdot p$ (128)
 denn für alle $f \in \mathcal{S}[\mathbb{R}]$ ist

$$\langle p | f \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_p^*(x) f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(-i\frac{p}{\hbar}x\right) f(x) \quad (129)$$

wohldefiniert und (129) beschreibt eine stetige lin. Abbildung von $\mathcal{S}[\mathbb{R}]$ auf \mathbb{C} .
 D.h. **ebene Wellen** sind gemäßigte Distributionen.

Flexible Notation:

$$\langle f | g \rangle = \langle g | f \rangle^*$$

Achtung: Für $f, g \in \mathcal{S}^*[\mathbb{R}]$ ist $\langle f | g \rangle$ nicht immer definiert!

Bsp:

$$\langle \psi_b | \psi_b \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx 1 = \infty$$

verallgemeinerte Eigenfunktionen (Eigenbras) zu \mathcal{X} :

gesucht:

$$\mathcal{X} \psi_{x_0}(x) = x_0 \psi_{x_0}(x) \quad \text{mit } x_0 \in \mathbb{R}$$

Lösung:

$$\psi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0) \in \mathcal{S}^*[\mathbb{R}] \quad (131)$$

Auch hier ist

$$\langle \psi_{x_0} | \psi_{x_0} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0) \delta(x - x_0) = \infty$$

nicht definiert.

Die **verallgemeinerten Eigenfunktionen selbstadjungierter Operatoren A sind vollständig**:

Die Entwicklung nach Eigenvektoren

$$|f\rangle = \sum_{\lambda \in \sigma} |\lambda\rangle \langle \lambda | f \rangle \quad (\text{wobei } A|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle)$$

im endlichdimensionalen Falle, liest sich nun (ohne entartete Eigenvektoren):

$$|f\rangle = \sum_{\lambda \in \sigma_p} |\lambda\rangle \langle \lambda | f \rangle + \int_{\sigma_c} d\lambda |\lambda\rangle \langle \lambda | f \rangle \quad (132)$$

Ortsoperator:

$$\mathcal{X} |\psi\rangle = x |\psi\rangle \quad (133)$$

verallg. Eigenfunktion

$$\begin{aligned} \mathcal{X} \delta(x - x_0) &= x_0 \delta(x - x_0) \\ \text{bzw. } \mathcal{X} |x_0\rangle &= x_0 |x_0\rangle \end{aligned}$$

symbolisch

$$|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} dx_0 |x_0\rangle \langle x_0 | \psi\rangle \quad (134)$$

entspricht:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 \underbrace{\delta(x - x_0)}_{|x_0\rangle} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx' \delta(x' - x_0) \psi(x')}_{\langle x_0 | \psi\rangle} \\ &= \psi(x) \end{aligned}$$

Impulsoperator:

$$P N \exp\left(i\frac{p}{\hbar}x\right) = p \underbrace{N \exp\left(i\frac{p}{\hbar}x\right)}_{|p\rangle}$$

N ist die Normierung.

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp |p\rangle \langle p | \psi\rangle$$

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dp \exp\left(i\frac{p}{\hbar}x\right) |N|^2}_{\text{inverse Fouriertransformation}} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(-i\frac{p}{\hbar}x\right) \psi(x)}_{\text{Fouriertransformation}} \\ &= \psi(x) \quad \text{für } |N|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar} \end{aligned} \quad (135)$$

Speziell für $|\psi\rangle = |x_0\rangle$

$$\langle p | x_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(-i\frac{p}{\hbar}x_0\right) \quad (136)$$

Ortseigenzustand in Impulsdarstellung

In (134) mit $|\psi\rangle = |p\rangle$:

$$|p\rangle = \int_{\mathbb{R}} dx' |x'\rangle \langle x' | p\rangle \stackrel{(136)}{=} \int_{-\infty}^{\infty} dx' |x'\rangle \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(i\frac{p}{\hbar}x'\right)$$

Konsistenzcheck (der Vollständigkeit):

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(i\frac{p}{\hbar}x\right) &= \langle x | p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \langle x | x' \rangle \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(i\frac{p}{\hbar}x'\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(i\frac{p}{\hbar}x\right) \end{aligned} \quad (137)$$

da

$$\langle x | x' \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx'' \delta(x - x') \delta(x' - x'') = \delta(x - x') \quad (138)$$

Normierung der Impulseigenzustände

$$\begin{aligned} \langle p | p' \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\exp\left(-i\frac{p}{\hbar}x\right)}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{\exp\left(i\frac{p'}{\hbar}x\right)}{\sqrt{2\pi\hbar}} \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} 2\pi \delta\left(\frac{p}{\hbar} - \frac{p'}{\hbar}\right) \\ &= \frac{1}{\hbar} \delta\left(\frac{p - p'}{\hbar}\right) = \delta(p - p') \end{aligned} \quad (139)$$

weil $\delta\left(\frac{x}{a}\right) = a \delta(x)$. Gleichung (139) ist also analog zu (138).

Projektion eines Zustands $|\psi\rangle$ auf **Ortseigenzustand**:

$$\langle x | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \delta(x - x_0) \psi(x) = \psi(x) \quad (140)$$

Das ist die Wellenfunktion in **Ortsdarstellung**.

Projektion auf **Impulseigenzustand**:

$$\langle p | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(-i\frac{p}{\hbar}x\right) \psi(x) =: \tilde{\psi}(p) \quad (141)$$

Die **Impulsdarstellung** (Fouriertransformierte der Ortsdarstellung $\psi(x)$)

Umkehrfunktion

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \langle x | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp' \langle x | p' \rangle \underbrace{\langle p' | \psi \rangle}_{\tilde{\psi}(p')} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp' \exp\left(i\frac{p'}{\hbar}x\right) \tilde{\psi}(p') \end{aligned} \quad (142)$$

Ortsoperator in Impulsdarstellung:

$$\begin{aligned}\langle p | \mathcal{X} | \psi \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dp' \langle p | \mathcal{X} | p' \rangle \langle p' | \psi \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dp' \langle p | \mathcal{X} | p' \rangle \tilde{\psi}(p')\end{aligned}\quad (143)$$

Nun ist

$$\begin{aligned}\langle p | \mathcal{X} | p' \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\exp(-i\frac{p}{\hbar}x)}{\sqrt{2\pi\hbar}} x \frac{\exp(i\frac{p'}{\hbar}x)}{\sqrt{2\pi\hbar}} \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p'} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(i\frac{p}{\hbar}x\right) \exp\left(i\frac{p'}{\hbar}x\right) \\ &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p'} \delta(p - p')\end{aligned}\quad (144)$$

Einsetzen in (143):

$$\begin{aligned}\langle p | X | \psi \rangle &\stackrel{P.I.}{=} \int_{-\infty}^{+\infty} dp' \delta(p - p') \left(-\frac{\hbar}{i}\right) \frac{\partial}{\partial p'} \tilde{\psi}(p') \\ &= -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} \tilde{\psi}(p)\end{aligned}\quad (145)$$

Impulsoperator in Impulsdarstellung:

$$\langle p | P | \psi \rangle = p \langle p | \psi \rangle = p \tilde{\psi}(p)$$

Zusammenfassung:

	Ortsdarstellung	Impulsdarstellung
Ortsoperator X	$x\psi(x)$	$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} \tilde{\psi}(p)$
Impulsoperator P	$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x)$	$p\tilde{\psi}(p)$

Energie:

klassische Mechanik Hamiltonfunktion $H(x_j, p_k)$

Quantenmechanik Hamiltonoperator $H(\mathcal{X}_j, P_k)$, wobei \mathcal{X}_j in kartesischen Koordinaten

Teilchen im Potential:

$$H(\vec{\mathcal{X}}, \vec{P}) = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(\vec{\mathcal{X}})\quad (146)$$

Eigenzustände $|E\rangle$ zum Eigenwert E

$$H(\vec{\mathcal{X}}, \vec{P})|E\rangle = E|E\rangle\quad (147)$$

Energie-Eigenzustände heißen auch **stationäre Zustände**. Die diskreten Eigenwerte E_n (= Elemente von σ_p), $n = 0, 1, 2, \dots$, von H ("Energieniveaus") entsprechen **Bindungszuständen** $|E_n\rangle$, da $\langle E_n | E_n \rangle < \infty$. Die uneigentlichen Eigenwerte (= Elemente von σ_c) von H entsprechen **Steuzuständen** $|E\rangle$, da $\langle E | E \rangle = \infty$.

Ortsdarstellung

$$(147) : \langle \vec{x} | H | E \rangle = E \langle \vec{x} | E \rangle$$

$$\int d^3x' \underbrace{\langle \vec{x} | H \vec{x}' \rangle}_{:=\psi_E(\vec{x}')} \underbrace{\langle \vec{x}' | E \rangle}_{:=\psi_E(\vec{x})} = E \underbrace{\langle \vec{x} | E \rangle}_{:=\psi_E(\vec{x})} \quad (148)$$

$$\begin{aligned} \langle \vec{x} | H | \vec{x}' \rangle &= \langle \vec{x} | \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(\vec{X}) | \vec{x}' \rangle \\ &= \langle \vec{x} | \frac{\vec{P}^2}{2m} | \vec{x}' \rangle + \underbrace{\langle \vec{x} | V(\vec{X}) | \vec{x}' \rangle}_{V(x) \underbrace{\langle \vec{x} | \vec{x}' \rangle}_{\delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{x}')}} \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} \langle \vec{x} | \frac{\vec{P}^2}{2m} | \vec{x}' \rangle &= \frac{1}{2m} \int d^3\vec{p} \langle \vec{x} | \vec{P} | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \vec{P} | \vec{x}' \rangle \\ &= \frac{1}{2m} \int d^3\vec{p} \vec{p}^2 \langle \vec{x} | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \vec{x}' \rangle \end{aligned} \quad (149)$$

3-dim Version (137)

$$\langle \vec{x} | \vec{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{i\frac{\vec{p}\vec{x}}{\hbar}} \quad (150)$$

Einsetzen in (149):

$$\begin{aligned} \langle \vec{x} | \frac{\vec{P}^2}{2m} | \vec{x}' \rangle &= \frac{1}{2m} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3\vec{p} \underbrace{\vec{p}^2 e^{i\frac{\vec{p}(\vec{x}-\vec{x}')}{\hbar}}}_{-\hbar^2 \Delta e^{i\frac{\vec{p}(\vec{x}-\vec{x}')}{\hbar}}} \\ &= -\frac{\hbar}{2m} \Delta \underbrace{\frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3\vec{k} e^{i\vec{k}(\vec{x}-\vec{x}')} }_{\delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{x}')} \end{aligned} \quad (151)$$

Einsetzen in (148)

$$\int d^3\vec{x}' \psi_E(\vec{x}') \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{x}') + V(\vec{x}) \delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{x}') \right] = E \psi_E(\vec{x})$$

partielle Integration:

$$\begin{aligned} \int d^3\vec{x}' \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi_E(\vec{x}') + V(\vec{x}) \psi_E(\vec{x}') \right] \delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{x}') &= E \psi_E(\vec{x}) \\ \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{x}) \right] \psi_E(\vec{x}) &= E \psi_E(\vec{x}) \end{aligned} \quad (152)$$

zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

Die Lösungen $\psi_E(x)$ von (152) sind die Energie-Eigen-Funktionen

$$\text{Salopp: } H\psi_E(\vec{x}) = E\psi_E(\vec{x}) \quad (153)$$

Dabei ist H der Hamilton-Operator in Ortsdarstellung $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{x})$

Impulsdarstellung:

Mit $\vec{\nabla}_p = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial p_x} \\ \frac{\partial}{\partial p_y} \\ \frac{\partial}{\partial p_z} \end{pmatrix}$:

$$\left[\frac{\vec{p}^2}{2m} + V(i\hbar\vec{\nabla}_p) \right] \tilde{\psi}(\vec{p}) = E\tilde{\psi}(\vec{p}) \quad (154)$$

praktisch für z.B. lineare Potentiale $V(\vec{x}) = \alpha\vec{x}$ und für Streuprobleme

Mathematische Literatur

1. Robert D. Richtmayer: Principles of Advanced Mathematical Physics, Vol.1, Springer
2. Siegfried Großmann: Funktionalanalysis, Aula-Verlag
3. Harro Heuser: Funktionanalysis, Teubner-Verlag
4. Hans Triebel: Höhere Analysis, Verlag Harri Deutsch / Dt. Verlag der Wissenschaft

1.4 Tensorprodukt

2 Hilberträume $\mathcal{H} = [|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots]$
 $\mathcal{H}' = [|e'_1\rangle, |e'_2\rangle, \dots]$

Tensorprodukt

$$\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}' = [|e_j\rangle \otimes |e'_k\rangle] \quad (155)$$

meist schreibt man für $[|e_j\rangle \otimes |e'_k\rangle], |e_j\rangle |e'_k\rangle$ oder $|e_j e'_k\rangle$

Für $\dim \mathcal{H} = N, \dim \mathcal{H}' = N'$ ist

$$\dim[\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}'] = N \cdot N'$$

Für $|\alpha\rangle = \sum_k \alpha_k |e_k\rangle; |\alpha'\rangle = \sum_l \alpha'_l |e'_l\rangle$ ist

$$|\alpha\rangle \otimes |\alpha'\rangle = \sum_{k,l} \alpha_k \alpha'_l |e_k\rangle \otimes |e'_l\rangle \quad (156)$$

Analogie:(aus der Elektrodynamik)

$$\vec{r} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}; \vec{r}' = \begin{pmatrix} x'_1 \\ x'_2 \\ x'_3 \end{pmatrix} \Rightarrow T_{kl} = x_k x'_l$$

Nicht jedes Element von $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}'$ lässt sich als $|\alpha\rangle \otimes |\alpha'\rangle$ schreiben. Allgemein gilt für

$$|\chi\rangle \in \mathcal{H} \otimes \mathcal{H}' = \sum_{n,l} \alpha_{nl} |e_n\rangle \otimes |e'_l\rangle \quad \text{mit } \alpha_{nl} \in \mathbb{C} \quad (157)$$

Bras:

$$\begin{aligned} (\langle \beta | \otimes \langle \beta' |) (|\alpha\rangle \otimes |\alpha'\rangle) &= \langle \beta | \alpha \rangle \langle \beta' | \alpha'\rangle \\ &= \left(\sum_k \alpha_k \beta'_k \right) \left(\sum_l \alpha'_l \beta'_l \right) \end{aligned} \quad (158)$$

für $|\beta\rangle = \sum_l \beta_l |e_l\rangle$ usw.

Zu Operatoren A auf \mathcal{H}, A' auf \mathcal{H}' sind

$$A \otimes \mathbb{1} \quad \text{und} \quad \mathbb{1} \otimes A'$$

Operatoren auf $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}'$ mit

$$\begin{aligned} (A \otimes \mathbb{1}) (|\alpha\rangle \otimes |\alpha'\rangle) &= |A\alpha\rangle \otimes |\alpha'\rangle \\ (\mathbb{1} \otimes A') (|\alpha\rangle \otimes |\alpha'\rangle) &= |\alpha\rangle \otimes |A'\alpha'\rangle \end{aligned} \quad (159)$$

Salopp: Statt $\begin{bmatrix} A \otimes \mathbb{1} \\ \mathbb{1} \otimes A' \end{bmatrix}$ schreibt man $\begin{bmatrix} A \\ A' \end{bmatrix}$

Allerdings nur wenn man weiß auf was der Operator wirkt!

Insbesondere gilt:

$$[A, A'] = 0 \quad (160)$$

denn $AA'|\alpha\rangle|\alpha'\rangle = |A\alpha\rangle|A\alpha'\rangle = A'A|\alpha\rangle|\alpha'\rangle$

Anwendung:

$\mathcal{H} = [|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle]$ beschreibt Spin-Freiheitsgrad (ist innerer Freiheitsgrad)

$\mathcal{H}' = L^2\mathbb{R}$ beschreibt äußere Freiheitsgrade (z.B. Orts-Wellenfunktion)

beliebiger Zustand in $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}'$ für $\mathcal{H}' = [|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots]$

$$\begin{aligned} |\chi\rangle &\stackrel{(157)}{=} \sum_{k=\uparrow,\downarrow} \sum_l \alpha_{kl} |k\rangle \otimes |\psi_l\rangle \\ &= \sum_l \alpha_{\uparrow l} |\uparrow\rangle \otimes |\psi_l\rangle + \sum_l \alpha_{\downarrow l} |\downarrow\rangle \otimes |\psi_l\rangle \\ &=: |\uparrow\rangle \otimes |\psi_{\uparrow}\rangle + |\downarrow\rangle \otimes |\psi_{\downarrow}\rangle \end{aligned} \quad (161)$$

Pauli-Spinor = zwei komponentige Wellenfunktion

$$\begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(\vec{x}) \\ \psi_{\downarrow}(\vec{x}) \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} (\langle \uparrow | \otimes \langle \vec{x} |) |\chi\rangle \\ (\langle \downarrow | \otimes \langle \vec{x} |) |\chi\rangle \end{pmatrix} \stackrel{(158),(161)}{=} \begin{pmatrix} \langle \vec{x} | \psi_{\uparrow}\rangle \\ \langle \vec{x} | \psi_{\downarrow}\rangle \end{pmatrix} \quad (162)$$

Interpretation:

$$\int_V d^3\vec{x} |\langle \vec{x} | \psi_{\uparrow}\rangle|^2$$

= Wahrscheinlichkeit, im Volumen V ein Elektron mit $s_z = \frac{\hbar}{2}$ zu finden

1.5 Zeitentwicklung

klassische Mechanik:

Symmetrien $\xrightarrow{\text{Noether-Theorem}}$ Erhaltungsgröße

Symmetrie unter Translation:

$$\vec{x} \rightarrow \vec{x} + \vec{a} \Rightarrow \text{Impuls } \vec{p} \text{ ist erhalten: } \frac{d\vec{p}}{dt}$$

QM: $\frac{\vec{p}}{\hbar}$ ist Generator der Translationen

$$\mathcal{T}_{\vec{a}} = e^{\frac{i}{\hbar}\vec{a}\vec{P}} : \mathcal{T}_{\vec{a}}\psi(\vec{x}) = \psi(\vec{x} + \vec{a}) \quad (163)$$

(Ü-Aufgabe 7c))

Analogie:

Symmetrie bzgl.

$$t \rightarrow t + \Delta t \Rightarrow \text{Hamiltonfunktion } H \text{ ist zeitlich konstant } \frac{dH}{dt} = 0$$

$$\begin{aligned} U(t_0 + t, t_0)\psi(\vec{x}, t_0) &= \psi(\vec{x}, t_0 + t) \\ U(t_0 + t, t_0)|\psi, t_0\rangle &= |\psi, t_0 + t\rangle \end{aligned} \quad (164)$$

mit dem Zeitentwicklungsoperator (= Translationsoperator der Zeit)

$$U(t_0 + t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}tH} \quad \text{für } \frac{dH}{dt} = 0 \quad (165)$$

Differenziell:

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x}, t_0 + t) &\stackrel{(164)}{=} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t_0 + t, t_0)\psi(\vec{x}, t_0) \\ &\stackrel{(165)}{=} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}e^{-\frac{i}{\hbar}tH}\psi(\vec{x}, t_0) \\ &= He^{-\frac{i}{\hbar}tH}\psi(\vec{x}, t_0) \\ &= H\psi(\vec{x}, t_0 + t) \end{aligned}$$

Für $t_0 = 0$:

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x}, t) &= H\psi(\vec{x}, t) \\ i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi, t\rangle &= H|\psi, t\rangle \end{aligned} \quad (166)$$

(166) heißt **zeitabhängige Schrödinger-Gleichung**

Für $\frac{dH}{dt} \neq 0$ sind (165) und (166) nicht mehr äquivalent. (166) stimmt auch für $\frac{dH}{dt} \neq 0$.

Gilt $[H(t_1), H(t_2)] = 0$ für alle t_1, t_2 , so ist

$$U(t + t_0, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_0+t} dt' H(t')} \quad (167)$$

Zeitgeordnetes Produkt:

$$\begin{aligned} \mathcal{T}A(t_1)B(t_2) &= \mathcal{T}B(t_2)A(t_1) \\ &= \Theta(t_1 - t_2)A(t_1)B(t_2) + \Theta(t_2 - t_1)B(t_2)A(t_1) \\ &= \begin{cases} A(t_1)B(t_2) & \text{für } t_1 > t_2 \\ B(t_2)A(t_1) & \text{für } t_2 > t_1 \end{cases} \end{aligned} \quad (168)$$

Analog:

$$\mathcal{T}B(t_1)B(t_2)C(t_3)\dots = \Theta(t_1 - t_2)\Theta(t_2 - t_3)\dots A(t_1)B(t_2)\dots + \Theta(\dots)\dots$$

Für $t_1 = t_2$ ist $\mathcal{T}A(t_1)B(t_2)$ i.A. nur für $A = B$ definiert

Anwendung:

$$\begin{aligned} &\int_{t_0}^{t_0+t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1+t} dt_2 \mathcal{T}H(t_1)H(t_2) \\ &= \int_{t_0}^{t_0+t} dt_1 \left\{ \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \mathcal{T}H(t_1)H(t_2) + \int_{t_1}^{t_0+t} dt_2 \mathcal{T}H(t_2)H(t_1) \right\} \end{aligned} \quad (169)$$

$$\frac{d}{dt}(169) \stackrel{*}{=} \int_{t_0}^{t_0+t} dt_2 \mathcal{T}H(t_0+t)H(t_2) + \int_{t_0}^{t_1+t} dt_2 \mathcal{T}H(t_1)H(t_0+t) \quad (170)$$

$$= H(t+t_0) \cdot 2 \cdot \int_{t_0}^{t_1+t} dt_1 \mathcal{T}H(t_1) \quad (171)$$

Zeitordnung trivial wegen $t_0 + t \geq t_1$

Dabei wurde bei * folgende Regel verwendet:

$$\frac{d}{dt} \int_a^t dt' \int_b^t dt'' f(t)g(t'') = \int_t^b dt'' f(t)g(t'') + \int_a^t dt' f(t')g(t)$$

Zeitgeordnete Exponentialreihe = Dyson-Reihe

$$\mathcal{T} \exp \left[\int_{t_0}^{t_0+t} A(t') dt' \right] := 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_{t_0}^{t_0+t} dt_1 \int_{t_0}^{t_0+t} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_0+t} dt_n \mathcal{T}A(t_1)\dots A(t_n) \quad (172)$$

Gilt $[A(t), A(t')] = 0$, so ist $\mathbb{T} \exp = \exp$

$$\begin{aligned} \mathbb{T} \exp \left[\int_{t_0}^{t_0+t} A(t') dt' \right] &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left[\int_{t_0}^{t_0+t} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_0+t} dt_n \mathbb{T} A(t_0+t) \dots A(t_n) \right. \\ &\quad + \int_{t_0}^{t_0+t} dt_1 \int_{t_0}^{t_0+t} dt_3 \dots \int_{t_0}^{t_0+t} dt_n \mathbb{T} A(t_1) A(t_0+t) \dots A(t_n) \\ &\quad \left. + \int_{t_0}^{t_0+t} dt_1 \dots \int_{t_0}^{t_0+t} dt_{n-1} \mathbb{T} A(t_1) \dots A(t_{n-1}) A(t_0+t) \right] \end{aligned}$$

n-mal der selbe Term!

$$= A(t_0+t) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} \int_{t_0}^{t_0+t} dt_1 \dots \int_{t_0}^{t_0+t} dt_{n-1} \mathbb{T} A(t_1) \dots A(t_{n-1})$$

mit $n \rightarrow n' + 1$ findet man:

$$\frac{d}{dt} \mathbb{T} \exp \left[\int_{t_0}^{t_0+t} A(t') dt' \right] = A(t_0+t) \mathbb{T} \exp \left[\int_{t_0}^{t_0+t} A(t') dt' \right] \quad (173)$$

Sehr praktisch für gekoppelte Differentialgleichungen:

$$\begin{aligned} \dot{c}_1 &= A_{11}(t)c_1 + \dots A_{1n}(t)c_n \\ &\vdots \\ \dot{c}_n &= A_{n1}(t)c_1 + \dots A_{nn}(t)c_n \end{aligned}$$

also $\dot{\vec{c}} = A(t)\vec{c}$

Lösung:

$$\vec{c}(t) = \mathbb{T} \exp \left[\int_0^t A(t') dt' \right] \vec{c}(0) \quad (174)$$

$$\text{denn } \dot{\vec{c}}(t) \stackrel{(173)}{=} A(t) \underbrace{\mathbb{T} \exp \left[\int_0^t A(t') dt' \right]}_{\vec{c}(t)} \vec{c}(0)$$

Im allgemeinen Fall ist

$$U(t_0+t, t_0) = \mathbb{T} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_0+t} dt' A(t') \right], \quad (175)$$

$$\text{denn } i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t_0+t, t_0) \stackrel{(173)}{=} H(t_0+t) U(t_0+t, t_0)$$

Zum Vorzeichen in (165) bzw (166)
Erfüllt $\psi(\vec{x}, t)$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t) = H\psi(\vec{x}, t),$$

so erfüllt $\psi^*(\vec{x}, t)$ die zeitgespiegelte Schrödinger-Gleichung:

$$\underbrace{-i\hbar \frac{\partial}{\partial t}}_{i\hbar \frac{\partial}{\partial(-t)}} \psi^*(\vec{x}, t) = H\psi^*(\vec{x}, t) \quad (176)$$

Das Vorzeichen in (165) ist zunächst willkürlich zum relativen Vorzeichen zu (163):

$$\text{Freies Teilchen } \psi_p(\vec{x}, t=0) = e^{i\frac{\vec{p}\vec{x}}{\hbar}} = \mathcal{T}_x \cdot 1$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_p = \frac{P^2}{2m} \psi_p$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \psi_p(\vec{x}, t) &= e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \psi_p(\vec{x}, 0) && \text{mit } E = \frac{P^2}{2m} \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{x} - Et)} && \text{ebene Welle} \end{aligned} \quad (177)$$

\Rightarrow Das relative Vorzeichen ist so gewählt, dass die Wellenfrotten in \vec{p} -Richtung und nicht in $-\vec{p}$ -Richtung laufen.

Ein Standardlösungsweg der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung

$$|\psi, t\rangle = \sum_n c_n(t) |E_n\rangle + \int_{\sigma_c} dE c(E, t) |E\rangle$$

mit $H|E\rangle = E|E\rangle$

$$\Rightarrow H|\psi, t\rangle = \sum_n c_n(t) E_n |E_n\rangle + \int dE c(E, t) E |E\rangle$$

Und

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi, t\rangle = H|\psi, t\rangle$$

hat für $\frac{dH}{dt} = 0$ die Lösung

$$|\psi, t\rangle = \sum_n c_n(0) e^{i\frac{E_n t}{\hbar}} |E_n\rangle + \int_{\sigma_c} dE c(E, 0) e^{-\frac{i}{\hbar}Et} |E\rangle \quad (178)$$

d.h.

$$\begin{aligned} c_n(t) &= c_n(0) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \\ c(E, t) &= c(E, 0) e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \end{aligned}$$

Energie Eigenzustände

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |E, t\rangle = E |E, t\rangle$$

$$\implies |E, t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \underbrace{|E\rangle}_{|E,0\rangle}$$

$$1 = \langle E, t | E, t \rangle = \langle E | E \rangle \longrightarrow \text{stationäre Zustände}$$

Schrödinger-Bild

$$\left. \begin{aligned} i\hbar |\psi, t\rangle &= H |\psi, t\rangle \\ |\psi, t\rangle &= U(t, 0) |\psi, 0\rangle \\ \text{mit } U(t, 0) &= \mathbb{T} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' H(t') \right] \end{aligned} \right\} \quad (179)$$

Zeitentwicklung steckt in den Zuständen, nicht in den Operatoren, die jedoch eine explizite, von außen vorgegebene Zeitabhängigkeit haben können. (z.B. Magnetfeld $\vec{B}(t)$ im Labor $\rightarrow H(t)$)

Heisenberg-Bild

$$\begin{aligned} |\psi\rangle_H &:= \underbrace{U^\dagger(t, 0)}_{U(0,t)} |\psi, t\rangle_S \\ &\stackrel{(179)}{=} U^\dagger(t, 0) U(t, 0) |\psi, 0\rangle_S = |\psi, 0\rangle_S \end{aligned} \quad (180)$$

$$A_H(t) = U^\dagger(t, 0) A_S(t) U(t, 0) \quad (181)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} A_H(t) &\stackrel{(173)}{=} \frac{i}{\hbar} H(t) A_H(t) + U^\dagger(t, 0) \left(\frac{d}{dt} A_S(t) \right) U(t, 0) - \frac{i}{\hbar} A_H(t) H(t) \\ &= \frac{i}{\hbar} [[H, A_H(t)]] + \frac{\partial}{\partial t} A_H(t) \end{aligned} \quad (182)$$

wobei

$$\frac{\partial}{\partial t} A_H(t) = U^\dagger(t, 0) \left[\frac{d}{dt} A_S(t) \right] U(t, 0)$$

Aus (182) folgt auch $H_S(t) = H_H(t) = H(t)$.

(182) ist die gesuchte Bewegungsgleichung im Heisenberg-Bild.

klass. Mechanik: $\frac{i}{\hbar} [,] \longrightarrow$ Poisson-Klammer

$$(182) \text{ f\u00fcr } A_H = \mathcal{X}_H \text{ und } A_H = P_H \quad H = \frac{P_H^2}{2m} + V(\mathcal{X}_H)$$

$$\begin{aligned} \dot{\mathcal{X}}_H(t) &= \frac{i}{\hbar} [H, \mathcal{X}_H(t)] = \frac{i}{\hbar} \left[\frac{P_H^2}{2m}, \mathcal{X}_H \right] \\ &\stackrel{*}{=} \frac{i}{\hbar m} (-i\hbar) P_H = \frac{1}{m} P_H \end{aligned} \quad (183)$$

$$\begin{aligned} \dot{P}_H(t) &= \frac{i}{\hbar} [H, P_H] = \frac{i}{\hbar} [V(x), P_H] \\ &\stackrel{*}{=} \frac{\partial V(\mathcal{X}_H)}{\partial \mathcal{X}_H} \end{aligned} \quad (184)$$

(*): siehe Aufgabe 7b)

(183),(184) entsprechen den L\u00f6sungen der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen!

2 Teilchen im Potenzial

2.1 $V = 0$ (freies Teilchen)

$$H = \frac{P^2}{2m}$$

$$H |p, t\rangle = E |p, t\rangle \quad \text{mit} \quad E = \frac{p^2}{2m} \quad (185)$$

Zeitentwicklung:

$$\begin{aligned} i\hbar |p, t\rangle &= E |p, t\rangle \\ |p, t\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \underbrace{|p\rangle}_{|p,0\rangle} = e^{-\frac{ip^2}{2m\hbar}t} |p\rangle \end{aligned} \quad (186)$$

Impulsdarstellung:

$$\langle p' | p, t\rangle = e^{-\frac{ip'^2}{2m\hbar}t} \delta(p - p') \quad (187)$$

Gaußsches Wellenpaket:

$$\tilde{\varphi}(p, t=0) := \langle p | \varphi, t=0\rangle := \left(\frac{2d^2}{\pi^2\hbar^2}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{(p-p_0)^2 d^2}{\hbar^2}\right) \quad (188)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\varphi}(p, t) &= \langle p | \varphi, t\rangle = \langle p | e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} | \varphi, t=0\rangle \\ &= \langle e^{\frac{i}{\hbar}Ht} p | \varphi, 0\rangle = \langle e^{i\frac{p^2 t}{2m\hbar}} p | \varphi, 0\rangle \\ &= e^{-i\frac{p^2 t}{2m\hbar}} \langle p | \varphi, 0\rangle = e^{-i\frac{p^2 t}{2m\hbar}} \tilde{\varphi}(p, 0) \\ &\stackrel{(188)}{=} \left(\frac{2d^2}{\pi^2\hbar^2}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{(p-p_0)^2 d^2}{\hbar^2} - i\frac{p^2 t}{2m\hbar}\right) \end{aligned} \quad (189)$$

Ortsdarstellung:

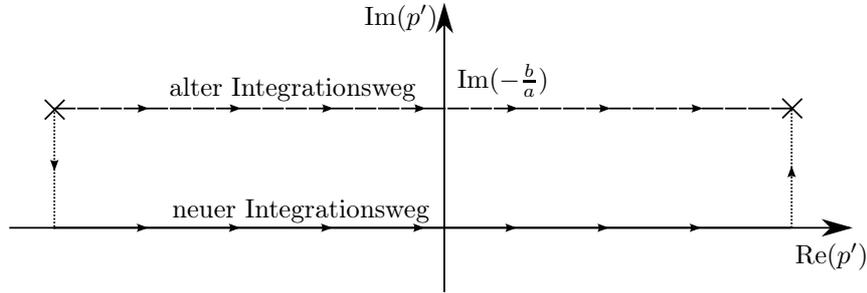
$$\begin{aligned} \varphi(x, t) &\stackrel{(142)}{=} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \tilde{\varphi}(p, t) e^{\frac{i}{\hbar}px} \\ &\stackrel{(189)}{=} \left(\frac{d^2}{2\pi^3\hbar^4}\right)^{\frac{1}{4}} \int dp \exp\left[\underbrace{\frac{i}{\hbar}\left(px - \frac{p^2 t}{2m}\right) - \frac{(p-p_0)^2 d^2}{\hbar^2}}_{\text{quadrat. Ergänzung}}\right] \\ &= \left(\frac{d^2}{2\pi^3}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \exp\left[-a\left(p - \frac{b}{a}\right)^2 + \frac{b^2}{a} - c\right] \end{aligned} \quad (190)$$

mit

$$a = \frac{d^2}{\hbar^2} + i\frac{t}{2m\hbar}, \quad b = \frac{d^2 p_0}{\hbar^2} + i\frac{x}{2\hbar}, \quad c = \frac{d^2 p_0^2}{\hbar^2} \quad (191)$$

Variablentransformation:

$$p' = p - \frac{b}{a}$$



Die Ränder tragen nicht bei für $\text{Re}(p') \rightarrow \pm\infty$. Integrand analytisch ohne Singularitäten im Gebiet zw. altem und neuem Integrationsweg.

$$\Rightarrow \varphi(x, t) \stackrel{(190)}{=} \left(\frac{d^2}{2\pi^3}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\hbar} \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} dp' \exp\left[-ap'^2 + \frac{b^2}{a} - c\right]}_{\sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp\left[\frac{b^2}{a} - c\right]} \quad (192)$$

$$|\varphi(x, t)|^2 = \frac{d}{\hbar^2 \sqrt{2\pi}} \frac{1}{|a|} \exp\left[2 \text{Re}\left(\underbrace{\frac{b^2}{a} - c}_{\frac{b^2 a^*}{|a|^2} - c}\right)\right] \quad (193)$$

Mit

$$V = \frac{p_0}{m} \quad \Delta(t) = \frac{t \hbar}{2m d^2} \quad (194)$$

ist

$$|a|^2 = \frac{d^4}{\hbar^4} + \frac{t^2}{4m^2 \hbar^2} = \frac{d^4}{\hbar^4} [1 + \Delta^2(t)] \quad (195)$$

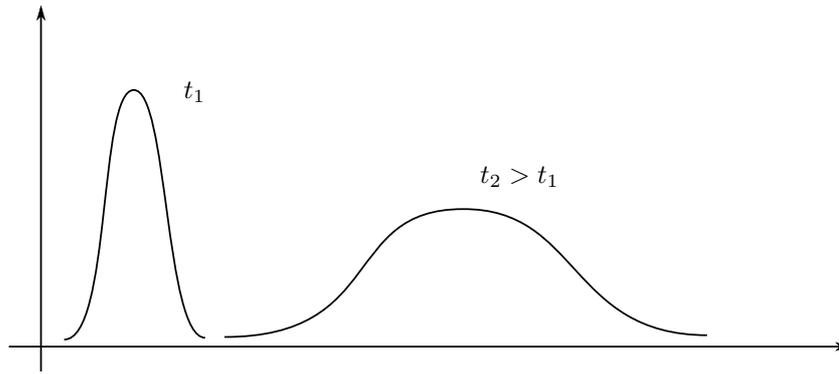
und

$$2 \text{Re}\left(\frac{b^2 a^*}{|a|^2} - c\right) = -\frac{(x - vt)^2}{2d^2 (1 + \Delta^2(t))} \quad (196)$$

Einsetzen von (195) und (196) in (193)

$$|\varphi(x, t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi} d} \frac{1}{\sqrt{1 + \Delta^2(t)}} \exp\left[-\frac{(x - vt)^2}{2d^2 (1 + \Delta^2(t))}\right] \quad (197)$$

Das Wellenpaket bewegt sich nach rechts mit der Geschwindigkeit v und "zerfließt", d.h. die Breite $\propto d(1 + \Delta(t))$ wächst linear mit t .



Zerfließen ist Folge der Impulsunschärfe un (183) analog zu einer Ladung Schrotkugeln

Aus (197) finden wir:

$$\langle x \rangle = \langle \varphi, t | x | \varphi, t \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx x |\varphi(x, t)|^2 = v \cdot t \quad (198)$$

$$\Delta x = \sqrt{\langle \varphi, t | (x - \langle x \rangle)^2 | \varphi, t \rangle} = d \sqrt{1 + \Delta(t)^2} \quad (199)$$

mit Aufgabe 8, wobei $b = \sqrt{2}d(1 + \Delta(t))$

$\langle p \rangle$ und $(\Delta p)^2$ findet man am einfachsten aus (189)

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dp \cdot p |\tilde{\varphi}(p, t)|^2 \\ &\stackrel{(189)}{=} \left(\frac{2d^2}{\pi \hbar^2} \right)^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dp \cdot p \exp \left[-\frac{2(p - p_0)^2 d^2}{\hbar^2} \right] \\ &\stackrel{p' = p - p_0}{=} \left(\frac{2d^2}{\pi \hbar^2} \right)^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dp \cdot (p' + p_0) \exp \left[-\frac{2p'^2 d^2}{\hbar^2} \right] \\ &= p_0 \quad \text{unabhängig von } t \end{aligned} \quad (200)$$

$$(\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle - p_0^2 = \frac{\hbar^2}{2d^2} \quad \text{mit Aufgabe 8} \quad (201)$$

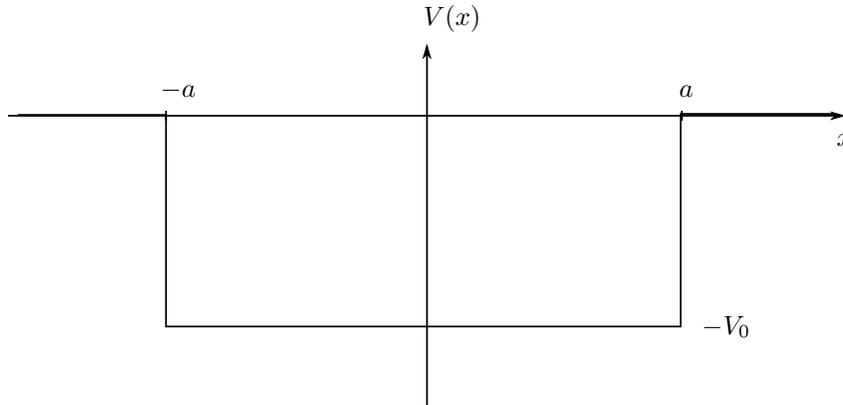
(199),(201)

$$\Rightarrow \Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2} \sqrt{1 + \Delta(t)^2} \quad (202)$$

maximale Unschärfe für $t = 0$

2.2 Kastenpotential = Potentialtopf

$$V(x) = -V_0 \Theta(a - |x|); \quad V_0 > 0 \quad (203)$$



Anwendung:

- abgeschirmte Störstellen in Halbleitern
- Kernphysik

Dimensionsloser Parameter:

$$\zeta = \frac{\sqrt{2mV_0}a}{\hbar} \quad (204)$$

Bindungszustände $\psi_n(x)$: $H\psi_n(x) = E_n\psi_n(x)$ also

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_n(x) = \begin{cases} E_n \psi_n(x) & \text{für } |x| > a \\ (E_n + V_0) \psi_n(x) & \text{für } |x| < a \end{cases} \quad (205)$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \psi_n''(x) & \text{ist unstetig bei } |x| = a & \text{mit Sprung } \pm V_0 \\ \psi_n'(x) & \text{ist stetig} & \text{mit Knick bei } |x| = a \\ \psi_n(x) & \text{ist stetig} \end{cases}$$

Lösung von (205) für $|x| > a$:

$$E_n > 0: \psi_n(x) \sim \sin(qx), \cos(qx)$$

- nicht normierbar
- Streuzustände

$$E_n < 0: \psi_n(x) = \begin{cases} N_n e^{\kappa_n x} & \text{für } x < -a \\ N'_n e^{-\kappa_n x} & \text{für } x > a \end{cases} \quad \text{mit } \kappa = \frac{\sqrt{2m(-E_n)}}{\hbar} \quad (206)$$

und Normierungskonstanten N_n, N'_n .

Paritätsoperator = Raumspiegelungsoperator

$$\mathbb{P}\psi(x) = \psi(-x) \quad (207)$$

In unserem Falle:

$$\begin{aligned} H\mathbb{P}\psi(x) &= H\psi(-x) = \left[-\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) \\ \mathbb{P}H\psi(x) &= \left[-\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{d(-x)^2} + V(-x) \right] \psi(-x) \\ &= H\psi(-x) \\ \text{wegen } V(-x) &= V(x) \\ &= H\mathbb{P}\psi(x) \\ &\Rightarrow [H, \mathbb{P}] = 0 \end{aligned} \quad (208)$$

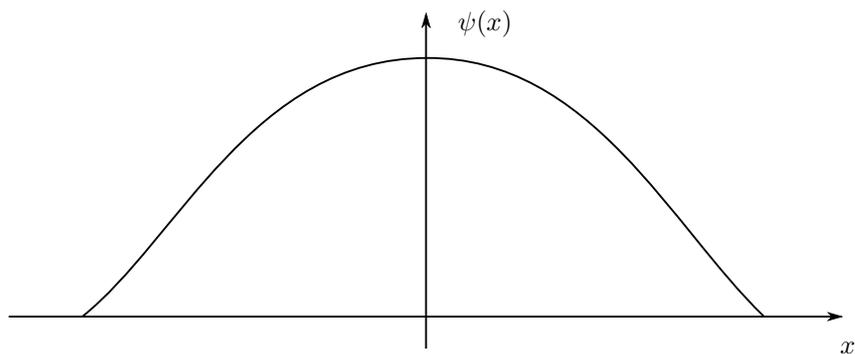
nur für symmetrische Potentiale

⇒ Es gibt eine Basis aus gemeinsamen Eigenfunktionen von H und \mathbb{P}

$$\mathbb{P}^2 = \mathbb{1} \Rightarrow \text{Eigenwerte } \pm 1 \quad (209)$$

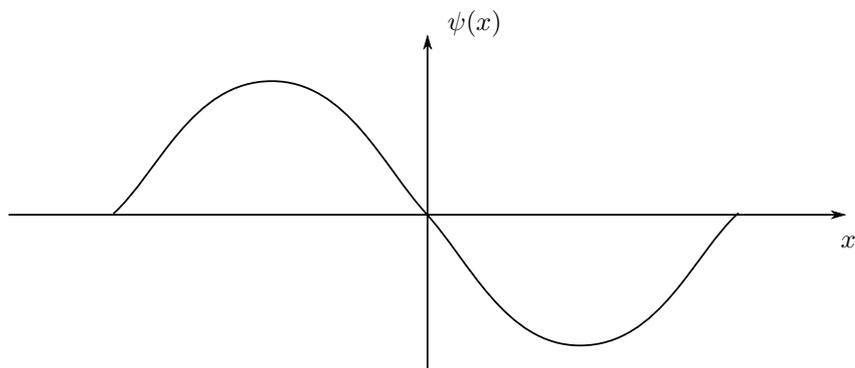
gerade Funktion: (EW = 1)

$$\mathbb{P}\psi(x) = \psi(-x) = \psi(x)$$



ungerade Funktion: (EW = -1)

$$\mathbb{P}\psi(x) = \psi(-x) = -\psi(x)$$



gerade Lösung: $N_n = N'_n$ in (206)
oszillierend

$$\psi_n(x) = C_n \cos(q_n x) \quad \text{für } |x| \leq a \quad \text{mit } q_n = \frac{\sqrt{2m(E_n + V_0)}}{\hbar} \quad (210)$$

(206) und (210) $\Rightarrow V_0 < E < 0$

Exponentielle Lösung ($E < -V_0$) im $|x| \leq a$ erfüllen nicht die Stetigkeit von $\psi_n(x)$ und $\psi'_n(x)$ bei $x = \pm a$

Stetigkeit (206), (210) \Rightarrow

$$\psi_n(x) = N_n e^{-\kappa_n a} \stackrel{!}{=} C_n \cos(q_n a) \quad (211)$$

$$\psi'_n(x) = -\kappa_n N_n e^{-\kappa_n a} = C_n q_n \sin(q_n a) \quad (212)$$

$$\begin{aligned} \frac{-(212)}{(211)} &= \kappa_n = q_n \tan(q_n a) \\ \Rightarrow \frac{\kappa_n}{q_n} &= \tan(q_n a) \end{aligned} \quad (213)$$

Wegen

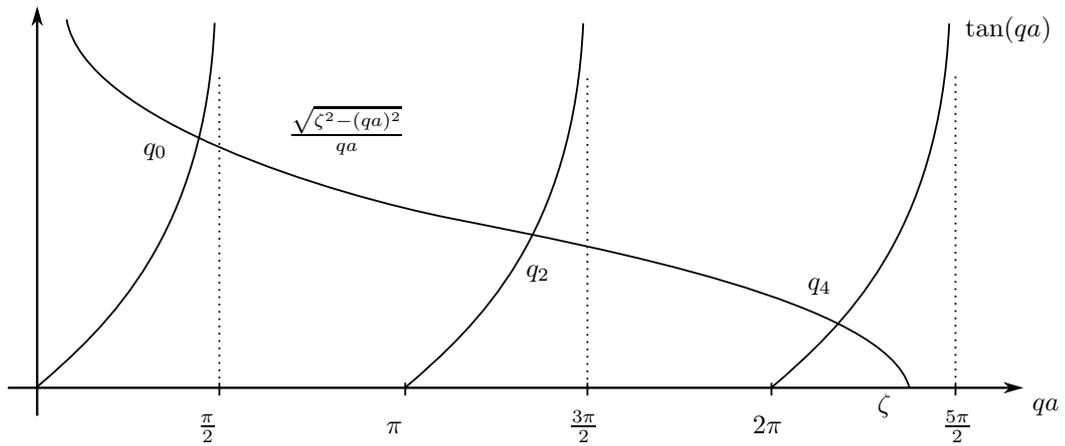
$$\begin{aligned} \zeta &\stackrel{(204)}{=} \frac{a^2}{\hbar^2} 2mV_0 \\ &= \frac{a^2}{\hbar^2} 2m(V_0 + E - E) \\ &= a^2 [q_n^2 + \kappa_n^2] \end{aligned}$$

bedeutet: (213)

$$\tan(q_n a) = \frac{\sqrt{\zeta^2 - (q_n a)^2}}{q_n a} \quad (214)$$

(214) bestimmt $q_n a$ und damit E_n

Graphische Lösung:



Zahl der geraden Lösungen:

$$n_g = \left[\frac{\zeta}{\pi} + 1 \right] \quad (215)$$

Je kleiner ζ desto weniger Eigenwerte gibt es.

Energie-Eigenwerte:

$$E_n \stackrel{(210)}{=} \frac{\hbar^2 q_n^2}{2m} - V_0 \quad (216)$$

Insbesondere E_0 existiert immer und

$$-V_0 < E_0 < \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2}$$

ungerade Lösungen:

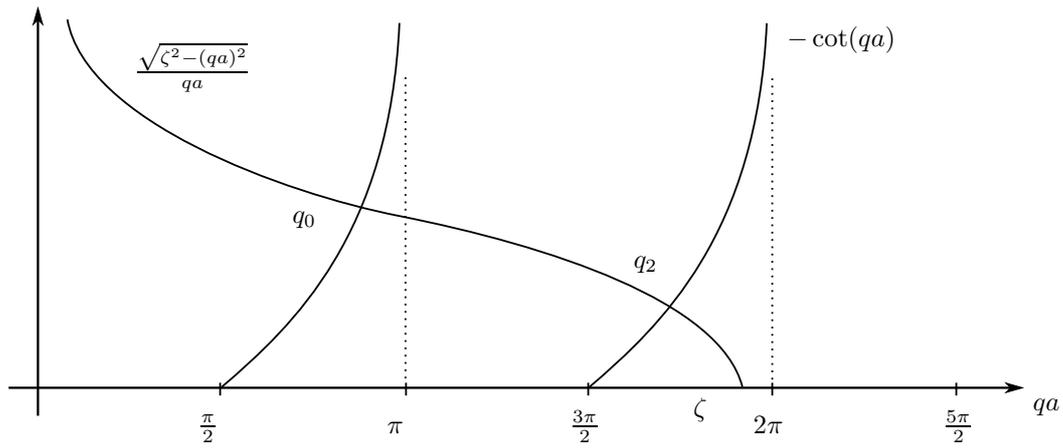
$$N_n = N'_n \quad \text{in (206)}$$

und

$$\psi_n(x) = S_n \sin(q_n x) \quad (217)$$

Setigkeitsbedingungen liefern analog zu (211)-(213):

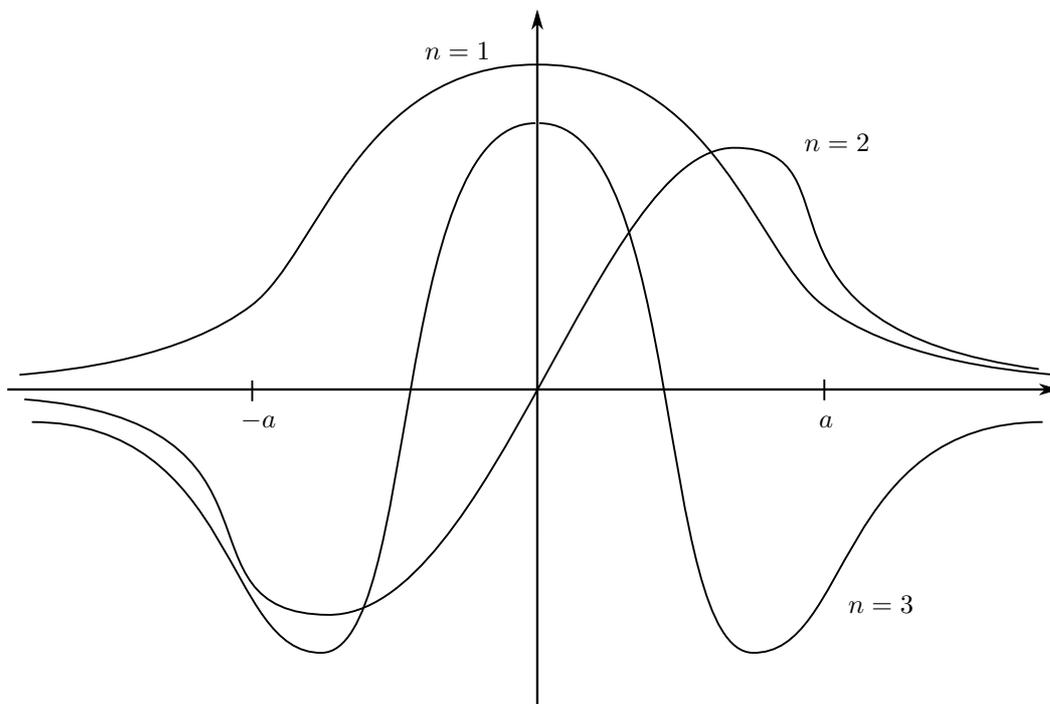
$$-\cot(q_n a) = \frac{\kappa_n}{q_n} = \frac{\sqrt{\zeta^2 - (q_n a)^2}}{q_n a} \quad (218)$$



Ungerade Lösungen gibt es nur für

$$\zeta \geq \frac{\pi}{2}, \text{ also } \frac{2mV_0a^2}{\hbar} > \frac{\pi^2}{4}$$

Lösungen:



Zustand	$q_n a \in$	Symmetrie	Knotenzahl
Grundz $n = 0$	$[0, \frac{\pi}{2}]$	gerade	0
$n = 1$	$[\frac{\pi}{2}, \pi]$	ungerade	1
$n = 2$	$[\pi, \frac{3\pi}{2}]$	gerade	2

2.3 Harmonischer Oszillator

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \mathcal{X}^2}{2} \quad (219)$$

d.h. Federkonstante $k = m\omega^2$

Algebraische Lösungen (M. Borne, N. Wiener)
charakteristische Längenskala des Problems

$$x_0 := \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad (220)$$

$$\Rightarrow H = \hbar\omega \left[\frac{1}{2} \frac{P^2 x_0^2}{\hbar^2} + \frac{1}{2} \left(\frac{\mathcal{X}}{x_0} \right)^2 \right] \quad (221)$$

Vernichtungsoperator (=Absteigeoperator, annihilation operator)

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\mathcal{X}}{x_0} + i \frac{P x_0}{\hbar} \right) \quad (222)$$

Erzeugungsoperator (=Aufsteigeoperator, creation operator)

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\mathcal{X}}{x_0} - i \frac{P x_0}{\hbar} \right) \quad (223)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow [a, a^\dagger] &= \frac{1}{2} \frac{i}{\hbar} \left(\left[P x_0, \frac{\mathcal{X}}{x_0} \right] - \left[\frac{\mathcal{X}}{x_0}, P x_0 \right] \right) \\ &\stackrel{(110)}{=} \frac{1}{2} \frac{i}{\hbar} (-i\hbar - i\hbar) = 1 \end{aligned} \quad (224)$$

Besetzungszahloperator

$$N := a^\dagger a \quad (225)$$

(222) und (223) liefern:

$$\begin{aligned} N &= \frac{1}{2} \left(\frac{\mathcal{X}}{x_0} - i \frac{P x_0}{\hbar} \right) \left(\frac{\mathcal{X}}{x_0} + i \frac{P x_0}{\hbar} \right) \\ &= \frac{1}{2} \left[\frac{\mathcal{X}^2}{x_0^2} + \frac{P^2 x_0}{\hbar^2} + \frac{i}{\hbar} \underbrace{[\mathcal{X}, P]}_{i\hbar} \right] \\ &= \frac{H}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \\ \Rightarrow H &= \hbar\omega \left(N + \frac{1}{2} \right) \end{aligned} \quad (226)$$

Also: Eigenzustände von H sind Eigenzustände von N

$$N |n\rangle = n |n\rangle \quad (227)$$

mit $n \in \mathbb{R}$ wegen $N = N^\dagger$

$|n\rangle$ ist ein Eigenket zum Eigenwert n .

$$\begin{aligned} n &= n \langle n | n \rangle = \langle n | N | n \rangle \stackrel{(225)}{=} \langle n | a^\dagger a | n \rangle \\ &= \langle a n | a n \rangle = \| |a n\rangle \|^2 \geq 0 \end{aligned} \quad (228)$$

$$[N, a^\dagger] = [a^\dagger a, a^\dagger] = a^\dagger \underbrace{[a, a^\dagger]}_{=1 \text{ s. (224)}} + \underbrace{[a^\dagger, a^\dagger]}_{=0} a = a^\dagger \quad (229)$$

$$[N, a] = [a^\dagger, N]^\dagger \stackrel{(229)}{=} (-a^\dagger)^\dagger = -a \quad (230)$$

Betrachte $a |n\rangle$:

$$\begin{aligned} N a |n\rangle &= ([N, a] + a N) |n\rangle \\ &\stackrel{(230)(227)}{=} -a |n\rangle + a n |n\rangle = (n-1) a |n\rangle \end{aligned} \quad (231)$$

$\implies a |n\rangle$ ist Eigenket zu N mit Eigenwert $n-1$ oder $a |n\rangle = 0$.

Ist $a |n\rangle = 0$ ist $N |n\rangle = a^\dagger a |n\rangle = 0 \implies n = 0$

$$N |0\rangle = 0 \quad (232)$$

Achtung: $|0\rangle \neq 0!$

Aus (231) folgt durch vollst. Induktion, dass $a^k |n\rangle$ Eigenvektor zu N mit Eigenwert $n-k$ ist, außer wenn $k-n \in \mathbb{N}$.

Wegen (228) muss für Eigenwerte $n-k \geq 0$ sein. Wäre $n \notin \mathbb{N}_0$, so könnten wir mit hinreichend großen k (228) verletzen.

$$\implies n \in \mathbb{N}_0 \quad (233)$$

Konstruktion der Eigenkets - zwei Möglichkeiten:

1. Grundzustand $|0\rangle$ ist nicht entartet
2. Grundzustand $|0\rangle$ ist entartet

Welche Möglichkeit realisiert ist, hängt vom Hilbertraum \mathcal{H} ab.

$$\begin{aligned} (229) \implies N a^\dagger |n\rangle &= a^\dagger \underbrace{N |n\rangle}_{n |n\rangle} + \underbrace{[N, a^\dagger]}_{a^\dagger \text{ s. (229)}} |n\rangle \\ &= (n+1) a^\dagger |n\rangle \end{aligned}$$

Somit ist $a^\dagger |n\rangle$ Eigenzustand zu N mit Eigenwert $n+1$.

Normierung:

$$\begin{aligned} \| a^\dagger |n\rangle \|^2 &= \langle a^\dagger n | a^\dagger n \rangle = \langle n | a a^\dagger |n\rangle \\ &= \langle n | \underbrace{[a, a^\dagger]}_{=1 \text{ s. (224)}} |n\rangle + \langle n | a^\dagger a |n\rangle \\ &= 1 + n \end{aligned}$$

$$\implies |n+1\rangle := \frac{1}{\sqrt{n+1}} a^\dagger |n\rangle \text{ ist normiert.} \quad (234)$$

Im Fall 1 (nicht entarteter GZ $|0\rangle$) definieren wir rekursiv:

$$\begin{aligned} |n\rangle &\stackrel{(234)}{=} \frac{1}{\sqrt{n}} a^\dagger |n-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n(n-1)}} (a^\dagger)^2 |n-2\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |0\rangle \end{aligned} \quad (235)$$

Weiter:

$$\begin{aligned} a|n\rangle &\stackrel{(234)}{=} \frac{1}{\sqrt{n}} a a^\dagger |n-1\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{n}} \underbrace{[a, a^\dagger]}_{=1} |n-1\rangle + \frac{1}{\sqrt{n}} \underbrace{a^\dagger a}_{=N} |n-1\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{n}} n |n-1\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \end{aligned} \quad (236)$$

Zusammenfassung von (234) und (236)

$$\left. \begin{aligned} a^\dagger |n\rangle &= \sqrt{n+1} |n+1\rangle \\ a |n\rangle &= \sqrt{n} |n-1\rangle \end{aligned} \right\} \quad (237)$$

und

$$a^n |n\rangle = \sqrt{n!} |0\rangle \quad (238)$$

Haben wir im Fall 1 mit (235) alle Eigenzustände gefunden? Ja!

Beweis:

Annahme: Es gibt außer $|n\rangle$ in (235) noch einen weiteren Ket $|n'\rangle$ mit $N|n'\rangle = n|n'\rangle$ und $\langle n|n'\rangle = 0$, d.h. n ist entartet.

Wegen (231) ist

$$a^n |n'\rangle \text{ EZ von } N \text{ zu } n = 0.$$

Nicht entarteter Grundzustand

$$a^n |n'\rangle = e^{i\varphi} \sqrt{n!} |0\rangle \quad (239)$$

$$\frac{1}{n!} (a^\dagger)^n a^n |n'\rangle = e^{i\varphi} \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |0\rangle \stackrel{(235)}{=} e^{i\varphi} |n\rangle$$

$$\implies \frac{1}{n!} \langle n' | (a^\dagger)^n a^n |n'\rangle = e^{i\varphi} \langle n' | n \rangle = 0$$

$$\implies a^n |n'\rangle = 0 \text{ Widerspruch zu (239)}$$

Im Fall 2 haben wir Grundzustände

$$|0, \lambda\rangle$$

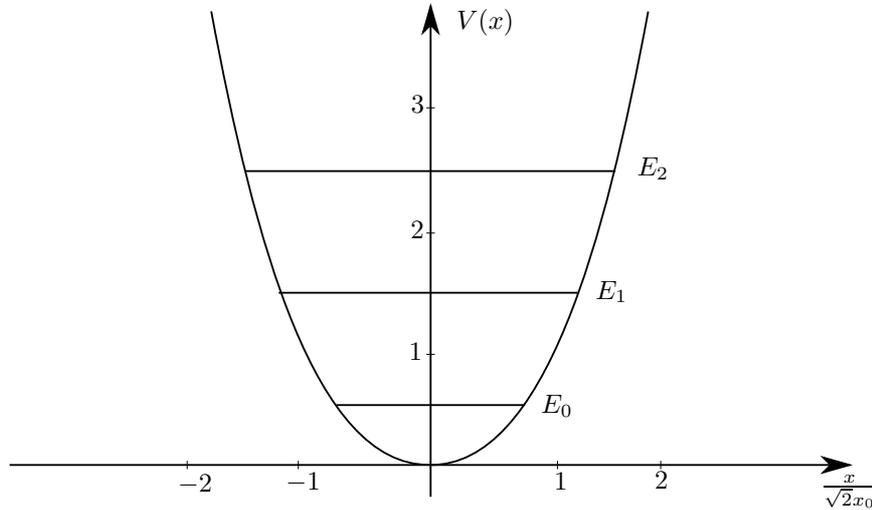
mit Entartungsindex λ .

Analog findet man:

$$|n, \lambda\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |0, \lambda\rangle$$

Sind alle Eigenzustände zum Eigenwert n von N .
Wegen (226) sind die Energieeigenwerte

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (240)$$



Streuzustände gibt es nicht.

$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$, Ortsdarstellung:

$$a|0\rangle \stackrel{(237)}{=} 0$$

$$\begin{aligned} 0 &= \langle x | a | 0 \rangle \\ &\stackrel{(222)}{=} \frac{1}{\sqrt{2}} \langle x | \frac{\mathcal{X}}{x_0} + i \frac{Px_0}{\hbar} | 0 \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{x}{x_0} - i \frac{x_0}{\hbar} \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right] \underbrace{\langle x | 0 \rangle}_{\psi_0(x)} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \left[\frac{d}{dx} + \frac{x}{x_0^2} \right] \psi_0(x) = 0 \quad (241)$$

DGL 1.Ordnung!

Standard-Lösungsweg:

Ansatz:

$$\begin{aligned} e^{f(x)} \left(\frac{d}{dx} + \frac{x}{x_0^2} \right) \psi_0(x) &= 0 \\ \stackrel{\text{Produktregel}}{\implies} \left[\frac{d}{dx} + \underbrace{-f'(x) + \frac{x}{x_0^2}}_{\stackrel{!}{=} 0} \right] e^{f(x)} \psi_0(x) &= 0 \end{aligned}$$

Wähle $f'(x) = \frac{x}{x_0^2}$, also $f(x) = \frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0}\right)^2$.

$$\Rightarrow \frac{d}{dx} \left[e^{\frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0}\right)^2} \psi_0(x) \right] = 0$$

$$\psi_0(x) = c \cdot e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0}\right)^2}$$

Normierung:

$$1 = \langle 0 | 0 \rangle = |c|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\left(\frac{x}{x_0}\right)^2} = |c|^2 x_0 \sqrt{\pi}$$

Wähle:

$$c = (x_0 \sqrt{\pi})^{-\frac{1}{2}}$$

\Rightarrow Grundzustands-Wellenfunktion

$$\psi_0(x) = (x_0 \sqrt{\pi})^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0}\right)^2} \quad (242)$$

Übrige $n > 0$:

$$\begin{aligned} \psi_n(x) &= \langle x | n \rangle \\ &\stackrel{(235)}{=} \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle x | a^\dagger | 0 \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \frac{1}{\sqrt{2^n}} \left[\frac{x}{x_0} - x_0 \frac{d}{dx} \right]^n \psi_0(x) \end{aligned}$$

Dimensionslose Variable:

$$\xi := \frac{x}{x_0}$$

$$\begin{aligned} \psi_n(x_0 \xi) &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \frac{1}{\sqrt{2^n}} \left[\xi - \frac{d}{d\xi} \right]^n \psi_n(x_0 \xi) \\ &\stackrel{(242)}{=} (x_0 \sqrt{\pi})^{-\frac{1}{2}} \frac{1}{\sqrt{n!}} \frac{1}{\sqrt{2^n}} \left[\xi - \frac{d}{d\xi} \right]^n e^{-\frac{\xi^2}{2}} \\ &= (x_0 \sqrt{\pi} \cdot n! \cdot 2^n)^{-\frac{1}{2}} H_n(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}} \end{aligned} \quad (243)$$

$$\text{mit } H_n(\xi) = e^{\frac{\xi^2}{2}} \left[\xi - \frac{d}{d\xi} \right]^n e^{-\frac{\xi^2}{2}} \quad (244)$$

Operator-Identität:

$$A_\xi := e^{-\frac{\xi^2}{2}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right) e^{\frac{\xi^2}{2}} = -\frac{d}{d\xi}$$

denn

$$\begin{aligned} A_\xi \psi(\xi) &= e^{-\frac{\xi^2}{2}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right) e^{\frac{\xi^2}{2}} \psi(\xi) \\ &= e^{-\frac{\xi^2}{2}} \left[\xi e^{\frac{\xi^2}{2}} \psi(\xi) - \xi e^{\frac{\xi^2}{2}} \psi(\xi) - e^{\frac{\xi^2}{2}} \frac{d}{d\xi} \psi(\xi) \right] \\ &= -\frac{d}{d\xi} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow (-1)^n \frac{d^n}{d\xi^n} = A_\xi^n := e^{-\frac{\xi^2}{2}} \left[\xi - \frac{d}{d\xi} \right]^n e^{\frac{\xi^2}{2}} \quad (245)$$

Einsetzen von (245) in (244):

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \quad (246)$$

ist die Definitions-Gleichung der **Hermite-Polynome**.

$$\begin{aligned} H_0(\xi) &= 1 & H_3(\xi) &= 8\xi^3 - 12\xi \\ H_1(\xi) &= 2\xi & H_4(\xi) &= 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12 \\ H_2(\xi) &= 4\xi^2 - 2 & H_5(\xi) &= 32\xi^5 - 160\xi^3 + 120\xi \end{aligned} \quad (247)$$

Aus $\delta_{nm} = \langle n | m \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_n^*(x) \psi_m(x)$ folgen mit (243) die Orthogonalitätsrelation:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi e^{-\xi^2} H_n(\xi) H_m(\xi) = \sqrt{\pi} \cdot 2^n n! \delta_{nm} \quad (248)$$

Wobei $e^{-\xi^2}$ die sogenannte Gewichtsfunktion ist. Ihre Wahl definiert die Orthogonalitätspolynome. In unserem Falle die Hermite-Polynome

Aus $\sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n| = 1$ folgt die **Vollständigkeitsrelation**

$$\sum_{n=0}^{\infty} \psi_n(x) \psi_n^*(x') = \sum_{n=0}^{\infty} \langle x | n \rangle \langle n | x' \rangle = \langle x | x' \rangle = \delta(x - x') \quad (249)$$

Mit (243):

$$\sum_{n=0}^{\infty} H_n(\xi) H_n(\xi') = \sqrt{\pi} \cdot n! 2^n e^{\xi^2} \delta(\xi - \xi') \quad (250)$$

Weitere Eigenschaften:
Erzeugende Funktionen

$$e^{-t^2+2t\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} t^n H_n(\xi) \quad (251)$$

Hermite'sche DGL

$$\left[\frac{d^2}{d\xi^2} - 2\xi \frac{d}{d\xi} + 2n \right] H_n(\xi) = 0 \quad (252)$$

klassische Physik: niedrigste Energie $E = 0$

QM: niedrigste Energie $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$ **Nullpunktsenergie**

Ein Zustand mit $E = 0$ würde $\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ verletzen.

$$\mathcal{X} = \frac{x_0}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger) \quad (253)$$

$$P = \frac{i}{\sqrt{2}} \frac{\hbar}{x_0}(a^\dagger - a) \quad (254)$$

$$\begin{aligned} \langle n | \mathcal{X} | n \rangle &\stackrel{(253)}{=} \frac{x_0}{\sqrt{2}} \langle n | a + a^\dagger | n \rangle \\ &\stackrel{(237)}{=} \frac{x_0}{\sqrt{2}} \left[\underbrace{\sqrt{n} \langle n | n-1 \rangle}_{=0} + \underbrace{\sqrt{n+1} \langle n | n+1 \rangle}_{=0} \right] \\ &= 0 \end{aligned}$$

klar HO schwingt um Ruhelage

Ebenso:

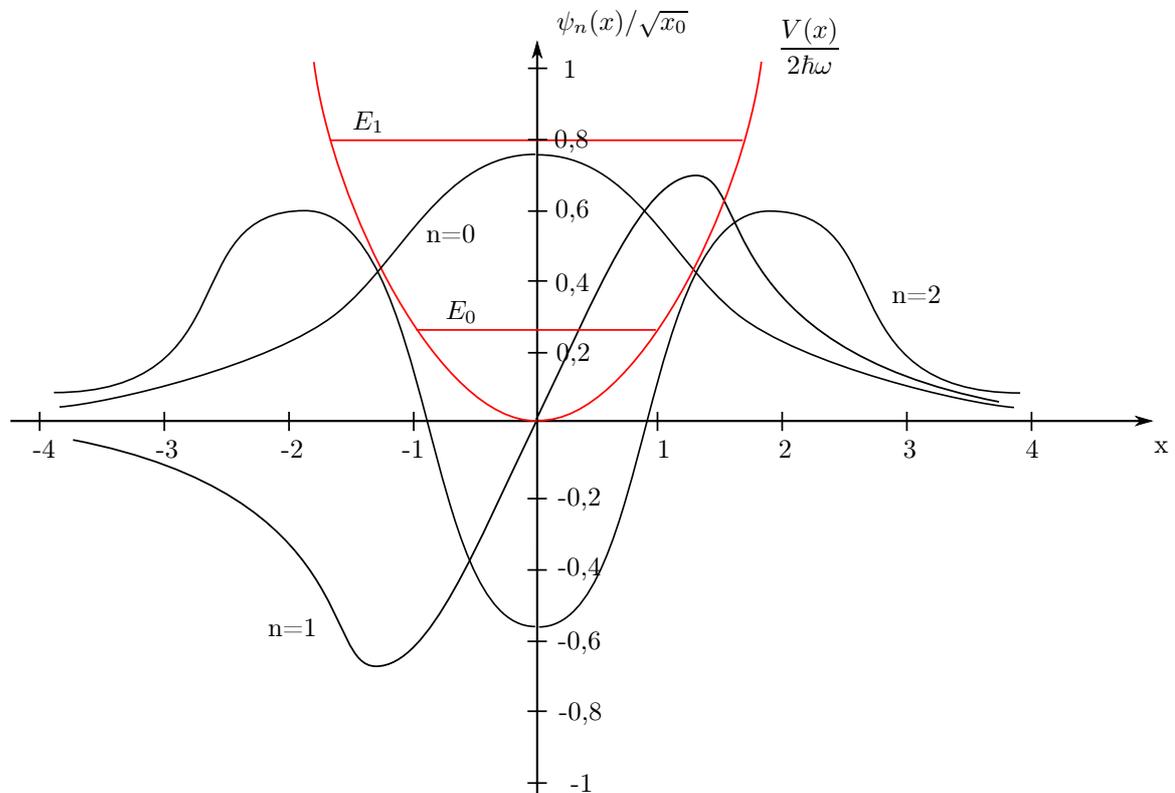
$$\langle n | P | n \rangle = 0$$

$$\begin{aligned} (\Delta \mathcal{X})^2 &= \langle n | \mathcal{X}^2 | n \rangle \\ &\stackrel{(253)}{=} \frac{x_0^2}{2} \langle n | (a + a^\dagger)^2 | n \rangle \\ &= \frac{x_0^2}{2} \left[\underbrace{\langle n | a^2 | n \rangle}_{=0} + \underbrace{\langle n | aa^\dagger + a^\dagger a | n \rangle}_{=\langle n | [a, a^\dagger] + 2N | n \rangle} + \underbrace{\langle n | a^{\dagger 2} | n \rangle}_{=0} \right] \\ &= \frac{x_0^2}{2} [\langle n | n \rangle + 2\langle n | N | n \rangle] \\ &= \frac{x_0^2}{2} (2n + 1) \quad (255) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (\Delta P)^2 &= \langle n | P^2 | n \rangle \\
 &\stackrel{(253)}{=} \frac{\hbar^2}{2x_0} \langle n | (a^\dagger - a)^2 | n \rangle \\
 &= \frac{\hbar^2}{2x_0} \langle n | aa^\dagger + a^\dagger a | n \rangle \quad (\text{siehe oben}) \\
 &= \frac{\hbar^2}{2x_0} (2n + 1) \tag{256}
 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \Delta \mathcal{X} \cdot \Delta P = \frac{\hbar}{2} (2n + 1) \tag{257}$$

GZ $|0\rangle$ hat minimale Unschärfe



klassisch: Aufenthalt nur dort, wo $E \geq V$ ist also $|\frac{x}{x_0}| \leq \sqrt{2n+1}$ für n -ten Energie-EZ E_n

QM: $|\psi_n(x)|^2 > 0$ auch für $|x| > \sqrt{2n+1}x_0$

Zeitentwicklung

Schrödinger-Bild:

$$|n, t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} |n\rangle \quad (258)$$

Heisenberg-Bild:

$$a(t=0) = a$$

$$\begin{aligned} (182) \quad \implies \quad \frac{d}{dt} a &= \frac{i}{\hbar} [H, a] \\ &\stackrel{(226)}{=} i\omega \left[N + \frac{1}{2}, a \right] = i\omega [N, a] \\ &\stackrel{(230)}{=} -i\omega a \end{aligned} \quad (259)$$

$$\begin{aligned} a(t) &= a(0) e^{-i\omega t} \\ a^\dagger(t) &= a^\dagger(0) e^{i\omega t} \end{aligned} \quad (260)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{X}(t) &\stackrel{(253)}{=} \frac{x_0}{\sqrt{2}} \left(\underbrace{a}_{a(0)} e^{-i\omega t} + a^\dagger e^{i\omega t} \right) \\ &= \frac{x_0}{\sqrt{2}} [(a + a^\dagger) \cos(\omega t) + (a^\dagger - a) i \sin(\omega t)] \\ &\stackrel{(253)(254)}{=} \mathcal{X} \cos(\omega t) + \frac{x_0^2}{\hbar} P \sin(\omega t) \\ &\stackrel{(220)}{=} \mathcal{X} \cos(\omega t) + \frac{1}{m\omega} P \sin(\omega t) \end{aligned} \quad (261)$$

wobei $\mathcal{X} = \mathcal{X}(0)$, $P = P(0)$.

Analog:

$$P(t) = P \cos(\omega t) - m\omega \mathcal{X} \sin(\omega t) \quad (262)$$

\implies klassische Bewegungsgleichung des harmonischen Oszillators.

Welche Zustände zeigen die Schwingungen des klassischen Oszillators?

Nicht die Energie-Eigenzustände

$$\begin{aligned} \langle n | \mathcal{X}(t) | n \rangle &\stackrel{(181)(165)}{=} \langle n | e^{\frac{i}{\hbar} H t} \mathcal{X} e^{-\frac{i}{\hbar} H t} | n \rangle \\ &= e^{\frac{i}{\hbar} E_n t} \langle n | \mathcal{X} | n \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} = \langle n | \mathcal{X} | n \rangle \end{aligned}$$

Jedoch:

$$\langle \lambda | \mathcal{X}(t) | \lambda \rangle = \sqrt{2} x_0 A \cos(\omega t - \delta)$$

für sog. kohärente Zustände $|\lambda\rangle$ (siehe Übung).

Nachtrag zum Heisenberg-Bild

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(x)$$

(183),(184) implizieren für jeden Zustand ψ

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \langle \psi | \mathcal{X} | \psi \rangle &= \frac{1}{m} \langle \psi | P | \psi \rangle \\ \frac{d}{dt} \langle \psi | P | \psi \rangle &= -\langle \psi | \frac{\partial V}{\partial \mathcal{X}} | \psi \rangle \\ m \frac{d^2}{dt^2} \langle \mathcal{X} \rangle &= \frac{d \langle P \rangle}{dt} = -\langle \frac{\partial}{\partial \mathcal{X}} V(x) \rangle\end{aligned}\tag{263}$$

Ehrenfestsches Theorem

Damit $\langle \psi | \mathcal{X} | \psi \rangle$ die klass. Bewegungsgleichungen erfüllt, muss

$$\langle \psi | \frac{\partial V}{\partial \mathcal{X}} | \psi \rangle = \frac{\partial}{\partial \mathcal{X}} V(\langle \psi | \mathcal{X} | \psi \rangle)\tag{264}$$

gelten. (264) gilt sogar für alle $\psi \in \mathcal{H}$, wenn V höchstens quadratisch in \mathcal{X} ist.

3 Drehungen, Drehimpuls, Spin

3.1 Drehungen und ihre Erzeuger

passive Drehung (also eine Drehung des Koordinatensystems) im \mathbb{R}^3 um Achse \vec{n} (mit $\vec{n}^2 = 1$) mit Winkel φ .

Aufgabe 6e): Vektor $\vec{a} \in \mathbb{R}^3$ wird in \vec{a}_φ gedreht, wobei

$$\vec{a}_\varphi = \cos \varphi \vec{a} + (1 - \cos \varphi) (\vec{a} \cdot \vec{n}) \vec{n} - \sin \varphi (\vec{n} \times \vec{a}) \quad (265)$$

Kurznotation: $\vec{\varphi} = \varphi \cdot \vec{n}$ beschreibt Drehung. Suche Matrix $R(\vec{\varphi}) \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ mit

$$\vec{a}_\varphi = R(\vec{\varphi}) \vec{a} \quad \text{für alle } \vec{a} \in \mathbb{R}^3 \quad (266)$$

$$(265) \implies a_{\varphi k} = \cos \varphi a_k + (1 - \cos \varphi) \left(\sum_{m=1}^3 a_m n_m \right) n_k - \sin \varphi \sum_{l,m=1}^3 \varepsilon_{klm} n_l a_m$$

$$\stackrel{(266)}{=} \sum_{m=1}^3 [R(\vec{\varphi})]_{km} a_m$$

$$[R(\vec{\varphi})]_{km} = \cos \varphi \delta_{km} + (1 - \cos \varphi) n_k n_m - \sin \varphi \sum_{l=1}^3 \varepsilon_{klm} n_l \quad (267)$$

$$R(\vec{\varphi}) = R(\varphi \vec{n}) =$$

$$\begin{pmatrix} \cos \varphi + (1 - \cos \varphi) n_1^2 & (1 - \cos \varphi) n_1 n_2 + \sin \varphi n_3 & (1 - \cos \varphi) n_1 n_3 - \sin \varphi n_2 \\ (1 - \cos \varphi) n_1 n_2 - \sin \varphi n_3 & \cos \varphi + (1 - \cos \varphi) n_2^2 & (1 - \cos \varphi) n_2 n_3 + \sin \varphi n_1 \\ (1 - \cos \varphi) n_1 n_3 + \sin \varphi n_2 & (1 - \cos \varphi) n_2 n_3 - \sin \varphi n_1 & \cos \varphi + (1 - \cos \varphi) n_3^2 \end{pmatrix} \quad (268)$$

Spezialfall: Drehung um die z-Achse

$$\vec{n} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$R \left[\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] = \begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (269)$$

Drehmatrizen sind orthogonal $R(\vec{\varphi})^T R(\vec{\varphi}) = \mathbb{1}$ mit $\det R(\vec{\varphi}) = 1$.

Auch: Alle Matrizen R mit $R(\vec{\varphi})^T R(\vec{\varphi}) = \mathbb{1}$ und $\det R(\vec{\varphi}) = 1$ sind Drehtmatrizen.

Bestimmung von φ und \vec{n} aus $R(\vec{\varphi})$:

- \vec{n} ist Eigenvektor zum Eigenwert 1.

$$R(\vec{\varphi}) \vec{n} = \vec{n} \quad (270)$$

- Spur

$$\begin{aligned} \operatorname{tr} R(\vec{\varphi}) &\stackrel{(265)}{=} \cos \varphi \underbrace{\operatorname{tr} \mathbb{1}}_3 + (1 - \cos \varphi) \underbrace{\sum_{k=1}^3 n_k^2}_1 \\ &= 1 + 2 \cos \varphi \end{aligned} \quad (271)$$

Die Menge aller Drehmatrizen bildet eine **Lie-Gruppe**. Definitionseigenschaften:

0. Es gibt ein Eins-Element

$$R(\vec{\varphi}) \cdot \mathbb{1} = \mathbb{1} R(\vec{\varphi}) = R(\vec{\varphi})$$

1. $R(\vec{\varphi}_2) \cdot R(\vec{\varphi}_2)$ ist Drehmatrix und für $R(\vec{\varphi}_3) := R(\vec{\varphi}_2) \cdot R(\vec{\varphi}_2)$ ist $\vec{\varphi}_3$ eine stetige Funktion von $\vec{\varphi}_1$ und $\vec{\varphi}_2$. ($\vec{\varphi}_3(\vec{\varphi}_1, \vec{\varphi}_2)$ ist sogar analytisch.)
2. $R^{-1}(\vec{\varphi}_1)$ ist Drehmatrix
3. $(R(\vec{\varphi}_1) \cdot R(\vec{\varphi}_2)) \cdot R(\vec{\varphi}_3) = R(\vec{\varphi}_1) \cdot (R(\vec{\varphi}_2) \cdot R(\vec{\varphi}_3))$

Die Lie-Gruppe der Drehungen im \mathbb{R}^3 heißt $\text{SO}(3)$. S steht für speziell ($\det R = 1$), O für orthogonal.

Infinitesimale Drehungen $\delta\varphi \ll 1$ in (267)

$$\begin{aligned} R(\delta\varphi \cdot \vec{n}) &= \mathbb{1} + \delta\varphi \cdot i \vec{n} \omega \\ &= \mathbb{1} + i \delta\varphi \sum_{l=1}^3 n_l \omega^{(l)} \end{aligned} \quad (272)$$

wobei

$$i \omega_{km}^{(l)} = -\varepsilon_{klm} \quad (273)$$

also

$$i \omega^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (274)$$

$$i \omega^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (275)$$

$$i \omega^{(3)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (276)$$

Die $\omega^{(l)}$ heißen **Generatoren** der $\text{SO}(3)$.

Aufbau einer endlichen Drehung aus infinitesimalen Drehungen:

$$\delta\varphi = \frac{\varphi}{N}$$

$$[R(\delta\varphi \cdot \vec{n})]^N = \left[1 + i \frac{\varphi}{N} \vec{n} \vec{\omega}\right]^N$$

$$R(\vec{\varphi}) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[R\left(\frac{\varphi}{N} \vec{n}\right) \right]^N = e^{i\varphi \vec{n} \vec{\omega}} = e^{i\vec{\varphi} \vec{\omega}} \quad (277)$$

eleganter als (267).

Alternativ: **Euler-Winkel**

$$R(\alpha, \beta, \gamma) := R(\alpha \vec{e}_z) R(\beta \vec{e}_y) R(\gamma \vec{e}_z) \quad (278)$$

Die Generatoren der SO(3) erfüllen

$$\left[\omega^{(j)}, \omega^{(k)} \right] = i \sum_{l=1}^3 \varepsilon_{jkl} \omega^{(l)} \quad (279)$$

Beweis:

$$\begin{aligned} \left[\omega^{(j)}, \omega^{(k)} \right]_{ln} &= \sum_{m=1}^3 \left[\omega_{ln}^{(j)} \omega_{mn}^{(k)} - \omega_{ln}^{(k)} \omega_{mn}^{(j)} \right] \\ &\stackrel{(273)}{=} - \sum_{m=1}^3 (\varepsilon_{ljn} \varepsilon_{mkn} - \varepsilon_{lkn} \varepsilon_{mjn}) \\ &= - (\delta_{lk} \delta_{jn} - \delta_{ln} \delta_{jk} - \delta_{lj} \delta_{kn} + \delta_{ln} \delta_{jk}) \\ &= - \sum_{m=1}^3 \varepsilon_{jkm} \varepsilon_{lmn} \stackrel{(273)}{=} i \sum_{m=1}^3 \varepsilon_{jkm} \omega_{ln}^{(m)} \end{aligned}$$

Der von $\{\omega^{(1)}, \omega^{(2)}, \omega^{(3)}\}$ aufgespannte Vektorraum heißt **Lie-Algebra** SO(3).

Also:

$$\vec{\varphi} \vec{\omega} \in \text{SO}(3) \quad \implies \quad e^{i\vec{\varphi} \vec{\omega}} \in \text{SO}(3)$$

Allgemein: Ein Satz $\{\omega^{(1)}, \omega^{(2)}, \dots, \omega^{(n)}\}$ von Matrizen oder linearen Operatoren bilden eine Lie-Algebra, wenn

$$\left[\omega^{(j)}, \omega^{(k)} \right] = i \sum_l f_{jkl} \omega^{(l)} \quad (280)$$

mit $f_{jkl} \in \mathbb{C}$ gilt. Die Zahlen f_{jkl} heißen **Strukturkonstanten** der Lie-Algebra bzw. Lie-Gruppe. $\{e^{i\vec{\varphi} \vec{\omega}}\}$ ist dann Lie-Gruppe.

Betrachte Lineare Abbildung

$$\omega^{(j)} \quad \longrightarrow \quad \omega^{(j)'}$$

mit

$$\left[\omega^{(j)'}, \omega^{(k)'} \right] = i \sum_l f_{jkl} \omega^{(l)'} \quad (281)$$

eine sogenannte Darstellung der Lie-Algebra.

Die Matrizen $e^{i\vec{\varphi} \vec{\omega}}$ bilden eine **Darstellung** der Lie-Gruppe:

Aus

$$e^{i\vec{\varphi}_1 \vec{\omega}} e^{i\vec{\varphi}_2 \vec{\omega}} = e^{i\vec{\varphi}_3 \vec{\omega}}$$

folgt

$$e^{i\vec{\varphi}_1 \vec{\omega}'} e^{i\vec{\varphi}_2 \vec{\omega}'} = e^{i\vec{\varphi}_3 \vec{\omega}'}$$

Darstellung der $SO(3)$ mit 2×2 -Matrizen:

$$\omega^{(j)} \longrightarrow \omega^{(j)'} := \frac{1}{2} \sigma_j$$

denn wegen (76) ist

$$\left[\frac{1}{2} \sigma_j, \frac{1}{2} \sigma_k \right] = i \sum_{l=1}^3 \varepsilon_{jkl} \frac{\sigma_l}{2}$$

$$SU(2) := \left\{ e^{i \vec{\varphi} \cdot \frac{\vec{\sigma}}{2}} \right\} = \left\{ U \in \mathbb{C}^{2 \times 2} : U^\dagger U = \mathbb{1} \wedge \det U = 1 \right\} \quad (282)$$

SU steht für speziell ($\det = 1$) unitär.

$e^{i \vec{\varphi} \cdot \frac{\vec{\sigma}}{2}}$ beschreibt eine Drehung der Spin-Einstellung

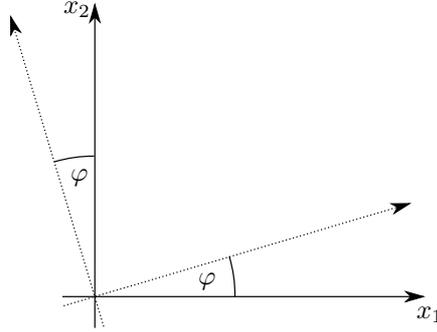
$$\begin{aligned} |s\rangle &= \alpha |\uparrow\rangle + \beta |\downarrow\rangle \\ \vec{x} &\longrightarrow \vec{x}' = e^{i \vec{\varphi} \cdot \vec{\omega}} \vec{x} \\ |s\rangle &\longrightarrow |s'\rangle \stackrel{(75)}{=} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{\varphi} \cdot \vec{S}} |s\rangle \\ \text{entspricht} \quad \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} &\longrightarrow \begin{pmatrix} \alpha' \\ \beta' \end{pmatrix} = e^{i \vec{\varphi} \cdot \frac{\vec{\sigma}}{2}} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (283)$$

Konsistenzcheck:

$$\begin{aligned} \langle S'_1 | \vec{a}' \cdot \vec{S}' | S'_2 \rangle &= \langle S_1 | e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\varphi} \cdot \vec{S}} \vec{a}' \cdot \vec{S}' e^{\frac{i}{\hbar} \vec{\varphi} \cdot \vec{S}} | S_2 \rangle \\ &\stackrel{A6e)}{=} \langle S_1 | \vec{a} \cdot \vec{S} | S_2 \rangle \end{aligned}$$

unabh. vom Koordinatensystem.

Generator von Drehungen der Wellenfunktion:



$$\begin{aligned} \vec{x} &\longrightarrow \vec{x}' = R(\delta\vec{\varphi}) \vec{x} \stackrel{(265)}{=} \vec{x} - \delta\vec{\varphi} \times \vec{\mathcal{X}} \\ \psi(\vec{x}) &= \psi'(\vec{x}') = \psi\left(\vec{x}' + \delta\vec{\varphi} \times \vec{\mathcal{X}}\right) + \mathcal{O}((\delta\vec{\varphi})^2) \\ &= \psi(\vec{x}') + \left(\delta\vec{\varphi} \times \vec{\mathcal{X}}\right) \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{x}') \\ &= \psi(\vec{x}') + \left(\vec{\mathcal{X}} \times \vec{\nabla} \psi\right) \cdot \delta\vec{\varphi} \\ &= \psi(\vec{x}') + \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\varphi} \cdot \vec{\mathcal{X}} \times \vec{P} \psi(\vec{x}') \\ &= \psi(\vec{x}') + \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\varphi} \cdot \vec{\mathcal{L}} \psi(\vec{x}') \end{aligned}$$

mit

$$\vec{\mathcal{L}} = \vec{\mathcal{X}} \times \vec{P} \quad (284)$$

Endliche Drehungen:

$$\psi'(R(\vec{\varphi})\vec{x}) = e^{\frac{i}{\hbar}\vec{\varphi}\vec{\mathcal{L}}}\psi(\vec{x}) \quad (285)$$

(284) bedeutet:

$$\mathcal{L}_j = \varepsilon_{jkl} \mathcal{X}_k P_l \quad (286)$$

Mit $[\mathcal{X}_k, P_l] = i\hbar\delta_{kl}$ findet man

$$[\mathcal{L}_j, \mathcal{L}_k] = i\hbar\varepsilon_{jkl} \mathcal{L}_l \quad (287)$$

so dass $\frac{1}{\hbar}\mathcal{L}_j$ tatsächlich (279) erfüllt.

Gesamtdrehimpuls

$$\vec{\mathcal{J}} := \vec{\mathcal{L}} + \vec{S} \quad (288)$$

wobei

$$[\mathcal{L}_j, S_k] = 0 \quad (289)$$

$$[\mathcal{J}_j, \mathcal{J}_k] = i\hbar\varepsilon_{jkl} \mathcal{J}_l \quad (290)$$

3.2 Eigenwerte des Drehimpulsoperators

$$\begin{aligned} [\vec{\mathcal{J}}^2, \mathcal{J}_m] &= \sum_{k=1}^3 [\mathcal{J}_k [\mathcal{J}_k, \mathcal{J}_m] + [\mathcal{J}_k, \mathcal{J}_m] \mathcal{J}_k] \\ &\stackrel{(290)}{=} i \hbar \sum_{k,l=1}^3 \varepsilon_{kml} (\mathcal{J}_k \mathcal{J}_l + \mathcal{J}_l \mathcal{J}_k) \stackrel{(*)}{=} 0 \end{aligned} \quad (291)$$

Casimir-Operator.

(*): ε_{kml} ist antisymmetrisch unter Vertauschung von k und l , $\mathcal{J}_k \mathcal{J}_l + \mathcal{J}_l \mathcal{J}_k$ symmetrisch.
 \implies gemeinsame Eigenkets von $\vec{\mathcal{J}}^2$ und \mathcal{J}_3 .

$$\begin{aligned} \vec{\mathcal{J}}^2 |\lambda m\rangle &= \lambda \hbar^2 |\lambda m\rangle \\ \mathcal{J}_3 |\lambda m\rangle &= m \hbar |\lambda m\rangle \end{aligned} \quad (292)$$

$$\langle \lambda_m | \vec{\mathcal{J}}^2 | \lambda_m \rangle \geq 0 \quad \implies \quad \lambda \geq 0 \quad (293)$$

Leiteroperatoren:

$$\mathcal{J}_{\pm} = \mathcal{J}_1 \pm i \mathcal{J}_2 \quad (294)$$

also

$$\mathcal{J}_{\pm}^{\dagger} = \mathcal{J}_{\mp}$$

Dann

a)

$$\begin{aligned} [\mathcal{J}_3, \mathcal{J}_{\pm}] &= [\mathcal{J}_3, \mathcal{J}_1] \pm i [\mathcal{J}_3, \mathcal{J}_2] \\ &\stackrel{(290)}{=} (i \mathcal{J}_2 \pm \mathcal{J}_1) \hbar = \pm \mathcal{J}_{\pm} \hbar \end{aligned} \quad (295)$$

b)

$$[\mathcal{J}_+, \mathcal{J}_-] \stackrel{(290)}{=} 2 \mathcal{J}_3 \hbar \quad (296)$$

c)

$$\begin{aligned} \vec{\mathcal{J}}^2 &\stackrel{(290)}{=} \mathcal{J}_+ \mathcal{J}_- + \mathcal{J}_3^2 - \mathcal{J}_3 \hbar \\ &\stackrel{(296)}{=} \mathcal{J}_- \mathcal{J}_+ + \mathcal{J}_3^2 + \mathcal{J}_3 \hbar \end{aligned} \quad (297)$$

d)

$$[\vec{\mathcal{J}}^2, \mathcal{J}_{\pm}] \stackrel{(291)}{=} 0 \quad (298)$$

Wegen (298) ist

$$\begin{aligned} \vec{\mathcal{J}}^2 \mathcal{J}_{\pm} |\lambda m\rangle &= \mathcal{J}_{\pm} \vec{\mathcal{J}}^2 |\lambda m\rangle \\ &= \mathcal{J}_{\pm} \lambda \hbar |\lambda m\rangle \end{aligned} \quad (299)$$

$\implies \mathcal{J}_{\pm} |\lambda m\rangle$ ist Eigenzustand zu $\vec{\mathcal{J}}^2$ mit Eigenwert $\lambda \hbar^2$ oder $\mathcal{J}_{\pm} |\lambda m\rangle = 0$.

$$\begin{aligned}
\mathcal{J}_3 \mathcal{J}_\pm | \lambda m \rangle &\stackrel{(295)}{=} \mathcal{J}_\pm \underbrace{\mathcal{J}_3 | \lambda m \rangle}_{\hbar m | \lambda m \rangle} \pm \mathcal{J}_\pm \hbar | \lambda m \rangle \\
&= (m \pm 1) \hbar \mathcal{J}_\pm | \lambda m \rangle
\end{aligned} \tag{300}$$

$\Rightarrow \mathcal{J}_\pm | \lambda m \rangle$ ist Eigenzustand zu \mathcal{J}_3 mit Eigenwert $(m \pm 1)\hbar$ oder $\mathcal{J} | \lambda m \rangle = 0$

$$\begin{aligned}
0 \leq \| \mathcal{J} | \lambda m \rangle \|^2 &= \langle \lambda m | \mathcal{J}_\mp \mathcal{J}_\pm | \lambda m \rangle \\
&\stackrel{(297)}{=} \langle \lambda m | \mathcal{J}^2 - \mathcal{J}_3^2 \mp \mathcal{J}_3 \hbar | \lambda m \rangle \\
0 \leq \lambda - m^2 \mp m &
\end{aligned} \tag{301}$$

$$\Rightarrow \lambda \geq m^2 \pm m$$

$$\Rightarrow \lambda \geq |m|(|m| + 1) \geq 0 \tag{302}$$

\Rightarrow Es gibt für jedes λ ein maximales m :

$$j = m_{\max} \tag{303}$$

$|\lambda j\rangle$ heißt Zustand höchsten Gewichts

$$\Rightarrow \mathcal{J}_+ |\lambda j\rangle = 0 \tag{304}$$

$$\Rightarrow 0 = \| \mathcal{J}_+ |\lambda j\rangle \|^2 \stackrel{(301)}{=} (\lambda - j^2 - j)\hbar^2$$

$$\Rightarrow \lambda = j(j+1) \tag{305}$$

Analog für m_{\min} und $-|\lambda m_{\min}\rangle$

$$\begin{aligned}
0 &\stackrel{(301)}{=} \lambda - m_{\min}^2 + m_{\min} \stackrel{(305)}{=} j(j+1) - m_{\min}^2 + m_{\min} \\
&\Rightarrow m_{\min} = -j
\end{aligned} \tag{306}$$

m nimmt also die Werte

$$-j, -j+1, \dots, j-1, j \tag{307}$$

an.

$$\begin{aligned}
&\Rightarrow 2j \in \mathbb{N}_0 \\
\text{also } j &= 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}
\end{aligned} \tag{308}$$

Bessere Notation

$$\begin{aligned}\vec{\mathcal{J}}^2|jm\rangle &= j(j+1)\hbar^2|jm\rangle \\ \mathcal{J}_3|jm\rangle &= m\hbar|jm\rangle\end{aligned}\quad (309)$$

und der Zustand höchsten Gewichts ist $|jj\rangle$

Eigenwerte des Bahndrehimpulses:

$$\vec{L} = \vec{\mathcal{X}} + \vec{P} \Rightarrow \text{Quantenzahlen } l, m_l$$

Spektrum gegenüber (308) weiter eingeschränkt

$$a_j := \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{\mathcal{X}_j}{x_0} + i \frac{x_0 P}{\hbar} \right] \quad (310)$$

Dabei ist x_0 ein beliebiger Parameter mit $[x_0] = \text{Länge}$

$$\begin{aligned}a_+ &:= \frac{1}{\sqrt{2}}(a_1 + ia_2) \\ a_+^\dagger &:= \frac{1}{\sqrt{2}}(a_1^\dagger - ia_2^\dagger) \\ a_- &:= \frac{1}{\sqrt{2}}(a_1 - ia_2) \\ a_-^\dagger &:= \frac{1}{\sqrt{2}}(a_1^\dagger + ia_2^\dagger)\end{aligned}\quad (311)$$

erfüllen (vgl. (224)):

$$[a_+, a_+^\dagger] = [a_-, a_-^\dagger] = \mathbb{1} \quad (312)$$

\Rightarrow Auf- und Absteigeoperatoren

$$\text{und } [a_+, a_-] = 0 \quad (313)$$

$$\begin{aligned}L_3 &\stackrel{(286)}{=} \mathcal{X}_1 P_2 - \mathcal{X}_2 P_1 \\ &\stackrel{(310)}{=} \frac{\hbar}{2i} \left[(a_1 + a_1^\dagger)(a_2 - a_2^\dagger) - (a_2 + a_2^\dagger)(a_1 - a_1^\dagger) \right] \\ &= \frac{\hbar}{1} \left[a_1^\dagger a_2 - a_1 a_2^\dagger \right] \\ &\stackrel{(311)}{=} \hbar \left[a_+^\dagger a_- - a_+ a_-^\dagger \right] \\ &= \hbar(N_- - N_+)\end{aligned}\quad (314)$$

mit Besetzungszahloperatoren N_+ und N_- .

(233) \Rightarrow Eigenwerte von N_\pm sind ganzzahlig

$\Rightarrow L_3$ hat nur ganzzahlige Eigenwerte

$$m_l = -l, -l+1, \dots, -1, 0, 1, \dots, l-1, l \quad (315)$$

⇒ Die Quantenzahl l in der Eigenwertgleichung (vgl. (309))

$$\vec{L}^2 |l m_l\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l m_l\rangle \quad (316)$$

ist ebenfalls ganzzahlig.

Normierung:

$$(300) \Rightarrow \mathcal{J}_- |j m\rangle \propto |j m-1\rangle \quad (317)$$

$$(310) \wedge (305) \Rightarrow \|\mathcal{J}_- |j m\rangle\|^2 = (j+1) - m(m-1)$$

Wähle:

$$|j m-1\rangle := \frac{1}{\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}} \mathcal{J}_- |j m\rangle \quad (318)$$

“Condon-Shortly-Phasenkonvention”

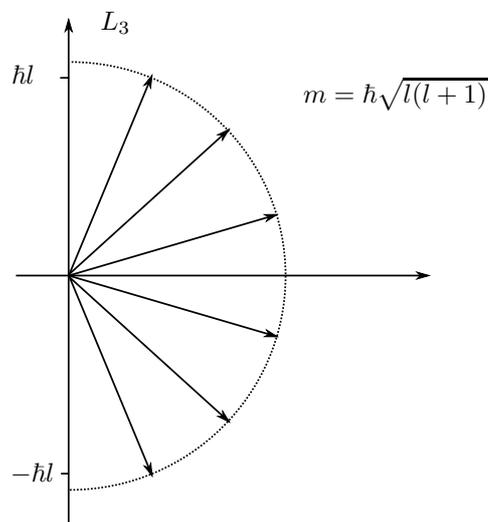
$$|j m+1\rangle := \frac{1}{\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}} \mathcal{J}_+ |j m\rangle \quad (319)$$

Analog:

$$|l m_l-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}} L_- |l m_l\rangle \quad (320)$$

mit $L_{\pm} = L_1 \pm iL_2$

usw.



Gut dargestellt in: Gernot Münster: Quantentheorie

Ortsdarstellung: Polarkoordinaten r, ϑ, φ

$$\begin{aligned} [\vec{\mathcal{X}}^2, \vec{L}] &= \sum_{j=1}^3 [\mathcal{X}_j^2, \vec{L}] \\ &= \sum_{j=1}^3 \left\{ \mathcal{X}_j [\mathcal{X}_j, \vec{L}] + [\mathcal{X}_j, \vec{L}] \mathcal{X}_j \right\} \\ &\stackrel{\text{Aufg. 18b}}{=} 0 \end{aligned} \quad (321)$$

Eigenfunktionen:

$$\langle \vec{r} | l m \rangle =: \langle r \vartheta \varphi | l m \rangle$$

(dabei steht m für m_l)

$$\begin{aligned} \langle \vec{r} | \vec{L}^2 | l m \rangle &= \hbar^2 l(l+1) \langle \vec{r} | l m \rangle \\ \langle \vec{r} | L_3 | l m \rangle &= \hbar m \langle \vec{r} | l m \rangle \end{aligned} \quad (322)$$

In der Ortsdarstellung bedeutet (321):

$$[r^2, \vec{L}] = 0$$

d.h. \vec{L} enthält keine Ableitung nach r

⇒ Wir suchen nach Eigenfunktionen die nicht von r abhängen

$$\langle \vec{r} | l m \rangle = Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (323)$$

$$\begin{aligned} \vec{L}^2 Y_{lm}(\vartheta, \varphi) &= \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \\ L_3 Y_{lm}(\vartheta, \varphi) &= \hbar m Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \end{aligned} \quad (324)$$

wobei L_j ein Differentialoperator bzgl. ϑ und φ ist.

Mit $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ ist auch $f(r) \cdot Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ mit beliebigen $f(r)$ eine Lösung von (324).

$$\vec{\nabla} = \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\vartheta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \vec{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (325)$$

Mit

$$\vec{x} = r \vec{e}_r \quad \vec{e}_r \times \vec{e}_\vartheta = \vec{e}_\varphi \text{ usw.}$$

$$\begin{aligned}
\vec{L} &= \frac{\hbar}{i} \vec{x} \times \vec{\nabla} \\
&= \frac{\hbar}{i} \left[\vec{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \vec{e}_\varphi \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \\
&= \frac{\hbar}{i} \left[\begin{pmatrix} -\sin \varphi \\ \cos \varphi \\ 0 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \begin{pmatrix} -\cot \vartheta \cos \varphi \\ -\cot \vartheta \sin \varphi \\ 1 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \quad (326)
\end{aligned}$$

$$\vec{L}^2 = -\hbar^2 \Delta_{\vartheta, \varphi} \quad (327)$$

wobei

$$\Delta_{\vartheta, \varphi} = \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (328)$$

Laplace-Operator ind Kugelkoordinaten:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \Delta_{\vartheta, \varphi} \quad (329)$$

$$(326) \implies L_3 = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$(324) \implies \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \hbar m Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

$$\implies Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = e^{im\varphi} Y_{lm}(\vartheta, 0) \quad (330)$$

Aus (326) finden wir

$$\begin{aligned}
L_\pm &= L_1 \pm iL_2 \\
&= \hbar e^{\pm i\varphi} \left[\pm \frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \quad (331)
\end{aligned}$$

Aus $L_+ |ll\rangle = 0$ folgt:

$$\begin{aligned}
0 &= L_+ Y_{ll}(\vartheta, \varphi) \\
&\stackrel{(331)(330)}{=} \hbar e^{i\varphi} \left[\frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] e^{il\varphi} Y_{ll}(\vartheta, 0) \\
&= e^{i(l+1)\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \vartheta} - l \cot \vartheta \right) Y_{ll}(\vartheta, 0) \quad (332)
\end{aligned}$$

Lösungsweg wie (241) \rightarrow (242)

$$\implies Y_{ll}(\vartheta, 0) = c_l (\sin \vartheta)^l \quad (333)$$

Normierung:

$$1 = \underbrace{\int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi}_{d\Omega} |Y_{lm}(\vartheta, \varphi)|^2 \quad (334)$$

$$\stackrel{(333)}{\implies} |c_l|^2 = \frac{2l+1}{4\pi} \frac{1}{4^l} \binom{2l}{l} \quad (335)$$

$$L_- Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \stackrel{(320)}{=} \underbrace{\sqrt{l(l+1) - m(m-1)}}_{a_{lm}} \hbar Y_{lm-1}(\vartheta, \varphi)$$

Mit (330) und (331):

$$\begin{aligned} a_{lm} e^{i(m-1)\varphi} Y_{lm-1}(\vartheta, 0) &= e^{i\varphi} \left[-\frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] Y_{lm}(\vartheta, 0) e^{im\varphi} \\ \implies a_{lm} Y_{lm-1}(\vartheta, 0) &= \left[-\frac{\partial}{\partial \vartheta} - m \cot \vartheta \right] Y_{lm}(\vartheta, 0) \end{aligned} \quad (336)$$

Standarttrick:

$$\begin{aligned} a_{lm} Y_{lm-1}(\vartheta, 0) &= - \left[\frac{\partial}{\partial \vartheta} + m \cot \vartheta \right] (\sin \vartheta)^{-m} (\sin \vartheta)^m Y_{lm}(\vartheta, 0) \\ &= -(\sin \vartheta)^{-m} \frac{\partial}{\partial \vartheta} (\sin \vartheta)^m Y_{lm-1}(\vartheta, 0) \end{aligned} \quad (337)$$

denn

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \vartheta} (\sin \vartheta)^{-m} &= -m (\sin \vartheta)^{-m-1} \cos \vartheta \\ &= -m (\sin \vartheta)^{-m} \cot \vartheta \end{aligned}$$

also

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

Mit $t := \cos \vartheta$, $\sin^2 \vartheta = 1 - t^2$ ist

$$\frac{\partial}{\partial \vartheta} = \frac{dt}{d\vartheta} \frac{d}{dt} = -\sin \vartheta \frac{d}{dt}$$

und (337) ist

$$\begin{aligned} a_{lm} Y_{lm-1}(\vartheta, 0) &= (\sin \vartheta)^{-(m-1)} \frac{d}{dt} (\sin \vartheta)^m Y_{lm}(\vartheta, 0) \\ &= (1-t^2)^{-\frac{m-1}{2}} \frac{d}{dt} (1-t^2)^{\frac{m}{2}} Y_{lm}(\vartheta, 0) \end{aligned}$$

⇒ Rekursionsformel

$$\begin{aligned} \underbrace{(1-t^2)^{\frac{m-1}{2}} Y_{lm-1}(\vartheta, 0)}_{f_{l,m-1}(t)} &= \frac{1}{a_{lm}} \frac{d}{dt} [(1-t^2)^{\frac{m}{2}} Y_{lm}(\vartheta, 0)] \\ f_{l,m-1}(t) &= \frac{1}{a_{lm}} \frac{d}{dt} f_{lm}(t) \end{aligned} \quad (338)$$

Anfangsbedingungen $m = l$ aus(333):

$$\begin{aligned} Y_{ll}(\vartheta, 0) &= c_l (1-t^2)^{\frac{l}{2}} \\ \Rightarrow f_{ll} &= (1-t^2)^{\frac{l}{2}} Y_{ll}(\vartheta, 0) = c_l (1-t^2)^l \end{aligned} \quad (339)$$

Lösung von (338):

$$\begin{aligned} f_{l,l-1} &= \frac{1}{a_{ll}} \frac{d}{dt} f_{ll}(t) \\ f_{l,l-2} &\stackrel{(338)}{=} \frac{1}{a_{l,l-1}} \frac{d}{dt} f_{l,l-1}(t) \\ &\stackrel{(340)}{=} \frac{1}{a_{l,l-1}} \frac{1}{a_{ll}} \frac{d^2}{dt^2} f_{ll}(t) \\ &\vdots \\ f_{lm} &= \frac{1}{a_{ll}} \cdots a_{lm+1} \frac{d^{l-m}}{dt^{l-m}} f_{ll}(t) \\ \stackrel{(338),(339)}{\implies} Y_{lm}(\vartheta, 0) &= \frac{c_l}{a_{ll} \cdots a_{lm+1}} (1-t^2)^{-\frac{m}{2}} \frac{d^{l-m}}{dt^{l-m}} (1-t^2)^l \end{aligned} \quad (340)$$

Die Lösung schreibt man üblicherweise als

$$Y_{lm}(\vartheta, 0) = C_{lm} P_l^m(t) \quad (341)$$

mit

$$C_{lm} = (-1)^m \left[\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (342)$$

und den **zugeordneten Legendre-Funktionen**

$$P_l^m(t) = (-1)^{l+m} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \frac{1}{2^l l!} (1-t^2)^{-\frac{m}{2}} \frac{d^{l-m}}{dt^{l-m}} (1-t^2)^l \quad (343)$$

Eigenschaften:

$$P_l^{-m}(t) = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(t) \quad (344)$$

also (via $m \rightarrow -m$ in (343))

$$P_l^m(t) = \frac{1}{2^l l!} (1-t^2)^{\frac{m}{2}} \left(\frac{d}{dt} \right)^{l+m} (t^2-1)^l \quad (345)$$

Die

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = C_{lm} P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi} \quad (346)$$

heißen **Kugelflächenfunktionen**

Es gilt:

$$Y_{l-m}(\vartheta, \varphi) = (-1)^m Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi) \quad (347)$$

Physik	Chemie
$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$	s-Orbital
$Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta e^{i\varphi}$	p-Orbitale $p_z = Y_{10}$ $p_x = \frac{1}{2}(Y_{11} + Y_{1-1})$ $p_y = \frac{1}{2i}(Y_{11} - Y_{1-1})$
$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta$	
$Y_{1-1} = -Y_{11}^* = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta e^{-i\varphi}$	
$Y_{22} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \vartheta e^{2i\varphi}$	d-Orbitale
$Y_{21} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \vartheta \cos \vartheta e^{i\varphi}$	
$Y_{2-1} = -Y_{21}^*$	
$Y_{2-2} = Y_{22}^*$	

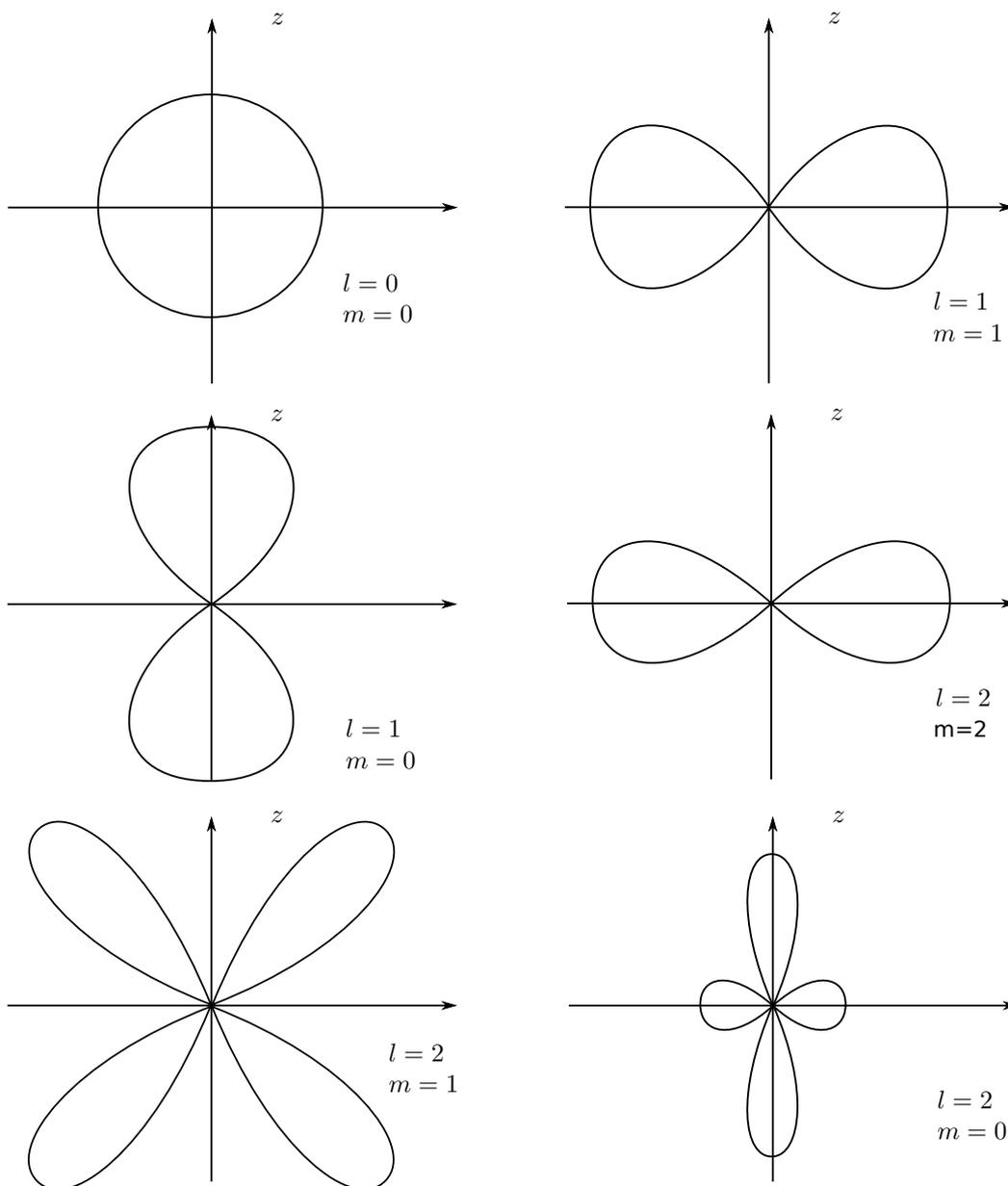
Normierung:

$$\begin{aligned} \langle l'm' | lm \rangle &= \delta_{ll'} \delta_{mm'} \\ \implies \int d\Omega Y_{l'm'}^*(\vartheta, \varphi) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) &= \delta_{ll'} \delta_{mm'} \end{aligned} \quad (348)$$

Vollständigkeit:

$$\begin{aligned} 1 &= \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l |lm\rangle \langle lm| \\ \implies \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi) Y_{lm}(\vartheta', \varphi') &= \delta(\Omega - \Omega') \\ &:= \frac{\delta(\vartheta - \vartheta') \delta(\varphi - \varphi')}{\sin \vartheta} \end{aligned} \quad (349)$$

$|Y_{lm}(\vartheta, \varphi)|^2$ hängt nicht von φ ab. $|Y_{lm}(\vartheta, \varphi)|^2 d\Omega$ ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Raumwinkelelement $d\Omega$ um (ϑ, φ) für Elektron mit Drehimpuls-Quantenzahl (l, m) :



Parität:

$$\mathbb{P}\psi(\vec{r}) \Rightarrow \psi(-\vec{r})$$

Für $\psi(\vec{r}) = f(r)Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ ist

$$\psi(-\vec{r}) = f(r)Y_{lm}(\pi - \vartheta, \varphi + \pi)$$

Aus (346) und (343):

$$Y_{lm}(\pi - \vartheta, \varphi + \pi) = (-1)^l Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (350)$$

\Rightarrow Die **Parität** von Y_{lm} ist $(-1)^l$

4 Wasserstoffatom

4.1 Zentralpotentiale

$$V(\vec{\mathcal{X}}) = V(R) \tag{351}$$

mit $R^2 = \mathcal{X}_1^2 + \mathcal{X}_2^2 + \mathcal{X}_3^2$

und $V(R) = V(r) = V(\sqrt{\vec{x}^2})$ in der Ortsdarstellung. In beliebiger Darstellung

$$V(R) = \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{x} |\vec{x}\rangle V(\sqrt{\vec{x}^2}) \langle \vec{x}|$$

Rotationsinvarianz:

$$e^{\frac{i}{\hbar} \vec{\varphi} \vec{\mathcal{J}}} V(R) e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\varphi} \vec{\mathcal{J}}} = V(R)$$

infinitesimal

$$\begin{aligned} \left[1 + \frac{i}{\hbar} \vec{\varphi} \vec{\mathcal{J}} \right] V(R) \left[1 - \frac{i}{\hbar} \vec{\varphi} \vec{\mathcal{J}} \right] &= V(R) + \mathcal{O}(\varphi^2) \\ [\vec{\mathcal{J}}, V(R)] &= 0 \end{aligned} \tag{352}$$

auch:

$$[\vec{\mathcal{J}}, \vec{P}^2] = 0 \tag{353}$$

also:

$$[\vec{\mathcal{J}}, H] = 0 \tag{354}$$

Energieeigenkets

$$|E j m\rangle \tag{355}$$

Ist $V(R)$ zusätzlich von \vec{S} unabhängig, so ist

$$[\vec{S}, V(R)] = 0$$

also auch (wg. $\vec{L} = \vec{\mathcal{J}} - \vec{S}$)

$$[\vec{L}, V(R)] = 0$$

So können wir die Energieeigenkets mit

$$|E l m_l s m_s\rangle \tag{356}$$

bezeichnen.

$$(354) \implies [H, \mathcal{J}_\pm] = 0$$

Aus

$$H |E j m\rangle = E |E j m\rangle$$

folgt also

$$\begin{aligned} H \mathcal{J}_\pm |E j m\rangle &= \mathcal{J}_\pm H |E j m\rangle \\ &= E \mathcal{J}_\pm |E j m\rangle \\ \implies H |E j m \pm 1\rangle &= E |E j m \pm 1\rangle \end{aligned}$$

$\implies E$ hängt nicht von m ab. Zunächst:

$$[\vec{S}, V(R)] = 0$$

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(R) \quad (357)$$

$$|E l m_l s m_s\rangle = |E l m_l\rangle \otimes |s m_s\rangle$$

Spin-Entartung: E hängt nicht von $m_s = \pm \frac{1}{2}$ ab.

$$H |E l m_l\rangle = E |E l m_l\rangle$$

Mit $\psi_{Elm}(\vec{r}) = \langle \vec{r} | E l m_l \rangle$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \psi(r) \right] \psi_{Elm}(\vec{r}) = E \psi_{Elm}(\vec{r}) \quad (358)$$

bzw. mit (327),(329):

$$P^2 = -\hbar^2 \Delta = P_r^2 + \frac{1}{r^2} \vec{L}^2 \quad (359)$$

wobei

$$P_r^2 = -\hbar^2 \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right] \quad (360)$$

Radialimpuls:

$$P_r = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \quad (361)$$

erfüllt

$$\begin{aligned} P_r^\dagger &= P_r \\ [P_r, R] &= \frac{\hbar}{i} \mathbb{1} \end{aligned} \quad (362)$$

(358) bedeutet also

$$\left[\frac{1}{2m} P_r^2 + \frac{1}{2mr^2} \vec{L}^2 + V(r) \right] \psi_{Elm_l}(\vec{r}) = E \psi_{Elm_l}(\vec{r}) \quad (363)$$

Mit

$$\vec{L}^2 \psi_{Elm_l}(\vec{r}) = \hbar^2 l(l+1) \psi_{Elm_l}(\vec{r}) \quad (364)$$

folgt (siehe Text (324)):

$$\psi_{Elm_l}(\vec{r}) = f_{El}(r) Y_{lm_l}(\vartheta, \varphi) \quad (365)$$

und (363) wird zu

$$\left[\frac{1}{2m} P_r^2 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2} + V(r) \right] f_{El}(r) Y_{lm_l}(\vartheta, \varphi) = E f_{El}(r) Y_{lm_l}(\vartheta, \varphi)$$

und mit (360)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2} + V(r) \right] f_{El}(r) = E f_{El}(r) \quad (366)$$

\Rightarrow tatsächlich keine m_l -Abhängigkeit

In (366) o.B.d.A $f_{El}(r)$ reell.

Trick:

$$u_{El}(r) := r f_{El}(r)$$

denn

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial r^2} u_{El}(r) &= \frac{\partial}{\partial r} \left[\underbrace{\left(\frac{\partial r}{\partial r} \right)}_{=1} f_{El}(r) + r \frac{\partial}{\partial r} f_{El}(r) \right] \\ &= 2 \frac{\partial}{\partial r} f_{El}(r) + r \frac{\partial^2}{\partial r^2} f_{El}(r) \\ &= r \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right] f_{El}(r) \quad \cdot) \end{aligned}$$

und (366) wird zu

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2} + V(r) \right] u_{El}(r) = E u_{El}(r) \quad (367)$$

entspricht eindimensionaler Schrödinger-Gleichung mit

$$V_{eff}(r) = V(r) + \underbrace{\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2}}_{\text{Zentrifugalpotenzial}} \quad (368)$$

Jedoch: $r \geq 0$

$$d^3 \vec{r} = r^2 dr d\Omega$$

Bindungszustände

$$\begin{aligned} \infty > \int_0^\infty f^2 dr f_{El}^2(r) &= \int_0^\infty dr u_{El}^2(r) \\ \Rightarrow |u_{El}(r)| \sqrt{r} &\rightarrow 0 \quad \text{für } r \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (369)$$

Nun $r \rightarrow 0$, zwei Fälle:

$$\begin{aligned} 1. u(0) \neq 0 &\Rightarrow f(r) \underset{r \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{r} \\ \Rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \right] f(r) Y_{lm_l}(\vartheta, \varphi) &\underset{r \rightarrow 0}{\sim} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \delta^{(3)}(\vec{r}) + V(r) \frac{1}{r} \right] Y_{lm_l}(\vartheta, \varphi) \\ \Rightarrow V(r) &\text{ hat } \delta^{(3)}(\vec{r})\text{-singulären Anteil} \end{aligned}$$

2. $u_{El}(0) = 0 \implies V(r)$ hat keinen $\delta^{(3)}$ -singulären Anteil
Für die meisten Potentiale gilt:

$$r^2 V(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} 0$$

so dass $V_{eff}(r)$ in (368) für $r \rightarrow 0$ vom **Zentrifugalpotenzial** dominiert ist, sofern $l \neq 0$.

$$r \rightarrow 0: \quad \frac{d^2 u_{El}}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} u_{El} = 0$$

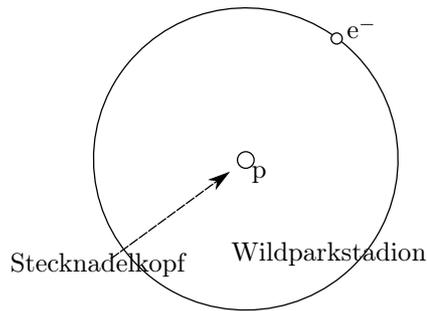
reguläre Lösung

$$u_{El}(r) \underset{r \rightarrow 0}{\sim} r^{l+1} \quad \text{für } l \neq 0 \quad (370)$$

irreguläre Lösung

$$u_{El}(r) \underset{r \rightarrow 0}{\sim} r^{-l} \quad \text{im Widerspruch zu } u_{El}(0) = 0$$

4.2 Wasserstoffatom



$$m_p \approx 1800 m_e$$

$$V(r) = -\frac{\gamma}{r} \quad (371)$$

mit

$$\gamma = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} = \underbrace{\hbar c \alpha}_{\text{SI}} \quad (372)$$

gilt in jedem Einheitensystem

wobei

$$\alpha \approx \frac{1}{137}$$

Bindungszustände $E < 0$

Wellenfunktion

$$\begin{aligned} \psi_{Elm_l}(\vec{r}) &\stackrel{(365),(367)}{=} f_{El}(r) Y_{lm_l}(\vartheta, \varphi) \\ &= r u_{El}(r) Y_{lm_l}(\vartheta, \varphi) \end{aligned} \quad (373)$$

Die Radialgleichung in (367) wird mit

$$\begin{aligned} \rho &= \kappa r \\ \kappa^2 &= \frac{2m|E|}{\hbar^2}, \kappa > 0 \\ \rho_0 &:= \frac{2m\gamma}{\hbar^2 \kappa} \end{aligned} \quad (374)$$

zu

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{\rho_0}{\rho} - 1 \right] u_{El}(\rho) = 0 \quad (375)$$

Asymptotik:

$$u_{El}(\rho) \underset{\rho \rightarrow 0}{\sim} \rho^{l+1} \quad \text{siehe (370)}$$

Für $\rho \rightarrow \infty$ wird (357) zu

$$\begin{aligned} \frac{d^2 u_{El}(\rho)}{d\rho^2} - u_{El}(\rho) &= 0 \\ \implies u_{El}(\rho) &\underset{\rho \rightarrow \infty}{\sim} e^{-\rho} \end{aligned} \quad (376)$$

Ansatz:

$$u(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho} W(\rho) \quad (377)$$

Einsetzen in (375)

$$\rho W''(\rho) + 2(l+1-\rho)W'(\rho) + [\rho_0 - 2(l+1)]W(\rho) = 0 \quad (378)$$

Lösung mit Potenzreihenansatz

$$W(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k \quad (379)$$

Ideal für Potenzreihenansätze

$$\theta = \rho \frac{d}{d\rho} \quad (380)$$

denn

$$\theta \rho^k = k \rho^k$$

ρ 's haben die gleiche Potenz.

$$\rho^2 \frac{d^2}{d\rho^2} = \theta(\theta-1) = \theta^2 - \theta \quad (381)$$

(378) \implies $[\theta(\theta-1) + 2(l+1-\rho)\theta + (\rho_0 - 2(l+1))\rho] W(\rho) = 0$
Einsetzen von (379)

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k [k(k-1) + 2(l+1-\rho)k + (\rho_0 - 2(l+1))\rho] = 0 \quad (382)$$

Koeffizienten von ρ^{k+1} :

$$[(k+1)k + 2(l+1)(k+1)] a_{k+1} + [-2k + \rho_0 - 2(l+1)] a_k = 0 \quad \text{für } k \geq 0 \quad (383)$$

Der Koeffizient von ρ^0 in (382) ist 0 $\implies a_0$ beliebig

$$(383) \implies a_{k+1} = \frac{2(k+l+1) - \rho_0}{(k+1)(k+2l+2)} a_k \quad (384)$$

Noch mehr Asymptotik:

Entweder die Reihe bricht ab, oder (384) bedeutet

$$\frac{a_{k+1}}{a_k} \underset{k \rightarrow \infty}{\sim} \frac{2}{k}$$

also

$$a_k \underset{\rho \rightarrow \infty}{\sim} \frac{2^k}{k!} \implies W(\rho) \underset{\rho \rightarrow \infty}{\sim} e^{2\rho}$$

\implies Widerspruch zu (376) \implies Die Reihe muss abbrechen!

(384) \implies Es gibt ein $N \in \mathbb{N}_0$ mit

$$\rho_0 = 2(N+l+1) \quad (385)$$

so dass in (384) $a_{N+1} = 0$ und

$$W(\rho) = \sum_{k=0}^N a_k \rho^k \quad (386)$$

Die **Hauptquantenzahl**

$$n = N + l + 1$$

erfüllt wegen $N \geq 0, l \geq 0, N, l \in \mathbb{N}_0$:

$$n \in \mathbb{N} \quad (387)$$

Also wg. (385)

$$\rho_0 = 2n \quad (388)$$

$$(374) \implies E = -\frac{2m\gamma^2}{\hbar^2 \rho_0^2}$$

Mit (388) sind die Eigenwerte durch die **Balmer-Formel**

$$E_n = -\frac{m\gamma^2}{2\hbar^2 n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (389)$$

gegeben.

(372) \implies SI-System:

$$E_n = -\frac{m e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

Jedes System:

$$E_n = -\frac{m c^2}{2} \frac{\alpha^2}{n^2} \quad (390)$$

Statt $|E l m_l\rangle$ schreibt man $|n l m_l\rangle$.

Wegen (385),(387) ist

$$l \leq n - 1 \quad (391)$$

l heißt **Nebenquantenzahl** und m_l (was $|m_l| \leq l$ erfüllt) **magnetische Quantenzahl**.
Speziell fürs Coulomb-Potenzial $V(r) = -\frac{\gamma}{r}$:

E_n hängt nicht von l ab.

Ursache: **Runge-Lenz-Vektor** ist Erhaltungsgröße.

Die DGL (378) lautet in der Variablen $t = 2\rho$:

$$t \frac{d^2 W}{dt^2} + [(2l+1) + 1 - t] \frac{dW}{dt} + [n+l - (2l+1)] W = 0 \quad (392)$$

Laguerrische DGL Die Lösung

$$W\left(\frac{t}{2}\right) = L_{n+l}^{2l+1}(t) \quad (393)$$

heißen **zugeordnete Laguerre-Polynome**.

Es gilt:

$$L_r^s(t) = \left(-\frac{d}{dt}\right)^s e^t \left(\frac{d}{dt}\right)^r e^{-t} t^r \quad (394)$$

$$L_1^1(t) = 1 \quad (395)$$

Die Radialfunktion $f_{El}(r)$ in (373) ist also mit (377) und (393):

$$f_{nl}(r) = f_{E_n l}(r) = N_{nl} (2\kappa r)^l e^{-\kappa r} L_{n+l}^{2l+1}(2\kappa r) \quad (396)$$

Normierungsfaktor

$$N_{nl}^2 = \frac{(n-l-1)! (2\kappa)^3}{2n [(n+l)!]^3} \quad (397)$$

κ hängt von n ab:

$$\kappa = \frac{m\gamma}{\hbar n} =: \frac{1}{a n} \quad (398)$$

mit dem **Bohrschen Radius**

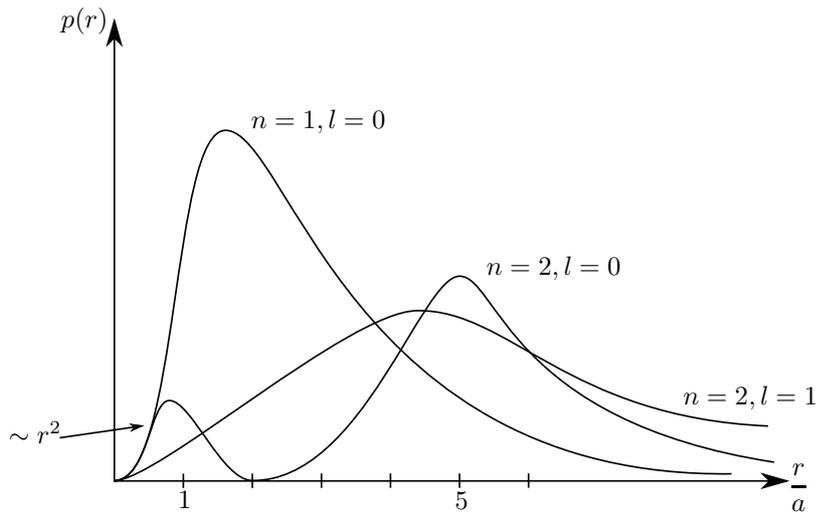
$$a = \frac{\hbar}{m\gamma} = \frac{\hbar}{m c \alpha} = 0,529 \cdot 10^{-10} \text{ m} \quad (399)$$

	Knoten	
$f_{10}(r) = 2a^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a}}$	0	
$f_{20}(r) = 2(2a)^{-\frac{3}{2}} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-\frac{r}{2a}}$	1	(400)
$f_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}} (2a)^{-\frac{3}{2}} \frac{r}{a} e^{-\frac{r}{2a}}$	0	

Anzahl der Knoten $N = n - l - 1$ (**radiale Quantenzahl**)

Die Wahrscheinlichkeit, das Elektron zwischen r und $r + dr$ anzutreffen, ist $p(r) dr$ mit

$$p(r) = r^2 f_{nl}^2(r)$$



größeres $n \implies$ größeres $\langle R \rangle$

$$\begin{aligned}\langle r \rangle_{nl} &:= \langle nlm | R | nlm \rangle = \int_0^\infty r^3 dr f_{nl}^2(r) \\ &= \frac{a}{2} [3n^2 - l(l+1)]\end{aligned}\tag{401}$$

5 Zeitabhängige Störungstheorie

5.1 Nicht entartete Störungstheorie

$$H = H_0 + H_1 \quad (402)$$

Gelöst:

$$H_0 |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle \quad (403)$$

Gesucht:

$$H |n\rangle = E_n |n\rangle \quad (404)$$

H_1 sei klein gegen H_0 , genauer

$$\langle m^{(0)} | H_1 | n^{(0)} \rangle \ll | E_n^{(0)} - E_m^{(0)} | \quad (405)$$

insbesondere: Nichtentartung von $|n\rangle$. D.h. $E_m^{(0)} \neq E_n^{(0)}$ für $m \neq n$, und $|n\rangle$ ist Bindungszustand.

Störungstheorie: Lösen von (404) durch Entwickeln in

$$\frac{\langle m^{(0)} | H_1 | n^{(0)} \rangle}{| E_n^{(0)} - E_m^{(0)} |}$$

Zweckmäßig: reeller Parameter λ und

$$H = H_0 + \lambda H_1 \quad (406)$$

\implies Organisation der Störungstheorie un Potenzen von λ

Störungsreihe:

$$\begin{aligned} E_n &= E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \\ |n\rangle &= |n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |n^{(2)}\rangle + \dots \end{aligned} \quad (407)$$

$|n\rangle$ ist unnormiert: Im allgemeinen $\langle n | n \rangle \neq 1$

(407) ist Potenzreihenansatz für (404)

$$(H_0 + \lambda H_1)(|n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \dots) = (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \dots)(|n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \dots) \quad (408)$$

Wir lösen (408) für **alle** λ .

Ordnung	
λ^0	$H_0 n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} n^{(0)}\rangle$ also (403)
λ^1	$H_1 n^{(0)}\rangle + H_0 n^{(1)}\rangle = E_n^{(1)} n^{(0)}\rangle + E_n^{(0)} n^{(1)}\rangle$ (409)
λ^2	$H_1 n^{(1)}\rangle + H_0 n^{(2)}\rangle = E_n^{(2)} n^{(0)}\rangle + E_n^{(1)} n^{(1)}\rangle + E_n^{(0)} n^{(2)}\rangle$ (410)

Entwicklung nach ungestörten Eigenzuständen:

$$|n^{(1)}\rangle = \sum_k \langle k^{(0)} | n^{(0)} \rangle \quad \text{usw.} \quad (411)$$

Zur Bestimmung der Entwicklungskoeffizienten $\langle k^{(0)} | n^{(0)} \rangle$ und $E_n^{(1)}$ multiplizieren (409) mit $\langle k^{(0)} |$:

$$\langle k^{(0)} | H_1 | n^{(0)} \rangle + \underbrace{\langle k^{(0)} | H_2 | n^{(1)} \rangle}_{E_k^{(0)} \langle k^{(0)} | n^{(1)} \rangle} = E_n^{(1)} \underbrace{\langle k^{(0)} | n^{(0)} \rangle}_{\delta_{kn}} + E_k^{(0)} \langle k^{(0)} | n^{(1)} \rangle \quad (412)$$

Für $k = n$ liefert (412) die erste Korrektur zur Energie:

$$E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | H_1 | n^{(0)} \rangle \quad (413)$$

Für $k \neq n$ folgt aus (412):

$$\langle k^{(0)} | n^{(1)} \rangle = \frac{\langle k^{(0)} | H_1 | n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \quad (414)$$

Jedoch: $\langle n^{(0)} | n^{(1)} \rangle$ ist unbestimmt!

$$\text{Wir wählen } \langle n^{(0)} | n^{(1)} \rangle = 0 \quad (415)$$

Also mit (411):

$$|n^{(1)}\rangle = \sum_{n \neq k} |k^{(0)}\rangle \frac{\langle k^{(0)} | H_1 | n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \quad (416)$$

($E_k^{(0)} \neq E_n^{(0)}$ für $k \neq n$; für $k \neq k'$ ist aber $E_k^{(0)} = E_{k'}^{(0)}$ erlaubt, solange $k, k' \neq n$)

In höheren Ordnungen können wir auch

$$\langle n^{(0)} | n^{(k)} \rangle; \quad k \geq 1 \quad (417)$$

fordern, denn zu jeder Lösung $|n^{(k)'}\rangle$ von (408) ist auch

$$|n^{(k)}\rangle = |n^{(k)'}\rangle + \alpha |n^{(0)}\rangle$$

Lösung von (408) zur Ordnung λ^k .

$$\begin{aligned} 0 &\stackrel{!}{=} \langle n^{(0)} | n^{(k)} \rangle \\ &= \langle n^{(0)} | n^{(k)'} \rangle + \alpha \underbrace{\langle n^{(0)} | n^{(0)} \rangle}_{=1} \\ &\implies \alpha = -\langle n^{(0)} | n^{(k)'} \rangle \end{aligned}$$

Achtung!: $|n\rangle$ ist nicht normiert, $|n^{(0)}\rangle$ allerdings schon!

Aus (410) finde wir dann:

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

$$\begin{aligned}
\Rightarrow E_n^{(2)} &= \langle n^{(0)} | H_1 | n^{(1)} \rangle \\
&\stackrel{(416)}{=} \sum_{k \neq n} \frac{\langle n^{(0)} | H_1 | k^{(0)} \rangle \langle k^{(0)} | H_1 | n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \\
\Rightarrow E_n^{(2)} &= \sum_{k \neq n} \frac{|\langle k^{(0)} | H_1 | n^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \quad (418)
\end{aligned}$$

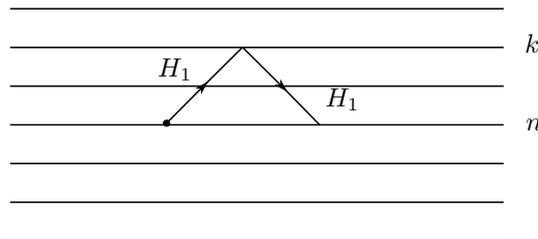
Interpretation:

Wahrscheinlichkeit, ein im Zustand $|n^{(0)}\rangle$ präpariertes System nach einschalten im Zustand $|k^{(0)}\rangle \neq |n^{(0)}\rangle$ anzuutreffen:

$$\begin{aligned}
&|n^{(0)}\rangle \xrightarrow{\text{Einschalten von } H_1} |n\rangle \\
P_{n \rightarrow k^{(0)}} &= \frac{|\langle k^{(0)} | n \rangle|^2}{|\langle n | n \rangle|^2} \\
&= \frac{|\langle k^{(0)} | n \rangle|^2}{|1 + \mathcal{O}(\lambda^2)|^2} \\
&\stackrel{(416)}{=} \frac{|\langle k^{(0)} | \lambda H_1 | n^{(0)} \rangle|^2}{|E_n^{(0)} - E_k^{(0)}|^2} [1 + \mathcal{O}(\lambda^2)] \\
&= \lambda^2 \frac{|\langle k^{(0)} | H_1 | n^{(0)} \rangle|^2}{|E_n^{(0)} - E_k^{(0)}|^2} + \mathcal{O}(\lambda^4) \quad (419)
\end{aligned}$$

$\langle k^{(0)} | H_1 | n^{(0)} \rangle$ nennt man **Übergangsamplitude** unb $P_{n \rightarrow k^{(0)}}$ **Übergangswahrscheinlichkeit**.

Zu $E_n^{(2)}$ tragen in (418) Zustände mit beliebig hoher Energie bei.



Ist $E_n > \langle n | H | n \rangle$, der Zustand also klassisch unerreichbar, so spricht man von einem **virtuellen** Effekt.

\Rightarrow Mit **Präzisionsmessungen** kann man Zustände $|k^{(0)}\rangle$ erforschen, selbst wenn $E_n^{(0)}$ für das Experiment unerreichbar ist.

\Rightarrow wichtig für die Teilchenphysik

5.2 Entartete Störungstheorie

$E_n^{(0)}$ sein N -fach entartet

$$H_0 |n^{(0)}\alpha\rangle = E_n^{(0)} |n^{(0)}\alpha\rangle \quad (420)$$

Entarteter N -dimensionaler Unterraum:

$$\mathcal{E} := \left[\left\{ |n^{(0)}\alpha\rangle \right\} \right] \quad \text{mit } \alpha = 1, \dots, N \quad (421)$$

$$\langle n^{(0)}\alpha | n^{(0)}\beta \rangle = \delta_{\alpha\beta} \quad (422)$$

Jede Linearkombination

$$|n^{(0)'}\gamma\rangle = \sum_{\alpha=1}^N |n^{(0)}\alpha\rangle c_{\alpha\gamma} \quad \text{mit } c_{\alpha\gamma} \in \mathbb{C} \quad (423)$$

ist ebenfalls Eigenket von H_0 zu $E_n^{(0)}$.

Wir wählen den selben Ansatz wie im nicht entarteten Fall in Gleichung (404), (406)-(411).

Mit der Ersetzung $|n\rangle \rightarrow |n\gamma\rangle$ wird (409) zu:

$$(H_0 - E_n^{(0)}) |n^{(1)}\gamma\rangle = (H_1 - E_n^{(1)}) |n^{(0)}\gamma\rangle$$

Linksmultiplikation mit $\langle n^{(0)}\beta |$ ergibt:

$$0 = -\langle n^{(0)}\beta | (H_1 - E_n^{(1)}) |n^{(0)}\gamma\rangle \quad (424)$$

also mit (423):

$$\sum_{\alpha=1}^N c_{\alpha\beta} \langle n^{(0)}\beta | H_1 |n^{(0)}\alpha\rangle = E_n^{(1)} c_{\beta\gamma} \quad (425)$$

Matrixdarstellung:

$$k_{1\beta\gamma} := \langle n^{(0)}\beta | H_1 |n^{(0)}\alpha\rangle \quad (426)$$

$$(425) \implies \sum_{\alpha=1}^N k_{1\beta\gamma} c_{\alpha\beta} = E_n^{(1)} c_{\beta\gamma} \quad (427)$$

Eigenwertproblem einer $N \times N$ -Matrix

$$\implies \det(h_1 - E_n^{(1)}) = 0 \quad (428)$$

(423) hat N Lösungen $E_{n\gamma}^{(1)}$, die nicht alle verschieden sein müssen. Die zugehörigen Eigenvektoren (siehe (427)) sind:

$$\vec{c}^{(\gamma)} = \begin{pmatrix} c_{1\gamma} \\ c_{2\gamma} \\ \vdots \\ c_{N\gamma} \end{pmatrix} \quad \gamma = 1, \dots, N \quad (429)$$

mit

$$\vec{c}^{(\gamma)\dagger} \vec{c}^{(\gamma')} = \delta_{\gamma\gamma'}$$

Der Basiswechsel zwischen $|n^{(0)} x\rangle$ und $|n^{(0)'} \gamma\rangle$ in (423) diagonalisiert wegen (427) also h_1 . Die Matrix $C = (C_{\alpha\beta})$ ist unitär.

(427) bedeutet:

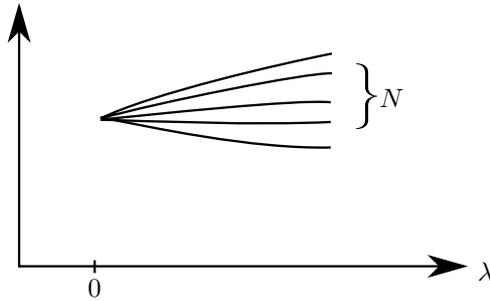
$$C^\dagger h_1 C = \text{diag}(E_{n1}^{(1)}, \dots, E_{nN}^{(1)}) \quad (430)$$

D.h. (423) diagonalisiert mit (427) die Störung H_1 im Unterraum \mathcal{E} .

$$\langle n^{(0)'} \gamma | H_1 | n^{(0)'} \gamma' \rangle = E_{n\gamma}^{(1)} \delta_{\gamma\gamma'} \quad (431)$$

\Rightarrow Bedingung (405) überlistet.

Wir beobachten, dass H_1 die N -fache Entartung i.a. aufhebt (oder reduziert).



(431) entspricht (413) im nichtentarteten Fall $E_{n\gamma}^{(1)}$ wird jedoch aus (428) bestimmt.

(416) wird nun zu:

$$\begin{aligned} |n^{(1)'} \gamma\rangle &= \sum_{|k^{(0)}\rangle \notin \mathcal{E}} |k^{(0)}\rangle \frac{\langle k^{(0)} | H_1 | n^{(0)'} \gamma\rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} + \sum_{\substack{\gamma'=1 \\ \gamma' \neq \gamma}}^N |n^{(0)'} \gamma'\rangle \langle n^{(0)'} \gamma' | n^{(1)'} \gamma\rangle \\ |n^{(1)'} \gamma\rangle &= \sum_{k \neq n} |k^{(0)}\rangle \frac{\langle k^{(0)} | H_1 | n^{(0)'} \gamma\rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} + \sum_{\substack{\gamma'=1 \\ \gamma' \neq \gamma}}^N |n^{(0)'} \gamma'\rangle \langle n^{(0)'} \gamma' | n^{(1)'} \gamma\rangle \end{aligned} \quad (432)$$

Neu: Komponenten $\langle n^{(0)'} \gamma' | n^{(1)'} \gamma\rangle$!

(410) entspricht im entarteten Fall:

$$H_1 |n^{(1)'} \gamma\rangle + H_0 |n^{(2)'} \gamma\rangle = E_{n\gamma}^{(2)} |n^{(0)'} \gamma\rangle + E_{n\gamma}^{(1)} |n^{(1)'} \gamma\rangle + E_n^{(0)} |n^{(2)'} \gamma\rangle \quad (433)$$

Multiplikation mit $\langle n^{(0)'} \gamma' |$:

$$\begin{aligned} & \langle n^{(0)'} \gamma' | H_1 | n^{(1)'} \gamma \rangle + E_n^{(0)} \langle n^{(0)'} \gamma' | n^{(2)'} \gamma \rangle \\ &= E_{n\gamma}^{(2)} \delta_{\gamma\gamma'} + E_{n\gamma}^{(1)} \underbrace{\langle n^{(0)'} \gamma' | n^{(1)'} \gamma \rangle}_{=0 \text{ wg. (415) für } \gamma=\gamma'} + E_n^{(0)} \langle n^{(0)'} \gamma' | n^{(2)'} \gamma \rangle \end{aligned} \quad (434)$$

Für $\gamma' = \gamma$

$$\begin{aligned} & E_{n\gamma}^{(2)} \stackrel{(434)}{=} \langle n^{(0)'} \gamma | H_1 | n^{(1)'} \gamma \rangle \\ & \stackrel{(432)}{=} \sum_{k \neq n} \frac{|\langle k^{(0)} | H_1 | n^{(0)'} \gamma \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \end{aligned} \quad (435)$$

Der zweite Term von (432) trägt nicht bei wegen:

$$\langle n^{(0)'} \gamma | H_1 | n^{(0)'} \gamma' \rangle \stackrel{(431)}{=} \delta_{\gamma\gamma'} E_{k\gamma}^{(1)} = 0 \quad \text{für } \gamma \neq \gamma'$$

Für $\gamma \neq \gamma'$ liefert (434)

$$\begin{aligned} & E_{n\gamma}^{(1)} \langle n^{(0)'} \gamma' | n^{(1)'} \gamma \rangle = \\ &= \langle n^{(0)'} \gamma' | H_1 | n^{(1)'} \gamma \rangle \\ & \stackrel{(432)}{=} \sum_{k \neq n} \frac{\langle n^{(0)'} \gamma' | H_1 | k^{(0)} \rangle \langle k^{(0)} | H_1 | n^{(0)'} \gamma \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} + \\ & \quad + \sum_{\gamma'' \neq \gamma} \underbrace{\langle n^{(0)'} \gamma' | H_1 | n^{(0)'} \gamma'' \rangle}_{E_{n\gamma'}^{(1)} \delta_{\gamma'\gamma''}} \langle n^{(0)'} \gamma'' | n^{(1)'} \gamma \rangle \\ &= \sum_{k \neq n} \frac{\langle n^{(0)'} \gamma' | H_1 | k^{(0)} \rangle \langle k^{(0)} | H_1 | n^{(0)'} \gamma \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} + \\ & \quad + E_{n\gamma'}^{(1)} \langle n^{(0)'} \gamma' | n^{(1)'} \gamma \rangle \end{aligned} \quad (436)$$

Ist die Entartung aufgehoben, also $E_{n\gamma}^{(1)} \neq E_{n\gamma'}^{(1)}$, so liefert (436) uns die fehlenden Komponenten in (432).

$$\langle n^{(0)'} \gamma' | n^{(1)'} \gamma \rangle = \frac{1}{E_{n\gamma}^{(1)} - E_{n\gamma'}^{(1)}} \sum_{k \neq n} \frac{\langle n^{(0)'} \gamma' | H_1 | k^{(0)} \rangle \langle k^{(0)} | H_1 | n^{(0)'} \gamma \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \quad (437)$$

Damit Zustände auch in erster Ordnung Störungstheorie entartet bleiben

$$\left(E_{n\gamma}^{(1)} = E_{n\gamma'}^{(1)} \text{ für } 1 \leq \gamma, \gamma' \leq N' \leq N \right),$$

muss man nun im entarteten Unterraum den Operator

$$H_1 \sum_{k \neq n} \frac{|k^{(0)} \rangle \langle k^{(0)}|}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} H_1 \quad (438)$$

(siehe (436)) diagonalisieren. Gilt $E_{n\gamma}^{(2)} \neq E_{n\gamma'}^{(2)}$, so liefert die Ordnung λ^3 die Koeffizienten in (437). Das Verfahren kann man zu beliebig hoher Ordnung treiben.

5.3 Anwendung: Feinstruktur des Wasserstoffspektrums

$$\vec{\mathcal{J}} = \vec{L} + \vec{S} \quad (288)$$

$$[L_j, S_k] = 0 \quad (289)$$

Gemeinsame EZ von

$$\vec{L}, L_3, \vec{S}^2 = \hbar^2 \frac{3}{4}, S_3 : |l m_l s m_s\rangle \quad (439)$$

Auch:

$$[\vec{\mathcal{J}}^2, \vec{L}^2] = [\vec{\mathcal{J}}^2, \vec{S}^2] = 0$$

⇒ Betrachte Basis aus gemeinsamen EZ von $\vec{\mathcal{J}}^2$

$$J_3, \vec{L}^2, \vec{S}^2 : |j m l s\rangle \quad (440)$$

Wegen $\mathcal{J}_3 = L_3 + S_3$ ist $|l m_l s m_s\rangle$ EZ von \mathcal{J}_3 zum EW $m = m_l + m_s$

$$\mathcal{J}_3 |l m_l s m_s\rangle = (L_3 + S_3) |l m_l s m_s\rangle = (m_l + m_s) |l m_l s m_s\rangle \quad (441)$$

D.h. $|j m l s\rangle$ in (440) ist Linearkombination aus $|l m_l s m_s\rangle$ mit $m = m_l + m_s$:

$$|j m l s\rangle = \sum_{\substack{m_l, m_s \\ m_l + m_s = m}} |l m_l s m_s\rangle \underbrace{\langle l m_l s m_s | j m l s \rangle}_{\text{Clebsch-Gordon-Koeffizienten}} \quad (442)$$

$$\begin{aligned} j = m_{\max} &= \max_{\substack{|m_l| \leq l \\ |m_s| \leq s}} (m_l + m_s) \\ &\leq m_{l \max} + m_{s \max} = l + s \end{aligned} \quad (443)$$

Betrachte

$$\begin{aligned} L_3 &= \mathcal{J}_3 - S_3 \quad \text{und} \quad m_s \rightarrow -m_s \\ l = m_{\max} &\leq m_{j \max} - m_{s \min} \leq j + s \end{aligned} \quad (444)$$

(443), (444) und die spezielle Betrachtung von $l = 0$. In (442) gilt also die Auswahlregel

$$|l - s| \leq j \leq l + s \quad (445)$$

d.h. **Clebsch-Gordon-Koeffizienten**, die (445) verletzen sind gleich Null.

Ausgehend von $|j j l s\rangle = |l l s s\rangle$ berechnet man die CG-Koeffizienten in (442) mit Hilfe von $\mathcal{J}_- = L_- + S_-$.

Wasserstoff:

$$H = H_0 + H_1$$

Relativistische Korrekturen

$$H_1 = H_{1 \vec{L}\vec{S}} + H_{1 \text{kin}} + H_{1 \text{pot}} \quad (446)$$

$$H_{1 \vec{L}\vec{S}} = \frac{1}{2m^2 c^2} \vec{S} \cdot \vec{L} \frac{\gamma}{R^3} \quad (447)$$

heißt **Spin-Bahn-Kopplung**.

$$\vec{S} \cdot \vec{L} = \frac{1}{2} \left[(\vec{L} + \vec{S})^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2 \right] = \frac{1}{2} [\vec{\mathcal{J}}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2] \quad (448)$$

Die Eigenkets $|n j m l s\rangle$ von H_0 erfüllen

$$H_0 |n j m l s\rangle = E_n^{(0)} |n j m l s\rangle \quad (449)$$

mit

$$E_n^{(0)} \stackrel{(390)}{=} -\frac{m c^2 \alpha^2}{2n^2}$$

Die Störung $H_{1\bar{L}\bar{S}}$ ist in der Basis $\{|n j m l s\rangle\}$ im entarteten Unterraum bereits diagonal, denn

$$\begin{aligned} \langle n j' m' l' s' | H_{1\bar{L}\bar{S}} |n j m l s\rangle & \\ \stackrel{(448)}{=} \frac{\gamma}{4m^2 c^2} \langle n j' m' l' s' | \frac{1}{R^3} (\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2) |n j m l s\rangle & \\ = \frac{\gamma \hbar^2}{4m^2 c^2} [j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}] \delta_{jj'} \delta_{ll'} \delta_{mm'} \cdot & \\ \cdot \langle n j m l s | \frac{1}{R^3} |n j m l s\rangle & \end{aligned} \quad (450)$$

Für $l \geq 1$:

$$E_{n\bar{L}\bar{S}}^{(1)} = \frac{\gamma \hbar^2}{4m^2 c^2} \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl} \quad (451)$$

wobei

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl} = \int_0^\infty dr \frac{f_{nl}^2(r)}{r} \stackrel{(396)}{=} \frac{2}{a^3 n^3 l(l+1)(2l+1)} \quad (452)$$

Einsetzen in (451) liefert:

$$\begin{aligned} E_{n\bar{L}\bar{S}}^{(1)} = \frac{\gamma \hbar^2}{2m^2 c^2 n^3 a^3} \begin{cases} -\frac{1}{(j+1)(2j+1)} & \text{für } l = j + \frac{1}{2} \\ +\frac{1}{j(2j+1)} & \text{für } l = j - \frac{1}{2} \neq 0 \end{cases} & \\ \stackrel{(389),(399)}{=} -E_n^{(0)} \frac{\alpha^2}{n} & \end{aligned} \quad (453)$$

Für $l = 0$:

$$\begin{aligned} j = s = \frac{1}{2}, \quad \text{also} & \\ j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} = 0 & \\ \rightarrow E_{n\bar{L}\bar{S}}^{(1)} = 0 \quad \text{für } l = 0 & \end{aligned} \quad (454)$$

In (446) folgt $H_{1\text{kin}}$ aus

$$E = \sqrt{m^2 c^4 - p^2 c^2} = m c^2 \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{8} \frac{p^4}{m^3 c^2} + \dots \quad (455)$$

$$\begin{aligned} H_{1\text{kin}} &= -\frac{1}{8} \frac{P^4}{m^3 c^2} = -\frac{1}{2mc^2} \left(\frac{P^2}{2m} \right)^2 \\ &= -\frac{1}{2mc^2} \left(H_0 + \frac{\gamma}{R} \right)^2 \end{aligned} \quad (456)$$

Wegen

$$\begin{aligned} [H_{1\text{ kin}}, \vec{J}^2] &= [H_{1\text{ kin}}, \mathcal{J}_3] = [H_{1\text{ kin}}, \vec{L}^2] \\ &= [H_{1\text{ kin}}, \vec{S}^2] = 0 \end{aligned} \quad (457)$$

ist $H_{1\text{ kin}}$ in der Basis $\{|j m l s\rangle\}$ diagonal.

$$\begin{aligned} \Rightarrow E_{n\text{ kin}}^{(1)} &= \langle n j m l s | H_{1\text{ kin}} | n j m l s \rangle \\ E_{n\text{ kin}} &\stackrel{(456)}{=} -\frac{1}{2mc^2} \langle n j l s | H_0^2 + 2\gamma H_0 \frac{1}{R} + \gamma^2 \frac{1}{R^2} | n j m l s \rangle \end{aligned} \quad (458)$$

Wir benötigen

$$\begin{aligned} \langle n j m l s | \frac{1}{R} | n j m l s \rangle &= \frac{1}{a n^2} \\ \langle n j m l s | \frac{1}{R^2} | n j m l s \rangle &= \frac{1}{a^2 n^3 (l + \frac{1}{2})} \end{aligned} \quad (459)$$

$$\begin{aligned} E_{n\text{ kin}}^{(1)} &= -\frac{1}{2mc^2} \left\{ E_n^{(0)2} + \frac{2\gamma}{a n^2} E_n^{(0)} + \frac{\gamma^2}{a^2 n^3 (l + \frac{1}{2})} \right\} \\ &\stackrel{(389), (399)}{=} -E_n^{(0)} \left\{ -\frac{\alpha^2}{4n^2} + \frac{\alpha^2}{n^2} - \frac{\alpha^2}{n^2} \frac{1}{l + \frac{1}{2}} \right\} \\ &= -E_n^{(0)} \frac{\alpha^2}{n} \left\{ \frac{3}{4n} - \frac{1}{l + \frac{1}{2}} \right\} \end{aligned} \quad (460)$$

$$= -E_n^{(0)} \frac{\alpha^2}{n} \left[\frac{3}{4n} + \begin{cases} -\frac{1}{j+1} & \text{für } l = j + \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{j} & \text{für } l = j - \frac{1}{2} \end{cases} \right] \quad (461)$$

Summe aus (461) und (459):

$$E_{n\vec{L}\vec{S}}^{(1)} + E_{n\text{ kin}}^{(1)} = -E_n^{(0)} \frac{\alpha^2}{n} \left[\frac{3}{4n} - \frac{1}{j + \frac{1}{2}} \right] \quad \text{für } l \geq 1 \quad (462)$$

Für $l = 0$ folgt aus (460) und (454)

$$E_{n\vec{L}\vec{S}}^{(1)} + E_{n\text{ kin}}^{(1)} = E_{n\text{ kin}}^{(1)} = -E_n^{(0)} \frac{\alpha^2}{n} \left[\frac{3}{4n} - 2 \right] \quad (463)$$

Letzter Term in (446) in Ortsdarstellung:

$$H_{1\text{ pot}} = \frac{\hbar^2}{8m^2 c^2} \Delta V(r) = \frac{\pi \hbar^2 \gamma}{2m^2 c^2} \delta^{(3)}(\vec{x}) \quad (464)$$

$$\begin{aligned} E_{n\text{ pot}}^{(1)} &= \langle n j m l s | H_{1\text{ pot}} | n j m l s \rangle \\ &= \frac{\pi \hbar \gamma}{2m^2 c^2} \underbrace{|f_{nl}(0)|^2}_{\text{Wellenfunktion am Ursprung von } \int d^3x \delta^{(3)}(\vec{x}) |\psi_{nl}|^2} \\ &= \frac{mc^2 \alpha^4}{2n^3} \delta_{l0} \\ &= -E_n^{(0)} \frac{\alpha^2}{n} \delta_{l0} \end{aligned} \quad (465)$$

Summe von (463) und (465):

$$E_n^{(1)} \vec{L}\vec{S} + E_n^{(1)} \text{kin} + E_n^{(1)} \text{pot} = \begin{cases} -E_n^{(0)} \frac{\alpha^2}{n} \left[\frac{3}{4n} - 1 \right] & \text{für } l = 0 \\ -E_n^{(0)} \frac{\alpha^2}{n} \left[\frac{3}{4n} - \frac{1}{j + \frac{1}{2}} \right] & \text{für } l \geq 0 \end{cases} \quad (466)$$

denn $l = 0$ impliziert $j = \frac{1}{2}$.

Also gilt mit (462), (466) **unabhängig** von l :

$$\begin{aligned} E_{nj}^{(1)} &:= E_n^{(1)} \vec{L}\vec{S} + E_n^{(1)} \text{kin} + E_n^{(1)} \text{pot} \\ &= -E_n^{(0)} \frac{\alpha^2}{n} \left[\frac{3}{4n} - \frac{1}{j + \frac{1}{2}} \right] \end{aligned} \quad (467)$$

Energie-Niveaus:

$$E_{nj} \doteq E_n^{(0)} + E_{nj}^{(1)} = -\frac{mc^2}{2} \frac{\alpha^2}{\hbar^2} \left[1 - \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{3}{4} - \frac{12}{j + \frac{1}{2}} \right) \right] \quad (468)$$

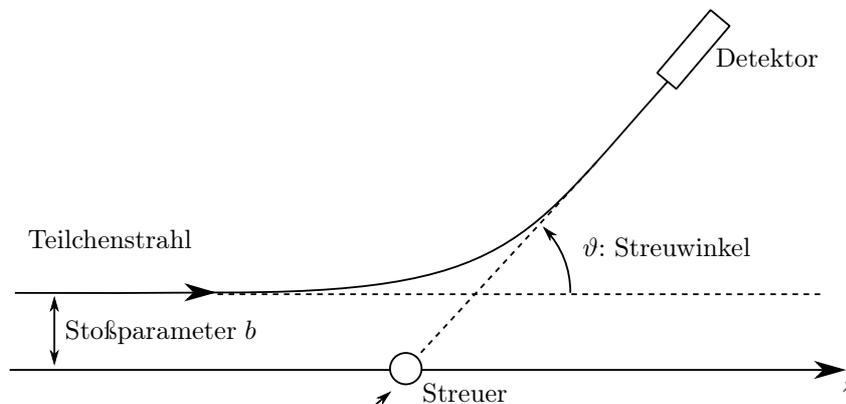
Mit $\alpha^2 = 5,2 \cdot 10^{-5} \rightarrow$ **Feinstruktur**.

Relativistische Wellengleichung des Elektrons: **Dirac-Gleichung**

Exakt lösbar für Wasserstoffatome: Quantenzahl j .

l, s keine guten Quantenzahlen.

6 Streutheorie

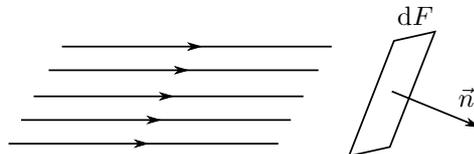


Ursprung eines unbekanntes, zu bestimmenden Potentials $V(\vec{x})$

Einlaufender Teilchenstrahl: Stromdichte $\vec{j}_{\text{ein}}(\vec{x})$

$$dN = \vec{j} \cdot d\vec{F} dt \tag{469}$$

Teilchen strömen in der Zeit dt durch das Flächenelement $d\vec{F} = \vec{n} \cdot dF$.

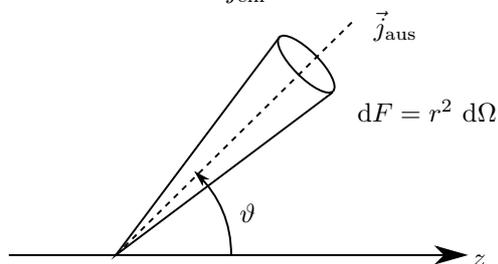


Für große $r = |\vec{x}|$ verhalten sich die Teilchen fast wie freie Teilchen (gerade Trajektorien). Dann ist die Definition des **differenziellen Wirkungsquerschnittes** bzw. **diff. Streuquerschnitts**

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}$$

sinnvoll.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} := \frac{1}{j_{\text{ein}}} \frac{dN}{d\Omega dt} \tag{470}$$



$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \stackrel{(469)}{=} \frac{1}{j_{\text{ein}}} \frac{j_{\text{aus}} dF}{d\Omega} = \frac{r^2 j_{\text{aus}}}{j_{\text{ein}}} \quad (471)$$

Geometrie:

$$j_{\text{aus}} \propto \frac{1}{r^2} \quad \text{für große } r$$

$\Rightarrow \frac{d\sigma}{d\Omega}$ ist unabhängig von r , Limes $r \rightarrow \infty$ impliziert.

Beispiel: Klass. Streuung an Coulomb-Potenzial (Rutherford 1911 an Goldatomen)

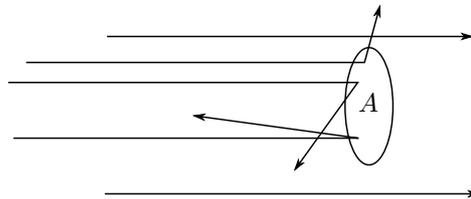
$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \propto \frac{1}{\sin^4\left(\frac{\vartheta}{2}\right)} \quad (472)$$

Der **totale Wirkungsquerschnitt**

$$\sigma = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} \quad (473)$$

divergiert für langreichweitige Potenziale wie $\frac{1}{r}$ (siehe (472)).

σ hat die Dimension einer Fläche. Für ein klassisches, hartes Target:



Quantenmechanik:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t) = H \psi(\vec{x}, t) \quad (166)$$

Teilchendichte \rightarrow **Aufenthaltswahrscheinlichkeit** eines Teilchens.

$$\rho(\vec{x}, t) = |\psi(\vec{x}, t)|^2 \quad (474)$$

Gesucht: Strom $\vec{j}(\vec{x}, t)$ zur **Kontinuitätsgleichung**

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{x}, t) = -\nabla \cdot \vec{j}(\vec{x}, t) \quad (475)$$

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{x}, t) &= i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi^* \right) \psi + \psi^* i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi \\ &\stackrel{(166)}{=} (-H \psi^*) \psi + \psi^* H \psi \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} (\Delta \psi^*) \psi - \frac{\hbar^2}{2m} \psi^* \Delta \psi \end{aligned} \quad (476)$$

d.h. $V(\vec{x})$ fliegt raus!

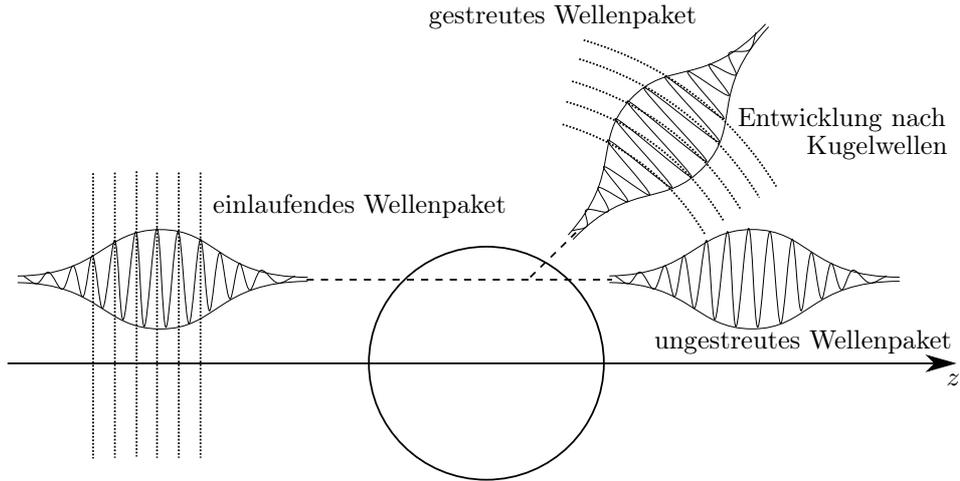
$$= -i\hbar \nabla \cdot \vec{j}(\vec{x}, t)$$

mit der **Wahrscheinlichkeitsstromdichte**

$$\vec{j}(\vec{x}, t) = \frac{\hbar}{2m} [\psi^*(\vec{x}, t) \nabla \psi(\vec{x}, t) - (\nabla \psi^*(\vec{x}, t)) \psi(\vec{x}, t)] \quad (477)$$

Teilchenstromdichte = Teilchendichte n mal \vec{j} .

Quantenmechanische Streuung:



Einlaufendes Wellenpaket

$$\psi(\vec{x}, t) = \int \frac{d^3 \vec{k}_0}{(2\pi)^2} A(\vec{k}_0) \underbrace{e^{-i(\vec{k}_0 \vec{r} - \omega(\vec{k}_0) t)}}_{\text{ebene Wellen}} \quad (478)$$

mit der freien Schrödinger-Gl

$$\omega(\vec{k}_0) = \frac{\hbar \vec{k}_0^2}{2m}$$

und $\vec{k}_0 = k_0 \vec{e}_z$.

Gestreutes Wellenpaket:

$$\psi_s(\vec{x}, t) = \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^2} A(\vec{k}) \underbrace{\varphi_s(\vec{r}, \vec{k}) e^{-i\omega(\vec{k}) t}}_{\text{allg. Ansatz}} \quad (479)$$

Wir betrachten nur **elastische Streuungen**

$$E_{\text{ein}} = E_{\text{aus}} = E, \quad \text{also } \omega(\vec{k}) = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

mit $k = k_0$ wie in (478) (jedoch i.a. $\vec{k} \neq \vec{k}_0$)

Superpositionsprinzip: \Rightarrow Wir müssen das Streuproblem nur für $e^{ik_0 z}$, $\varphi_s(\vec{r})$ lösen; **stationäres** (zeitunabhängiges) **Streuproblem**.

$$\begin{aligned} H \varphi(\vec{r}) &= E \varphi(\vec{r}) & E &= \frac{\hbar k^2}{2m} > 0 \\ H &= \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(\vec{r}) \\ \varphi(\vec{r}) &= e^{ikz} + \varphi_s(\vec{r}) \end{aligned} \quad (480)$$

Weitere Annahme: V ist kugelsymmetrisch.

$$V(\vec{r}) = V(r) \quad (481)$$

$\varphi_s(\vec{r})$ wird nach **Kugelwellen** entwickelt

$$\varphi_s(\vec{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} f(\vartheta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (482)$$

mit der Streuamplitude $f(\vartheta)$.

Keine φ -Abhängigkeit wegen (481) und $L_3 \varphi_0 = 0$ ($\varphi_0 = e^{ik_0 z}$), also $L_3 \varphi_s = 0$ (**Drehimpulserhaltung**).

Einsetzen von (482) in (477) liefert die **Wahrscheinlichkeitsstromdichte**:

$$\vec{j}_s = \frac{\hbar k}{m} \frac{|f(\vartheta)|^2}{r^2} \vec{e}_r + \mathcal{O}(r^3) \quad (483)$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \stackrel{(471)}{=} \frac{r^2 j_s}{j_0} \stackrel{(483)}{=} \frac{\frac{\hbar k}{m} |f(\vartheta)|^2}{\frac{\hbar k}{m}} = |f(\vartheta)|^2 \quad (484)$$

wobei $j_s = j_{\text{aus}}$ und $j_0 = j_{\text{ein}}$.

$$\begin{aligned} \Rightarrow \sigma &= \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \\ &\stackrel{(484)}{=} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\cos\vartheta |f(\vartheta)|^2 \\ &= 2\pi \int d\vartheta \sin\vartheta |f(\vartheta)|^2 \end{aligned} \quad (485)$$

$$\varphi(\vec{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{ikz} + f(\vartheta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (486)$$

erfüllt die Schrödinger-Gleichung, sofern

$$\lim_{r \rightarrow \infty} r V(r) = 0 \quad (487)$$

Nicht erfüllt für Coulomb-Potenzial!

Kugelsymmetrie

$$[H, \vec{L}^2] = [H, L_3] = 0 \quad (488)$$

\Rightarrow Entwicklung nach **Kugelflächenfunktionen**

$$L_3 = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (489)$$

$\varphi(\vec{r})$ in (486) hat keine φ -Abhängigkeit

$$\Rightarrow L_3 \varphi(\vec{r}) = 0 \quad (490)$$

$\Rightarrow \varphi(\vec{r})$ ist Eigenfunktion zu L_3 mit $m = 0$.

$\Rightarrow \varphi(\vec{r})$ kann in

$$Y_{l0}(\vartheta, \varphi) \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \underbrace{P_l(\cos\vartheta)}_{\text{Legendre-Polynome}} \quad (491)$$

entwickelt werden.

In

$$\varphi(\vec{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{u_l(r)}{r} P_l(\cos \vartheta) \quad (492)$$

erfüllt $u_l(r)$ also die **Radialgleichung**

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2} + V(r) \right] u_l(r) = E u_l(r)$$

bzw.

$$\frac{d^2 u_l}{dr^2} + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar} V(r) \right) u_l(r) = 0 \quad (493)$$

mit

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

Randbedingung

$$u_l(0) = 0 \quad (494)$$

Zunächst $V = 0$, also $\varphi_s(\vec{r}) = 0$ in (480).

$$\varphi_0(\vec{r}) = e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{u_l^m(r)}{r} P_l(\cos \vartheta) \quad (495)$$

wobei $z = r \cos \vartheta = rt$.

Orthogonalität

$$\int_{-1}^1 dt P_l(t) P_n(t) = \frac{2}{2l+1} \delta_{ln}$$

$$(495) \Rightarrow \int_{-1}^1 dt e^{ikrt} P_n(t) = \frac{2}{2l^n+1} \frac{u_n^{(0)}(r)}{r} \quad (496)$$

$$\begin{aligned} \frac{2}{2l+1} \frac{u_l^{(0)}}{r} &\stackrel{(496)}{=} \frac{1}{ikr} [e^{ikr} P_l(t)]_{-1}^1 - \frac{1}{ikr} \int_{-1}^1 dt e^{ikrt} P_l'(t) \\ &= \frac{1}{ikr} [e^{ikr} - (-1)^l e^{-ikr}] + \mathcal{O}\left(\frac{1}{r^2}\right) \\ &\quad (\text{Entwicklung in } \frac{1}{r} \text{ durch partielle Integration}) \\ &= \frac{1}{ikr} i^l [e^{i(kr-l\frac{\pi}{2})} - e^{-i(kr-l\frac{\pi}{2})}] + \mathcal{O}\left(\frac{1}{r^2}\right) \end{aligned}$$

Einsetzen in (495)

$$\varphi_0(\vec{r}) = e^{ikr \cos \vartheta} \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l \frac{1}{2ikr} \left(\underbrace{e^{i(kr-l\frac{\pi}{2})}}_{\text{auslaufende Kugelwelle}} - \underbrace{e^{-i(kr-l\frac{\pi}{2})}}_{\text{einlaufende Kugelwelle}} \right) P_l(\cos \vartheta) \quad (497)$$

Bemerkung: exakt:

$$u_l^{(0)} = i^l (2l+1) r \underbrace{j_l(kr)}_{\text{sphärische Besselfunktionen}}$$

Nun zu $V \neq 0$: $\varphi_s(\vec{r})$ besteht nur aus auslaufenden Kugelwellen

$$e^{i(kr-l\frac{\pi}{2})}$$

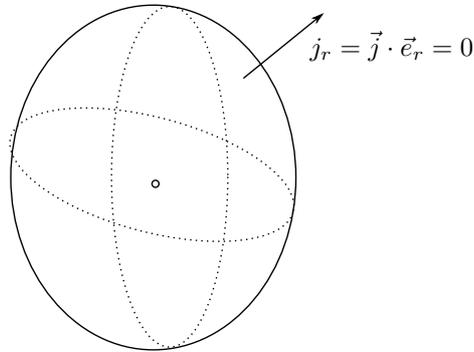
$$\begin{aligned} \varphi_r(\vec{r}) &= e^{ikr \cos \vartheta} + \varphi_s(\vec{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{u_l(r)}{r} P_l(\cos \vartheta) \\ &\underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l \frac{1}{2ikr} \left(S_l e^{i(kr-l\frac{\pi}{2})} - e^{i(kr-l\frac{\pi}{2})} \right) P_l(\cos \vartheta) \end{aligned} \quad (498)$$

also $S_l = 1 +$ Betrag der gestreuten Welle.

Summand in (498): **l-te Partialwelle**

$$\begin{aligned} l = 0 & \text{ S-Wellen} \\ l = 1 & \text{ P-Wellen} \\ l = 2 & \text{ D-Wellen} \end{aligned}$$

Elastische Streuung



Radialkomponente = 0, keine Teilchenvernichtung oder Erzeugung durch $V(\vec{r})$!

(477) und (498):

$$0 = j_r \propto \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos \vartheta) \underbrace{\text{Im} \left[\frac{u_l^*(0)}{r} \frac{d}{dr} \frac{u_l(r)}{r} \right]}_{\propto 1 - |S_l|^2} \quad (499)$$

$$\Rightarrow |S_l| = 1 \quad (500)$$

$$\Rightarrow S_l(k) =: e^{2i \delta_l(k)}$$

mit der **Streuphase** $\delta_l(k)$.

Einsetzen in (498) (mit (480),(497)):

$$f(\vartheta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \underbrace{e^{i\delta_l} \sin \delta_l}_{\frac{S_l - 1}{2i}} P_l(\cos \vartheta) \quad (501)$$

(482), (484)

$$\Rightarrow \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{k^2} \sum_{l,l'} (2l+1)(2l'+1) e^{i(\delta_l - \delta_{l'})} \sin \delta_l \sin \delta_{l'} P_l(\cos \vartheta) P_{l'}(\cos \vartheta)$$

und

$$\sigma = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l$$

mit

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l \quad (502)$$

⇒ keine Interferenz verschiedener Partialwellen.

σ_l wird maximal für $\delta_l = \pm \frac{\pi}{2}$
 ⇒ Resonanz

Aus (501) und (502) findet man das **optische Theorem**

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \underbrace{\operatorname{Im} f(0)}_{\text{Amplitude der Vorwärtsstreuung}} \quad (503)$$

Beispiel: Steuerung an der harten Kugel

$$V(r) = \begin{cases} \infty & \text{für } r \leq R \\ 0 & \text{für } r > R \end{cases}$$

also $\varphi(\vec{r}) = 0$ für $r \leq R$ Lösung:

$$\delta_l(k) = \arctan \frac{j_l(kR)}{n_l(kR)} \left(\frac{\text{sph. Bessel-Fkt}}{\text{sph. Neumann-Fkt}} \right) \quad (504)$$

Grenzfälle

1. große Wellenlängen $kR \ll 1$

$$\tan \delta_l \approx -\frac{(kR)^{2l+1}}{(2l-1)!!(2l+1)!!}$$

also

$$\delta_{l+1} \ll \delta_l \quad \tan \delta_0 \approx \delta_0 \approx -kR, \quad |\delta_0| \ll 1$$

⇒ praktisch reine S-Wellenstreuung und

$$\sigma \stackrel{(502)}{=} 4\pi R^2 \quad (505)$$

2. kleine Wellenlängen $kR \gg 1$

$$\tan \delta_l \approx -\tan \left(kR - l\frac{\pi}{2} \right)$$

⇒ viele Partialwellen, ca. bis $l \approx kR$ tragen bei.

$$\sigma = 2\pi R^2 = 2\sigma_{\text{klassisch}} \quad (506)$$