

# Theoretische Physik D

Dozentin: Frau Mühlleitner

geschrieben von Birgit Adams und Benedikt Prunsche

## Contents

<b>1 Einführung</b>	<b>2</b>
1.1 Physik um 1900 . . . . .	2
1.2 Historische Entwicklung . . . . .	2
<b>2 Dualismus Teilchen und Welle</b>	<b>4</b>
2.1 EM Wellen und Photonen . . . . .	4
2.1.1 Zusammenhang zwischen Energie und Frequenz, zwischen Impuls und Wellen . . . . .	4
2.1.2 Ausbreitung . . . . .	4
2.1.3 Spektralzerlegung . . . . .	4
2.2 Materiewellen . . . . .	5
2.3 Schrödingergleichung . . . . .	6
2.4 Wellenpakete $ \vec{k}  = \frac{2\pi}{\lambda}$ . . . . .	6
2.4.1 Freies Teilchen ( $v=0$ ) . . . . .	6
2.4.2 Zusammenhang $\Psi(\vec{r}, t = 0)$ und $g(\mathbf{k})$ . . . . .	7
2.4.3 Zeitliche Entwicklung eines freien Wellenpakets . . . . .	7
2.5 Zeitunabhängiges Potential . . . . .	7
2.5.1 Stufenpotentiale qualitativ . . . . .	8
2.5.2 Stufenpotential quantitativ . . . . .	10
2.5.3 Potentialtopf . . . . .	11
<b>3 Mathematische Hilfsmittel</b>	<b>13</b>
3.1 Zustandsraum der Wellenfunktion . . . . .	13
3.2 Dirac Notation . . . . .	15
3.3 Darstellungen im Zustandsraum . . . . .	20
3.3.1 Darstellung der ket, Bra, und Operatoren . . . . .	20
3.3.2 Darstellungswechsel (Basiswechsel) . . . . .	21
3.4 Eigenwert-Gleichungen / Observablen . . . . .	21
3.4.1 Eigenwerte / Eigenvektoren . . . . .	21
3.4.2 Bestimmung der EW und EV eines Operators . . . . .	22
3.4.3 Observable . . . . .	23
3.4.4 Kommutierende Observable . . . . .	24

<b>4</b>	<b>Die Grundpostulate der QM</b>	<b>27</b>
4.1	Die Postulate (1925/26)	27
4.2	Interpretation der den Messprozess betreffenden Postulate	29
4.3	Zeitabhängigkeit isolierter quantenmechanischer Systeme	31
<b>5</b>	<b>Der harmonische Oszillator</b>	<b>35</b>
5.1	Harmonischer Oszillator in der klassischen Mechanik	35
5.2	Harmonischer Oszillator in der QM	35
5.2.1	Analytische Lösung der DGL	35
5.2.2	Algebraische Methode	36
5.3	Quantenmechanik für Spin 1/2	39
5.4	Teilchen mit Spin 1/2 im konstanten Magnetfeld	40
5.5	Allgemeines Zwei-Zustands-System	42
<b>6</b>	<b>Drehimpuls</b>	<b>44</b>
6.1	Vertauschungsrelationen für den Bahndrehimpuls	44
6.2	Eigenwerte und Eigenzustände	45
<b>7</b>	<b>Bahndrehimpuls in Polarkoordinaten</b>	<b>50</b>
7.1	EW-Gleichung in der Ortsdarstellung $[\vec{r} > \}$	50
7.2	Drehimpuls als Erzeugender (Generator) von Drehungen	52
7.3	Integrale der Bewegung und Symmetrieeigenschaften	52
7.4	Rotation eines zweiatomigen Moleküls	54
7.4.1	Qualitative Betrachtung	54
7.4.2	Starrer Rotator	54
<b>8</b>	<b>Zentralpotentiale/Wasserstoffatom</b>	<b>55</b>
8.1	Hamiltonoperator: Zentralpotential, d.h. $V(\vec{r}) \rightarrow V(r)$	55
8.2	Separation der Variablen	56
8.3	Enartung der Energieniveaus	58
8.4	System aus 2 Teilchen	58
8.5	Das Wasserstoffatom	59
<b>9</b>	<b>Streutheorie in der nicht-relativistischen Quantenmechanik</b>	<b>61</b>
9.0.1	Strahl von Teilchen auf Stationäres Target	62
9.0.2	Teilchenstrahlene gegeneinander	63
9.1	Stationäre Streuzustände	63
9.2	Stromdichten, Streuquerschnitt	64
9.3	Optisches Theorem	65
9.4	Integralgleichung für die gestreute Welle	67
9.4.1	Partialwellen im Potential $V(r)$	68
9.4.2	Streuquerschnitt als Funktion der Streuphasen	69
9.4.3	Optisches Theorem	71

<b>10 Stationäre (zeitunabhängige) Störungstheorie</b>	<b>71</b>
10.1 Problemstellung	71
10.2 Störungstheorie bei Entartung	72
10.3 Gestörter harmonischer Oszillator	72
10.3.1 Störung durch ein lineares Potential	72
10.3.2 Störung durch quadratische Potential	74
10.4 Stark-Effekt des Wasserstoffatoms	75

# 1 Einführung

## 1.1 Physik um 1900

- Klassische Mechanik
- Elektrodynamik
- erweitert 1905 zur speziellen Relativitätstheorie

nicht erklärbar

- Physik der Atomhülle
- Physik makroskopischer Körper
- Kernphysik
- Elektrodynamik
- Teilchenphysik

QM: Relativitätstheorie  $\rightarrow$  Quantenfeldtheorie  
hier: nicht relativistische QM

## 1.2 Historische Entwicklung

1. Hohlraumstrahlung: Plank 1900, Hypothese:  
Energieaustausch zwischen Oszillatoren der Materie und dem EM Feld  
in Form von Energiepaketen/Quanten

$$E = h\nu$$

$$h = 6,626 \cdot 10^{-34} Js$$

Planksches Wirkungsquantum

2. Photoelektrischer Effekt  
Mindestfrequenz:

$$h \cdot \nu_{min} \geq W_{Austritt}$$

Elektronenemission instantan

Hypothese: Licht besteht aus Photonen de Energie

$$E = h\nu = \hbar\omega$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

3. Compton-Effekt  
 Elastischer Stoß zwischen Photon und Elektron  
 Energie und Impulserhaltung

$$\lambda' - \lambda = \frac{4\pi\hbar}{m_e c} \sin^2 \frac{\theta}{2}$$

Hypothese von Compton: Photonen sind nicht nur Lichtpakete, sondern reelle Teilchen mit Impuls  
 Teilchencharakter (E;P), Wellencharakter ( $\omega = 2\pi\nu$ ;  $|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$ )

4. Planck-Einsteinbeziehungen:

$$E = \hbar \cdot \omega = h \cdot \nu$$

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

5. Dualität: Licht hat Wellen- und Teilcheneigenschaft
6. Doppelspalt-Experiment  $I(x) \neq I_1(x) + I_2(x)$   
 $E(x) = E_1(x) + E_2(x)$   
 $I(x) \propto E(x)^2 = |E_1(x) + E_2(x)|^2 = |E_1|^2 + |E_2|^2 + 2\text{Re}(E_{1,2}) \neq I_1 + I_2$
7. Hypothese von de Broglie (1923): Materieteilchen besitzen Wellencharakter
8. Rutherford (1911): Elektronen umlaufen planetenartigen positiv geladenen Kern. Problem: Elektronen beschleunigte Bewegung  $\rightarrow$ strahlen kontinuierlich Energie ab. Diskrete Emissions-/Absorptionslinien:

$$H(\text{Wasserstoff}) : 1/\lambda_{nm} = R_Y \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

9. Bohrsche Postulate (1913):

- (a) Elektronenkreisbahnen (Coulomb-Anziehung)
- (b) Quantisierung der Kreisbahnen  $L = n\hbar \quad n \in \mathbb{N}$
- (c) Strahlungsemission/-absorption  $h\nu = E_i - E_f$

$\rightarrow$ Problem:

- kann Intensität und tatsächlich auftretende Linien nicht erklären
- veragt bereits für Helium
- willkürliche Teilerklärung

## 2 Dualismus Teilchen und Welle

### 2.1 EM Wellen und Photonen

#### 2.1.1 Zusammenhang zwischen Energie und Frequenz, zwischen Impuls und Wellen

$$\vec{p} = \hbar \cdot \vec{k}$$
$$E = h\nu = \hbar\omega$$

#### 2.1.2 Ausbreitung

$$I(x) \propto |E(x)|^2$$

$I(x)$  = Wahrscheinlichkeitsverteilung der Photonen auf dem Schirm. Die Bahn eines einzelnen Photons kann nicht mit Sicherheit angegeben werden.

Gilt Superpositionsprinzip:  $E_1(x), E_2(x)$  Lösung der Maxwell Gleichungen  $\rightarrow$  so auch  $E(x) = \lambda_1 E_1(x) + \lambda_2 E_2(x), \lambda_i = konst.$

#### 2.1.3 Spektralzerlegung

Polarisiertes Licht mit Ausbreitungsrichtung.

$O_Z$  fällt auf einen Analysator, klassisch: p-polarisiertes Licht in  $\vec{e}_p$ -Richtung :

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = E_0 \vec{e}_p e^{i(kz - \omega t)}$$

Intensität:  $E_0^2$ , Nach A:  $\vec{E}'(\vec{r}, t) = E'_0 \vec{e}_x e^{i(kz - \omega t)}$  wobei  $E'_0 = E_0 \vec{e}_p \vec{e}_x = E_0 \cos\Theta \rightarrow Intensität : E_0'^2 = E_0^2 \cos^2\Theta$

QM: Photon wird im Analysator gestoppt oder durchgelassen  $\rightarrow$  zwei mögliche Resultate der Messung: "Eigenresultate". Einzelresultat kann nicht vorhergesagt werden. Nach A würde das Photon weitere Analysatoren (bzgl. x-Richtung) sicher durchlaufen: nach A ist es im Eigenzustand. Es gibt 2 Eigenzustände für A mit Polarisation in x-Richtung  $\propto \vec{e}_x, \vec{e}_y$ . Für diese Eigenzustände ist das Messresultat sicher in A: Durchgang oder Stoppen. Jeder Zustand mit Polarisation  $\vec{e}_p$  kann in Eigenzustände von A zerlegt werden:  $\vec{e}_p = \cos\Theta \vec{e}_x + \sin\Theta \vec{e}_y$ . Wahrscheinlichkeit für "durch":  $\cos^2\Theta$  für "stop":  $\sin^2\Theta$ .  $\rightarrow \sum_{i=1}^3 P_i = 1$ . "Spektrale Zerlegung" von  $\vec{e}_p$  nach Eigenzuständen.

## 2.2 Materiewellen

$$\nu = \frac{E}{h}$$

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

$$|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$$

Ein freies nicht relativistisches Teilchen ist also mit einer ebenen Welle assoziiert.

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi_0 \exp\{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)\} = \Psi_0 \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - Et)\right\}$$

Kohärent mit Interpretation der Geschwindigkeit der Welle: Punkte gleicher Phase:

$$\vec{k}\vec{r} - \omega t = \text{const.}$$

$$\vec{k}d\vec{r} - \omega dt = 0$$

$$\rightarrow \text{Phasengeschwindigkeit: } \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p} = \frac{1}{2}v$$

Propagationsgeschwindigkeit der Energie der Welle:

$$\rightarrow \text{Gruppengeschwindigkeit: } \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp} = v$$

Dies ist die Geschwindigkeit eines Materieteilchens unter Berücksichtigung von

$$\vec{p} = mv$$

und mit

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m}$$

1. Klassische Trajektorie  $\vec{x}(t) \rightarrow$  zeitliche Veränderliche Wellenfunktion  $\psi(\vec{r}, t)$

2.  $|\psi(\vec{r}, t)|^2 =$  Wahrscheinlichkeitsamplitude

$$\int d^3r |\psi(\vec{r}, t)|^2 = 1$$

3. Klassische Bewegungsgleichung  $\rightarrow$  Schrödingergleichung.

## 2.3 Schrödingergleichung

Suchen Bewegungsgleichung für  $\psi(\vec{r}, t)$ . Forderungen:

1. DGL 1. Ordnung in der Zeit, damit  $\psi(\vec{r}, t)$  durch die Anfangsverteilung  $\psi(\vec{r}, t=0)$  bestimmt ist.
2. Sie muss linear in  $\psi$  sein, damit Superpositionsprinzip gilt (d.h. Linearkombination von Lösungen stellen wieder Lösungen dar  $\rightarrow$  deshalb treten Interferenzeffekte auf wie in der Optik. (Optik: Diese folgen aus der Linearität der Maxwellgleichungen))
3. Sie muss homogen sein, damit  $\int_{-\infty}^{\infty} d^3r |\psi(\vec{r}, t)|^2 = 1$  für alle Zeiten erfüllt bleibt.
4. Die ebenen Wellen  $\psi(\vec{r}, t) = c \cdot \exp\{i(\vec{p}\vec{r} - \frac{p^2}{2m}t)/\hbar\}$  sollen Lösungen der Gleichung sein.  
Für diese ebenen Wellen gilt:  $\frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{ip^2}{\hbar 2m} \psi(\vec{r}, t) = \frac{i\hbar^2}{\hbar 2m} \underbrace{\Delta \psi(\vec{r}, t)}_{-\frac{p^2}{\hbar^2} \Delta \psi(\vec{r}, t)}$

Aus 1.-4. erhalten wir die zeitabhängige Schrödingergleichung für ein freies Teilchen:

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

Annahme: Teilchen der Masse  $m$  unterliegt einem Potential  $V(\vec{r}, t)$

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

## 2.4 Wellenpakete $|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$

### 2.4.1 Freies Teilchen ( $\mathbf{v}=0$ )

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

Lösung:  $\Psi(\vec{r}, t) = A e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}$ ;  $A = \text{const}$  und  $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$

de Broglie-Beziehung:  $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ ;  $E = \hbar \omega$

damit (wie in klassischer Mechanik)  $\hbar \omega = E = \frac{p^2}{2m}$

Ferner  $|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = |A|^2 = \text{const.}$  (\*) D.h. die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im ganzen Raum gleich.

Lineare DGL: Superpositionsprinzip: Jeder Linearkombination von ebenen Wellen des Typs (\*) ist wieder eine Lösung.

Überlagerung ebener Wellen  $\equiv$  Wellenpaket.

$$\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k g(\vec{k}) e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} (A)$$

$g(\vec{k})$  (kann  $\in C$ ), muss hinreichend regulär sein

Bei fester Zeit  $t_0$  (per Konvention ( $t_0 = 0$ ))

$$\Psi(\vec{r}, 0) = \int d^3k g(\vec{k}) e^{i(\vec{k}\vec{r})}$$

Zu einer bestimmten Zeit kann zu  $\Psi(\vec{r}, t)$  immer die Fouriertransformierte angegeben werden. Die Gleichung (A) legt  $\Psi(\vec{r}, t)$  für alle Zeiten t fest.

### 2.4.2 Zusammenhang $\Psi(\vec{r}, t = 0)$ und $g(\mathbf{k})$

Ansatz:  $|g(k)|e^{i\alpha(k)}$

Annahme:  $\alpha(k)$  sei im Intervall  $[k_0 - \frac{\Delta k}{2}, k_0 + \frac{\Delta k}{2}]$ , in dem  $|g(k)|$  nennenswert von null verschieden ist, hinreichend regulär

(Grafik)  $\rightarrow$  Linearisierung von  $\alpha(k)$  um  $k = k_0$  für  $\Delta k \ll 1$

Taylor:  $\alpha(k) \approx \alpha(k_0) + (k - k_0) \underbrace{\left(\frac{d\alpha}{dk}\right)_{k_0}}_{\equiv -x_0} + \Theta(\Delta k)^2$

O.B.d.A. eindimensional:

$$\Psi(x, t = 0) = \int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} \underbrace{g(k)}_{|g(k)|e^{i\alpha k}} e^{ikx} \approx \int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} |g(k)| e^{i\alpha(k_0) - (k - k_0)x_0 + kx} = e^{i(\alpha(k_0) + k_0 x)} \int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} |g(k)| e^{i(k - k_0)(x - x_0)}$$

Falls  $x = x_0$  nur positive Beiträge  $\rightarrow |\Psi|$  maximal. Falls  $x - x_0 \gg \underbrace{\frac{1}{\Delta k}}_{k - k_0}$ . Viele

Oszillationen des Integranden innerhalb des Integrationsgebiets  $\Rightarrow |\Psi|$  klein. (Grafik)

Maximum des Wellenpakets im Ortsraum bei  $x_{max} = x_0 = -\left(\frac{d\alpha}{dk}\right)_{k=k_0}$  (stationäre Phase des Integranden bei  $x_0$ )

Breite im Ortsraum  $\Delta x \sim \frac{1}{\Delta k}$

Abfall von  $|\Psi(x, 0)|$  macht sich bemerkbar, wenn  $e^{i(k - k_0)(x - x_0)}$  ungefähr eine Schwingung ausführt, falls  $k$  das Intervall  $\Delta k$  durchläuft.

$$\Delta k(x - x_0) \approx 1$$

Sei  $\Delta x = x - x_0$  die Breite des Wellenpakets, dann gilt also  $\Delta k \cdot \Delta x \geq 1$ .

Mit  $p = \hbar k$

Heisenbergsche  
Unschärferelation

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar$$

### 2.4.3 Zeitliche Entwicklung eines freien Wellenpakets

### 2.5 Zeitunabhängiges Potential

Annahme:  $V = V(\vec{r}) \neq 0 \Rightarrow$  Wir haben  $E = K = E_{kin} = \frac{p^2}{2m}$

$\rightarrow E = K + V = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r})$ . Mit dem Hamiltonoperator  $H = K + V$ .

Schrödingergleichung eines Teilchens im Potential  $V(\vec{r})$ :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi$$

bzw:

$$\underbrace{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t)}_{\text{Ableitung nach } t} = - \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}) \Psi(\vec{r}, t)}_{\text{Ableitung nach } \vec{r}}$$

Ansatz:  $\Psi(\vec{r}, t) = \phi(\vec{r}) \cdot \chi(t)$

$$\frac{1}{\chi(t)} \underbrace{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \chi(t)}_{\text{Funktion von } t} = \frac{1}{\phi(\vec{r})} \underbrace{\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \phi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}) \phi(\vec{r}) \right)}_{\text{Funktion von } \vec{r}} = \text{konst!} = \hbar\omega$$

⇒ für  $\chi(t) : i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \chi(t) = \hbar\omega \chi(t) \rightarrow \chi(t) = A \cdot e^{-i\omega t}$

$$\text{Gleichung für } \phi(\vec{r}) : -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \phi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}) \phi(\vec{r}) = \underbrace{\hbar\omega}_{E} \phi(\vec{r})$$

Zeitunabhängige Schrödingergleichung:

$$\underbrace{\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right)}_{\text{Hamiltonoperator } H} \phi(\vec{r}) = E \phi(\vec{r})$$

Eigenwertgleichung des linearen Operators H.

E: Eigenwert,  $\phi$ : Eigenfunktion.

$$\Psi(\vec{r}, t) = \phi(\vec{r}) e^{-i\omega t}$$

stationärer Zustand, da  $|\Psi|^2 = \text{const.}$

### 2.5.1 Stufenpotentiale qualitativ

Eindimensionale Bewegung (Grafik)

stationäre Schrödingergleichung:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \varphi(x) = E \varphi(x) \quad \rightsquigarrow \quad \left[ \frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \right] \varphi(x) = 0$$

Analogie zurück: Elektrische Feld  $\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{e} E(x) e^{-i\omega t}$

Wellengleichung im Medium mit Brechungsindex n:

$$\left[ \frac{d^2}{dx^2} - \frac{n^2}{c^2} \frac{d^2}{dt^2} \right] E(x) e^{-i\omega t} = 0 \quad \rightsquigarrow \quad \left[ \frac{d^2}{dx^2} + \frac{n^2 \omega^2}{c^2} \right] E(x) = 0$$

$$\text{QM: } \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) = \frac{n^2 \omega^2}{c^2}$$

$$n^2 \begin{cases} > 0 & \text{transparentes} \\ < 0 & \text{totalreflektierendes} \end{cases} \text{Medium}$$

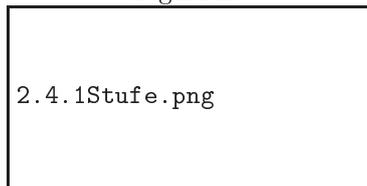
$$n^2 > 0 : \left[ \frac{d^2}{dx^2} + k^2 \right] E(x) = 0 \quad k = \frac{\omega}{c} \sqrt{n^2}; E(x) \propto e^{(\pm ikx)}$$

$$n^2 < 0 : \left[ \frac{d^2}{dx^2} - \rho^2 \right] E(x) = 0 \quad \rho = \frac{\omega}{c} \sqrt{-n^2}; E(x) \propto e^{\pm \rho x}$$

Beispiele:

1. Stufe

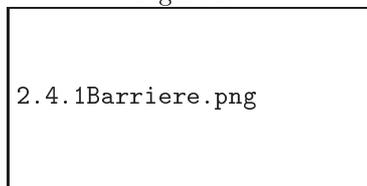
Figure 1:



Brechungsindex;  $n_1 = \frac{c}{\hbar\omega} \sqrt{2mE}$  ;  
 $n_2 = \frac{c}{\hbar\omega} \sqrt{2m(E - V_0)}$ ,  
 $E > V_0$  :QM: Wahrscheinlichkeit P reflektiert; Wahrscheinlichkeit (1-P):  
transmittiert  
Totalreflexion, aber: Eindringen in Grenzschicht (gedämpfte Welle). QM:  
Wahrscheinlichkeit  $\neq 0$ , das Teilchen in der Region 2 zu finden.

2. Barriere:

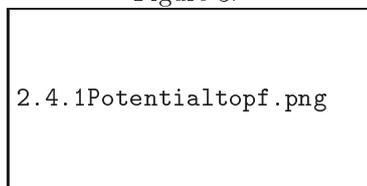
Figure 2:



„Tunneleffekt“;  $0 < E < V_0$

3. Potentialtopf

Figure 3:



- (a)  $-V_0 < E < 0$  “Energiequantisierung
- (b)  $E > 0$  teilweise Transmission, teilweise Reflexion

## 2.5.2 Stufenpotential quantitativ

- (i)  $E > V$   $[\frac{d^2}{dx^2} + k^2]\varphi(x) = 0$   $k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V)}$   
 $\varphi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$   $A, B \in \mathbb{C}$
- (ii)  $E < V$   $[\frac{d^2}{dx^2} - \rho^2]\varphi(x) = 0$   $\rho$  bzw.  $\kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V - E)}$   
 $\varphi(x) = Ce^{\rho x} + De^{-\rho x}$   $C, D \in \mathbb{C}$
- (iii)  $E = V$   $\varphi(x) = E + Fx$   $E, F \in \mathbb{C}$

### 2.5.2.1 Anschlussbedingungen

$V(x)$  mit Unstetigkeit bei  $x=a$ .

Sei  $V_\rho$  in  $[a - \delta; a + \delta] \forall \delta$  beschränkt; einmalig integriert

$$\frac{d\varphi}{dx}|_{a+\delta} - \frac{d\varphi}{dx}|_{a-\delta} = \int_{a-\delta}^{a+\delta} \frac{2m}{\hbar^2}(V_\delta(x) - E)\varphi(x)dx$$

beschränkt  $\rightsquigarrow$  rechte Seite  $\rightarrow 0$  für  $\delta \rightarrow 0$

$$\frac{d\varphi}{dx}|_{a+\delta} = \frac{d\varphi}{dx}|_{a-\delta} \implies \varphi' = \frac{d\varphi}{dx} \text{ ist stetig bei } x=a$$

$\implies \varphi$  ebenfalls stetig bei  $x=a$

### 2.5.2.2 Potentialstufe

$$V(x) = V_0 E(x) = \{V_0 \ x > 0 \quad 0 \ x \leq 0$$

$E > V_0$ :

I:

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + k_1^2\varphi = 0, \quad k_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}$$

II:

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + k_2^2\varphi = 0, \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)}$$

$$\varphi_I(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A'_1 e^{-ik_1 x}$$

$$\varphi_{II}(x) = A_2 e^{ik_2 x} + A'_2 e^{-ik_2 x}$$

Teilchen kommt von links  $\implies A'_2 = 0$

i)  $\varphi_I(0) = \varphi_{II}(0): A_1 + A'_1 = A_2$

ii)  $\varphi'_I(0) = \varphi'_{II}(0): K_1(A_1 - A'_1) = K_2 A_2$

$$\rightarrow \frac{A'_1}{A_1} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}$$

$$\frac{A_2}{A_1} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}; \text{ wähle } A_1 = 1$$

Reflexionskoeffizienten:

$$\phi(x; x \leq 0) = e^{(ik_1 x)} + \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} e^{(-ik_1 x)}$$

$$\phi(x; x > 0) = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} e^{(ik_2 x)}$$

$$\text{Transmissionskoeffizient: } T = \frac{k_2}{k_1} \left| \frac{A_2}{A_1} \right|^2 = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

$R+T=1$ ; Totalreflexion  $T=0$

• (b)  $E < V_0$ (II):  $\frac{d^2\phi}{dx^2} - \rho^2\phi = 0; \rho = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}$

$$k_2 \rightarrow i\rho; \phi_{II}(x) = B_2 e^{(\rho x)} + B'_2 e^{(\rho x)}; \text{ Beschränkung von } \phi \Rightarrow B_2 = 0$$

•  $\frac{A'_1}{A_1} = \frac{k_1 - i\rho}{k_1 + i\rho}; \frac{B'_2}{A_1} = \frac{2k_1}{k_1 + i\rho} \rightarrow R = \left| \frac{A'_1}{A_1} \right|^2 = 1$

- $\phi(x; x < 0) = (A_1=1) e^{(ik_1x)} + \frac{k_1-i\rho}{k_1+i\rho} e^{-ik_1x}$
- $\phi(x; x \geq 0) = (A_1=1) \frac{2k_1}{k_1+i\rho} e^{-\rho x}$
- $V_0 \rightarrow \infty (\rho \rightarrow \infty); A'_1 \rightarrow -A_1; B_2 \rightarrow 0$
- $\phi(x=0) = 0; \phi|_{\infty \text{ Schwelle}} \equiv 0$

### 2.5.2.3 Tunneleffekt, Potentialschwelle

$$V(x) = V_0 \Theta(a - |x|)$$

(bild)

$E < V_0$  :

$$\varphi(x) = \begin{cases} x < a & Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \\ -a \leq x \leq a & Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x} \\ x > a & Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} \end{cases}$$

$$\text{Mit } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar}} \text{ und } \kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar}}$$

( $\kappa \triangleq \rho$ )

**Anschlußbedingung bei  $x=-a$**

$$(i) \varphi_I(x=-a) = \varphi_{II}(x=-a) : Ae^{-iKa} + Be^{iKa} = Ce^{\kappa a} + De^{-\kappa a}$$

$$(ii) \varphi'_I(-a) = \varphi'_{II}(-a) : ik(Ae^{-iKa} - Be^{iKa}) = -\kappa(Ce^{\kappa a} - De^{-\kappa a})$$

Entsprechend bei  $x=a$

Betrachten: von links einlaufendes Teilchen  $G=0$

(Rechnung)

$$A = F(\cosh 2\rho a + \frac{i\epsilon}{2} \sinh 2\rho a) e^{2ika}$$

$$B = F(\frac{-i\eta}{2}) \sinh 2\rho a$$

$$\text{wobei: } \epsilon = \frac{\rho}{k} - \frac{k}{\rho}; \eta = \frac{\rho}{k} + \frac{k}{\rho}$$

$$\text{Definition Transmissionsamplitude: } S = \frac{F}{A} = \frac{e^{-2ika}}{\text{arsh}(2\rho a) + \frac{i\epsilon}{2} \sinh(2\rho a)}$$

$$T = |S|^2 = \frac{1}{1 + (1 + \frac{\epsilon^2}{4}) \sinh^2(2\rho a)} = \frac{4E(V_0-E)}{4E(V_0-E) + V_0^2 \sinh^2(\sqrt{2m(V_0-E)} 2a/\hbar)}$$

Grenzfall:  $\rho a \gg 1$  sehr hohe und sehr breite Schwelle

$$\rightarrow T = e^{(-4\sqrt{2m(V_0-E)} \frac{a}{\hbar})}$$

### 2.5.3 Potentialtopf

$$V(x) = -V_0 \theta(\frac{a}{2} - |x|)$$

$V_0 \leq E \leq 0$  :

$$\varphi'' - \kappa^2 \varphi \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar}(V_0 - E)} \quad \text{für } |x| > \frac{a}{2}$$

$$\varphi'' + k^2 \varphi \quad k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar}(E + V_0)} \quad \text{für } |x| \leq \frac{a}{2}$$

$$\varphi_I = B_1 e^{\kappa x} + B'_1 e^{-\kappa x}$$

$$\varphi_{III} = B_3 e^{\kappa x} + B'_3 e^{-\kappa x}$$

$$\varphi_{II} = A_2 e^{ikx} + A'_2 e^{-ikx}$$

Beschränktheit  $\rightsquigarrow B_3 \equiv 0$

$$\begin{aligned}
x = -\frac{a}{2} \quad (B'_1 = 0) \quad x \text{ ist negativ darauf folgt die Beschränktheit von } \varphi_I \\
\varphi_I^{(')} (x = -\frac{a}{2}) = \varphi_{II}^{(')} (x = -\frac{a}{2}) \\
\implies A_2 = e^{(-\kappa+ik)\frac{a}{2}} \frac{\kappa+ik}{2ik} B_1 \\
\implies A'_2 = -e^{-(\kappa+ik)\frac{a}{2}} \frac{\kappa-ik}{2ik} B_1
\end{aligned}$$

Anschlussbedingung bei  $x = \frac{a}{2}$ :

- $\frac{B_3}{B_1} = \frac{e^{-\kappa a}}{4ik\kappa} [(\kappa + ik)^2 e^{ika} - (\kappa - ik)^2 e^{-ka}]$
- $\frac{B'_3}{B_1} = \frac{\kappa^2 + k^2}{2k\kappa} \sin ka$

$$B_3 = 0 \rightsquigarrow \left( \frac{\kappa - ik}{\kappa + ik} \right)^2 = e^{2ika} \rightsquigarrow \text{Energiequantisierung}$$

$$1. \frac{\kappa - ik}{\kappa + ik} = -e^{ika} \rightsquigarrow \frac{\kappa}{k} = \tan\left(\frac{ka}{2}\right); k_0 = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} = \sqrt{k^2 + \kappa^2}$$

$$\frac{1}{\cos^2\left(\frac{ka}{2}\right)} = 1 + \tan^2\left(\frac{ka}{2}\right) = \frac{\kappa^2 + k^2}{k^2} = \left(\frac{k_0}{k}\right)^2$$

$$\rightsquigarrow \begin{cases} |\cos\left(\frac{ka}{2}\right)| = \frac{k}{k_0} \\ \tan\left(\frac{ka}{2}\right) > 0 \end{cases}$$

(Grafik), Schnittpunkte mit Welle=Geradenlösungen

$$2. \frac{\kappa - ik}{\kappa + ik} = e^{ika} \rightsquigarrow \begin{cases} |\sin\left(\frac{ka}{2}\right)| = \frac{k}{k_0} \\ \tan\left(\frac{ka}{2}\right) < 0 \end{cases}$$

### 3 Mathematische Hilfsmittel

Literatur (zur Vollständigkeit-.-)

- S.Großmann: Funktioanalysis im Hinblick auf Anwendungen in der Physik
- Achieser, Glasmann: Theorie der linearen Operatoren im Hilbertraum

Ziel: Abstrakte Beschreibung des Zustandes als Element eines Zustands (Hilbert) Raums und der Messgrößen durch hermitesche Operatoren unabhängig von einer Basis.

#### 3.1 Zustandsraum der Wellenfunktion

$L^2 \equiv \{ \text{quadratintegrale Funktionen} \}$   
 $\rightarrow \mathcal{F} = \{ \text{genügend reguläre Fkten} \in L^2 \}$

1.  $\mathcal{F}$  ist ein linearer Raum  $\Psi_1(\vec{r}), \Psi_2(\vec{r}) \in \mathcal{F}$   
 $\Rightarrow \Psi(\vec{r}) = \lambda_1 \Psi_1 + \lambda_2 \Psi_2 \in \mathcal{F} \quad \lambda_{1,2} \text{ konst} \in \mathbb{C}$   
da  $|\Psi(\vec{r})|^2$  quadratintegabel  $|\Psi|^2 = |\lambda_1|^2 |\Psi_1|^2 + |\lambda_2|^2 |\Psi_2|^2 = 2 \text{Re} \lambda_1 \lambda_2^* \Psi_1 \Psi_2^* < |\lambda_1| |\lambda_2| (|\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2)$   
 $\rightsquigarrow |\Psi|^2 < \text{Funktion deren Integral konvergiert}$

2. Skalarprodukt  $\phi(\vec{r}), \Psi(\vec{r}) \in \mathcal{F}$

$$(\phi, \Psi) = \underbrace{\int d^3 r \phi^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r})}_{\mathbb{C}}$$

Eigenschaften:  $(\phi, \Psi) = (\Psi, \phi)^*$

$(\varphi, \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2) = \lambda_1 (\varphi, \psi_1) + \lambda_2 (\varphi, \psi_2)$  bezüglich der zweiten Komponente linear

$(\lambda_1 \varphi_1 + \lambda_2 \varphi_2, \psi) = \lambda_1^* (\varphi_1, \psi) + \lambda_2^* (\varphi_2, \psi)$  bezüglich der ersten Komponente antilinear

Falls  $(\varphi, \psi) = 0$   $\varphi$  und  $\psi$  zueinander orthogonal

$$(\psi, \varphi) \geq 0 = \int d^3 r \psi^* \varphi$$

$$(\psi, \psi) = 0 \Leftrightarrow \psi(\vec{r}) = 0$$

Norm in  $\mathcal{F}$ :  $|\psi| = (\psi, \psi)^{\frac{1}{2}}$

Schwarzsche Ungleichung

$$|(\psi_1, \psi_2)| \leq |\psi_1| |\psi_2|$$

[Norm:  $\psi_1 - \frac{(\psi_2, \psi_1)}{|\psi_2|} \psi_2$ ]

1. Lineare Operatoren

Linearer Operator A:  $\phi(\vec{r}) = A \cdot \Psi(\vec{r}), \phi, \Psi(\vec{r}) \in \mathcal{F}$

$A(\lambda_1 \Psi_1 + \lambda_2 \Psi_2) = \lambda_1 A \Psi_1 + \lambda_2 A \Psi_2; \lambda_{1,2} \in \mathbb{C}$

Beispiele:

- (a) Ortsoperator  $\chi : X\Psi(x, y, z) = x\Psi(x, y, z)$
- (b) Differentialoperator  $D_x D_x \Psi(x, y, z) = \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, y, z)$
- (c) Partitätsoperator  $\Pi : \Pi\Psi(x, y, z) = \Psi(-x, -y, -z)$
- (d) Hamiltonoperator  $H : H\Psi(x, y, z) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x, y, z)\right) \Psi(x, y, z)$

2. Produkte von Operatoren

- (a) A, B lineare Operatoren ; Produkt (Def.):

$$(AB)\psi(\vec{r}) = A(\underbrace{B\psi(\vec{r})}_{\varphi(\vec{r})})$$

Kommutator: von A und B:  $[A, B] = AB - BA$

$$\text{Bsp: } [\chi, D_x] \psi(\vec{r}) = \left(x \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} x\right) \psi(x, y, z) = -\psi(x, y, z)$$

$$\Rightarrow [\chi, D_x] = -1 \quad \text{oder} \quad \left[\chi, \frac{\hbar}{i} D_x\right] = i\hbar$$

- (b) Orthonormierte Basis

Vektor charakterisiert durch Komponenten bzgl. einer orthonormierten Basis  $\{u_i\}$  ;  $u_i(\vec{r}) \in \mathcal{F}$

Orthonormiert:

$$(u_i; u_j) = \delta_{ij}$$

$$\psi \in \mathcal{F} : \quad \psi(\vec{r}) = \sum_i c_i u_i(\vec{r})$$

3. Komponenten einer Fkt. in Bzg. auf eine Basis  $\{u_i(\vec{r})\}$

$$\psi(\vec{r}) = \sum_i c_i u_i(\vec{r})$$

$$\int d^3r \cdot u_j^* \psi(\vec{r}) = \sum_i c_i \underbrace{\int d^3r u_j^* u_i}_{\delta_{ij}} = c_j$$

$$c_j = \int d^3r \cdot u_j^*(\vec{r}) \psi(\vec{r})$$

$$\sum_i c_i u_i$$

$$(u_j, \psi) = \sum_i c_i \underbrace{(u_i, u_j)}_{\delta_{ij}}$$

$$c_j = (u_j, \psi)$$

$\psi =$

4. Skalarprodukt in Komponentenschreibweise

$$\phi(\vec{r}) = \sum_i b_i u_i(\vec{r})$$

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_i c_i u_i(\vec{r})$$

$$\int d^3r \Psi(\vec{r})^* \Psi(\vec{r}) = \sum_i b_i^* c_i \quad \text{speziell: } (\Psi, \Psi) = \sum |c_i|^2$$

5. Vollständigkeitsrelation:  $\forall \Psi \in \mathcal{F}$  gilt:

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_i c_i u_i(\vec{r}) = \sum_i \int d^3r' u_i^*(\vec{r}') \Psi(\vec{r}') u_i(\vec{r}) = \int d^3r' \Psi(\vec{r}') \underbrace{\sum_i u_i(\vec{r}') u_i^*(\vec{r})}_{F(\vec{r}, \vec{r}')}$$

$$\int d^3r' \Psi(\vec{r}') F(\vec{r}, \vec{r}') \quad \forall \Psi$$

Vollständigkeitsrelation

$$\rightsquigarrow \sum_i u_i(\vec{r}') u_i^*(\vec{r}) = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

6. Ebene Wellen und andere verallgemeinerte Basiszustände

Ebene Welle (eindimensional):  $V_p(x) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ipx}{\hbar}}$  mit  $p \triangleq \text{Index}$

Zerlegung eines Wellepaketes nach ebenen Wellen  $\triangleq$  Entwicklung nach Basis  $\{v_p\}$

Fouriertransformation

$$\psi(x) = \int \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} \tilde{\psi}(p) e^{\frac{ipx}{\hbar}} = \underbrace{\int dp}_{\triangleq \sum_i} \underbrace{\tilde{\psi}(p)}_{\triangleq c_i} \underbrace{v_p(x)}_{\triangleq u_i}$$

$$\underbrace{\tilde{\psi}(p)}_{\triangleq c_i} = \underbrace{\int \frac{dx}{\sqrt{2\pi\hbar}} \psi(x) e^{\frac{ipx}{\hbar}}}_{\triangleq (u_i, \psi)}$$

7. Parsevalsche Gleichung

$$\int dx \Psi^*(x) \Psi(x) = \int dp \tilde{\Psi}^*(p) \tilde{\Psi}(p) \triangleq (\Psi, \Psi) = \sum_i |c_i|^2$$

Vollständigkeit:  $\int dp v_p(x) v_p^*(x') = \delta(x - x')$

$[\sum_i u_i(x) u_i^*(x') = \delta(x - x')]$

Orthonomertheit:  $(v_p, v_{p'}) = \underbrace{\delta(p - p')}_{\frac{1}{2\pi} \int \frac{dx}{\hbar} e^{i\frac{x}{\hbar}(p-p')}$  (Distribution, nicht Deltafkt.!)

$$\frac{1}{2\pi} \int \frac{dx}{\hbar} e^{i\frac{x}{\hbar}(p-p')}$$

Verallgemeinerung auf beliebige kontinuierliche Basis

$\{w_\alpha(\vec{r})\}$

• orthonorm:  $(w_\alpha, w_{\alpha'}) = \delta(\alpha - \alpha')$

• vollständig:  $\int d\alpha w_\alpha(\vec{r}) w_\alpha^*(\vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$

Häufig gemischte Basis:

$$\begin{cases} (u_i, u_j) &= \delta_{ij} \\ (w_\alpha, w_{\alpha'}) &= \delta(\alpha - \alpha') \\ (u_i, w_\alpha) &= 0 \end{cases}$$

### 3.2 Dirac Notation

Basis	Index	Komp.	$\Psi$	Bezeichnung
$u_i(\vec{r})$	i	$c_i$	$\sum_i c_i u_i(\vec{r})$	allgemein
$v_{\mathbf{k}}(\vec{r})$	p	$\tilde{\Psi}(p)$	$\int dp \tilde{\Psi}(p) v_p(\vec{r})$	Impulsdarstellung
$\zeta_{\vec{r}_0}(\vec{r})$	$\vec{r}_0$	$\tilde{\Psi}(\vec{r}_0)$	$\int d\vec{r}_0 \tilde{\Psi}(\vec{r}_0) \zeta_{\vec{r}_0}(\vec{r})$	Ortsdarstellung
$\omega_{E_n}(\vec{r})$	n	$c_n$	$\sum_n c_n \omega_{E_n}(\vec{r})$	Energiedarstellung (gebundene)
$\omega_E(\vec{r})$	E	c(E)	$\int dE c(E) \omega_E(\vec{r})$	Energiedarstellung (Streuzustände)

Verallgemeinerte Basen:

(i) Ebene Wellen (eindimensional)

$$\text{Basis: } v_P(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$$

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dp \underbrace{\tilde{\psi}(p)}_{\triangleq c_i} \underbrace{v_p(x)}_{\triangleq u_i}$$

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}(p) &= (v_p(x), \psi(x)) = \int dx \cdot v_p^*(x) \psi(x) = \int dp' \int dx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} \tilde{\psi}(p') \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip'x/\hbar} \\ &= \int dp' \underbrace{\int dx \cdot \frac{1}{2\pi\hbar} e^{i(p-p')x/\hbar}}_{\frac{1}{\hbar} \delta((p-p')/\hbar) = \delta(p-p')} \tilde{\psi}(p') = \tilde{\psi}(p) \end{aligned}$$

Anmerkung:

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int dk \cdot e^{ikx}$$

$$\delta(p) = \frac{1}{2\pi} \int dx \cdot e^{ipx}$$

$$\text{orthonormiert: } (v_p, v_{p'}) = \int dx \cdot v_p^*(x) \cdot v_{p'}(x) = \int \frac{dx}{2\pi\hbar} e^{ipx/\hbar} e^{ip'x/\hbar} = \frac{1}{\hbar} \delta((p-p')/\hbar) = \delta(p-p')$$

$$\text{vollständig: } \int dp \cdot v_p(x) \cdot v_p^*(x') = \underbrace{\int dp \cdot \frac{1}{2\pi\hbar} e^{ipx/\hbar} e^{-ipx'/\hbar}}_{\frac{1}{\hbar} \delta((x-x')/\hbar)} = \delta(x-x')$$

(ii) Ortsdarstellung:

$$\begin{aligned} \{\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})\} \quad \xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) &= \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) \\ \psi(\vec{r}) &= \int d^3r_0 \cdot \underbrace{\psi(\vec{r}_0)}_{\triangleq c_i} \underbrace{\delta(\vec{r} - \vec{r}_0)}_{\triangleq u_i} \end{aligned}$$

$$\psi(\vec{r}_0) = (\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}), \psi) = \int d^3r \cdot \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) \cdot \psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r}_0)$$

$$\text{vollständig: } \int d^3r_0 \xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) \xi_{\vec{r}'_0}(\vec{r}'_0) = \int d^3r_0 \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) \delta(\vec{r}'_0 - \vec{r}_0) = \delta(\vec{r} - \vec{r}'_0)$$

$$\text{orthonormiert: } (\xi_{\vec{r}'_0}, \xi_{\vec{r}_0}) = \int d^3r \xi_{\vec{r}'_0}^*(\vec{r}) \xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) = \int d^3r \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) \delta(\vec{r} - \vec{r}'_0) = \delta(\vec{r}_0 - \vec{r}'_0)$$

1. Zustand eines Teilchens charakterisiert durch Wellenfunktion  $\Psi(\vec{r})$  bzw. durch Komponenten bezüglich einer bestimmten Basis.

$$\text{Analogie: Vektor } \vec{a} \text{ im } \mathbb{R}^3 \text{ bzg. einer Basis } \{\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3\} \quad \vec{a} = (a_1, a_2, a_3) = \sum_{i=1}^3 a_i \vec{e}_i$$

Basiswechsel: neue Basisvektoren  $\vec{e}'_i$  mit  $e_i = 0\vec{e}'_i$ :  $\vec{a} = \sum_{i=1}^3 a'_i \vec{e}'_i$  wobei

$$a'_j = \sum_i a_i \vec{e}'_j \vec{e}_i = \sum_i \underbrace{a_i \vec{e}'_j \vec{e}_i}_{\equiv \mathcal{O}_{ji}}$$

$$[\sum_i a_i \vec{e}_i = \sum_j a'_j \vec{e}'_j \Leftrightarrow \sum_i a_i \vec{e}_i \vec{e}'_k = \sum_j a'_j \underbrace{\vec{e}'_k \vec{e}'_j}_{\delta_{jk}} = \sum_j a_i \delta_{jk} = a'_k]$$

$\vec{a}$  hat die Bedeutung unabhängig von der Basis;  $\vec{a} \cdot \vec{b}$  liefert in jeder Basis das gleiche Resultat.

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = \sum_i a_i b_i = \sum_i a'_j b'_j = \sum_{i,k,l} a_k \mathcal{O}_{jk} b_l \mathcal{O}_{jl} = \sum_{j,k,l} a_k b_l \mathcal{O}_{jl} \mathcal{O}_{kj}^T$$

$$\mathcal{O} \cdot \mathcal{O}^T = \Lambda = \sum_{k,l} a_k b_l \delta_{kl} = \sum_k a_k b_k$$

## 2. "Ket" und "Bra"

Beschreibung eines Zustandes ohne Bezug auf die Ortsvariable.

### (a) "Ket"

"Ket" = Element eines Zustandsraums  $H$  (Hilbertraum) symbolisiert

$$|a\rangle$$

Speziell: Für jedes  $\psi(\vec{r}) \in \mathcal{F} \iff |\psi\rangle \in H$

### (b) "Bra"

Zu jedem "Ket"  $|\varphi\rangle$  gehört ein Bra:  $\langle\varphi|$ , der zusammen mit einem beliebigen ket  $|\psi\rangle$  eine komplexe Zahl definiert:

$\langle\varphi|\psi\rangle$  = komplexe Zahl = Skalarprodukt Anm.: Analogie wäre Vektor und konjugiert komplexer Vektor

Es gilt:

$$\langle\varphi|\psi\rangle^* = \langle\psi|\varphi\rangle$$

$$\langle\varphi|\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2\rangle = \lambda_1\langle\varphi|\psi_1\rangle + \lambda_2\langle\varphi|\psi_2\rangle \text{ mit } \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$$

$\langle\lambda_1\varphi_1 + \lambda_2\varphi_2|\psi\rangle = \lambda_1^*\langle\varphi_1|\psi\rangle + \lambda_2^*\langle\varphi_2|\psi\rangle$  Skalarprodukt ist in Bezug auf vorderen Faktor antilinear:

Bemerkung: Werden auch (als math. Hilfsmittel) "verallgemeinerte ket" zulassen; z.B.  $|\xi_{x_0}\rangle, |v_{p_0}\rangle$

## 3. Lineare Operatoren

Linearer Operator ordnet jedem  $|\Psi\rangle \in H$  einen ket  $|\Psi'\rangle \in H$  so zu, dass der Zusammenhang linear ist:  $|\Psi'\rangle = \underbrace{A}_{\text{Operator}} |\Psi\rangle$  ist wieder ket

$$A(\lambda_1|\Psi_1\rangle + \lambda_2|\Psi_2\rangle) = \lambda_1 A|\Psi_1\rangle + \lambda_2 A|\Psi_2\rangle \quad \lambda_{1,2} \in \mathbb{C}$$

Produkt zweier linearer Operatoren,  $AB$ , ist definiert durch:  $(AB)|\Psi\rangle = A(B|\Psi\rangle)$  I.A.  $AB \neq BA$

Kommutator  $[A, B] = AB - BA \neq_{i.a.} 0$

einerseits Skalarprodukt von  $\langle\Psi|$  mit  $|\Psi'\rangle = A|\Psi\rangle$ :  $\underbrace{\langle\Psi|}_{\langle\phi|(A|\Psi\rangle)}$

andererseits Matrixelement von  $A$  zwischen  $|\phi\rangle$  und  $|\Psi\rangle$ . Ist eine Zahl die linear von  $|\Psi\rangle$ , antilinear von  $|\phi\rangle$  abhängt.

Gegeben sei  $|\Psi_1\rangle$  und  $\langle\phi_1|$  fest. Dann definiert  $|\Psi_1\rangle\langle\phi_1|$  einen linearen Operator auf einem beliebigen ket  $|\Psi\rangle$  durch  $|\Psi\rangle\langle\phi_1|\Psi\rangle$  Die Anwen-

dingung von  $|\Psi_1\rangle\langle\phi_1|$  führt auf einen anderen ket  $\rightarrow$  stellt einen Operator dar.

Bei kets, bras, Operatoren ist die Reihenfolge wichtig!

$\langle a|b\rangle$  Skalarprodukt

$|b\rangle\langle a|$  Operator

Analogie Vektoren  $\langle a|b \rangle$  Analogie  $(a_1 \dots a_n)^* \begin{pmatrix} b_1 \\ \dots \\ b_n \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^n a_i b_i$  Skalarprodukt

$|b \rangle \langle a|$  Analogie  $bat = \begin{pmatrix} b_1 \\ \dots \\ b_n \end{pmatrix} (a_1^* \dots a_n^*) = \begin{pmatrix} b_1 a_1^* & \dots & b_1 a_n^* \\ \dots & \dots & \dots \\ b_n a_1^* & \dots & b_n a_n^* \end{pmatrix}$  dyadisches Produkt

Projektor  $P_\psi$

Es sei  $\langle \psi|\psi \rangle = 1$ ; Operator  $P_\psi = |\psi \rangle \langle \psi|$

Anwendung auf  $|\varphi \rangle$ :  $P_\psi |\varphi \rangle = \underbrace{|\psi \rangle}_{\text{"Richtung"}} \underbrace{\langle \psi|\varphi \rangle}_{\text{"Gewicht"}}$  Projektion von  $|\varphi \rangle$  auf

$\psi$

Es gilt:  $P_\psi^2 = P_\psi$

$$\left[ P_\psi^2 |\varphi \rangle = P_\psi |\psi \rangle \langle \psi|\varphi \rangle = |\psi \rangle \underbrace{\langle \psi|\psi \rangle}_1 \langle \psi|\varphi \rangle = |\psi \rangle \langle \psi|\varphi \rangle = P_\psi |\varphi \rangle \right]$$

Beispiel im  $\mathbb{R}^3$ :

$$\vec{a} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad P_a = \vec{a}\vec{a}^t = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (0 \ 0 \ 1) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$P_a^2 = P_a$

$$P_a \vec{b} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix} = b_3 \underbrace{\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}}_{\text{Richtung } \vec{a}}$$

Anwendung des Projektors auf einen Unterraum:

Seien  $|\psi_1 \rangle, \dots, |\psi_2 \rangle$  orthonormierte ket:  $\langle \psi_i|\psi_j \rangle = \delta_{ij}$  für  $1 \leq i, j \leq q$  durch  $|\psi_1 \rangle \dots |\psi_q \rangle$  aufgespannter Unterraum  $H_q$

Dann ist  $P_q = \sum_{i=1}^q |\psi_i \rangle \langle \psi_i|$  Projektor auf  $H_q$

z.z.  $P^2 = P$ :  $P_q^2 = \sum_{i,j=1}^q |\psi_i \rangle \underbrace{\langle \psi_i|\psi_j \rangle}_{\delta_{ij}} \langle \psi_j| = \sum_{i=1}^q |\psi_i \rangle \langle \psi_i| =$

$P_q$

Sei  $|\varphi \rangle \in H$  beliebig:  $P_q |\varphi \rangle = \sum_{i=1}^q |\psi_i \rangle \langle \psi_i|\varphi \rangle$

Projektion von  $|\varphi \rangle$  auf Unterraum  $H_q$

#### 4. Hermitesche Konjugation

A angewandt auf  $|\Psi \rangle$  liefert  $A |\Psi \rangle$

Definition von  $A^+$  (linear):  $|\Psi' \rangle = A |\Psi \rangle \leftrightarrow \langle \Psi| = \langle \Psi|A^+$

Es folgt hieraus: Skalarprodukt

$$\langle \Psi'|\phi \rangle = \langle \phi|\Psi' \rangle^* \rightarrow \langle \Psi|A^+|\phi \rangle = \langle \phi|A|\Psi \rangle^*$$

Beachte:  $A|\Psi \rangle = |A\Psi \rangle$  Schreibweise

$$\langle A\Psi| = \langle \Psi|A^+$$

Eigenschaften:

$$(A^+)^+ = A$$

$$\begin{aligned}
(\lambda A)^+ &= \lambda^* A^+ \quad \lambda \in \mathbb{C} \\
(AB)^+ &= B^+ A^+ \\
|\phi\rangle &= AB|\Psi\rangle = A|\chi\rangle \\
\langle\phi| &= \langle\Psi|(AB)^+ = \langle\chi|A^+ = \langle\Psi|B^+A^+
\end{aligned}$$

**Anmerkungen:**

$\Lambda \triangleq$  Einheitsmatrix

+ transponiert und komplex konjugiert

\* komplex konj.

zu A adjungierter Operator

$$A^+ : \langle\phi|A^+|\psi\rangle = \langle\psi|A|\phi\rangle^*$$

Eigenschaften:

$$(A^+)^+ = A$$

$$(\lambda A)^+ = \lambda^* A^+, \quad \lambda \in \mathbb{C};$$

$$(AB)^+ = B^+ A^+$$

Betrachten Operator:  $|u\rangle\langle v|$

Es ist

$$(|u\rangle\langle v|)^+ = |v\rangle\langle u|$$

Beweis:  $\langle\varphi|(|u\rangle\langle v|)^+|\psi\rangle = \langle\psi|u\rangle\langle v|\varphi\rangle^*$   
 $= \langle\psi|u\rangle^* \langle v|\varphi\rangle = \langle\varphi|v\rangle\langle u|\psi\rangle$

Speziell:

$$(|u\rangle\langle u|)^+ = |u\rangle\langle u|$$

Der Projektionsoperator ist hermitesch

Hermitesche Operatoren:

$$A^+ = A$$

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

$$A^* = A^T \leftrightarrow A^+ = A$$

### 3.3 Darstellungen im Zustandsraum

Wahl einer Darstellung entspricht der Wahl einer orthonormierten (diskret; kontinuierliche) Basis im Zustandsraum  $H$  ( $\{|ket \rangle\}$ )

Zustände werden dargestellt durch Komponenten bzgl. dieser Basis.

Operatoren werden dargestellt durch Matrizen bzgl. dieser Basis.

**Orthonormierungsbedingungen:**  $\{|u_i \rangle\}$  diskret (kontinuierliche Indizes: analog)

$$\langle u_i | u_j \rangle = \delta_{ij}$$

**Vollständigkeitsrelation:**  $\{|u_i \rangle\}$  bildet eine Basis in  $H$ , wenn jeder  $|\psi \rangle \in H$  auf genau eine Weise nach  $|u_i \rangle$  entwickelt werden kann.

$$|\psi \rangle = \sum_i c_i |u_i \rangle \quad \text{und} \quad c_j = \langle u_j | \psi \rangle$$

$$|\psi \rangle = \sum_i \langle u_i | \psi \rangle |u_i \rangle = \sum_i |u_i \rangle \langle u_i | \psi \rangle = (\sum_i |u_i \rangle \langle u_i |) |\psi \rangle$$

Sei  $\Lambda$  Einheitsoperator in  $H$ :  $P_{\{u_i\}} = \sum_i |u_i \rangle \langle u_i | = \Lambda \leftarrow$  Vollständigkeitsrelation

#### 3.3.1 Darstellung der ket, Bra, und Operatoren

- $\rightarrow$  *Ket*  $|\psi \rangle$  in der durch die Basis  $\{|u_i \rangle\}$  charakterisierten Darstellung entspricht der einspaltigen Matrix

$$\begin{pmatrix} \langle u_1 | \psi \rangle \\ \vdots \\ \langle u_n | \psi \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}$$

- $\rightarrow$  *Bra*  $\langle \psi |$  in der durch  $\{|u_i \rangle\}$  char. Darstellung: einzeilige Matrix

$$(\langle \psi | u_1 \rangle \dots \langle \psi | u_n \rangle) = (c_1^* \dots c_n^*)$$

- $\rightarrow$  *Operator*  $A$  in der durch  $\{|u_i \rangle\}$  charakterisierten Darstellung:  $A_{ij} = \langle u_i | A | u_j \rangle$

$$\begin{aligned} \langle u_i | AB | u_j \rangle &= \langle u_i | A | B | u_j \rangle = \langle u_i | A P_{\{k\}} B | u_j \rangle \\ &= \sum_k \langle u_i | A | u_k \rangle \langle u_k | B | u_j \rangle = \sum_k A_{ik} B_{kj} \rightarrow \text{Matrixmultiplikation} \end{aligned}$$

- $\rightarrow$  *Matrixdarstellung*  $|\psi' \rangle = A |\psi \rangle$  in der  $\{|u_i \rangle\}$  Darstellung:  
 $c'_i = \langle u_i | \psi' \rangle = \langle u_i | A | \psi \rangle = \langle u_i | A P_{\{j\}} | \psi \rangle = \sum_j \langle u_i | A | u_j \rangle \langle u_j | \psi \rangle = \sum_j A_{ij} c_j$

- Darstellung von  $\langle \phi | A | \psi \rangle$   
in der  $\{|u_i \rangle\}$  Darstellung:  $\langle \phi | A | \psi \rangle = \sum_{ij} \langle \phi | u_i \rangle \langle u_i | A | u_j \rangle \langle u_j | \psi \rangle = \sum_{ij} b_i^* A_{ij} c_j$

- Darstellung des zu  $A$  hermitesch konjugierten Operators  $A^+$   
in der  $\{|u_i \rangle\}$  Darstellung:  $(A^+)_{ij} = A_{ji}^*$   
 $[(A^+)_{ij} = \langle u_i | A^+ | u_j \rangle = \langle u_j | A | u_i \rangle^* = A_{ji}^*]$

- Für hermiteschen Operator  $A^+ = A$ :  
 $A_{ij} = A_{ji}^*$  und  $A_{ii} = A_{ii}^*$

### 3.3.2 Darstellungswechsel (Basiswechsel)

In gegebener Darstellung sind bra, ket und Operatoren durch eine Matrix dargestellt.

Darstellungswechsel → die selben Objekte sind durch eine andere Matrix dargestellt. Frage: Wie hängen diese Matrizen zusammen?

Übergang von Basis  $\{|u_i\rangle\}$  zu Basis  $\{|t_k\rangle\}$ : festgelegt durch Komponenten der neuen Basisvektoren bzgl. der alten Basis:

$$|t_k\rangle = \sum_i \underbrace{\langle u_i | t_k \rangle}_{\text{Komponenten von } |t_k\rangle \text{ bzgl. } \{|u_i\rangle\}} |u_i\rangle$$

Matrix (Einführung):

$$S_{ik} \equiv \langle u_i | t_k \rangle$$

$$(S_{ki}^+) = (S_{ik})^* = \langle t_k | u_i \rangle$$

S ist unitär:

$$SS^+ = S^+S = \mathbb{I}$$

Beweis:  $(SS^+)_{ij} = \sum_k \underbrace{\langle u_i | t_k \rangle}_{S_{ik}} \underbrace{\langle t_k | u_j \rangle}_{S_{kj}^+} = \langle u_i | u_j \rangle \stackrel{\text{orthonormiert}}{=} \delta_{ij}$

Verallgemeinerung der Drehung auf komplexe Vektoren.

orthogonale Drehmatrix:  $A^T A = \Lambda$

- Neue Komponenten des ket  $|\psi\rangle$ :

$$\begin{aligned} \langle t_k | \psi \rangle &= \langle t_k | \mathbb{I} | \psi \rangle = \langle t_k | P_{\{k_i\}} | \psi \rangle = \sum_i \langle t_k | u_i \rangle \langle u_i | \psi \rangle = \sum_i S_{ki}^+ \langle u_i | \psi \rangle \rightarrow \\ \langle t_k | \psi \rangle &= \sum_i S_{ki}^+ c_i \end{aligned}$$

- Neue Komponenten des bra:

$$\langle \phi | t_k \rangle = \langle \phi | \Lambda | t_k \rangle = \langle \phi | P_{\{k_i\}} | t_k \rangle = \sum_i \underbrace{\langle \phi | u_i \rangle}_{b_i^*} \underbrace{\langle u_i | t_k \rangle}_{S_{ik}}$$

- Neue Komponenten einer Matrix:

$$A'_{KL} = \langle t_k | A | t_l \rangle = \langle t_k | P_{\{u_i\}} A P_{\{u_j\}} | t_l \rangle = \sum_{ij} \langle t_k | u_i \rangle \langle u_i | A | u_j \rangle \langle u_j | t_l \rangle = \sum_{ij} S_{ki}^+ A_{ij} S_{jl}$$

## 3.4 Eigenwert-Gleichungen / Observablen

### 3.4.1 Eigenwerte / Eigenvektoren

Definition: Ket  $|\psi\rangle$  sei Eigenvektor (oder Eigenket) des linearen Operators A, wenn mit einer komplexen Zahl  $\lambda$  die folgende Beziehung gilt:

$$A|\psi\rangle = \underbrace{\lambda}_{\text{Eigenwert (=EW)}} \underbrace{|\psi\rangle}_{\text{Eigenvektor (=EV)}} \quad (*)$$

(\*) heißt Eigenwertgleichung des linearen Operators A.  
 Gesamtheit der Eigenwerte: Spektrum von A.

- $\lambda$  einfacher Eigenwert  $\Leftrightarrow$  zu  $\lambda$  gehörige EV ist eindeutig festgelegt (bis auf einen konst. Faktor:  $|\psi\rangle$  sei EV zu A mit EW  $\lambda$ ;  $\alpha \in \mathbb{C}$   
 $A(\alpha|\psi\rangle) = \alpha A|\psi\rangle = \alpha\lambda|\psi\rangle = \lambda(\alpha|\psi\rangle)$ ;  $e^{i\theta}|\psi\rangle$  kann drannmultipliziert werden.)
- $\lambda$  ist g-fach entartet  $\Leftrightarrow$  g linear unabhängige EV zu  $\lambda$ :  $|\phi^i\rangle$ ;  $i = 1 \dots g$   
 Diese spannen einen g-dimensionalen Eigenraum auf (jede Linearkombination ist wieder EV) denn:  
 $|\psi\rangle = \sum_{i=1}^g c_i |\psi^i\rangle$  ist EV von A zu  $\lambda$ ;  $c_i \in \mathbb{C}$ :  
 $A|\psi\rangle = \sum_{i=1}^g c_i A|\psi^i\rangle = \sum_{i=1}^g c_i \lambda |\psi^i\rangle = \lambda \sum_{i=1}^g c_i |\psi^i\rangle = \lambda |\psi\rangle$   
 Beispiel: Projektionsoperator  $P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$   $\langle\psi|\psi\rangle = 1$   
 EW-Gleichung:  $P_\psi|\phi\rangle = \lambda|\phi\rangle \rightarrow |\psi\rangle\langle\psi|\phi\rangle = \lambda|\phi\rangle$   
 EV von  $P_\psi$ :

- $|\psi\rangle, \lambda = 1$   $|\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$
- alle zu  $|\psi\rangle$  orthogonalen  $|\phi\rangle$  mit  $\lambda = 0$   $|\psi\rangle\langle\psi|\phi\rangle = \lambda|\phi\rangle$

Spektrum von  $P_\psi$ : 0, 1

Bemerkung: konjugierte EW-Gleichung:  $\langle\psi|A^\dagger = \lambda^* \langle\psi|$

### 3.4.2 Bestimmung der EW und EV eines Operators

Beschränken uns auf Zustandsraum mit endl. Dimensionen N

Wählen eine bestimmte Darstellung  $\{|u_i\rangle\}$ :  $c_i \equiv \langle u_i|\psi\rangle$

$$A_{ij} = \langle u_i|A|u_j\rangle$$

$$\langle u_i|A|\psi\rangle = \lambda \langle u_i|\psi\rangle \Leftrightarrow \sum_j \langle u_i|A|u_j\rangle \langle u_j|\psi\rangle = \lambda \langle u_i|\psi\rangle \Leftrightarrow \sum_j A_{ij}c_j = \lambda c_i \Leftrightarrow \sum_j A_{ij}c_j = \sum_j \lambda c_j \delta_{ij} \Leftrightarrow$$

$$\sum_j (A_{ij} - \lambda \delta_{ij})c_j = 0$$

Homogenes Gleichungssystem:

Hat nur dann Lösung  $\neq 0$ , wenn

$$\text{Det}(A_{ij} - \lambda_{ij}) = 0$$

Charakteristische Gleichung/ Säkulärgleichung

Für NxN-Matrizen: Gleichung N-ten Grades für  $\lambda \rightarrow N$  Wurzeln: reell, komplex, einfach oder vielfach.

Durch beliebigen Basiswechsel zeigt man, dass die charakteristische Gleichung unabhängig von der Basis ist. Die EW eines Operators sind die Lösungen seiner charakteristischen Gleichung.

Für hermitesche Operatoren gilt:

Falls EW  $\lambda$  n-fach entartet ist  $\Rightarrow$  existieren n linear unabh. EV zu  $\lambda$ . Dimension des zugehörigen Eigenraums ist n. ( $\rightsquigarrow$  Operator ist diagonalisierbar)

### 3.4.3 Observable

Im folgenden sei A hermitesch:  $A = A^\dagger$

(i) Die Eigenwerte eines hermiteschen Operators sind reell.

Denn es gilt:

$$A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \text{ für EV } |\psi\rangle$$

$$\langle\psi|A|\psi\rangle = \lambda\langle\psi|\psi\rangle$$

$$\lambda^* \langle\psi|\psi\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle^* = \langle\psi|A^\dagger|\psi\rangle \stackrel{A \text{ hermitesch}}{=} \langle\psi|A|\psi\rangle = \lambda\langle\psi|\psi\rangle$$

$\rightsquigarrow \lambda$  ist reell

Für alle  $\varphi$ :

$$\langle\psi|A|\varphi\rangle = \langle\varphi|A^\dagger|\psi\rangle^* \stackrel{A \text{ hermitesch}}{=} \langle\varphi|A|\psi\rangle^* \stackrel{\langle\varphi|\psi\rangle^* = \langle\psi|\varphi\rangle}{=} \lambda^* \langle\psi|\varphi\rangle = \lambda\langle\psi|\varphi\rangle$$

$$\langle\psi|A|\varphi\rangle = \lambda\langle\psi|\varphi\rangle \text{ oder } A \text{ wirkt nach links } \langle\psi|A = \lambda\langle\psi|$$

(ii) Zwei Eigenvektoren eines hermiteschen Operators zu verschiedenen Eigenwerten stehen orthogonal.

$$A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$$

$$A|\varphi\rangle = \mu|\varphi\rangle$$

$$\langle\phi|A|\psi\rangle = \begin{cases} \lambda\langle\phi|\psi\rangle & \text{nach rechts} \\ \mu\langle\phi|\psi\rangle & \text{nach links} \end{cases} \rightarrow (\lambda - \mu)\langle\phi|\psi\rangle = 0, \text{ Für } \lambda \neq \mu \rightarrow$$

$$\langle\phi|\psi\rangle = 0$$

Definition: Ein hermitescher Operator A ist eine Observable, wenn dessen Eigenvektoren im Zustandsraum eine Basis bilden. D.h. jeder Zustand kann nach Eigenvektoren der Observablen entwickelt werden.

Beispiele:

1. Hamilton-Operator: Energie- Eigenzustände sind vollständig.

2. Projektionsoperator  $P_\psi \equiv |\psi\rangle\langle\psi|$  mit  $\langle\psi|\psi\rangle = 1$

(a)  $P_\psi$  ist hermitesch. Ein EW=1, alle anderen EW=0

$$(b) |\psi\rangle = \underbrace{P_\psi|\phi\rangle}_{\equiv|\phi_1\rangle} + \underbrace{(\mathbb{I} - P_\psi)|\phi\rangle}_{\equiv|\phi_2\rangle}$$

$$|\phi_1\rangle = P_\psi|\phi\rangle \text{ ist EV von } P_\psi \text{ zum EW 1. Denn } P_\psi(\underbrace{P_\psi|\phi\rangle}_{|\phi_1\rangle}) =$$

$$P_\psi|\phi\rangle = \underbrace{P_\psi|\phi\rangle}_{|\phi_1\rangle}$$

$$|\phi_2\rangle = (1 - P_\psi)|\phi\rangle \text{ ist EV von } P_\psi \text{ zum EW 0. Denn } P_\psi|\phi_2\rangle = P_\psi(1 - P_\psi)|\phi\rangle = \underbrace{(P_\psi - P_\psi^2)}_{P_\psi}|\phi\rangle = 0|\phi_2\rangle$$

$\Rightarrow$  Jeder *ket*  $|\psi\rangle$  kann nach den EV von  $P_\psi$  entwickelt werden  $\rightarrow P_\psi$  ist Observable.

### 3.4.4 Kommutierende Observable

Satz 1: Es gelte  $[A, B] = AB - BA = 0$  und  $A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \Rightarrow B|\psi\rangle$  ist EV von A mit dem selben EW.

$$\text{Denn: } A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \rightsquigarrow BA|\psi\rangle = B\lambda|\psi\rangle \overset{[A,B]}{\rightsquigarrow} A(B|\psi\rangle) = \lambda(B|\psi\rangle)$$

Satz 2: Es gelte  $[A, B] = 0$ ;  $A|\psi_1\rangle = \lambda_1|\psi_1\rangle$ ;  $A|\psi_2\rangle = \lambda_2|\psi_2\rangle \Rightarrow \langle\psi_2|B|\psi_1\rangle = 0$  mit  $\lambda_1 \neq \lambda_2$

Denn  $0 = \langle\psi_2|AB - BA|\psi_1\rangle = \lambda_2 \langle\psi_2|B|\psi_1\rangle - \lambda_1 \langle\psi_2|B|\psi_1\rangle = (\lambda_1 - \lambda_2) \langle\psi_2|B|\psi_1\rangle$ ;  $\lambda_1 \neq \lambda_2 \rightsquigarrow$  Behauptung

Zentraler Satz:

Satz 3: Falls  $[A, B] = 0 \Rightarrow$  Existiert eine orthonormierte Basis mit Basisvektoren, die simultan Eigenvektoren zu A und B sind.

(i)  $|u_i\rangle$  sei EV zu A mit nicht-entartetem EW  $a_i$ .  $B|u_i\rangle$  ist EV zu A

Also proportional zu  $|u_i\rangle$ ; Koeffizient =  $b_i \Rightarrow B|u_i\rangle = b_i|u_i\rangle$

(ii) Sei  $a_i$  m-fach entartet  $\{|u_j^i\rangle, j = 1 \dots m\}$ ;  $A|u_j^i\rangle = a_i|u_j^i\rangle$

orthonormiert  $\langle u_j^i | u_k^i \rangle = \delta_{jk}$ ;  $j, k = 1 \dots m$

$B|u_j^i\rangle$  ist EV zu A

$B|u_j^i\rangle = \sum_{k=1}^m \beta_{jk} |u_k^i\rangle$  ist hermitesch (B hermitesch) und somit diagonalisierbar durch unitäre Transformation.

$$U^{-1}BU = \beta_{diag} = \begin{pmatrix} \beta_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \beta_m \end{pmatrix}$$

Wähle also neue Basis-Vektoren  $|\hat{u}_l^i\rangle = \sum_j U_{lj}^{-1} |u_j^i\rangle$

$|\hat{u}_l^i\rangle$  ist EV zu A mit EW  $a_i$

$$\text{Ist EV zu B mit EW } \beta_l, \text{ denn } \sum_j BU_{lj}^{-1} |u_j^i\rangle = \sum_{j,l'} U_{lj}^{-1} \beta_{jl'} |u_{l'}^i\rangle = \underbrace{\sum_{j,l',n} U_{lj}^{-1} \beta_{jk}}_{(\beta_{diag})_{ln}} \underbrace{(U^{-1})_{nl} |u_{l'}^i\rangle}_{|\hat{u}_n^i\rangle}$$

$$B|\hat{u}_l^i\rangle = \sum_n (\beta_{diag})_{ln} |\hat{u}_n^i\rangle = \beta_l |\hat{u}_l^i\rangle$$

#### Vollständiger Satz kommutierender Observabler (v.S.k.O)

1. Alle Operatoren vertauschen untereinander
2. Angabe der Eigenwerte aller dieser Operatoren reicht aus, um (bis auf einen Faktor) eindeutig einen gemeinsamen Eigenvektor zu bestimmen.  
Bzw: Wenn eine orthonormierte Basis gemeinsamer EV existiert und diese Basis (bis auf einen Faktor) eindeutig ist.

Diese Eigenvektoren sind somit eindeutig durch die EW charakterisiert.

Beispiele:

- Eindimensionale Potentiale:  $\chi$  oder P

$$A, B (a_i, b_i) e^{i\varphi} |\psi\rangle \quad | \quad \langle\psi|\psi\rangle = \mathbb{I}$$

- Dreidimensionale Probleme:  $X, Y, Z$  oder  $P_x, P_y, P_z$  drehinvariantes Potential  $H, L^2, L_z$  (siehe später)

Bemerkungen:

Wenn  $\mathcal{O}$  mit allen Operatoren eines vollständigen Satzes vertauscht, ist er keine Funktion dieser Operatoren.

1-dimensionales  $\mathcal{O}$  vertauscht mit  $X \rightsquigarrow \mathcal{O}$  ist Fkt. von  $X$ .

“ket” (oder auch “bra”) werden oft durch die EW eines vollst. Satzes charakterisiert:

- $|p\rangle$  entspricht der ebenen Welle mit Impuls  $p$
- $|E_o\rangle$  entspricht dem Grundzustand des H-Operators

$|n, l, m\rangle$  entspricht Eigenzustand mit Energie  $\sim n^2$ , Drehimpuls  $L^2 = l \cdot (l+1)\hbar$   
 $L_z = m\hbar$

Wichtige Beispiele:

- Observable Impuls

$$\text{Basis } \underbrace{v_o(\vec{r})}_{|p_o\rangle} = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{i/\hbar p_o \vec{r}} \{ \text{Eigenzustände}, |p_o\rangle \} = \text{Basis}$$

$$\text{orthonormiert: } \langle \vec{p}_0 | \vec{p}'_0 \rangle = \delta(\vec{p}_0 - \vec{p}'_0)$$

$$\text{vollständig: } \int d^3 p_0 |p_o\rangle \langle p_o| = \mathbb{I} \quad |\psi\rangle = \int d^3 p_0 |p_o\rangle \langle p_o | \psi \rangle$$

$$\text{und } \begin{aligned} \langle p_o | \psi \rangle &= \int d^3 r \cdot v_{p_o}^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) \rightsquigarrow \text{Impulsdarstellung:} \\ \langle p_o | \psi \rangle &= \tilde{\psi}(p_0) \end{aligned}$$

- Observable Ort:  $\{ \text{Eigenzustände} | \vec{r}_0 \rangle \} = \text{Basis}$

orthonormiert:

$$\langle \vec{r}_0 | \vec{r}'_0 \rangle = \delta(\vec{r}_0 - \vec{r}'_0)$$

vollständig:

$$\int d^3 r_0 |r_0\rangle \langle r_0| = 1$$

$$|\psi\rangle = \int d^3 r_0 |r_0\rangle \langle r_0 | \psi \rangle$$

Ortsdarstellung:

$$\langle \vec{r}_0 | \psi \rangle = \psi(\vec{r}_0)$$

Im folgenden lassen wir die Indizes "0" weg.

- Observable Energie:

- $\{ \text{Eigenzustände } |E_n\rangle \} = \text{Basis}$   
Energiedarstellung:

$$\langle E_n | \psi \rangle$$

**Funktion eines Operators:  $f(A)$**

- In einer Darstellung, in der A diagonal ist  $\langle i | A | j \rangle = a_i \delta_{ij} = \begin{pmatrix} a_1 & & \\ & \ddots & \\ & & a_n \end{pmatrix}$
- $$\langle i | f(A) | j \rangle = f(a_i) \delta_{ij} = \begin{pmatrix} f(a_1) & & \\ & \ddots & \\ & & f(a_n) \end{pmatrix}$$

- $f(A) = \sum_n c_n A^n$  als Potenzreihe

Beispiel:  $e^{ia \frac{P}{\hbar}}$  P Impulsoperator, a Konstante

$$P | p_0 \rangle = p_0 | p_0 \rangle$$

$$\langle p'_0 | e^{ia \frac{P}{\hbar}} | p_0 \rangle = \langle p'_0 | e^{ia \frac{p_0}{\hbar}} | p_0 \rangle = e^{ia \frac{p_0}{\hbar}} \delta(p_0 - p'_0)$$

$$\langle p'_0 | e^{ia \frac{P}{\hbar}} | \psi \rangle = \int dp' \underbrace{\langle p_0 | e^{ia \frac{P}{\hbar}} | p' \rangle}_{e^{ia \frac{p'}{\hbar}} \delta(p_0 - p')} \underbrace{\langle p' | \psi \rangle}_{\psi(p')} = e^{ia \frac{p_0}{\hbar}} \tilde{\psi}(p_0)$$

In der Ortsdarstellung:  $p = \frac{\hbar \partial}{i \partial x} = \frac{\hbar d}{i dx}$   $e^{ia \frac{P}{\hbar}} = e^{a \frac{d}{dx}} = \sum_n \frac{1}{n!} (a \frac{d}{dx})^n =$

$$\langle x | e^{ia \frac{P}{\hbar}} | \psi \rangle = \int dx' \left\langle x \left| \underbrace{e^{ia \frac{P}{\hbar}}}_{\sum_n \frac{1}{n!} (a \frac{d}{dx})^n} \right| x' \right\rangle \underbrace{\langle x' | \psi \rangle}_{\psi(x')}$$

$$= \int dx' \delta(x - x') \frac{1}{n!} (a \frac{d}{dx'})^n \psi(x') = \sum_n \frac{1}{n!} (a \frac{d}{dx})^n \psi(x) = \psi(x + a)$$

Beispiel: Hamilton- Operator

$H = \frac{p^2}{2m} + V(X)$  mit p als Impulsoperator, X als Ortsoperator

Ortsdarstellung

$$\langle x_0 | p^2 | x'_0 \rangle = \left( \frac{\hbar d}{i dx_0} \right)^2 \delta(x_0 - x'_0) \quad \text{Anm.: } X | x_0 \rangle = x_0 | x_0 \rangle$$

$$\langle x_0 | V(X) | x'_0 \rangle = V(x'_0) \delta(x_0 - x'_0)$$

$$\langle x_0 | H | \psi \rangle = \int dx'_0 \underbrace{\langle x_0 | H | x'_0 \rangle}_{\psi(x'_0)} \langle x'_0 | \psi \rangle = \int dx'_0 \left[ \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar d}{i dx_0} \right)^2 + V(x'_0) \right] \delta(x_0 - x'_0) \psi(x'_0)$$

$$\langle x_0 | H | \psi \rangle = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx_0^2} + V(x_0) \right] \psi(x_0) = E \psi(x_0) \quad \text{Anm.: } H | \psi \rangle = E | \psi \rangle$$

$$\langle x_0 | H | \psi \rangle = E \langle x_0 | \psi \rangle \text{Differentialgleichung}$$

Impulsdarstellung

$$\langle p_0 | P^2 | p'_0 \rangle = (p'_0)^2 \delta(p_0 - p'_0)$$

$$\begin{aligned}
\langle p_0 | V(X) | p'_0 \rangle &= \int dx_1 dx_2 \underbrace{\langle p_0 | x_1 \rangle}_{V_{p_0}^*(x_1)} \underbrace{\langle x_1 | V(X) | x_2 \rangle}_{V(x_2)\delta(x_1-x_2)=\langle x_1 | V(X) | x_2 \rangle} \underbrace{\langle x_2 | p'_0 \rangle}_{V_{p'_0}(x_2)} \\
&= \int dx_1 dx_2 V_{p_0}^*(x_1) V_{p'_0}(x_2) V(x_2) \delta(x_1 - x_2) \\
&= \int dx_1 V_{p_0}^*(x_1) V_{p'_0}(x_1) V(x_1) = \int dx_1 \frac{1}{2\pi\hbar} e^{(i/\hbar)p_0 x_1} e^{-(i/\hbar)p'_0 x_1} V(x_1) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx_1 \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{(i/\hbar)(p_0 - p'_0)x_1} V(x_1) \\
&= \tilde{V}(p_0 - p'_0) / \sqrt{2\pi\hbar} \\
v_{p_0}(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip_0 \frac{x}{\hbar}} \\
\langle p_0 | H | \psi \rangle &= \int dp'_0 \langle p_0 | H | p'_0 \rangle \langle p'_0 | \psi \rangle \\
&= \int dp'_0 \frac{p_0'^2}{2m} \delta(p_0 - p'_0) \langle p'_0 | \psi \rangle + \int \frac{dp'_0}{\sqrt{2\pi\hbar}} \tilde{V}(p_0 - p'_0) \underbrace{\langle p'_0 | \psi \rangle}_{\tilde{\psi}(p'_0)} \\
\langle p_0 | H | \psi \rangle &= \frac{p_0^2}{2m} \tilde{\psi}(p_0) + \int \frac{dp'_0}{\sqrt{2\pi\hbar}} \tilde{V}(p_0 - p'_0) \tilde{\psi}(p'_0) \\
\rightarrow \langle p_0 | H | \psi \rangle &= E \langle p_0 | \psi \rangle \text{ Integralgleichung}
\end{aligned}$$

## 4 Die Grundpostulate der QM

Klassisches System: vollständig charakterisiert durch generalisierte Koordinaten und die zugehörigen konjugierten Impulse  $(q_i(t_0), p_i(t_0))$ ,  $i = 1, 2, 3$

$[p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}]$  Beliebige Zeit:  $q_i(t_0), p_i(t_0)$  + Hamiltongleichungen.

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}; \quad H = H(q_i, p_i, t)$$

### 4.1 Die Postulate (1925/26)

1. P1: Der Zustand eines physikalischen Systems zu einem bestimmten Zeitpunkt  $t_0$  wird durch einen  $ket |\psi(t_0)\rangle \in \mathcal{H}$  definiert
2. P2: Jede messbare physikalische Größe (Ort, Impuls, Energie, ...) wird durch einen im Zustandsraum  $\mathcal{H}$  wirkenden hermiteschen Operator  $A$  beschrieben: "Observable"
3. P3: Die möglichen Messwerte der Observablen  $A$  sind ihre Eigenwerte

Bemerkung:

- $A$  ist hermitesch  $\rightarrow$  Messwerte von  $A$  sind reell
- Falls das Spektrum von  $A$  diskret ist sind die möglichen Resultate bei der Messung von  $A$  quantisiert

4. P4:

- Nicht-entartetes, diskretes Spektrum  
Bei der Messung der physikalischen Größe  $\mathcal{A}$  in einem normierten Zustand  $|\psi\rangle$ : Wahrscheinlichkeit, den nicht entarteten EW  $a_n$  der zugehörigen Observablen  $A$  zu finden gegeben durch:  
 $P(a_n) = |\langle u_n | \psi \rangle|^2$ ;  $[A |u_n\rangle = a_n |u_n\rangle]$
- $g$ -fach entartetes, diskretes Spektrum:  $P(a_n) = \sum_{i=1}^g |\langle u_n^i | \psi \rangle|^2$   
 $g_n$  ist der Entartungsgrad von  $a_n$ ,  
 $\{|u_n^i\rangle\}$  System von orthonormierten Vektoren, bilden im Eigenraum  $\mathcal{H}_n$  zum EW  $a_n$  von  $A$  eine Basis.
- Nicht-entartetes, kontinuierliches Spektrum  
Die Wahrscheinlichkeit dafür, dass die Messung einen Wert zwischen  $\alpha$  und  $\alpha + d\alpha$  liefert ist:  $d \underbrace{P(\alpha)}_{\text{Wahrscheinlichkeitsdichte}} = |\langle V_\alpha | \psi \rangle|^2 d\alpha$ ; *EV der Observablen  $A$  mit EW  $\alpha = V_\alpha$*   
Beispiel:  
–  $d\omega(x) = |\langle x | \psi \rangle|^2 dx = |\psi(x)|^2 dx$   
–  $d\omega(p) = |\langle p | \psi \rangle|^2 dp = |\tilde{\psi}(p)|^2 dp$

5. P5: "Reduktion des Wellenpakets"

Nach der Messung mit Resultat  $a_n$  ist der Zustand des Systems unmittelbar nach der Messung gleich der auf 1 normierten Projektion von  $|\psi\rangle$  auf den zu  $a_n$  gehörenden Eigenraum:  $\psi \Rightarrow \frac{P_n |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | P_n | \psi \rangle}}$ ;  $P_n$  = Projektor auf den Zustand mit EW  $a_n$

$$|\psi\rangle \xrightarrow{a_n} \frac{1}{\underbrace{\sqrt{\sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^i | \psi \rangle|^2}}_{\langle \psi | P_n | \psi \rangle}} \underbrace{\sum_{i=1}^{g_n} |u_n^i\rangle \langle u_n^i | \psi \rangle}_{P_n}$$

- Jede weitere Messung von  $\mathcal{A}$  unmittelbar danach ändert den Zustand nicht mehr und liefert das gleiche Resultat (gleiche EW).
- Sukzessive Messung von Observablen aus einem vollständigen Satz führt auf einen Zustand, der Eigenzustand von allen Operatoren ist. Dieser ist dann eindeutig festgelegt.

6. P6: Zeitliche Entwicklung des Zustandsvektors  $|\psi(t)\rangle$  bestimmt durch die Schrödingergleichung:

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

$H(t)$  - der Gesamtenergie zugeordnete Observable,  
 $H$  = Hamiltonoperator, der aus der klassischen Hamiltonfunktion gewonnen wird.

7. P7: Korrespondenzregeln: Wie die QM Observablen aus den klassischen Größen abgeleitet werden.

Ortsdarstellung:

$$x_i \rightarrow \chi_i$$

$$p_i \rightarrow P_i = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_i}$$

Berücksichtige:

$$[\chi_i, \chi_j] = 0$$

$$[P_i, P_j] = 0$$

$$[P_i, \chi_j] = \frac{\hbar}{i} \delta_{ij}$$

Alle anderen Observablen, die klassisch Funktionen von  $x$  und  $p$  sind, werden durch diese Substitution gewonnen: Korrespondenzprinzip.

Wdh: Korrespondenzregeln

Ortsdarstellung:

$$x_i \rightarrow X_i$$

$$p_i \rightarrow P_i = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_i}; \quad i = 1, 2, 3$$

und

$$[x_i, x_j] = [P_i, P_j] = 0$$

$$[P_i, X_j] = \frac{\hbar}{i} \delta_{ij}$$

Beachte:

- Symmetrisierungsregel:

$$\vec{r}\vec{p} \rightarrow \frac{1}{2}(\vec{R}\vec{P} + \vec{P}\vec{R})$$

$$(\vec{R}\vec{P})^+ = \vec{P}^+ \vec{R}^+ = \vec{P}\vec{R} \neq \vec{R}\vec{P}$$

- nicht alle Größen haben klassisches Analogon (z.B. Spin)

## 4.2 Interpretation der den Messprozess betreffenden Postulate

### Erwartungswerte

(Mittelwert der erhaltenen Ergebnisse, wenn große Anzahl von Messungen dieser Größe an Systemen im Zustand  $|\psi\rangle$  durchgeführt werden).

Einzelne Messung liefert einen der EW  $a_n$  mit Wahrscheinlichkeit:

$$\omega_n = |\langle u_n | \psi \rangle|^2$$

Viele Messungen:

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \sum_n a_n \omega_n = \sum_n \langle \psi | u_n \rangle a_n \langle u_n | \psi \rangle \\ &= \sum_n \langle \psi | A | u_n \rangle \langle u_n | \psi \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle \end{aligned}$$

Der Erwartungswert  $A$  einer Observablen im Zustand  $\psi$  erhält man durch:

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle$$

Falls  $|\psi\rangle$  nicht normiert ist dann:  $\langle A \rangle = \frac{\langle \psi | A | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$

In der Praxis wählt man eine bestimmte Darstellung:

$$\langle X \rangle = \langle \psi | X | \psi \rangle = \int d^3 \underbrace{\langle \psi | \vec{r} \rangle}_{\psi^*(\vec{r})} \underbrace{\langle \vec{r} | X | \psi \rangle}_{x | \psi \rangle} = \int d^3 r \psi^*(\vec{r}) \cdot x \cdot \psi(\vec{r})$$

$$\langle P_x \rangle = \int d^3 p \tilde{\psi}^*(p) \cdot p \cdot \tilde{\psi}(p)$$

**Standardabweichung** (Maß für Unsicherheit der Observablen bei einer Messung im normierten Zustand  $|\psi\rangle$ )

quadratische Abweichung vom Mittelwert:

$$\langle \Delta A \rangle = \sqrt{\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle \psi | (A - \langle A \rangle)^2 | \psi \rangle}$$

$$= (\langle \psi | A^2 | \psi \rangle - (\langle \psi | A | \psi \rangle)^2)^{\frac{1}{2}}$$

$$\text{NR: } \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 - 2A \langle A \rangle + \langle A \rangle^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - 2 \langle A \rangle^2 + \langle A \rangle^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$$

**Die Unschärferelation** Es gelte:  $[Q, P] = i\hbar$

Betrachte:  $|\varphi\rangle = (Q + i\lambda P) |\psi\rangle$

$$0 \leq \langle \varphi | \varphi \rangle = \left\langle \psi \left| \underbrace{(Q - i\lambda P)(Q + i\lambda P)}_{Q^2 + \lambda^2 P^2 + i\lambda \underbrace{[Q, P]}_{i\hbar}} \right| \psi \right\rangle = \langle Q^2 \rangle + \lambda^2 \langle P^2 \rangle$$

$$\text{Wähle } \lambda = \frac{\hbar}{2\langle P^2 \rangle} \Rightarrow \langle Q^2 \rangle + \frac{\hbar^2}{4\langle P^2 \rangle} - \frac{\hbar^2}{2\langle P^2 \rangle} \geq 0 \Leftrightarrow \langle Q^2 \rangle - \frac{\hbar^2}{4\langle P^2 \rangle} \geq 0$$

$$\Leftrightarrow \langle Q^2 \rangle \langle P^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

Dies gilt auch für:

$$Q' = x - \langle \psi | x | \psi \rangle \equiv \Delta x$$

$$P' = p - \langle \psi | p | \psi \rangle \equiv \Delta p$$

$$\underbrace{\langle \psi | (\Delta x)^2 | \psi \rangle}_{\langle \Delta x \rangle^2} \underbrace{\langle \psi | (\Delta p)^2 | \psi \rangle}_{\langle \Delta p \rangle^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

$$\langle \Delta x \rangle \langle \Delta p \rangle \geq \frac{\hbar}{2}$$

**Präparation eines Zustandes und Dichteoperator** Messung einer Observablen  $A \Rightarrow$  Nach der Messung  $|\psi\rangle \in \epsilon$  Eigenraums des gemessenen entarteten Eigenwertes, aber nicht eindeutig bestimmt.

$$(|\psi'_n\rangle = \underbrace{\frac{1}{\sqrt{\sum_i |c_n^i|^2}} \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i |u_n^i\rangle}_{\text{entartet}}) \underbrace{(|\psi'_n\rangle = |u_n\rangle)}_{\text{nicht entartet}}$$

Messung mit vollständigem Satz kontinuierlicher Observablen

$\rightarrow$  nach der Messung Zustand eindeutig bestimmt durch den gemeinsamen Eigenvektor der Observablen

$\Rightarrow$  Präparation des System bei bekanntem Zustand

Nun folgende Situation: Das System befindet sich mit einer Wahrscheinlichkeit  $p_i$  in einem Zustand  $|\psi_i\rangle$ , wobei die Summe der Wahrscheinlichkeiten 1 ergibt:  $\sum_i p_i = 1$  (statistisches Gemisch).

Wir wollen von solch einem statistischen Gemisch den Erwartungswert bestimmen:

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \sum_i p_i \langle \psi_i | A | \psi_i \rangle = \sum_{i,k} p_i \langle \psi_i | A | \phi_k \rangle \langle \phi_k | \psi_i \rangle \\ &= \sum_k \langle \phi_k | \underbrace{\sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|}_{\equiv \text{Dichteoperator } \rho} A | \phi_k \rangle = \text{tr}(\rho A) \end{aligned}$$

Spur eines Operators (Definition:)  $\text{Spur } A = \text{tr } A = \sum_k \langle \phi_k | A | \phi_k \rangle$   
 Ausdruck ist unabhängig von der Orthonormalbasis:

$$\begin{aligned} \sum_k \langle \phi_k | A | \phi_k \rangle &= \sum_{k,m,n} \langle \phi_k | \chi_m \rangle \langle \chi_m | A | \chi_n \rangle \langle \chi_n | \phi_k \rangle \\ &= \sum_{m,n} \langle \chi_m | A | \chi_n \rangle \langle \chi_n | \sum_k |\phi_k\rangle \langle \phi_k| \chi_m \rangle = \sum_k \langle \chi_n | A | \chi_n \rangle \end{aligned}$$

Insbesondere  $\text{Sp } \rho = \sum_{i,k} p_i \langle \varphi_k | \psi_i \rangle \langle \psi_i | \varphi_k \rangle = \sum_i p_i \langle \psi_i | \psi_i \rangle = \sum_i p_i = 1$

**Reiner Zustand**  $\rho = |\psi\rangle \langle \psi|$   $\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$

P5:  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho = \sum_i p_i \{ |\psi\rangle \langle \psi| + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \psi_i | + (i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \psi_i \rangle) \langle \psi_i | \}$  mit  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = H |\psi\rangle$

$$= \sum_i p_i \{ -|\psi_i\rangle \langle \psi_i| H^\dagger + H |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \} \stackrel{\text{mit } H^\dagger = H}{=} -\rho H + H \rho = [H, \rho]$$

### Beispiele:

- Messung eines entarteten Messwerts  $|u_n^i\rangle$   
 Keine Kenntnis des System vor der Messung  $\rightarrow$  alle Zustände im Eigenraum sind gleich wahrscheinlich.  
 (Entartung  $g_n$ )  $\rho = \frac{1}{g_n} \sum_{n=1}^{g_n} |u_n^i\rangle \langle u_n^i|$
- Messung von A ohne Feststellung der Messwerte (A diskretes, nicht entartetes Spektrum)  $\rightarrow$  statistisches Gemisch der Eigenzustände  $|u_i\rangle$  mit  $p_i = |\langle u_i | \psi \rangle|^2$ , wenn das System vor der Messung im Zustand  $|\psi\rangle$  war:  
 $\rho = \sum_i \underbrace{|\langle u_i | \psi \rangle|^2}_{p_i} |u_i\rangle \langle u_i|$
- System im thermodyn. Gleichgewicht:  
 $\rho = Z^{-1} e^{-H/kT}$   $Z = \text{Sp } e^{-H/kT} \rightarrow \text{Sp } \rho = 1$   
 In einer ONB von Eigenzuständen  $|n\rangle$ :  $\langle n | \rho | m \rangle = \delta_{nm} Z^{-1} e^{-E_n/kT}$

$\Rightarrow$  Thermodynamik QM Systeme

## 4.3 Zeitabhängigkeit isolierter quantenmechanischer Systeme

Schrödingergleichung:  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle$

**allgemeine Eigenschaften:**

1. Zeitentwicklung zwischen zwei Messungen ist deterministisch/kausal:  
 $|\psi(t_0)\rangle \rightsquigarrow |\psi(t)\rangle$  eindeutig bestimmt
2. Superpositionsprinzip: Sind  $|\psi_1(t)\rangle, |\psi_2(t)\rangle$  Lösungen zur Anfangsbedingung  $|\psi_1(t_0)\rangle, |\psi_2(t_0)\rangle$ , so ist auch  $\lambda_1|\psi_1(t)\rangle + \lambda_2|\psi_2(t)\rangle$  Lösung zur Anfangsbedingung  $\lambda_1|\psi_1(t_0)\rangle + \lambda_2|\psi_2(t_0)\rangle$
3.  $\hbar \rightarrow 0$ : klassische Mechanik
4. Erhaltung der Norm:  $\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \left( \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \right) |\psi(t)\rangle + \langle \psi(t) | \left( \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle \right)$   
 $= -\frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | H^\dagger(t) | \psi(t) \rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | H(t) | \psi(t) \rangle = 0$

### Zeitentwicklungsoperator

es gibt einen linearen Operator  $U(t, t_0)$ , so dass

$$|\psi(t)\rangle \equiv U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad (*)$$

$$\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t_0) | U^\dagger(t, t_0) U(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle \quad \underbrace{=} \quad \langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle \rightsquigarrow$$

*Erhaltung der Norm*

$$U^\dagger(t, t_0) U(t, t_0) = \mathbb{I}$$

$U(t, t_0)$  ist unitär

**Eigenschaften von  $U(t, t_0)$ :**  $U(t, t_0) = \mathbb{I}$

$$U(t, t_0) = U(t, t_1) U(t_1, t_0)$$

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_1) | \underbrace{\psi(t_1)}_{U(t_1, t_0) |\psi(t_0)\rangle} \rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$$

\* in Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = H(t) U(t, t_0)$$

$$\Rightarrow U(t, t_0) = 1 - \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t') U(t', t_0)$$

### 1. Kontinuitätsgleichung in der Ortsdarstellung

$$\text{mit: } H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{x}, t); \quad \frac{\partial}{\partial t} \psi^* = \frac{H^\dagger}{i\hbar} \psi^*; \quad \frac{\partial}{\partial t} \psi = \frac{H}{i\hbar} \psi$$

$$\frac{\partial}{\partial t} |\langle \vec{x} | \psi(t) \rangle|^2 = \frac{\partial}{\partial t} (\psi^*(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t)) = -\frac{\hbar}{2mi} (\psi^*(\vec{x}, t) \Delta \psi(\vec{x}, t) - \psi(\vec{x}, t) \Delta \psi^*(\vec{x}, t))$$

$$-\vec{\nabla} \cdot \left( \frac{\hbar}{2mi} [\psi^*(\vec{x}, t) \vec{\nabla} \psi(\vec{x}, t) - \psi(\vec{x}, t) \vec{\nabla} \psi^*(\vec{x}, t)] \right)$$

$$\rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{x}, t) + \text{div} \vec{j}(\vec{x}, t) = 0$$

$$\text{Bsp: } \vec{v} = \frac{\vec{p}}{m} = \frac{\hbar \vec{\nabla}}{im}; \quad \psi = A e^{i(\vec{p}\vec{r} - Et)/\hbar}$$

$$\rho = |A|^2 \quad \vec{j} = |A|^2 \frac{\vec{p}}{m}$$

klassisch: Stromdichte = Dichte · Geschwindigkeit

$$\frac{\partial}{\partial t} |\langle \vec{x} | \psi(t) \rangle|^2 = \frac{\partial}{\partial t} |\psi^*(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t)| =$$

$$= \frac{1}{i\hbar} (\psi^*(\vec{x}, t) H \psi(\vec{x}, t) - \psi(\vec{x}, t) H \psi^*(\vec{x}, t))$$

$$= \frac{1}{i\hbar} (\psi^*(\vec{x}, t) V(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t) - \psi(\vec{x}, t) V(\vec{x}, t) \psi^*(\vec{x}, t)) - \frac{\hbar}{2mi} (\psi^*(\vec{x}, t) \dots \text{ (hier$$

muss noch was hin, ist aber nicht so wichtig, hatten wir schon in der letzten Vorlesung)

$$\rightsquigarrow \frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{x}, t) + \text{div} \vec{j}(\vec{x}, t) = 0$$

## 2. Zeitentwicklung von Erwartungswerten

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A \psi \rangle$$

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle_{\psi(t)} = \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | A(t) | \psi(t) \rangle$$

$$= \left\langle \psi(t) \left| \frac{\partial A(t)}{\partial t} \right| \psi(t) \right\rangle + \left( \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \right) A(t) | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | A \left( \frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle \right)$$

$$\left\langle \psi \left| \frac{\partial A}{\partial t} \right| \psi \right\rangle - \frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | H^+ A | \psi \rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | A H | \psi(t) \rangle$$

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle_{\psi(t)} = \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle_{\psi(t)} + \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle_{\psi(t)}$$

**Erhaltungsgröße:** Falls A nicht explizit zeitabhängig ist und mit H kommutiert ist  $\langle A \rangle$  eine Konstante der Bewegung.

Bsp: Wähle speziell  $A = \vec{R}$  Ortsoperator,  $H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{R})$

$$[\vec{R}, H] = \left[ \vec{R}, \frac{\vec{p}^2}{2m} \right] = \frac{i\hbar}{m} \vec{p}$$

$$[\vec{P}, H] = [\vec{P}, V(\vec{R})] = -i\hbar \nabla V(\vec{R})$$

$$(a) [A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$$

$$(b) P, F(x) = \sum_n [P, f_n X^n] = (\text{durch vollst. Ind.}) \sum_n -i\hbar n f_n X^{n-1} = -i\hbar F'(x)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{P} = 0, \quad \frac{\partial}{\partial t} \vec{R} = 0$$

**Ehrenfest'sches Theorem:**

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{R} \rangle (t) = \left\langle \frac{\vec{P}}{m} \right\rangle (t)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{P} \rangle (t) = - \left\langle \vec{\nabla} V(\vec{R}) \right\rangle (t)$$

Analog zu Hamiltongleichungen:  $\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}$ ,  $\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -\frac{\partial V(q)}{\partial q}$

Quasiklassischer Grenzfall:  $\left\langle \vec{\nabla} V(\vec{R}) \right\rangle (t) \simeq \vec{\nabla} V(\vec{r})$

**Konservative Systeme:**

$$\frac{\partial}{\partial t} H = 0, \quad \frac{d}{dt} \langle H \rangle = 0$$

Eigenzustände von H bei  $t = t_0$ :  $H |\psi_n(t_0)\rangle = E_n |\psi_n(t_0)\rangle$

$$\psi(t) = \sum_n c_n(t) |\psi_n(t_0)\rangle$$

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

$$\rightarrow \sum_n i\hbar \left( \frac{d}{dt} c_n(t) \right) |\psi_n(t_0)\rangle = \sum_n c_n(t) E_n |\psi_n(t_0)\rangle$$

$$\rightsquigarrow i\hbar \frac{d}{dt} c_n(t) = E_n c_n(t) \quad \text{DGL zur Bestimmung von } c_n(t)$$

$$c_n(t) = c_n(t_0) e^{-\frac{iE_n(t-t_0)}{\hbar}}$$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t_0) e^{-\frac{iE_n(t-t_0)}{\hbar}} |\psi_n(t_0)\rangle$$

Wichtige Konsequenz: Falls nur ein  $c \neq 0$

$$\langle A \rangle(t) = \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle = \left\langle \psi_n(t_0) e^{i\frac{E_n t}{\hbar}} | A | e^{i\frac{E_n t}{\hbar}} \psi_n(t_0) \right\rangle$$

$$= \langle \psi_n(t_0) | A | \psi_n(t_0) \rangle = \langle A \rangle(t_0)$$

Erwartungswerte ändern sich nicht: "Stationärer Zustand"  $\iff$  scharfe Energie

### 3. Schrödingerbild (Darstellung) und Heisenbergbild der Zeitabhängigkeit

**Schrödingerbild:** Zustände zeitabhängig

$$|\psi(t)\rangle_S = \sum_n e^{-i\frac{E_n(t-t_0)}{\hbar}} c_n(t_0) |\psi_n(t_0)\rangle_S = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle_S$$

$$\text{mit } U(t, t_0) = e^{i\frac{H_S(t-t_0)}{\hbar}} = \sum_n c_n(t_0) |\psi_n(t_0)\rangle_S = |\psi(t_0)\rangle_S$$

Observable  $A_S(t)$

$$\text{Messung: } \langle \psi(t) | A_S(t) | \psi(t) \rangle_S$$

**Heisenbergbild:** Zustände zeitunabhängig

$$|\psi\rangle_H = U^\dagger(t, t_0) \underbrace{|\psi(t)\rangle_S}_{U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle_S} = |\psi(t_0)\rangle_S$$

$$\text{Messung: } \left\langle \underbrace{\psi(t)}_{H < \psi} | \underbrace{U(t, t_0) U^\dagger(t, t_0) A_S(t) U(t, t_0)}_{A_H(t)} \underbrace{U^\dagger(t, t_0) |\psi(t)\rangle_S}_{|\psi\rangle_H} \right\rangle_S$$

$$\text{mit } A_H(t) \equiv U^\dagger(t, t_0) A_S(t) U(t, t_0)$$

$A_H(t)$  auch dann zeitabhängig, wenn  $A_S$  im Schrödingerbild zeitunabhängig ist.

$$\frac{d}{dt} A_H(t) = \frac{d}{dt} (U^\dagger(t, t_0) A_S(t) U(t, t_0))$$

$$= -\frac{1}{i\hbar} U^\dagger(t, t_0) H_S(t) \overbrace{U U^\dagger}^{\cdot} A_S(t) U(t, t_0) + U^\dagger(t, t_0) \frac{\partial}{\partial t} A_S(t) \cdot U(t, t_0) + \frac{1}{i\hbar} U^\dagger(t, t_0) A_S(t) H_S(t) U(t, t_0)$$

$$= -\frac{1}{i\hbar} H_H(t) A_H(t) + \frac{1}{i\hbar} A_H(t) \underbrace{\cdot}_{U U^\dagger} H_H(t) + U^\dagger(t, t_0) \underbrace{\frac{\partial}{\partial t} A_S(t) U(t, t_0)}_{\left(\frac{\partial}{\partial t} A_S(t)\right)_H}$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} A_H(t) = [A_H(t), H_H(t)] + i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} A_S(t)\right)_H$$

## 5 Der harmonische Oszillator

### 5.1 Harmonischer Oszillator in der klassischen Mechanik

Teilchen der Masse  $m$  im Potential  $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$

$$\text{Bewegungsgleichung: } m \frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{dV}{dx} = -kx$$

$$\text{Lösung: } x(t) = x_M \cos(\omega t - \varphi)$$

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}; \quad x_M, \varphi : \text{Anfangsbedingungen}$$

**Gesamtenergie:**  $E = T + V$

kinetische Energie:  $T = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x_M^2 \sin^2(\omega t - \varphi)$

wir hatten :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = H(t)U(t, t_0)$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U^+(t, t_0) = U^+(t, t_0)H(t)$$

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x_H^2 \cos^2(\omega t - \varphi) \Rightarrow E = \frac{1}{2}m\omega^2 x_M^2 = \text{const.}$$

**Bemerkung:** Die potentielle Energie  $U(x)$  vieler physikalischer Systeme hat bei  $x = x_0$  ein Minimum

Entwicklung um  $x = x_0$  (für kleine Schwingungen um  $x_0$ )

$$U(x) = \underbrace{U(x_0)}_{=0} + \underbrace{U'(x_0)}_{=0, \text{ da Min.}} \cdot (x - x_0) + \frac{1}{2} \underbrace{U''(x_0)}_{\geq 0 \equiv m\omega^2 = k} (x - x_0)^2 + \dots$$

### 5.2 Harmonischer Oszillator in der QM

Klassische Größen durch Operatoren ersetzt:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega^2 X^2$$

$$\text{Eigenwertgleichung } H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

im Ortsraum:  $X, P \rightarrow \frac{\hbar d}{i dx} \rightsquigarrow \text{Ortsdarstellung (DGL)}$

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

#### 5.2.1 Analytische Lösung der DGL

Setze  $\hat{x} = x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ ,  $\epsilon = \frac{E}{\hbar\omega}$ ,  $(**) \frac{2}{\hbar\omega} \rightsquigarrow \left[ \frac{d^2}{d\hat{x}^2} - \hat{x}^2 + 2\epsilon \right] \varphi(\hat{x}) = 0 \quad (\Delta)$

Verhalten  $\varphi(\hat{x})$  für große  $\hat{x} (\hat{x}^2 \gg \epsilon) \rightsquigarrow \left( \frac{d^2}{d\hat{x}^2} - \hat{x}^2 \right) \varphi(\hat{x}) = 0$

Ansatz:  $G_{\pm}(\hat{x}) = e^{\pm \frac{\hat{x}^2}{2}}$  unabhängig von  $\epsilon$

$G_{\pm}(\hat{x})$  Lösung für folgende DGL:  $\left[ \frac{d^2}{d\hat{x}^2} - \hat{x}^2 \mp 1 \right] G_{\pm}(\hat{x}) = 0$

$$\left( G''_{\pm}(\hat{x}) = \pm e^{\pm \frac{\hat{x}^2}{2}} + \hat{x}^2 e^{\pm \frac{\hat{x}^2}{2}} \right)$$

asymptotisches Verhalten  $\hat{x} \rightarrow \infty$ :  $\hat{x}^2 \pm 1 \sim \hat{x}^2 - 2\epsilon$

$\rightsquigarrow \left[ \frac{d^2}{d\hat{x}^2} - \hat{x}^2 + 2\epsilon \right] G_{\pm}(\hat{x}) = 0$  Verhalten wie  $(\Delta)$

Normierbarkeit: nur exponentiell abfallende Lösungen

⇒ Ansatz für DGL:  $\varphi(\hat{x}) = h(\hat{x})e^{-\hat{x}^2/2}$

Einsetzen in  $(\Delta)$ :  $\left[\frac{d^2}{d\hat{x}^2} - 2\hat{x}\frac{d}{d\hat{x}} + 2\epsilon - 1\right] h(\hat{x}) = 0$  ( $\Delta\Delta$ )

Lösung mit Potenzreihenansatz für  $h(\hat{x})$ :

$h(\hat{x}) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m x^{2m+p}$  und  $a_0 \neq 0$ ,  $a_i = 0$  für negative  $i$

Diesen Ansatz in  $(\Delta\Delta)$  einsetzen:

$$(2m+p+2)(2m+p+1)a_{2m+2} = (4m+2p-2\epsilon+1)a_{2m}$$

normierte Lösung nur, falls die Potenzreihe abbricht:

nach unten:  $a_{-2} = 0 \Rightarrow p(-1+p)a_0 = 0$  und  $a_0 \neq 0 \rightsquigarrow p = 0, 1$

nach oben:  $\underbrace{4m+2p}_{2n} - 2\epsilon + 1 = 0 \rightsquigarrow$  Bedingung:  $2\epsilon - 1 = 2n$ ;  $n = 0, 1, \dots$

$$\epsilon_n = n + \frac{1}{2}$$

$\epsilon = \frac{E}{\hbar\omega}$ ;  $n = 0$  gerade Lösung

mit dieser Quantisierungsbedingung folgt:

$$\left[\frac{d^2}{d\hat{x}^2} - 2\hat{x}\frac{d}{d\hat{x}} + 2n\right]h_n(\hat{x}) = 0$$

Lösung: Hermite Polynome  $H_n(\hat{x})$ :  $h_n(\hat{x}) = N_n H_n(\hat{x})$

$$N_n = (\sqrt{\pi}n!2^n)^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}$$

$$H_n(\hat{x}) = (-1)^n e^{\hat{x}^2} \frac{d^n}{d\hat{x}^n} e^{-\hat{x}^2}$$

Stationäre Zustände des harmonischen Oszillators:

$$\varphi_n(\hat{x}) = N_n H_n(\hat{x}) e^{-\frac{\hat{x}^2}{2}}$$

zugehörige diskrete Eigenwerte:

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

- $\Delta E = \hbar\omega = \text{const.}$
- $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega = 0$  Nullpunktsenergie; QM kleinste Energie  $\neq 0$

### 5.2.2 Algebraische Methode

Zu lösen Eigenwertgleichung:  $\underbrace{\left[\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right]}_{\text{Hamiltonoperator}} \varphi(x) = E\varphi(x)$

definiere dimensionslose Größen:

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x \quad \hat{p} = \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}p \quad \text{mit } [\hat{x}, \hat{p}] = i$$

$$\hat{H} = \frac{1}{\hbar}H = \frac{1}{2}[\hat{x}^2 + \hat{p}^2] \quad ; \quad \epsilon = E/\hbar\omega$$

$$\text{und } a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} + i\hat{p}) \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} - i\hat{p})$$

$$\hat{x} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger) \quad \hat{p} = \frac{i}{\sqrt{2}}(a^\dagger - a)$$

⇒ dimensionslose Eigenwertgleichung

$$\hat{H}|\varphi_\nu\rangle = \epsilon_\nu|\varphi_\nu\rangle \quad (1)$$

**Es gilt:**

1.  $[a, a^\dagger] = \frac{1}{2} [\hat{x} + i\hat{p}, \hat{x} - i\hat{p}] = \frac{i}{2} [\hat{p}, \hat{x}] - \frac{i}{2} [\hat{x}, \hat{p}] = 1$
2.  $N = a^\dagger a = \frac{1}{2} (\hat{x} + \hat{p}^2 + i\hat{x}\hat{p} - i\hat{p}\hat{x}) = \frac{1}{2} (\hat{x}^2 + \hat{p}^2 - 1)$  wobei N der Besetzungsoperator ist
3.  $\hat{H} = a^\dagger a + \frac{1}{2} = N + \frac{1}{2}$

⇒ Eigenzustände von  $\hat{H}$  sind auch Eigenzustände von N und umgekehrt  
Lösen von 5.2.2 ist äquivalent zur Lösung der Eigenwertgleichung

$$N|\varphi_\nu\rangle = \nu|\varphi_\nu\rangle$$

denn dies entspricht  $H = \hat{H}\hbar\omega = \hbar\omega(N + \frac{1}{2}) \rightsquigarrow H|\varphi_\nu\rangle = \hbar\omega(\nu + \frac{1}{2})|\varphi_\nu\rangle$   
 $|\varphi_\nu\rangle$  sind Eigenvektoren von H und N. Falls  $\nu$  bekannt ist:

$$\epsilon_\nu = \frac{E_0}{\hbar\omega} = \nu + \frac{1}{2}$$

Problem: Bestimmung von  $\nu$  und  $|\varphi_\nu\rangle$

**Eigenschaften von  $N, a, a^\dagger$ :**

1.  $[N, a] = [a^\dagger a, a] = a^\dagger [a, a] + [a^\dagger, a] a = -a$
2.  $[N, a^\dagger] = [a^\dagger a, a^\dagger] = \underbrace{a^\dagger [a, a^\dagger]}_{=1} + \underbrace{[a^\dagger, a^\dagger] a}_{=0} = a^\dagger$

3. Für die EW von  $\nu$  von N gilt:  $\nu \geq 0$ . Denn

$$0 \leq \|\underbrace{a|\varphi_\nu\rangle}_{|a\varphi_\nu\rangle}\|^2 = \left\langle \underbrace{a\varphi_\nu}_{\langle\varphi_\nu|a^+} \right\rangle = \langle\varphi_\nu|a^+a|\varphi_\nu\rangle = \langle\varphi_\nu|N|\varphi_\nu\rangle = \nu \underbrace{\langle\varphi_\nu|\varphi_\nu\rangle}_{\geq 0}$$

$$\nu \geq 0$$

D.h. der niedrigste Eigenwert von N ist  $\geq 0$ . Falls  $\nu = 0 \Rightarrow a|\varphi_0\rangle = 0$

4. Sei  $|\varphi_\nu\rangle$  Eigenzustand zu N mit Eigenwert  $\nu \Rightarrow$   
 $a|\varphi_\nu\rangle$  ist auch Eigenvektro N mit EW  $\nu - 1$   
 $a^+|\varphi_\nu\rangle$  ist auch EV zu N mit EW  $\nu + 1$   
denn  $N a^+|\varphi_\nu\rangle = (a^+ N + a^+)|\varphi_\nu\rangle = \underbrace{(\nu + 1)}_{EW} a^+|\varphi_\nu\rangle$

Verlangen, dass  $|\varphi_\nu\rangle$  auf 1 normiert sei:

$$\begin{aligned}
\langle a^+ \varphi_\nu | a^+ \varphi_\nu \rangle &= \langle \varphi_\nu | a a^+ | \varphi_\nu \rangle = \langle \varphi_\nu | a^+ a + 1 | \varphi_\nu \rangle \\
&= (\nu + 1) \underbrace{\langle \varphi_\nu | \varphi_\nu \rangle}_{=1} = \nu + 1 \\
a^+ | \varphi_\nu \rangle &= \sqrt{\nu + 1} | \varphi_{\nu+1} \rangle \\
N a^+ | \varphi_\nu \rangle &= \sqrt{\nu + 1} N | \varphi_{\nu+1} \rangle = \sqrt{\nu + 1} (\nu + 1) | \varphi_{\nu+1} \rangle \\
&= (\nu + 1) a^+ | \varphi_\nu \rangle
\end{aligned}$$

analog:

$$\begin{aligned}
a | \varphi_\nu \rangle &= \sqrt{\nu} | \varphi_{\nu-1} \rangle \\
&= (\nu + 1) a^\dagger | \varphi_\nu \rangle \text{ analog } a | \varphi_\nu \rangle = \sqrt{\nu} | \varphi_{\nu-1} \rangle
\end{aligned}$$

D.h. falls eine Eigenfunktion  $|\varphi_\nu\rangle$  bekannt ist, erhält man durch sukzessives Anwenden von  $a$  und  $a^\dagger$  alle anderen!

**Bestimmung von  $|\varphi_0\rangle$**  Es gilt:  $a|\varphi_0\rangle = 0$  und somit in der Ortsdarstellung:

$$0 = \langle x | a | \varphi_0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \hat{x} + \frac{d}{d\hat{x}} \right) \underbrace{\langle x | \varphi_0 \rangle}_{\varphi_0(x)} \rightsquigarrow \text{Normierte Lösung:}$$

$$\langle x | \varphi_0 \rangle = N_0 e^{-\hat{x}^2/2} \text{ mit } N_0 = \left( \frac{n\pi}{m\omega} \right)^{1/4}$$

Im folgenden  $\nu \rightarrow n$  mit  $n=0,1,2,\dots$

Wegen  $a^\dagger |\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1} |\varphi_{n+1}\rangle$  bzw.  $|\varphi_{n+1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n+1}} a^\dagger |\varphi_n\rangle$  sind mit  $|\varphi_0\rangle$  auch alle anderen Lösungen bekannt.

$$|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} a^\dagger |\varphi_{n-1}\rangle = \dots = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |\varphi_0\rangle$$

mit EW:  $(n + 1/2) \hbar \omega$   $n=0,1,\dots$

Also angeregte Zustände:

$$\begin{aligned}
\langle \hat{x}, \varphi_n \rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle \hat{x} | (a^\dagger)^n | \varphi_0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{n! 2^n}} \left( \hat{x} - \frac{d}{d\hat{x}} \right)^n \langle \hat{x} | \varphi_0 \rangle \\
\langle x | a^\dagger | \varphi_0 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \hat{x} - \frac{d}{d\hat{x}} \right) \langle x | \varphi_0 \rangle
\end{aligned}$$

Lösung durch Rekursion

$$\langle \hat{x} | \varphi_{n-1} \rangle = \frac{1}{\sqrt{(n-1)! 2^{n-1}}} H_{n-1}(\hat{x}) N_0 e^{-\hat{x}^2/2}$$

Rekursion erfüllt für  $n=1$ :  $\langle \hat{x} | \varphi_0 \rangle = H_0(\hat{x}) N_0 e^{-\hat{x}^2/2}$

$$\text{Damit also } \langle \hat{x} | \varphi_n \rangle = \frac{1}{\sqrt{n! 2^n}} \left( \hat{x} - \frac{d}{d\hat{x}} \right) \langle x | \varphi_{n-1} \rangle$$

$$\frac{1}{\sqrt{(n-1)! 2^{n-1}}} H_{n-1}(\hat{x}) N_0 e^{-\hat{x}^2/2}$$

Verwende:

$$H'_{n-1}(\hat{x}) = 2(n-1) H_{n-2}(\hat{x})$$

$$H_n(\hat{x}) = 2\hat{x} H_{n-1} - 2(n-1) H_{n-2} = 2\hat{x} H_{n-1} - H'_{n-1}(\hat{x})$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{x} | \varphi_n \rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!2^n}} \left( \hat{x} - \frac{d}{d\hat{x}} \right) H_{n-1}(\hat{x}) N_0 e^{-\frac{\hat{x}^2}{2}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left( \hat{x} H_{n-1} - H'_{n-1} - \underbrace{\left( -\frac{2\hat{x}}{2} \right) H_{n-1}}_{+\hat{x}H_{n-1}} \right) N_0 e^{-\frac{\hat{x}^2}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\hat{x}) N_0 e^{-\frac{\hat{x}^2}{2}} \\ &\quad \underbrace{\hspace{10em}}_{2\hat{x}H_{n-1} - H'_{n-1} = (*) H_n(\hat{x})} \end{aligned}$$

Nochmal zu EW:  $|\varphi_n\rangle$  sind EF zu  $N$  mit EW  $n \in \mathbb{N}_0$

Denn gäbe es ein  $\tilde{\nu}$  mit  $n < \tilde{\nu} < n+1 \rightsquigarrow N|\varphi_{\tilde{\nu}}\rangle = \tilde{\nu}|\varphi_{\tilde{\nu}}\rangle$

und damit  $N(a^n|\varphi_{\tilde{\nu}}\rangle) = ([N, a^n] + a^n N)|\varphi_{\tilde{\nu}}\rangle = (\tilde{\nu} - n)a^n|\varphi_{\tilde{\nu}}\rangle$

$N(a^{n+1}|\varphi_{\tilde{\nu}}\rangle) = (\tilde{\nu} - n - 1)a^{n+1}|\varphi_{\tilde{\nu}}\rangle$

### 5.3 Quantenmechanik für Spin 1/2

Postulat:

$$\vec{S} = \begin{pmatrix} S_x \\ S_y \\ S_z \end{pmatrix} \text{ wobei } S_{x,y,z} \text{ Operatoren}$$

Zwei Zustände: Basis so, dass  $S_z$  diagonal ist

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

$$S_z |-\rangle = -\frac{\hbar}{2} |-\rangle$$

In  $\{| \pm \rangle\}$ -Basis Darstellung von  $S_z$ :  $S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

$[S_i, S_j] = i\epsilon_{ijk} S_k$  mit  $i, j, k = 1, 2, 3/x, y, z$

(Motivation: später)

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad S_k = \frac{\hbar}{2} \sigma_k$$

Mit  $\langle + | + \rangle = \langle - | - \rangle = \mathbb{I}$

$\langle + | - \rangle = 0$

Vollständigkeitsrelation:  $|+\rangle\langle +| + |-\rangle\langle -| = 1$

Allgemeiner Zustand im Spinraum:  $|\psi\rangle = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle$

mit  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$  ( $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ )

Zeigen: Zu jedem Zustand  $|\psi\rangle$  existiert eine Richtung  $\vec{\mu}$ , so dass  $|\psi\rangle$  kollinear zu  $|+\rangle_u$

Konstruieren  $\vec{u}$  für gegebenes  $\alpha, \beta$ .

Ansatz:

$$\vec{u} = \begin{pmatrix} \sin\theta \cos\phi \\ \sin\theta \sin\phi \\ \cos\theta \end{pmatrix} \text{ Einheitsvektor}$$

$$S_n = \vec{S} \vec{u} = \begin{pmatrix} S_x \\ S_y \\ S_z \end{pmatrix} \vec{u} = \frac{\hbar}{2} \left[ \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \sin\theta \cos\phi + \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \sin\theta \sin\phi + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \cos\theta \right]$$

$$= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\phi} \\ \sin\theta e^{-i\phi} & -\cos\theta \end{pmatrix}$$

$$\vec{S}\vec{u}|1\rangle_u = \frac{\hbar}{2}|1\rangle_u$$

$$\vec{S}\vec{u}|2\rangle_u = -\frac{\hbar}{2}|2\rangle_u$$

Lösen der Eigenwertgleichung ( $\det(\vec{S}\vec{u} - \lambda\mathbb{I}) = 0$ )

Eigenwerte  $\pm \frac{\hbar}{2}$  und die zugehörigen Eigenvektoren

$$|1\rangle_u = \cos\frac{\theta}{2}e^{-i\frac{\phi}{2}}|+\rangle + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\frac{\phi}{2}}|-\rangle \quad EW : +\frac{\hbar}{2}$$

$$|2\rangle_u = -\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\frac{\phi}{2}}|+\rangle + \cos\frac{\theta}{2}e^{i\frac{\phi}{2}}|-\rangle \quad EW : -\frac{\hbar}{2}$$

Wähle:

$$|\alpha| = \cos\frac{\theta}{2}$$

$$|\beta| = \sin\frac{\theta}{2}$$

$$0 < \theta < \pi \rightsquigarrow \theta = 2\arccos|\alpha|$$

$$\phi = \varphi_\beta - \varphi_\alpha$$

$$\chi = \varphi_\beta + \varphi_\alpha \rightsquigarrow \varphi_\alpha = \frac{1}{2}(\chi - \phi); \varphi_\beta = \frac{1}{2}(\chi + \phi)$$

$$\text{Wobei: } \alpha = |\alpha|e^{i\varphi_\alpha} \quad \beta = |\beta|e^{i\varphi_\beta}$$

$$\rightsquigarrow \text{Lösung: } |\psi\rangle = e^{i\chi/2}|1\rangle_u$$

$$\text{denn } e^{i\chi/2}|1\rangle_u = e^{i(\varphi_\beta + \varphi_\alpha)/2} [|\alpha|e^{-i(\varphi_\beta - \varphi_\alpha)/2}|+\rangle + |\beta|e^{i(\varphi_\beta - \varphi_\alpha)/2}|-\rangle] =$$

$$|\alpha|e^{i\varphi_\alpha}|+\rangle + |\beta|e^{i\varphi_\beta}|-\rangle$$

Es gibt zu jedem Zustand  $|\psi\rangle = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle$  eine Richtung  $\vec{u}$ , so dass  $|\psi\rangle$  Eigenzustand zu  $\vec{S}\vec{u}$  ist.

## 5.4 Teilchen mit Spin 1/2 im konstanten Magnetfeld

Sei  $\vec{B} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B_0 \end{pmatrix} \rightsquigarrow$  potentielle Energie des magnetischen Moments

$$U = -\vec{M}\vec{B} = -\gamma B_0 S_z \Rightarrow H = \omega_0 S_z \text{ mit } \omega_0 \equiv -\gamma B_0 (\text{Frequenz})$$

Zeitliche Entwicklung: Löse EW-Gleichung

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

H=2x2 Matrix in Diagonalform

$$H = \frac{\hbar\omega_0}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\text{Also: } H|+\rangle = \frac{\hbar\omega_0}{2}|+\rangle, H|-\rangle = -\frac{\hbar\omega_0}{2}|-\rangle$$

Zeitliche Entwicklung: t=0 Zustand sei Eigenzustand von  $S_z$

$$|\psi(t=0)\rangle = |+\rangle \Rightarrow |\psi(t)\rangle = e^{-i\omega_0 t/2}|+\rangle$$

$$\text{oder } |-\rangle \Rightarrow |\psi(t)\rangle = e^{i\omega_0 t/2}|-\rangle$$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t_0) e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} |\psi_n(t_0)\rangle$$

hier:  $t_0 = 0$

$$|\psi_n(t_0)\rangle = |+\rangle \rightsquigarrow E = \frac{\hbar\omega_0}{2}$$

$$|\psi_n(t_0)\rangle = |-\rangle \rightsquigarrow E = -\frac{\hbar\omega_0}{2}$$

Ein Eigenzustand von  $S_z$  bleibt Eigenzustand zu  $S_z$  auch bei Anwesenheit eines Magnetfeldes in z-Richtung.

$|\psi(t=0)\rangle$  sei Eigenzustand zu  $\vec{S}\vec{u}$  mit EW  $= \pm \frac{\hbar}{2}$ . Feld zeigt in z- Richtung.

Also zur Zeit  $t=0$ :

$$|\psi(t=0)\rangle = \cos\frac{\theta}{2}e^{-i\frac{\phi}{2}}|+\rangle + \sin\frac{\theta}{2}e^{+i\frac{\phi}{2}}|-\rangle$$

$$\rightsquigarrow |\psi(t)\rangle = \cos\frac{\theta}{2}e^{-i\frac{\phi+\omega_0 t}{2}}|+\rangle + \sin\frac{\theta}{2}e^{+i\frac{\phi+\omega_0 t}{2}}|-\rangle$$

$\Rightarrow$  Zeitliche Änderung der relativen Phase zwischen  $|+\rangle$  und  $|-\rangle$ .

Zu jeder Zeit  $t$  können wir eine Richtung  $\vec{u}(t)$  finden, bezüglich welcher

$|\psi(t)\rangle = \alpha(t)|+\rangle + \beta|-\rangle$  Eigenzustand ist:

$$\vec{u} = \begin{pmatrix} \sin\theta(t)\cos\varphi(t) \\ \sin\theta(t)\sin\varphi(t) \\ \cos\theta(t) \end{pmatrix}$$

$$\alpha(t) = \cos\frac{\theta}{2}e^{-i\frac{\varphi+\omega_0 t}{2}}$$

$$\beta(t) = \sin\frac{\theta}{2}e^{i\frac{\varphi+\omega_0 t}{2}}$$

Es gilt offensichtlich:

$$\theta(t) = \theta(t_0) = \theta$$

$$\varphi(t) = \varphi(t=0) + \omega_0 t$$

D.h. der Winkel zwischen  $\vec{B}$  und  $\vec{u}(\theta)$  bleibt erhalten  $\vec{u}$  präzediert um die z-Achse: Lamor-Präzession ( $\omega_0 = -\gamma B_0$ )

Ferner ist die Observable  $S_z$  eine Konstante der Bewegung:

$$H = \omega_0 S_z \Rightarrow S_z \text{ vertauscht mit } H.$$

$$\frac{d}{dt} \langle S_z \rangle (t) = \frac{1}{i\hbar} \underbrace{\langle [S_z, H] \rangle (t)}_{=0} + \underbrace{\langle \frac{\partial}{\partial t} S_z \rangle (t)}_0 = 0$$

Der Erwartungswert der z-Komponente ist zeitlich konstant. Test:

$$\langle S_z \rangle = \frac{\hbar}{2} \langle \psi(t) | \underbrace{\sigma_z}_{*} | \psi(t) \rangle$$

$$= \frac{\hbar}{2} (\langle + | \cos\frac{\theta}{2} e^{i(\Phi+\omega_0 t)/2} + \langle - | \sin\frac{\theta}{2} e^{-i(\Phi+\omega_0 t)/2} \rangle \cdot \underbrace{\left( \cos\frac{\theta}{2} e^{-i(\Phi+\omega_0 t)/2} |+\rangle - \sin\frac{\theta}{2} e^{i(\Phi+\omega_0 t)/2} |-\rangle \right)}_{=*})$$

$$= \frac{\hbar}{2} (\cos^2\frac{\theta}{2} - \sin^2\frac{\theta}{2}) = \frac{\hbar}{2} \cos\theta \text{ zeitlich konstant}$$

Hingegen sind  $S_x, S_y$  keine Konstanten der Bewegung

$$\langle \psi(t) | S_x | \psi(t) \rangle = \dots = \frac{\hbar}{2} \sin\theta \cos(\Phi + \omega_0 t) \quad S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\langle \psi(t) | S_y | \psi(t) \rangle = \dots = \frac{\hbar}{2} \sin\theta \sin(\Phi + \omega_0 t) \quad S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

Die Erwartungswerte von  $S_x, S_y, S_z$  verhalten sich wie die Komponenten eines klassischen Drehimpulses mit dem Betrag  $\frac{\hbar}{2}$ , der zu einer Lamordrehung angeregt wird.

Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit  $P(t)$  zum Zeitpunkt  $t$  den EW  $\pm \frac{\hbar}{2}$  in  $\vec{u}$ -Richtung zu finden?

$$P_{++}(t) = |\langle \psi(t=0) | \psi(t) \rangle|^2$$

$$\begin{aligned}
&= \left| \left( \overbrace{\left\langle + \left| \cos \frac{\theta}{2} e^{i \frac{\phi}{2}} + \left\langle - \left| \sin \frac{\theta}{2} e^{-i \frac{\phi}{2}} \right. \right\rangle}_{\langle \psi(t=0) |} \right) \left( \overbrace{\left( \cos \frac{\theta}{2} e^{-i \frac{(\psi+\omega_0 t)}{2}} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i \frac{\phi+\omega_0 t}{2}} |-\rangle \right)}_{|\psi(t)\rangle} \right) \right|^2 \\
&= \left| \cos^2 \frac{\theta}{2} e^{-i \frac{\omega_0 t}{2}} + \sin^2 \frac{\theta}{2} e^{i \frac{\omega_0 t}{2}} \right|^2 = \left| \frac{1}{2} (1 + \cos \theta) e^{-i \frac{\omega_0 t}{2}} + \frac{1}{2} (1 - \cos \theta) e^{i \frac{\omega_0 t}{2}} \right|^2 \\
&= \cos^2 \frac{\omega_0 t}{2} + \cos^2 \theta \sin^2 \frac{\omega_0 t}{2} \\
&\text{Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit } -\frac{\hbar}{2} \text{ in } \vec{u}\text{-Richtung zu finden.} \\
&P_{-+}(t) = \dots = \left| \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} e^{i \frac{\omega_0 t}{2}} - \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i \frac{\omega_0 t}{2}} \right|^2 = \sin^2 \theta \sin^2 \frac{\omega_0 t}{2} \\
&\Rightarrow P_{++}(t) + P_{-+}(t) = 1
\end{aligned}$$

## 5.5 Allgemeines Zwei-Zustands-System

Problemstellung:

Betrachten System in einem 2-dimensionalen Zustandsraum.

Die allgemeine hermitesche 2x2 Matrix:

$$H = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix} \quad H_{11}, H_{22} \in \mathbb{R}; H_{12} = H_{21}^*$$

hat 4 reelle Parameter und kann in der Form  $H = A\mathbb{I} + \vec{B}\vec{\sigma}$  geschrieben werden.

$\vec{\sigma}$  Paulimatrizen  $\Rightarrow$  Behandlung in enger Analogie zum Spin- $\frac{1}{2}$ -System

$$\text{Anm.: } \vec{B}\vec{\sigma} = \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \\ B_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \end{pmatrix} = B_1\sigma_1 + B_2\sigma_2 + B_3\sigma_3; \quad B_{1,2,3} \in \mathbb{C}; \quad \sigma_i : 2 \times 2$$

Betrachte zunächst  $H_0$  diagonal mit  $H_0 = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix}$

wähle als Basis  $\{|1\rangle; |2\rangle\}$

Anm.:  $\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$   $i, j = 1, 2$   $|1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2| = 1$

Addiere nun Wechselwirkung zwischen den Zuständen

$$H = H_0 + W$$

mit der hermiteschen Matrix (Annahme:  $W$  zeitunabhängig) (hermitesch) ( $W^\dagger = W$ )

$$W = \begin{pmatrix} W_{11} & W_{12} \\ W_{21} & W_{22} \end{pmatrix} \quad W_{11}, W_{22} \in \mathbb{R} \quad W_{12} = W_{21}^*$$

Ohne Kopplung:

$E_1, E_2$  sind die möglichen Energien des Systems und die Zustände  $|1\rangle, |2\rangle$  stationär

Mit Kopplung:

1. Mögliche Energien sind nicht mehr  $E_1, E_2$  sondern  $E_+, E_-$  sind die Eigenwerte von  $H$

2.  $|1\rangle, |2\rangle$  nicht mehr stationär. Im allgemeinen keine Eigenzustände zu  $H$ . Die Kopplung/ Störung induziert #

### Eigenzustände und $EW$ von $H$

In der Basis  $|1\rangle, |2\rangle$  ist der Hamilton-Operator  $H$  gegeben durch:

$$(H) = \begin{pmatrix} E_1 + W_{11} & W_{12} \\ W_{21} & E_2 + W_{22} \end{pmatrix}$$

Diagonalisierung der Eigenwerte

$$E_{\pm} = \frac{1}{2}(E_1 + W_{11} + E_2 + W_{22}) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22})^2 + 4|W_{12}|^2}$$

$$W_{ij} = 0 \rightsquigarrow E_{\pm} = E_{1/2}$$

Eigenvektoren:

$$|\psi_+\rangle = \cos\frac{\theta}{2}e^{-i\frac{\varphi}{2}}|1\rangle + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\frac{\varphi}{2}}|2\rangle$$

$$|\psi_-\rangle = -\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\frac{\varphi}{2}}|1\rangle + \cos\frac{\theta}{2}e^{i\frac{\varphi}{2}}|2\rangle$$

$$\theta, \varphi: \tan\theta = \frac{2|W_{12}|}{E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22}} \quad \text{wobei } 0 \leq \theta \leq \pi$$

$$W_{12} = |W_{12}|e^{-i\varphi}$$

Vereinfachungen:

- $W_{11}, W_{22}$  tauchen nur in der Kombination  $(E_1 + W_{11}), (E_2 + W_{22})$  auf  $\Rightarrow$  können in  $E_1, E_2$  absorbiert werden.
- Energie-Nullpunkt des Systems beliebig  $\rightsquigarrow$  wähle:  
(bild)  
 $\Rightarrow E_1 = -E_2, E_1 + E_2 = 0, E_1 - E_2 = 2\Delta$   
 $\rightsquigarrow$  neuer Hamilton-Operator:  $\begin{pmatrix} \Delta & W_{12} \\ W_{21} & -\Delta \end{pmatrix} = \Delta\sigma_z + \text{Re}(W_{12})\sigma_x - \text{Im}(W_{12})\sigma_y =$   
 $\begin{pmatrix} \text{Re}(W_{12}) \\ -\text{Im}(W_{12}) \\ \Delta \end{pmatrix} \vec{\sigma}$   
 $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \sigma_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$   
und also:  $E_{\pm} = \pm\sqrt{\Delta^2 + |W_{12}|^2} \quad \tan\theta = \frac{|W_{12}|}{\Delta}$   
Interpretation:  
 $|W_{12}| \ll \Delta:$   
 $E_{\pm} = \pm\left(\Delta + \frac{|W_{12}|^2}{2\Delta}\right)$  kleine Verschiebung der Energie  
 $\Theta = \frac{|W_{12}|}{\Delta} \ll 1$

$|\psi_+\rangle = *|1\rangle +$  kleine Beimischung von  $|2\rangle$  (\* bis auf globale Phase)

$|\psi_-\rangle = *|2\rangle +$  kleine Beimischung von  $|1\rangle$

- $W_{12} \gg \Delta$  (starke Kopplung)

$E_{\pm} = \pm\left(|W_{12}| + \frac{\Delta^2}{2|W_{12}|}\right)$  gilt insbesondere für  $\Delta = 0$

$\Delta = 0 \triangleq$  Entartung der ungestörten Niveaus

$\tan\theta \gg 1 \Rightarrow \theta \approx \frac{\pi}{2}$

$$|\psi_+\rangle \cong \frac{(e^{-i\frac{\phi}{2}}|1\rangle + (e^{-i\frac{\phi}{2}}|1\rangle))}{2}$$

$$|\psi_-\rangle \cong \frac{(-e^{-i\frac{\phi}{2}}|1\rangle + (e^{-i\frac{\phi}{2}}|1\rangle))}{2}$$

(bild)

Ist der Grundzustand eines physikalischen Systems doppelt entartet (und hinreichend weit von den anderen Niveaus entfernt), senkt jede rein nicht-diagonale Kopplung zwischen den beiden zugehörigen Zuständen die Energie dieses Grundzustands ab  $\rightarrow$  er wird also stabiler.

## 6 Drehimpuls

In der klassischen Mechanik ist der Drehimpuls eine Erhaltungsgröße (auch im Zentralpotential:  $\vec{F}||\vec{r} \rightarrow \frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{M} = \vec{r} \times \vec{F} = \vec{0}$ )

Notation:

$\vec{L}$  jeglicher Drehimpuls der klassischen Äquivalent hat

$\vec{S}$  Spin

$\vec{J}$  beliebiger Drehimpuls

### 6.1 Vertauschungsrelationen für den Bahndrehimpuls

klassisch  $\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p} \Leftrightarrow L_i = \epsilon_{ijk} x_j p_k$

d.h.  $L_1 = x_2 p_3 - x_3 p_2, L_2 = x_3 p_1 - x_1 p_3, L_3 = x_1 p_2 - x_2 p_1$

QM:  $\vec{X}, \vec{P}$  Operatoren, die Vertauschungsrelationen gehorchen. Aber  $z$  kommutiert mit  $P_y, Y$  mit  $P_z$  etc.

$\Rightarrow$  Wir können schreiben

$\vec{L} = \vec{X} \times \vec{P}$   $\vec{L}$  ist hermitesch

Anwendung der Vertauschungsrelation:

$[X_i, P_j] = i\hbar \delta_{ij}$   $i, j = 1, 2, 3$  liefert:

$$[L_x, L_y] = [Y P_z - Z P_y, Z P_x - X P_z] = [Y P_z, Z P_x] + [Z P_y, X P_z]$$

$$= Y \underbrace{[P_z, Z]}_{-i\hbar} P_x + X [Z, P_z] P_y = -i\hbar Y P_x + i\hbar X P_y = i\hbar L_z$$

Analoge Rechnung liefert:

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z$$

$$[L_y, L_z] = i\hbar L_x$$

$$[L_x, L_z] = i\hbar L_y$$

$$[L_i, L_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} L_k \quad (*)$$

Die folgende Überlegungen gelten für jeden Satz von Operatoren mit Vertauschungsrelation (\*). Im folgenden:  $J_i, i = 1, 2, 3$

Wir definieren:  $\vec{J}^2 = J_1^2 + J_2^2 + J_3^2$  ist hermitisch, da  $J_1, J_2, J_3$  hermitisch

$$[\vec{J}^2, J_i] = 0, \quad i = 1, 2, 3$$

da z.B.  $[J_1^2, J_2] = 0$

$$[J_2^2, J_1] = J_2[J_2, J_1] + [J_2, J_1]J_2 = J_2(-i\hbar J_3) + (-i\hbar J_3)J_2 = -i\hbar(J_2J_3 + J_3J_2)$$

$$[\vec{J}^2, J_1] = [J_1^2 + J_2^2 + J_3^2, J_1] = 0$$

## 6.2 Eigenwerte und Eigenzustände

Wir suchen vollständigen Satz kommutierender Observablen: dürfen hier nur  $\vec{L}^2$  und eines von  $L_i$  nehmen.

Wir wählen  $\vec{J}^2$  und  $J_3 = J_z$

Definition  $J_{\pm} : J_{\pm} = J_x \pm iJ_y$

(nicht hermitesch)  $J_- = J_x - iJ_y$

Werden  $J_{\pm}, J_z, \vec{J}^2$  benutzen.

Vertauschungsrelation:

$$[J_z, J_{\pm}] = [J_z, J_x] \pm i[J_z, J_y] = i\hbar J_y \pm i(-\hbar J_x) = \hbar J_{\pm}$$

$$[J_z, J_-] = -\hbar J_-$$

$$[J_{\pm}, J_{\pm}] = 2\hbar J_z$$

$$[J^2, J_{\pm}] = 0$$

v.S.k.O (vollständiger Satz kommutierender Observablen):  $H, \vec{L}^2, L_z$

Definition:

$$J_+ = J_x + iJ_y$$

$$J_- = J_x - iJ_y$$

$$[J^2, J_{\pm}] = 0$$

Ferner:

$$J_+J_- = J_x^2 + J_y^2 - i \underbrace{[J_x, J_y]}_{i\hbar J_z} = J_x^2 + J_y^2 + \hbar J_z = J^2 - J_z^2 + \hbar J_z$$

$$J_-J_+ = \dots = J_x^2 + J_y^2 - \hbar J_z = J^2 - J_z^2 - \hbar J_z$$

$$\vec{J}^2 = \frac{1}{2}(J_+J_- + J_-J_+) + J_z^2$$

$\vec{J}^2$  ist die Quadratsumme hermitescher Operatoren.

Es folgt, dass für jeden Zustand  $|\psi\rangle$ :  $\langle\psi|J^2|\psi\rangle \geq 0$

$$\langle\psi|J^2|\psi\rangle = \sum_{i=1}^3 \langle\psi|J_i^2|\psi\rangle = \|J_1|\psi\rangle\|^2 + \|J_2|\psi\rangle\|^2 + \|J_3|\psi\rangle\|^2 \geq 0$$

$\Rightarrow$  Damit sind also alle Eigenwerte  $\lambda$  von  $J^2 \geq 0$ .

Kann man schreiben als  $\lambda = \hbar^2 j(j+1)$  wobei  $j \geq 0$

Eigenwerte  $J_z : m\hbar$

Eigenwertgleichung für  $\vec{J}^2, J_z$

Index  $k$  unterscheidet zwischen den verschiedenen EV, die zu denselben EW  $j(j+1)\hbar^2$  und  $m\hbar$  von  $J^2$  und  $J_z$  gehören.

$\Rightarrow$  Zu lösende EW-Gleichungen:

$$\vec{J}^2|k, j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1)|k, j, m\rangle$$

$$J_z|k, j, m\rangle = \hbar m|k, j, m\rangle$$

Eigenwerte von  $J^2, J_z$ : Zunächst sind 3 Lemmas zu beweisen:

1. Lemma1:

Wenn  $\hbar^2 j(j+1)$  und  $m\hbar$  die EW von  $J^2$  und  $J_z$  sind, die zum selben EV  $|k, j, m\rangle$  gehören, dann gilt:

$$-j \leq m \leq j$$

Beweis:  $\|J_{\pm}|k, l, m\rangle\|^2 \geq 0$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \langle k, j, m | J_- J_+ | k, j, m \rangle &= \langle k, j, m | (J^2 - J_z^2 - \hbar J_z) | k, j, m \rangle \\ &= \hbar j(j+1) - m^2 \hbar^2 - m \hbar^2 \\ \langle k, j, m | J_+ J_- | k, j, m \rangle &= \langle k, j, m | (J^2 - J_z^2 + \hbar J_z) | k, j, m \rangle \\ &= \hbar j(j+1) - m^2 \hbar^2 + m \hbar^2 (*) \\ \Rightarrow j(j+1) - m(m+1) &= (j-m)(j+m+1) \geq 0 \\ \Rightarrow j(j+1) - m(m-1) &= (j-m+1)(j+m) \geq 0 \end{aligned}$$

d.h

$$-j \leq m \leq j \quad \begin{cases} -(j+1) \leq m \leq j \\ -j \leq m \leq j+1 \end{cases}$$

2. Lemma 2:

Sei  $|k, l, m\rangle$  EV von  $J^2, J_z$  mit EW  $\hbar^2 j(j+1), m\hbar$

- (a) Falls  $m = -j$ :  $J_- |k, l, m\rangle = 0$
- (b) Falls  $m > -j$ :  $J_- |k, l, m\rangle$  nicht-verschwindender EV von  $J^2$  und  $J_z$  mit EW  $\hbar^2 j(j+1)$  und  $(m-1)\hbar$

Beweis:

- (a) Gemäß (\*) Quadrat der Norm von  $J_- |k, l, m\rangle$ :  
 $\hbar^2 j(j+1) - \hbar^2 m(m-1) \rightsquigarrow 0$  für  $m = -j$   
 $m = -j \Rightarrow$  Alle Vektoren  $J_- |k, j, -j\rangle = 0$ . ( $\Delta$ )  
 umgekehrt zeigt man:  $J_- |k, j, m\rangle = 0 \Rightarrow m = -j$   
 $J_+$  anwenden auf ( $\Delta$ )  
 $J_+ J_- |k, l, m\rangle \Rightarrow^{(*)} (\hbar j(j+1) - m^2 \hbar^2 + m \hbar^2) |k, j, m\rangle = 0$   
 $\Rightarrow (j > 0) m = -j$
- (b) Sei  $m > -j$ : (\*)  $\Rightarrow J_- |k, j, m\rangle \neq 0$ , da Quadrat der Norm  $\neq 0$   
 zu zeigen: EV von  $J^2, J_z$   
 $[J^2, J_-] = 0 \rightsquigarrow [J^2, J_-] |k, j, m\rangle = 0$   
 $\rightsquigarrow J^2 J_- |k, j, m\rangle = J_- J^2 |k, j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) J_- |k, j, m\rangle$   
 $\Rightarrow J_- |k, j, m\rangle$  ist EV von  $J^2$  mit EW  $\hbar^2 j(j+1)$   
 $[J_z, J_-] = -\hbar J_- \rightsquigarrow [J_z, J_-] |k, j, m\rangle = -\hbar J_- |k, j, m\rangle$   
 $\Rightarrow J_z J_- |k, j, m\rangle = J_- J_z |k, j, m\rangle - \hbar J_- |k, j, m\rangle$   
 $= m \hbar J_- |k, j, m\rangle - \hbar J_- |k, j, m\rangle = (m-1) \hbar J_- |k, j, m\rangle$   
 $\Rightarrow J_- |k, j, m\rangle$  ist EV von  $J_z$  mit  $(m-1)\hbar$ .

3. Lemma 3: Sei  $|k, j, m\rangle$  EV von  $J^2, J_z$  mit EW  $\hbar^2 j(j+1)$  und  $m\hbar$ .

- (a) Falls  $m=j$ :  $J_+ |k, j, m\rangle = 0$
- (b) Falls  $m < j$ :  $J_+ |k, j, m\rangle$  nicht verschwindender EV zu  $J^2$  und  $J_z$  mit EW  $\hbar^2 j(j+1)$  und  $(m+1)\hbar$

$J_{\pm}$  sind Auf- und Absteigeoperatoren bzgl.  $m$ .

Bestimmung des Spektrums von  $J^2$  und  $J_z$ :

Sei  $|k, j, m\rangle$  nicht verschwindender EV von  $J^2$  und  $J_z$  mit EW  $\hbar^2 j(j+1)$  und  $m\hbar$ :

Laut Lemma 1 gilt:

Es gibt ein  $p \geq 0$ , so dass  $-j \leq m - p \leq -j + 1$ .

Wir betrachten Set von EV  $|k, j, m\rangle, J_-|k, j, m\rangle, \dots, J_-^p|k, j, m\rangle$

Laut Lemma 2 gilt:

Jeder dieser EV  $(J_-)^n|k, j, m\rangle$  ( $n = 0, 1, \dots, p$ )

ist nicht-verschwindender EV von  $J^2$  und  $J_z$  mit EW  $j(j+1)\hbar^2$ .

(Beweis durch Iteration)

Wirke nun  $J_-$  auf  $(J_-)^p|k, j, m\rangle$

Annahme: EW von  $J_z$ :  $\hbar(m-p)$  sei größer als  $-j\hbar$ .

D.h.  $m-p > -j$

Dann ist  $J_-(J_-)^p|k, j, m\rangle \neq 0$  mit EW  $\hbar^2 j(j+1)$ ,  $(m-p-1)\hbar$ :

Widerspruch zu Lemma 1, denn es gilt:  $m-p-1 < -j$

$\Rightarrow m-p = -j$ .

Dann gehört  $(J_-)^p|k, j, m\rangle$  zum EW  $-j\hbar$  von  $J_z$

und  $J_-(J_-)^p|k, j, m\rangle = 0$ . (Lemma 2)

$\Rightarrow$  Die obige Serie der Vektoren ist also beschränkt.

Es wurde gezeigt: Es gibt ein  $p \geq 0$  mit  $m-p = -j$ ,  $p$  ist ganzzahlig.

Analog findet man, dass es ein ganzzahliges  $q \geq 0$  gibt, mit  $m+q = j$   
Insgesamt findet man, dass  $p+q = 2j$ , d.h.  $j$  ist ganz- oder halbzahlig und positiv.

Für gegebenes  $j$  sind die einzig möglichen Werte für  $m$  die  $(2j+1)$  Werte:

$-j, -j+1, \dots, +j$ .  $m$  ist daher halb- oder ganzzahlig.

Konstruktion einer Basis

I.a. sind  $J^2, J_z$  nicht v.S.k.O ( $\rightsquigarrow$  Index  $k$ )

Wir betrachten Drehimpuls  $\vec{J}$ , der im Zustandsraum ewirkt.

EW-Paar:  $j(j+1)\hbar^2, m\hbar$ : Set der EV zu diesem EW-Paar bildet einen Vektorunterraum von  $\epsilon$ , genannt  $\epsilon(j, m)$ ,  $\dim(\epsilon(j, m)) \equiv g(j, m)$

i.a.  $> 1$ , da  $J^2, J_z$  nicht v.S.k.O.

Wähle in  $\epsilon(j, m)$  eine beliebige ONB  $\{|k, j, m\rangle, k = 1, \dots, g(j, m)\}$

Falls  $m \neq j \Rightarrow$  es muss einen anderen Unterraum  $\epsilon(j, m+q)$  in  $\epsilon$  existieren,

bestehend aus EV zu  $\vec{J}, J_z$  mit EW  $j(j+1)\hbar^2, (m+1)\hbar$

Falls  $m \neq -j \Rightarrow \exists \epsilon(j, m-1)$ , EV zu  $J^2, J_z$  mit EW  $(j+1)j\hbar^2, (m-1)\hbar$ .

Falls  $m \neq \pm j$ : konstruieren ONB  $\epsilon(j, m+1), \epsilon(j, m-1)$  ausgehend von der in  $\epsilon(j, m)$  gewählten.

Zeigen zunächst:  $k_1 \neq k_2 \Rightarrow J_{\pm}|k, j, m\rangle \perp J_{\pm}|k_2, j, m\rangle$  denn

$$\begin{aligned} \langle k_2, j, m | J_{\pm} | k_1, j, m \rangle &= \langle k_2, j, m | (J^2 - J_z^2 - \hbar J_z) | k_1, j, m \rangle \\ &= (\hbar^2 j(j+1) - m^2 \hbar^2 - \hbar^2 m) \langle k_2, j, m | k_1, j, m \rangle = 0 \end{aligned}$$

Wir haben  $\frac{\|J_{\pm}|k_1, j, m\rangle\|^2}{\| |k_1, j, m\rangle \|^2} = [j(j+1) - m(m \pm 1)] \hbar^2 \underbrace{\langle k_1, j, m | k_1, j, m \rangle}_1$

Man zeigt, dass  $|k, j, m \pm 1\rangle = \frac{1}{\hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}} J_{\pm} |j, k, m\rangle$

ONB in  $\epsilon(j, m \pm 1)$  bilden.

Man sieht ferner:  $g(j, m+1) = g(j, m-1) = g(j, m) = g(j)$  unabhängig von  $m$ .

### Konstruktion einer Basis

1. Für jeden Wert von  $j$  wähle einen zu  $j$  gehörigen Unterraum, z.B. den,  $m=j$ , d.h.  $\epsilon(j, j)$ .
2. Wähle hierin beliebige ONB  $\{|k, j, j\rangle, k = 1, \dots, g(j)\}$
3. Mit  $|k, j, m \pm 1\rangle = \frac{1}{\hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}} J_{\pm} |j, k, m\rangle$  konstruiere durch Iteration die Basis, aus der sich die Basen der  $2j$  anderen Unterräume  $\epsilon(j, m)$  ergeben.
4. Führe dies für alle  $j$  aus.

Standardbasis des Zustandraum  $\epsilon$  mit der

Orthonormierungsrelation  $\langle k, j, m | k', j', m' \rangle = \delta_{kk'} \delta_{jj'} \delta_{mm'}$

Vollständigkeitsrelation:  $\sum_j \sum_{k=1}^{g(j)} |k, j, m\rangle \langle k, j, m| = 1$

$\epsilon(j, m = j)$	$ 1, j, j\rangle \dots  g(j), j, j\rangle$
$\downarrow J_-$	$\downarrow J_- \quad \downarrow J_-$
$\epsilon(j, m = j - 1)$	$ 1, j, j - 1\rangle \dots  g(j), j, j - 1\rangle$
	$\downarrow J_- \quad \downarrow J_-$
	$ 1, j, -j\rangle \dots  g(j), j, -j\rangle$

**Darstellung der Drehimpulsoperator** Im folgenden verwenden wir die Räume  $\epsilon(k, j)$ , d.h. wir gruppieren Kets  $|k, j, m\rangle$  mit festen Werten  $k$  und  $j$ .

- $\dim \epsilon(k, j) = 2j + 1$  unabh. von  $k$  und vom betrachteten physikal. System

- $\epsilon(k, j)$  global invariant unter  $\vec{J}$

Suchen nun Matrix, die in einer "Standardbasis" die Komponente  $J_U$  von  $\vec{J}$  darstellt.

$$\begin{aligned} \text{Nützen hierfür: } J_z |k, j, m\rangle &= \hbar m |k, j, m\rangle \\ J_{\pm} |k, j, m\rangle &= \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |k, j, m \pm 1\rangle \\ \Rightarrow \langle k, j, m | J_z |k', j', m'\rangle &= \hbar \delta_{kk'} \delta_{jj'} \delta_{mm'} \end{aligned}$$

$$\langle k, j, m | J_{\pm} |k', j', m'\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} \delta_{kk'} \delta_{jj'} \delta_{m(m' \pm 1)}$$

### Beispiele:

1.  $j=0, m=0$   $J_n^{(0)}$  reduzieren sich Zahlen = 0

$$2. j = \frac{1}{2}, \quad \underbrace{m = +\frac{1}{2}, m = -\frac{1}{2}}$$

wählen Basisvektoren in dieser Reihenfolge

$$J_z^{(1/2)} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \text{ und}$$

$$J_+^{(1/2)} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \hbar = \sqrt{\frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} - (-\frac{1}{2})(-\frac{1}{2} + 1)}$$

$$J_-^{(1/2)} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$J_{\pm} = J_x \pm i J_y$$

$$\Rightarrow J_x^{(1/2)} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow J_y^{(1/2)} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

3.  $J = 1$  ( $m = \pm 1, 0, -1$ )

$$J_z^{(1)} = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \leftarrow \delta_{1,0,+1} = \delta_{11}$$

$$J_-^{(1)} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow J_x^{(1)} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_y^{(1)} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

## 7 Bahndrehimpuls in Polarkoordinaten

### 7.1 EW-Gleichung in der Ortsdarstellung $|\vec{r}\rangle$

$\vec{X}, \vec{P}$ - Operator in Ortstarstellung:

- Multiplikation mit  $\vec{X}$
- Differentialoperator  $\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$

$$\begin{aligned} L_x &= \frac{\hbar}{i}(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}) \\ L_y &= \frac{\hbar}{i}(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}) \\ L_z &= \frac{\hbar}{i}(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}) \end{aligned}$$

Die Drehimpulsoperatoren wirken nur auf  $\theta, \Phi$  nicht auf  $r \rightsquigarrow$  Übergang zu Kugelkoordinaten

$$\text{mit } r \geq 0; 0 \leq \theta \leq \pi; 0 \leq \Phi \leq 2\pi \quad \begin{cases} x = r \cdot \sin \theta \cdot \cos \Phi \\ y = r \cdot \sin \theta \cdot \sin \Phi \\ z = r \cdot \cos \theta \end{cases}$$

und  $d^3r = r^2 \sin \theta \cdot dr \cdot d\Phi \cdot d\theta = r^2 d\Omega dr$

$$\begin{aligned} \Rightarrow L_x &= i\hbar \left( \sin \Phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \Phi}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \Phi} \right) \\ L_y &= i\hbar \left( -\cos \Phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\sin \Phi}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \Phi} \right) \\ L_z &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \Phi} \end{aligned}$$

$$\text{so dass } \vec{L}^2 = -\hbar^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \Phi^2} \right)$$

$$L_+ = \hbar e^{i\Phi} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \Phi} \right) \quad (\Delta)$$

$$L_- = \hbar e^{-i\Phi} \left( -\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \Phi} \right)$$

Wir suchen Funktionen  $\psi(r, \theta, \Phi)$ , die die EW-gleichungen erfüllen:

$$-\hbar^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \Phi^2} \right) \psi(r, \theta, \Phi) = \hbar^2 l \cdot (l+1) \psi(r, \theta, \Phi)$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \Phi} \psi(r, \theta, \Phi) = m\hbar \psi(r, \theta, \Phi)$$

Da  $r$  nicht im Differentialoperator auftritt, sei  $Y_l^m(\theta, \phi)$  gemeinsame Eigenfunktion zur  $\vec{L}^2, L_z$  mit EW  $\hbar^2 l(l+1)$  und  $m\hbar$ :

$$\vec{L}^2 Y_l^m(\theta, \phi) = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\theta, \phi)$$

$$(*) \underbrace{L_z}_{-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}} Y_l^m(\theta, \phi) = m\hbar Y_l^m(\theta, \phi)$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$

mit  $\psi(r, \theta, \phi) = f(r) \cdot Y_l^m(\theta, \phi)$  für beliebige Fkt.

$$(*) \rightsquigarrow \text{Separationsansatz: } Y_l^m(\theta, \phi) = F_l^m(\theta) \Phi_m(\phi)$$

$$\Phi_m(\phi) = e^{im\phi} \quad (**) \rightsquigarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \Phi_m(\phi) = m\hbar \Phi_m(\phi)$$

Da  $\phi \in [0, 2\pi]$  und  $\psi(r, \theta, \psi)$  stetig sein muss, muss  $e^{im2\pi} = 1$  und  $m, l$  ganzzahlig.

$$\text{Es gilt } L_+ Y_l^l(\theta, \phi) = 0$$

$$\text{Aus } (\Delta) \text{ und } Y_l^m(\theta, \phi) = F_l^m(\theta) e^{im\phi}$$

$$\Rightarrow \left( \frac{d}{d\theta} - l \cot \theta \right) F_l^l(\theta) = 0 \rightarrow F_l^l(\theta) = c_l (\sin \theta)^l$$

$$\left[ c_l \frac{\cos \theta}{\sin \theta} l (\sin \theta)^{l-1} \sin \theta - l \cot \theta = 0 \right]$$

$c_l$  aus Normierungsbedingung  $\rightsquigarrow$  Für jedes  $(\geq 0 \exists Y_l^l(\theta, \Phi))$   
 mit  $Y_l^l(\theta, \Phi) = c_l \cdot (\sin \theta)^l e^{im\Phi}$   
 Wiederholtes Anwenden von L  $\rightsquigarrow Y_l^{l-1}, Y_l^{l-2}, \dots, Y_l^{-l}$   
 (zu jedem Paar  $(l, m)$  nur eine Eigenfunktion)  
 Normierung:

$$\begin{aligned}
 \int d\Omega |Y_l^m(\theta, \Phi)|^2 &= \int_0^{2\pi} d\Phi \int_0^\pi \sin \theta d\theta |Y_l^m(\theta, \Phi)|^2 = 1 \\
 &\rightsquigarrow 2\pi \int \theta |F_l^m(\theta)|^2 \sin \theta = 1 \\
 &\int_0^\infty = r^2 |f(r)|^2 dr = 1 \\
 \Rightarrow c_l &= \frac{(-1)^l}{2^l l!} \cdot \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}
 \end{aligned}$$

Und schließlich noch längerer Rechnung: Kugelflächenfunktionen

$$Y_l^m(\theta, \Phi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi} \cdot \frac{(l+m)!}{(l-m)!}} e^{im\Phi} (\sin \theta)^{-m} \frac{d^{l-m}}{(d \cos \theta)^{l-m}} (\sin \theta)^{2l}$$

Alternative Form

$$Y_l^m(\theta, \Phi) = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi} \cdot \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} \cdot P_l^{|m|}(\cos \theta) \cdot e^{im\Phi}$$

$P_l^m$  = assoziierte Légendre Polynome:

$$P_l^m(u) = (1-u^2)^{m/2} \frac{d^m}{du^m} P_l(u)$$

$$P_l^0(u) \equiv P_l(u)$$

$$P_l(u) = \frac{(-1)^l}{d^l l!} \frac{d^l}{du^l} (1-u^2)^l$$

Struktur von  $Y_l^m(\theta, \phi)$ :  $P_l^m(u)$  = Polynom  $l$ -ten Grades in  $m$ ;

$$l : \left\{ \begin{array}{l} gerade \\ ungerade \end{array} \right\} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} gerade \\ ungerade \end{array} \right\} \text{ Potenz}$$

$$Y_l^{-m} = (-1)^m (Y_l^m)^*$$

**Beispiele:**  $Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$$

$$Y_1^1 = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\Phi}$$

$$Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$$

$$Y_2^1 = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{i\Phi}$$

$$Y_2^2 = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta \cdot e^{2i\Phi}$$

Verhalten unter Parität:  $\vec{x} \rightarrow -\vec{x}$

d.h.  $r \rightarrow r, \theta \rightarrow \pi - \theta, \Phi \rightarrow \Phi + \pi$

$$Y_l^m(\pi - \theta, \pi + \theta) = (-1)^l Y_l^m(\theta, \Phi)$$

Orthogonalität:  $\int d\Omega Y_l^m(\theta, \Phi) Y_{l'}^{m'*}(\theta, \Phi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$

Vollständigkeit:  $\sum_{l,m} Y_l^m(\theta, \Phi) Y_l^m(\theta', \Phi') = \delta(\cos \theta - \cos \theta') \delta(\Phi - \Phi')$

Zusammenhang mit ket:

$$Y_l^m(\theta, \Phi) = \langle \theta, \phi | l, m \rangle$$

## 7.2 Drehimpuls als Erzeugender (Generator) von Dehnungen

In Polarkoordinaten  $L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \Phi}$

$$\left(1 + \frac{i}{\hbar} \alpha L_z\right) f(\theta, \Phi) = \left(1 + \alpha \frac{\partial}{\partial \Phi}\right) f(\theta, \Phi + \alpha) \quad \alpha \ll 1$$

Für endliche  $\alpha$  (und analytische  $f$ ):

$$\underbrace{e^{i\alpha L_z/\hbar}}_{e^{\alpha \partial/\partial \Phi}} f(\theta, \Phi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\alpha \frac{\partial}{\partial \Phi}\right)^n f(\theta, \Phi) = f(\theta, \Phi + \alpha)$$

Allgemein:

$$e^{i\vec{\varphi} \vec{L}/\hbar} \psi(\vec{x}) = \psi(\vec{x}')$$

wobei  $\vec{X}'$  aus  $\vec{X}$  durch eine Drehung um Richtung  $\frac{\vec{\varphi}}{|\vec{\varphi}|}$  um den Betrag  $|\vec{\varphi}|$  hervorgeht.

## 7.3 Integrale der Bewegung und Symmetrieeigenschaften

A ist Integral der Bewegung sind alle Erwartungswerte zeitlich konstant.

$$\left[\frac{d}{dt} \langle A \rangle(t) = \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle(t) + \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle\right]$$

Falls  $\frac{\partial A}{\partial t} = 0$  und  $[A, H] = 0$  ist A Integral der Bewegung/ Erhaltungsgröße

Wir betrachten räumliche Verschiebungen oder Drehungen des QM Systems.

Betrachten Ortsvektor der Teilchen.

$$\text{Bsp. für Drehungen: } \vec{X} \rightarrow \vec{X}' = S \vec{X} \quad \vec{X} = S^{-1} \vec{X}'(\Delta)$$

$$\psi'(x') = \psi(x) \quad (*) \text{ bestimmt } \psi'$$

Suchen Operator  $R_s$ , so dass

$$\psi'(\vec{x}') = R_s \psi(\vec{x})$$

$$(*) \rightarrow \psi(\vec{x}) = R_s \psi(\vec{x}')$$

$$(\Delta) \rightarrow \psi(S^{-1} \vec{X}') = R_s \psi(\vec{x}') \quad \forall \vec{x}'$$

$$\Rightarrow \psi(S^{-1} \vec{X}) = R_s \psi(\vec{x})$$

1. Homogenität des Raumes: Eigenschaften eines abgeschlossenen Systems bei Parallelverschiebungen ungeändert  $\Leftrightarrow H$  bei Verschiebungen ungeändert.

Verschiebung:  $\vec{X} \rightarrow \vec{X}' = \vec{X} + \delta\vec{a} \quad \delta\vec{a} \ll 1$

$$\Rightarrow R_{\text{Verschiebung}}\psi(\vec{x}) = \psi(\vec{x} - \delta\vec{a}) = \left(1 - (\delta\vec{a}) \cdot \vec{\nabla}\right) \psi(\vec{x}) = \left(1 - \frac{i}{\hbar} \delta\vec{a} \cdot \underbrace{\frac{\hbar \vec{\nabla}}{i}}_{\vec{p}}\right) \psi(\vec{x})$$

Invarianz von  $H$ :

$$\begin{aligned} \underbrace{\langle \psi' | H | \psi' \rangle}_{\langle H \rangle'} &= \langle \psi | R_v^\dagger H R_v | \psi \rangle \quad \psi' = R_v \psi \\ &= \langle \psi | H | \psi \rangle \quad \forall |\psi\rangle \\ &\Rightarrow H = R_s^\dagger H R_s \end{aligned}$$

infinitesimale Translation:  $R_{\delta\vec{a}} = \left(1 - \frac{i}{\hbar} \delta\vec{a} \cdot \vec{p}\right)$

$$\begin{aligned} \rightsquigarrow R_{\delta\vec{a}}^\dagger H R_{\delta\vec{a}} &= \left(1 + \frac{i}{\hbar} \delta\vec{a} \cdot \vec{p}\right) H \left(1 - \frac{i}{\hbar} \delta\vec{a} \cdot \vec{p}\right) \\ &= H + \frac{i}{\hbar} \delta\vec{a} \cdot [\vec{p}, H] + \sigma(\delta\vec{a}^2) = H \end{aligned}$$

$\Rightarrow$  Invarianz unter Verschiebung  $\Rightarrow [H, \vec{p}] = 0$

2. Isotropie des Raumes: Invarianz unter Drehungen

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \langle \psi | R_D^\dagger H R_D | \psi \rangle$$

infinitesimal:  $R_D = 1 - \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\varphi} \cdot \vec{L} \Rightarrow [H, \vec{L}] = \vec{0}$

Wenn  $\vec{L}$  Erhaltungsgröße dann folgt Isotropie des Raumes

3. Homogenität der Zeit:

$$\frac{\partial H}{\partial t} = 0 \text{ ist nicht explizit zeitabhängig}$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} \langle H \rangle = \left\langle \frac{d}{dt} H \right\rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle [H, H] \rangle = 0$$

d.h.  $\frac{d}{dt} \langle \psi | H | \psi \rangle = 0$   $H$  Konstante der Bewegung  $\Rightarrow$  Energieerhaltung

4. Allgemein

unitärer Operator:  $U_\alpha = e^{-i\alpha/\hbar \cdot A}$

Wenn für alle Zustände  $|\psi\rangle$ :  $\langle \psi | H | \psi \rangle = \langle \psi | U_\alpha^\dagger H U_\alpha | \psi \rangle$

also  $H = U_\alpha^\dagger H U_\alpha \Rightarrow [H, A] = 0$

Und wenn  $\frac{\partial A}{\partial t} = 0$ :

- U bewirkt Symmetrietransformation
- A Generator  $(\vec{P}, \vec{L}, \dots)$
- $\frac{d}{dt} \langle \psi | A | \psi \rangle = 0$

Gilt auch für innere Symmetrien (Isospin)

**Satz (Noether):**

Ist U eine Symmetrietransformation, A eine Observable, H der zeitunabhängige Hamiltonoperator, dann ist die A zugeordnete physikalische Größe eine Erhaltungsgröße, d.h.

1.  $\langle A \rangle = const.$  (erhaltener Erwartungswert)
2. Ist das System einmal in einem Eigenzustand von A, bleibt es ohne äußere Einwirkung in diesem
3. Die Wahrscheinlichkeit, einen bestimmten Eigenwert von A in einem beliebigen Zustand  $|\psi\rangle$  zu messen, ist zeitunabhängig.

## 7.4 Rotation eines zweiatomigen Moleküls

### 7.4.1 Qualitative Betrachtung

Einfachstes Beispiel:  $H_2$   $2e^-$ , 2 Kerne

(bild)

adiabatische Näherung:

Für kleine Änderungen des Kernabstandes kann die Wirkung durch ein Potential  $\sim (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$  beschrieben werden  $\Rightarrow$  harmonischer OZ

(bild)

Betrachten hier Drehungen um Massenmittelpunkt  $\rightarrow$  Rotationsanregung

### 7.4.2 Starrer Rotator

1. klassisch (bild)

im Schwerpunktsystem:  $m_1 r_1 = m_2 r_2$

$$\frac{r_1}{m_2} = \frac{r_2}{m_1} = \frac{r_1 + r_2}{m_1 m_2} = \frac{r}{m_1 m_2}$$

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \text{ reduzierte Masse } \mu \equiv r_1 + r_2$$

$$\text{Trägheitsmoment bezüglich } O_s : I = m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2 = \frac{1}{(m_1 + m_2)^2} [m_1 m_2^2 + m_2 m_1^2] r^2$$

Drehung um feste Achse  $\frac{\vec{L}}{I}$  mit einer Winkelgeschwindigkeit  $\omega_R$

$$|\vec{L}| = I \omega_R$$

$$\text{Energie: } H = \frac{1}{2} I \omega_R^2 = \frac{\vec{L}^2}{2I}$$

im Ruhesystem des Massenmittelpunktes nur kinetische Rotationsenergie)

## 2. Quantisierung

Verallgemeinerte Koordinaten:  $\theta, \varphi \triangleq$  Richtung von  $\vec{r}$

Wellenfunktion:  $\psi(\theta, \varphi) = \langle \theta, \varphi | \psi \rangle$ ,  $\int |\psi|^2 d\Omega = 1$

$H = \frac{\vec{L}^2}{2I}$  (Operator)

$$\langle \theta, \varphi | H | \psi \rangle = -\frac{\hbar^2}{2I} \left[ \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \psi(\theta, \varphi)$$

Eigenfunktionen:  $Y_m^l(\theta, \varphi) = \langle \theta, \varphi | lm \rangle$ ,  $H |l, m \rangle = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2I} |l, m \rangle$   
vorlesung 11.juni

### 1. Quantisierung

$$H = \frac{\vec{L}^2}{2I}$$

Eigenfunktionen:  $Y_m^l(\theta, \varphi) = \langle \theta, \varphi | lm \rangle$

$$H |lm \rangle = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2I} |lm \rangle$$

Konvention:  $B = \frac{\hbar}{4\pi I}$  "Rotationskonstante" Einheit [ $s^{-1}$ ]

$$E_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I} = Bh l(l+1)$$

Niveaus:  $E_l - E_{l-1} = Bh 2l$

### 2. Interpretation

Implikation für EM Übergänge: Kopplung an Dipolübergangsmoment

$$\left\langle l'm' \left| \underbrace{Z}_{r \cos \theta} \right| lm \right\rangle = r \delta_{mm'} \left[ \delta_{l', l-1} \sqrt{\frac{l^2 - m^2}{4l^2 - 1}} + \delta_{l', l+1} \sqrt{\frac{(l+1)^2 - m^2}{4(l+1)^2 - m^2}} \right]$$

$$\cos \theta \cdot Y_l^m(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{l^2 - m^2}{4l^2 - 1}} Y_{l-1}^m(\theta, \varphi) + \sqrt{\frac{(l+1)^2 - m^2}{4(l+1)^2 - m^2}} Y_{l+1}^m(\theta, \varphi)$$

(a) Übergänge nur zwischen benachbarten Niveaus. Auswahlregeln:

$$\Delta m = 0, \Delta l = \pm 1$$

$$\langle X \rangle : \Delta l = \pm 1, \Delta m = \pm 1$$

$$\langle Y \rangle : \Delta l = \pm 1$$

(b) Photonfrequenz:  $(E_l - E_{l-1})/\hbar = 2Bl = \nu_{l, l-1}$

## 8 Zentralpotentiale/Wasserstoffatom

### 8.1 Hamiltonoperator: Zentralpotential, d.h. $V(\vec{r}) \rightarrow V(r)$

1. klassisch: Kraft auf klass. Teilchen:  $\vec{F} = -\vec{\nabla} V(r) = -\frac{dV}{dr} \cdot \frac{\vec{r}}{r}$

Kraft zeigt in Richtung Ursprung  $0 \rightsquigarrow d\vec{U} = \vec{r} \times \vec{p}$  folgt (Drehimpulssatz)

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{0} \Rightarrow \text{Drehimpuls ist Erhaltungsgröße}$$

Bahn des Teilchens in Ebene durch  $0 \perp$  auf  $\vec{L}$

wobei  $v_r = \frac{dr}{dt}$  und mit  $|\vec{r} \times \vec{v}| = r |\vec{v}_\perp|$

hat man  $|\vec{L}| = |\vec{r} \times \mu \vec{v}| = \mu r |\vec{v}_\perp|$

$\Rightarrow$  Gesamtenergie des Teilchens:

$$E = E_{kin} + E_{pot} = \frac{\mu}{2} v_r^2 + \frac{\mu}{2} v_\perp^2 + V(r)$$

$$\rightsquigarrow E = \frac{1}{2} \mu v_r^2 + \frac{L^2}{2\mu r^2} + V(r)$$

$$\rightsquigarrow \text{klassische Hamiltonfunktion: } H = \frac{p_r^2}{2\mu} + \frac{L^2}{2\mu r^2} + V(r)$$

$$p_r = \frac{\partial L}{\partial v_r} = \mu v_r, \quad L = T - V$$

$$p_r = \mu \frac{dr}{dt} \text{ kanon. Impuls zu } r$$

$\vec{L}^2$  ausdrücken durch  $r, \theta, \varphi$  und  $p_r, p_\theta, p_\varphi$  d.h.

$$\vec{L}^2 = p_\theta^2 + \frac{1}{\sin^2 \theta} p_\varphi^2$$

2. QM:

EW-Glg. des Hamiltonoperators/Schrödingergleichung

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

V nur abh. von r  $\Rightarrow$  Kugelkoordinaten. Mit

$$\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right)$$

$\vec{L}^2$  in Kugelkoordinaten:

$$\vec{L}^2 = -\hbar^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right)$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{2\mu r^2} \vec{L}^2 + V(r)$$

## 8.2 Separation der Variablen

$L_i$  wirken nur  $\theta, \varphi \rightsquigarrow$  vertauschen mit jedem Operator der nur auf r wirkt.

$$\rightsquigarrow [H, \vec{L}] = 0 \rightarrow L_i \text{ Konstante der Bewegung}$$

$$\text{ebenso } [H, \vec{L}^2] = 0.$$

Da die  $(L_i, \vec{L}^2)$  nicht alle untereinander vertauschen, verwenden wir nur  $\vec{L}^2, L_z, H, \vec{L}^2, L_z$  vertauschen paarweise.

$\Rightarrow$  Möglich Basis des Zustandsraums zu finden, deren Elemente gleichzeitig Eigenfunktionen zu diesen 3 Observablen sind.

$$H\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r})$$

$$\vec{L}^2\varphi(\vec{r}) = \hbar^2 l(l+1)\varphi(\vec{r})$$

$$L_z\varphi(\vec{r}) = \hbar m\varphi(\vec{r})$$

D.h. Niveaus werden nach E, l, m klassifiziert. Suchen Lösungen der Form:

$$\varphi(\vec{r}) = R(r)Y_l^m(\theta, \varphi)$$

$$H\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r})$$

$$\left[ \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r) \right] R(r) = ER(r)$$

Forderung: Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\rho(\vec{r}) = |R(r)|^2 |Y_l^m|^2 \text{ integrabel bezüglich } d^3r$$

$$\Rightarrow |R(r)|^2 \text{ integrabel bezüglich } d^3r$$

Energie E hängt ab von l und einem weiteren diskreten (Bindungszustände) oder kontinuierlichen (Streuzustände) Index k:  $E_{kl}$

$$\text{Übergang zu Funktion } u: R(r) = \frac{1}{r}u(r)$$

$$\frac{1}{r} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} r \right) \frac{1}{r} u(r) = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} u(r)$$

$$\text{so dass } \left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r) \right] u_{kl}(r) = E_{kl} u_{kl}(r)$$

Diese Gleichung ist analog zu der eines eindimensionalen Problems, bei dem sich ein Teilchen der Masse  $\mu$  in einem effektiven Potential

$$V_{eff}(r) = V(r) + \frac{l(l+1)}{2\mu r^2} \text{ bewegt.}$$

Achtung:  $r \geq 0!$  und  $|u(r)|^2$  integrabel bzgl. dr.

**Verhalten der Lösungen bei kleinem r:** Annahme:  $V(r)$  bei  $r \rightarrow 0$

regulär oder weniger singular als  $\frac{1}{r^2}$

Ansatz:

$$u(r) \underset{r \rightarrow 0}{\sim} Cr^s$$

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} s(s-1)r^{s-2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu} r^{s-2} + \underbrace{V(r)r^s}_{\text{vernachlässigbar}} \right] = \underbrace{Er^s}_{\text{vernachlässigbar}}$$

$$s(s-1) = l(l+1) \Rightarrow \underbrace{s=l+1}_{R(r) \sim r^l} \text{ oder } \underbrace{s=-1}_{R(r) \sim \frac{1}{r+1}}$$

**Anmerkung:** Für  $l=0$  wäre  $R \sim \frac{1}{r}$  zwar nicht integrabel aber wegen  $\Delta \frac{1}{r} = -4\pi\delta(r)$  nicht Lösungen der Schrödingerlg.

Bleibt nur Lösung  $R(r) \sim r^l$ . Also verschwindet  $u(r)$  bei  $r=0$ .  $u(r) \sim r^1$  (für  $l=0$ ).  $R(r)$  geht gegen eine Konstante (für  $l=0$ ) oder verschwindet für  $l>0$ . Also füge DGL die Bedingung hinzu  $u_{kl}(0) = 0$ .

Wellenfkten von H eines Teilchens in einem Zentralpotential  $V(r)$  hängen von 3 Indizes ab:

$$\varphi_{klm}(r, \theta, \varphi) = R(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$$

Bezeichnung:  $|k| m \rangle$

$$\text{Quantenzahlen } \begin{cases} k & \text{radiale} \\ l & \text{azimutale orbitale} \\ m & \text{magnetische} \end{cases}$$

### 8.3 Entartung der Energieniveaus

Die Energieniveaus  $E_{kl}$  sind  $(2l + 1)$ -fach entartet:

zu festem  $k, l$ :  $m = -l, -l + 1, \dots, +l$

Diese Entartung existiert für alle Formen des Potentials: "wesentliche Entartung". Möglich, dass EW  $E_{k,l}$  der Radialgleichung zu gegebenen  $l$  nochmals als EW  $E_{k',l'}$  der durch  $l \neq l'$  charakterisierten Radialgleichung auftritt: "zufällige Entartungen" (z.B. bei H).

Die Radialgleichung hat für gegebenes  $l$  höchstens eine physikalisch akzeptable Lösung.

Zur Eindeutigkeit:

Mit EW von  $L^2 \rightarrow$  Gleichung für Radialfunktion EW von H legt diese Radialfunktion eindeutig fest. Zu gegebenem Paar  $(l, m)$  existiert nur eine Kugelflächenfunktion  $Y_l^m(\theta, \varphi)$ .

### 8.4 System aus 2 Teilchen

2 Teilchen ohne Spin, Massen  $m_1, m_2$ , Ortsvektoren  $\vec{r}_1, \vec{r}_2$

$$V = V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$$

$$\text{Klassisch: } L(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dot{\vec{r}}_1, \dot{\vec{r}}_2, t) = T - V = \frac{1}{2}m_1 \dot{\vec{r}}_1^2 + \frac{1}{2}m_2 \dot{\vec{r}}_2^2 - V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$$

$$\text{Konjugierte Impulse: } \vec{p}_1 = \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}_1} = m_1 \dot{\vec{r}}_1, \quad \vec{p}_2 = m_2 \dot{\vec{r}}_2$$

$$\text{Massenmittelpunkt: } \vec{r}_G = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2} \quad \text{und} \quad \vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$$

$$\vec{r}_1 = \vec{r}_G + \frac{m_2}{m_1 + m_2} \vec{r}, \quad \vec{r}_2 = \vec{r}_G - \frac{m_1}{m_1 + m_2} \vec{r}$$

$$\rightsquigarrow L(\vec{r}_G, \dot{\vec{r}}_G, \vec{r}, \dot{\vec{r}}, t) = \frac{1}{2}M \dot{\vec{r}}_G^2 + \frac{1}{2}\mu \dot{\vec{r}}^2 - V(\vec{r})$$

mit der Gesamtmasse  $M = m_1 + m_2$  und der reduzierten Masse  $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$

Konjugierte Impulse  $\vec{p}_G = \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}_G} = M \dot{\vec{r}}_G = m_1 \dot{\vec{r}}_1 + m_2 \dot{\vec{r}}_2 = \vec{p}_1 + \vec{p}_2$  Gesamtimpuls

$$\vec{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}} = \mu \dot{\vec{r}} = \frac{m_2 \vec{p}_1 - m_1 \vec{p}_2}{m_1 + m_2} \quad \text{Relativimpuls}$$

$$\text{Klassische Hamiltonfunktion } H = \sum_{i=G, \text{rel}} \vec{p}_i \dot{\vec{r}}_i - L$$

$$H(\vec{r}_G, \vec{p}_G, \vec{r}, \vec{p}, t) = \frac{\vec{p}_G^2}{2M} + \frac{\vec{p}^2}{2\mu} + V(\vec{r})$$

$$\text{Bewegungsgleichungen } \dot{\vec{p}}_i = -\frac{\partial H}{\partial \vec{r}_i}$$

$$\dot{\vec{p}}_G = -\frac{\partial H}{\partial \vec{r}_G} = \vec{0} \quad \text{Ruhezustand des Massenmittelpunkts MMP}$$

$$\dot{\vec{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{r}} = -\vec{\nabla} V(\vec{r})$$

Wählen das Ruhesystem des MMP: Hamiltonfunktion:

$$H_r = \frac{\vec{r}^2}{2\mu} + V(\vec{r})$$

QM: Operatoren  $\vec{R}_1, \vec{P}_1, \vec{R}_2, \vec{P}_2$  mit

$$[X_1, P_{1X}] = i\hbar$$

$$[X_2, P_{2X}] = i\hbar \quad \text{analog} \dots?$$

$$\text{Observablen } \vec{R}_G, \vec{R}: \quad \vec{R}_G = \frac{m_1 \vec{R}_1 + m_2 \vec{R}_2}{m_1 + m_2}, \quad \vec{R} = \vec{R}_1 - \vec{R}_2$$

$$\text{und die Observablen } \vec{P}_G = \vec{P}_1 + \vec{P}_2, \quad \vec{p} = \frac{m_2 \vec{p}_1 - m_1 \vec{p}_2}{m_1 + m_2}$$

Man findet die Kommutator-Relationen:  $[X_G, P_{GX}] = i\hbar$

$$[X, P_X] = i\hbar$$

$$\{\vec{R}, P\} \text{ vertauscht mit } \{\vec{R}_G, \vec{P}_G\}$$

Hamilton-Operator:  $H = \frac{\vec{P}_G^2}{2M} + \frac{\vec{p}^2}{2\mu} + V(\vec{R})$

d.h.  $H = H_G + H_r$  mit  $H_G = \frac{\vec{P}_G^2}{2M}$  und  $H_r = \frac{\vec{p}^2}{2\mu} + V(\vec{R})$

und  $[H_G, H_r] = 0$  das heißt es gibt eine Basis aus EV zu H, die gleichzeitig EV zu  $H_G$  und  $H_r$  sind. Wir suchen die Lösungen des Systems

$H_G|\varphi\rangle = E_G|\varphi\rangle \quad H_r|\varphi\rangle = E_r|\varphi\rangle$  mit  $E = E_G + E_r$

### 8.5 Das Wasserstoffatom

besteht aus einem Proton mit  $m_P = 1,7 \cdot 10^{-27} \text{kg}$  und einem Elektron mit  $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{kg}$  mit der Ladung  $q_{P/e} = \pm 1,6 \cdot 10^{-19} \text{C}$

WW elektrostatisch, potentielle Energie  $V(r) = -\frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} = -\frac{e^2}{r}$

r: Abstand zwischen p und  $e^-$   $e^2 = \frac{q}{4\pi\epsilon_0}^2$

Überlegungen aus (System aus 2 Teilchen) Beschränkung auf Ruhesystem des MMP. Außerdem:  $\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} = m_e (1 - \frac{m_e}{m_p})$

In der Ortsdarstellung haben wir die EW-Gleichung des Hamilton Operators:

$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta - \frac{e^2}{r}\right] \varphi(\vec{r}) = E \varphi(\vec{r})$

Wir haben ein Zentralpotential:  $\varphi_{klm}(\vec{r}) = \frac{1}{r} \overbrace{u_{kl}(r)}^{R_{kl}(r)} \cdot Y_l^m(\theta, \varphi)$

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \underbrace{\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r}}_{V_{eff}(r)} \right] u_{kl}(r) = E_{kl} u_{kl}(r) \quad (*)$$

und  $u_{kl}(0) = 0$

(bild von nem Potential)

$E > 0$  kontinuierliches Spektrum

$E < 0$  diskretes Spektrum

Dividieren (\*) durch  $\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} = E_I = \text{Ionisierungsenergie}$

wählen dimensionslose Variablen:  $\rho = \frac{r}{a_0}$  mit Bahn-Radius  $a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$

wir betrachten  $E_{kl} < 0$  und  $\lambda_{kl} = \sqrt{-\frac{E_{kl}}{E_I}}$

$\left[ \frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho} - \lambda_{kl}^2 \right] u_{kl}(\rho) = 0$

Lösung der Radialgleichung: Verhalten für große Abstände  $\rho$  :

$\left[ \frac{d^2}{d\rho^2} - \lambda_{kl}^2 \right] u_{kl}(\rho) = 0$

Lösungen hiervon sind  $u_{kl}(\rho) \sim e^{(\pm)\lambda_{kl}\rho}$

modulo Polynom in  $\rho$ , + wird ausgeschlossen wegen Normierbarkeit.

Ansatz für  $u_{kl}(\rho) = e^{-\lambda_{kl}\rho} Y_{kl}(\rho)$

DGL für  $Y_{kl}$  :  $[u_{kl}'' = \lambda_{kl}^2 e^{-\lambda_{kl}\rho} Y_{kl} + (-2\lambda_{kl})e^{-\lambda_{kl}\rho} y'_{kl} + e^{-\lambda_{kl}\rho} Y_{kl}'']$

$\left[ \frac{d^2}{d\rho^2} - 2\lambda_{kl} \frac{d}{d\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho} \right] Y_{kl}(\rho) = 0$  und  $Y_{kl}(0) = 0 \quad (\Delta)$

Potenzreihenansatz:  $Y_{kl}(\rho) = \rho^S \sum_{q=0}^{\infty} c_q \rho^q$  und  $c_0 \neq 0$  vorausgesetzt.

$(\Delta) \Rightarrow s > 0$

Ableitungen:  $\frac{d}{d\rho} Y_{kl}(\rho) = \sum_{q=0}^{\infty} (q \pm s) c_q \rho^{q+s-1}$

$\frac{d^2}{d\rho^2} Y_{kl}(\rho) = \sum_{q=0}^{\infty} (q+s)(q+s-1) c_q \rho^{q+s-2}$

Einsetzen in DGL für  $\rho$ : Alle Koeffizienten müssen gleich null sein.

Term in niedrigster Ordnung in  $\rho$  ( $\sim \rho^{s-2}$ ):

Koeff=0  $[-l(l+1) + s(s-1)] c_0 = 0$

—(Rechnung)—

$s = l - 1$  oder  $s = -l$  nicht akzeptiert.

Mit  $s = l + 1$  und Forderung Koeffizienten von  $\rho^{q+s-2} = 0$

$\Rightarrow$  Rekursionsformel:  $q(q+2l+1) = 2[(q-l)\lambda_{kl} - 1] c_{q-1}$

Verhalten für große  $q$ :  $\frac{c_q}{c_{q-1}} = \frac{1}{q} \frac{2[(1+l)\lambda_{kl} - 1]}{q+2l+1} \xrightarrow{q \rightarrow \infty} \frac{2\lambda_{kl}}{q} \rightarrow 0$

Wir haben also für  $[(q+l)\lambda_{kl} - 1] \neq 0$ :  $\frac{c_q}{c_{q-1}} \sim^{q \rightarrow \infty} \frac{2\lambda_{kl}}{q}$

Potenzreihenentwicklung der Funktion  $e^{2\rho\lambda_{kl}}$

$e^{2\rho\lambda_{kl}} = \sum_{q=0}^{\infty} d_q \rho^q$  mit  $d_q = \frac{(2\lambda_{kl})^q}{q!}$

Hieraus:  $\frac{d_q}{d_{q-1}} = 2 \frac{\lambda_{kl}}{q}$

VLG: Betrachte Reihe verhält sich für große  $\rho$  wie  $e^{2\rho\lambda_{kl}}$  physikalisch nicht sinnvoll  $\rightarrow$  Alle Fälle auszuschließen, für die die Reihe nicht abbricht  $\rightarrow$  einzig möglichen Werte von  $\lambda_{kl}$  sind die, für die die Reihe nur eine endliche Anzahl von Termen hat, d.h.  $Y_{kl}(\rho)$  sich auf ein Polynom reduziert. Suchen also  $k$ , so dass für  $q = k$ .

$(k+l)\lambda_{kl} - 1 = 0 \Rightarrow \lambda_{kl} = \frac{1}{k+l} \quad k \geq 1$

Die einzig möglichen diskreten Energie EW sind also  $\lambda_{kl} = \sqrt{-\frac{E_{kl}}{E_I}}$

$E_{kl} = -\frac{E_I}{(k+l)^2}, \quad k = 1, 2, \dots; \quad l = 0, 1, \dots$

18. und 21. Juni fehlen (Southside) -----

$\vec{B}$  konstant  $\Rightarrow H = H_0 + H_1 + H_2$

$H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2\mu} + V(\vec{R}); \quad H_1 = -\frac{\mu_B}{\hbar} \vec{L} \cdot \vec{B}$

$\mu_B = \frac{\hbar q}{2\mu}$

$H_2 = \frac{q^2 \vec{B}^2}{8\mu} \vec{R}_\perp^2; \quad \Delta E_0 \gg \Delta E_1 \gg \Delta E_2$

Interpretation des paramagnetischen Terms

magnetisches Moment  $\vec{M}$ , das zu einer Ladung  $q$  auf einer Kreisbahn gehört:

$\vec{M} = \frac{q}{2m_e} \vec{L} \Rightarrow$  QM: Operatorgleichung  $\vec{M}_1 = \frac{q}{2m_e} \vec{L}$

so dass:  $H_1 = -\vec{M} \cdot \vec{B}$

$H_1$  entspricht also der Kopplung zwischen dem magnetischen Feld  $\vec{B}$  und dem atomaren magnetischen Moment  $\rightsquigarrow H_1$  paramagnetisch

Kopplungsterm:

----- Vorlesung

**Bemerkungen:**

- Die EW einer jeden Komponente des magnetischen Moments  
 $\left(\frac{q}{2m_e}\right) (m\hbar) = m\mu_B$  (m ist eine ganze Zahl,  $m_e$  ist Masse des Elektrons)  
 $\mu_B$  gibt die Größenordnung des zur Bahnbewegung gehörenden magnetischen Momentes
- Elektron hat auch einen inneren Spin  $\vec{M}_S = 2\frac{\mu_B}{\hbar}\vec{S}$ ,  $2=g$ , gyromagnetisches Verhältnis

Interpretation des diamagnetischen Terms

Sei Drehimpuls=0(Grundzustand)  $\rightsquigarrow H_1 = 0$ . Bleibt  $H_2$ . Homogenes Magnetfeld modifiziert Wahrscheinlichkeitsstrom. Mit zugehörigem elektrischen Strom ist magnetisches Moment  $\langle \vec{M}_{dia} \rangle$  antiparallel zu  $\vec{B}$  verbunden  $\rightarrow$  positive Kopplungsenergie.

Betrachte:

$$\vec{M}_{dia} = \left(\frac{q}{2m_e}\vec{r} \times m_e\vec{v}\right) = \frac{q}{2m_e}\vec{r} \times \underbrace{\left[\vec{p} - q\vec{A}\right]}_{\vec{p}_{kanon.}}$$

$$= \frac{q}{2m_e} \left[ \vec{L} - q\vec{r} \times \vec{A} \right]$$

$$\text{Für } l=0 \underbrace{\rightarrow}_{m=0} \underbrace{\vec{L}} = \vec{0} \text{ (Eichung } \vec{A} = -\frac{1}{2}\vec{r} \times \vec{B})$$

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ L_z \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \vec{M}_{dia} = \frac{q^2}{4m_e}\vec{r} \times (\vec{r} \times \vec{B})$$

$$= \frac{q^2}{4m_e} \left[ (\vec{r} \cdot \vec{B})\vec{r} - r^2\vec{B} \right]$$

$\vec{M}_{dia}$  ist proportional zur Größe des magnetischen Feldes. Es handelt sich um das durch  $\vec{B}$  induzierte magnetische Moment im Atom. Entgegen  $\vec{B}$ - Richtung  $\rightsquigarrow \vec{B}$  wird geschwächt (Lenzsche Regel).

Kopplungsenergie mit  $\vec{B}$  ( $\vec{B}$  langsam angeschaltet)

$$- \int_0^B \vec{M}_{dia} \vec{e}_z dB' = - \int_0^B dB' \vec{e}_z B' \left[ (r\vec{e}_z) z\vec{e}_z - r^2\vec{e}_z \right] \quad \vec{B}' = B'\vec{e}_z$$

$$= - \frac{q^2}{4m_e} \frac{B^2}{2} \left[ \underbrace{z^2 - r^2}_{\vec{r}_\perp^2} \right] = \frac{q^2}{8m_e} \vec{B}^2 \vec{r}_\perp^2$$

## 9 Streutheorie in der nicht-relativistischen Quantenmechanik

Streuexperimente: Information über Wechselwirkung (WW) zwischen (fundamentalen) Teilchen.

- Spektrum der gebundenen Zustände
- Verhalten in Streuexperimenten

1. Hochenergiephysik

$$L < 1 \text{ fm} \sim 10^{-5} \text{ \AA}$$

$$E > 16 \text{ eV}$$

Streuproben

Bsp:  $e^+e^-$  : *LEP(CERN)*  $\sim 200 \text{ GeV}$

PP: LHC  $14 \text{ TeV}$

$P\bar{P}$  Tevatron  $2 \text{ TeV}$

2. Kernphysik

$$L \sim 10 \text{ fm (atomkern)}$$

$$E \sim 1 \text{ MeV}$$

Bsp: Gold-Gold Kollisionen  $\sim 100 \text{ GeV} \rightsquigarrow$  Quark-Gluon Plasma

3. Atomphysik

$$L \sim 1$$

$$E \sim \text{eV}$$

Bsp: Optische Spektroskopie

4. Physik der kondensierten Materie

$$L \sim \rightarrow \infty$$

$$E \sim \text{meV} - \text{eV}$$

Bsp: Röntgenstreuung, Photoemission, Optische Spektroskopie, Neutronenstrahlung

### 9.0.1 Strahl von Teilchen auf Stationäres Target

skizze)

Vorteil: Bei genügender Dichte des Targets voller Gebrauch des einlaufenden Strahls

Nachteil: Energie im Schwerpunktsystem reduziert

Laborsystem:  $E = \frac{1}{2}mv^2$

Schwerpunktsystem:  $E = \frac{1}{2}m\frac{v^2}{4} \cdot 2 = \frac{1}{4}mv^2$

### 9.0.2 Teilchenstrahlene gegeneinander

Vorteil: Energie im Schwerpunktsystem  $E = \sum$  Strahlenergien

Nachteil: Starke Fokussierung am WW-Punkt erforderlich, um genügend hohe Raten zu erzielen

Wir betrachten nur elastische Streuung: Innere Zustände der Teilchen unverändert

**Potentialstreuung:** Folgende Annahmen für Streuung am target

1. Teilchen hat kein Spin
2. Innere Struktur der Teilchen unberücksichtigt
3. Target ist sehr dünn, Mehrfachstreuungsprozesse sind vernachlässigbar
4. Keine Kohärenz zwischen an verschiedenen Target-Teilchen gestreuten Wellen
5. WW zwischen Teilchen durch  $V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$  beschreibbar  $\Rightarrow$  im Ruhesystem des Schwerpunkts: Streuung eines Teilchens mit reduzierter Masse  $\mu$  am Potential  $V = V(\vec{r})$ ,  $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$

Nicht-relativistische Behandlung

### 9.1 Stationäre Streuzustände

Zwei Beschreibungsmöglichkeiten:

1. Wellenpakete ("einzelnes Teilchen")
2. Stationäre Streuwelle ("Teilchenstrahl")

Beide äquivalent. 2. meistens einfacher. Zu 2.:

$$H = H_0 + V(\vec{r})$$

$$H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2\mu}$$

Annahme:  $V(\vec{r})$  falle für  $|\vec{r}| \rightarrow \infty$  schneller ab als  $\frac{1}{|\vec{r}|}$ .

Suche Lösungen  $\psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r})e^{-iEt/\hbar}$  mit  $H\varphi = E\varphi$ ,  $E > 0$  ( $E$ =kinetische ENergie weit weg vom Streuzentrum)

$$\Leftrightarrow [\Delta + k^2 - V(\vec{r})] \varphi(\vec{r}) = 0 \quad (*)$$

mit  $U(\vec{r}) := \frac{2\mu}{\hbar^2}V(\vec{r})$  und  $E := \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$

Im Allgemeinen:  $\infty$  viele Lösungen von (\*) zu gegebenem  $E$ !

Idee: Randbedingungen entsprechend der physikalischen Situation.

Ansatz: Weit weg vom Streuzentrum  $V \simeq 0$   $H \simeq H_0$

für große  $|\vec{r}|$ :

$$\varphi_k^{(diff)}(\vec{r}) \simeq \underbrace{e^{ikz}}_{\text{einlaufend}} + \underbrace{f_k(\theta, \varphi) \cdot \frac{e^{ikr}}{r}}_{\text{auslaufend}}$$

### Erläuterung:

- $e^{ikz} \triangleq$  Ebene Welle in z-Richtung
- $e^{ikz} \triangleq$  Teichenstrahl in z-Richtung  
löst (\*) für große  $|\vec{r}|$
- $\frac{e^{ikr}}{r} \triangleq$  Kugelwelle ( $\Delta + k^2$ )  $\frac{e^{ikr}}{r} = 0$   
 $f_k(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} \triangleq$  Kugelwelle mit richtungsabhängiger Intensität.  
 $\triangleq$  Gestreuter Strahl  
löst (\*) ebenfalls für große  $|\vec{r}|$
- $f_k(\theta, \varphi)$  löst Streuamplitude
- Experiment: Bestimmung von  $|f_k(\theta, \varphi)|^2$   
Theorie: Zusammenhang  $f_k(\theta, \varphi) \leftrightarrow V(\vec{r})$
- Kann zeigen: Diese Randbedingungen fixieren Lösung eindeutig! (Annahme an  $V(\vec{r})$  wichtig!)

Beschreibung durch Wellenpakete: (Zur Vereinfachung nur in z-Richtung)

$$\psi(\vec{r}, t) = \int_0^{\infty} A(k) \varphi_k^{(diff)}(\vec{r}) e^{-iE_k t / \hbar} dk$$

A mit Maximum bei  $k_0$  (Bild mit Peak an  $k_0$ , k x-achse, A y-achse)

$$\psi(\vec{r}, t) \simeq \int_0^{\infty} dk A(k) e^{ikz} e^{-iE_k t / \hbar} + \int_0^{\infty} A(k) f_k(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} e^{-iE_k t / \hbar}$$

Bewegung der Maxima: Mit  $v_g = \frac{\hbar k_0}{\mu}$  und  $r$  groß,  $Z_{einl.}(t) = v_g t$ ,

$$r_{ausl.}(\theta, \varphi, t) = \underbrace{-\alpha'_k(\theta, \varphi)}_{<0} + v_g t$$

$t < 0$  kein Maximum in auslaufender Welle.

(Bild von Welle weiche sich in z-Richtung fortbewegt; bei Erreichen des Streuzentrums hat die Welle eine Form, die sich nicht so leicht interpretieren lässt;  $\theta$  = Winkel vom Streuzentrum aus, Peaks in einem best. Abstand vom Streuzentrum)

## 9.2 Stromdichten, Streuquerschnitt

Interpretation der Streuwellen als Teilchenströme:

Zur Wellenfunktion  $\varphi(\vec{r})$  gehöriger Strom:

$$\vec{J}(\vec{r}) = \frac{1}{\mu} \text{Re} \left[ \varphi^* \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \varphi \right]$$

$\varphi^{(diff)}$ ,  $r$  groß:

$$\varphi_r^{(diff)} = N \left[ \underbrace{e^{ikz}}_{\varphi_e} + \underbrace{f_k(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r}}_{\varphi_a} \right]$$

$$\vec{J}_e = N^2 \frac{\hbar k}{\mu} \vec{e}_z$$

Für

$$\varphi_a : \vec{\nabla} = \vec{e}_r \cdot \frac{\partial}{\partial r} + \underbrace{\vec{e}_\theta \cdot \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi}}_{\text{für große } r \text{ unterdrückt}}$$

$$\frac{\partial}{\partial r} \frac{e^{ikr}}{r} = ik \frac{e^{ikr}}{r} - \underbrace{\frac{e^{ikr}}{r^2}}_{\sim \frac{1}{r^2} \rightarrow \text{unterdrückt}}$$

$$\vec{J}_a = \frac{N^2 \hbar k}{\mu r^2} |f_k(\theta, \varphi)|^2 \vec{e}_r$$

$$|\vec{J}_a| = |\vec{J}_e| \frac{|f(\theta, \varphi)|^2}{r^2}$$

Definition des Stromquerschnitts  $\equiv$  Wirkungsquerschnitts

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} := \frac{J_a(\Delta\Omega r^2)}{J_e} \frac{1}{\Delta\Omega} = |f(\theta, \varphi)|^2 = (\text{Zahl beobachteter Teilchen im Detektor} / \Delta\Omega / \text{Zeiteinheit}) / (\text{Zahl einlaufender Teilchen} / \text{Fläche } F / \text{Zeiteinheit})$$

Dimension:  $f \sim L$ ,  $\frac{d\sigma}{d\Omega} \sim \text{Fläche!}$

$\sigma_{total} := \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \text{totaler Wirkungsquerschnitt}$

Im Experiment misst man Zählraten, die zu  $J_e$  sowie zur Anzahl der Streuzentren proportional sind.

Wiederholung der letzten Vorlesung:

Stromdichten, Streuquerschnitt

$$\vec{J}_e = N^2 \frac{\hbar k}{m}$$

$$\vec{J}_s = \frac{N^2 \hbar k}{m r^2} |f(\theta, \varphi)|^2 \vec{e}_r$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta, \varphi)|^2$$

### 9.3 Optisches Theorem

$\vec{J}_e = N^2 \frac{\hbar k}{m}$  räumlich konstant

$\vec{J}_s(\vec{r}) = N^2 \hbar \frac{|k|}{m} \vec{e}_r \frac{|f(\theta, \varphi)|^2}{r^2}$  nur in auslaufender radialer Richtung

Strom durch Fläche  $F$  nach außen

$$\int_F dF \vec{j}_e = 0$$

$$\int_F dF \vec{J}_s = \frac{N^2 \hbar |\vec{k}|}{m} \int_F d\vec{F} \vec{e}_r \frac{|f(\theta, \varphi)|^2}{r^2} = \frac{|\vec{J}_e|}{m} \int d\Omega \overbrace{|f(\theta, \varphi)|^2}^{\sigma_{tot}}$$

Scheinbarer Konflikt mit Stromerhaltung!

Lösung. INterferenzterm zwischen einfallender ( $\phi_k(\vec{r})$ ) und gestreuter ( $\psi_k(\vec{r})$ ) Welle.

$$\vec{J}_{int} = \frac{\hbar}{2m} \left[ \left( \phi_k^*(\vec{r}) \frac{\vec{\nabla}}{i} \psi_k^s(\vec{r}) + \psi_k^{s*}(\vec{r}) \frac{\vec{\nabla}}{i} \phi_k(\vec{r}) \right) + h.c. \right]$$

+ h.c. = das gleiche nochmal nur hermitisch konjugiert

Ziel: Zeige, dass der Interferenzterm einen negativen Beitrag in Vorwärtsrichtung ( $\theta = 0$ ) liefert.

Wir sind nur am radialen Anteil ( $\sim \vec{e}_r$ ) bei  $\theta = 0$  interessiert.

$$\vec{\nabla} = \partial_r \vec{e}_r + \dots \vec{e}_\theta + \dots \vec{e}_\varphi$$

$$\vec{\nabla} \psi_k^s = \vec{e}_r \partial_r \left( N f(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} \right) = \vec{e}_r N f(\theta, \varphi) \left( \frac{ik}{r} - \frac{1}{r^2} \right) e^{ikr} + \dots$$

$$\vec{\nabla} \phi_k = \vec{\nabla} \left( N e^{i\vec{k}\vec{r}} \right) = i\vec{k} N e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

Radialer Anteil:

$$\vec{e}_r \vec{J}_{int} = \frac{N^2 \hbar}{2m} \left[ \overbrace{e^{-i\vec{k}\vec{r}} \frac{ik}{ir} f(\theta, \varphi) e^{ikr}}^{\frac{\vec{\nabla}}{i} \psi_k^s(r)} + \overbrace{\frac{e^{-ikr}}{r} f^*(\theta, \varphi)}^{\psi^*} \right]$$

$$= \frac{N^2 \hbar k}{2mr} \left[ \left( e^{-i\vec{k}\vec{r}+ikr} f(\theta, \varphi) + k.c. \right) + \left( e^{i\vec{k}\vec{r}-ikr} f^*(\theta, \varphi) \cos\theta + h.c. \right) \right]$$

$$= \frac{N^2 \hbar k}{2mr} \left[ e^{ikr(1-\cos\theta)} (1 + \cos\theta) f(\theta, \varphi) + h.c. \right]$$

...fällt mit  $\sim \frac{1}{r}$  ab.

Für beliebige  $\cos\theta \neq 1$  liefert der schnell oszillierende Phasenfaktor  $e^{ikr}$  nach Faltung mit dem Wellenpaket  $A_{k_0}(\vec{k})$  Null.

Der Beitrag nur im Bereich  $1 \geq \cos\theta \geq 1 - \epsilon$ ,  $\epsilon \ll 1$

$$\int d\vec{F} \vec{J}_{int}(\vec{r}) = \int d\Omega r^2 \vec{e}_r \vec{J}_{int}(\vec{r}) = \frac{N^2 \hbar k}{2mr} r^2$$

$$\frac{N^2 \pi \hbar r}{m} \left[ \frac{2}{ikr} e^{ikrx} + \frac{1}{ikr} \left( \frac{1}{ikr} - x \right) e^{ikrx} \right]_0^\epsilon \cdot f(0) + h.c.$$

Term mit  $e^{ikr\epsilon}$  schnell oszillierend: trägt für große  $r$  nach Faltung mit  $A_{k_0}(\vec{k})$  nicht bei. Stationäre Phase nur bei  $x=0$ . (Vernachlässigen Term  $\sim \frac{1}{r^2}$  gegenüber  $\frac{1}{r}$ , da  $r \gg 1$ )

$$\dots = \frac{N^2 \pi \hbar k r}{m} \left[ -\frac{2}{ikr} f(\theta=0) + h.c. \right] = \frac{N^2 4\pi \hbar}{m} \text{Im}(f(\theta=0))$$

$$= -4\pi \frac{|\vec{J}_e|}{k} \text{Im}(f(\theta=0))$$

$$\Rightarrow |\vec{J}_e| \sigma_{tot} - |\vec{J}_e| \frac{4\pi}{k} \text{Im}(f(\theta=0)) = 0$$

$$\Rightarrow \text{Optisches Theorem. } \sigma_{tot} = \frac{4\pi}{k} \text{Im}(f(\theta=0))$$

Anmerkungen

1. Bis Gesagtes gilt nur für Potentiale mit "endlicher Reichweite".  
Inbesondere muss  $\sigma_{tot}$  endlich sein. (Gilt also nicht für  $V(r) \sim \frac{1}{r}$ )  
Umgekehrt: Potential "unendlicher Reichweite"  $\rightsquigarrow \sigma_{tot} = \infty$
2. Optisches Theorem gilt auch, wenn Teilchen bei der Streuung verschwinden
3.  $f$  hat immer Imaginärteil, wenn Streuung auftritt
4. Für  $k \rightarrow 0$  muss  $\text{Im}(f(\theta=0)) \sim k$ , damit  $\sigma_{tot}$  nicht divergiert.

## 9.4 Integralgleichung für die gestreute Welle

Aufstellen einer Integralgleichung, deren Lösung die Wellenfunktionen sind, die zu den Streuzuständen gehört.

EW-Gleichung von H:

$$(\Delta + k^2) \varphi(\vec{r}) = U(\vec{r}) \varphi(\vec{r}); \quad V(\vec{r}) = \frac{\hbar^2}{2\mu} U(\vec{r}) \quad (*)$$

Annahme: es gibt eine Greensche Fkt.  $G(\vec{r})$  des Operators  $(\Delta + k^2)$ , so dass

$$(\Delta + k^2)G(\vec{r}) = \delta(\vec{r})$$

$$\rightsquigarrow \varphi(\vec{r}) = \varphi_0(\vec{r}) + \int d^3 r' G(\vec{r} - \vec{r}') U(\vec{r}') \varphi(\vec{r}') \quad (\Delta)$$

mit  $\varphi_0(\vec{r})$  Lösung der homogenen Gleichung  $(\Delta + k^2) \varphi_0(\vec{r}) = 0$   
Erfüllt die DGL. (Anm:  $\Delta$  wirkt nur auf Variable  $\vec{r}$ .)

Demn

$$\begin{aligned} (\Delta + k^2) \varphi_0(\vec{r}) &= (\Delta + k^2) \int d^3 r' G(\vec{r} - \vec{r}') U(\vec{r}') \varphi(\vec{r}') \\ &= \int d^3 r' \delta(\vec{r} - \vec{r}') U(\vec{r}') \varphi(\vec{r}') = U(\vec{r}) \varphi(\vec{r}) \end{aligned}$$

Umgekehrt kann man zeigen, dass jede Lösung von (\*) die Gleichung ( $\Delta$ ) erfüllt.

Mit der richtigen Wahl von  $\varphi_0(\vec{r})$  und  $G(\vec{r})$  kann das asymptotische Verhalten  $\psi_k(\vec{r}) \sim^{r \rightarrow \infty} e^{ikz} + f(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r}$  in die Gleichung eingebaut werden.

Die  $G_{\pm}(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi} \cdot \frac{e^{\pm ikr}}{r}$  sind Lösungen von  $(\Delta + k^2)G(\vec{r}) = \delta(\vec{r})$ .

-----Vorlesung 7. Juli fehlt---

Vorlesung 09. Juli

$V \equiv 0$  Asymptotische Verhalten

$$\begin{aligned} \varphi_{klm}^{(0)} \sim^{kr \rightarrow \infty} & -\sqrt{\frac{2k^2}{\pi}} Y_l^m(\theta, \varphi) \frac{e^{-ikr} e^{il\frac{\pi}{2}} e^{ikr} e^{-il\frac{\pi}{2}}}{2ikr} \\ e^{ikz} &= \sum_{i=0}^{\infty} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} j_l(kr) Y_l^0(\theta) \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos\theta) \end{aligned}$$

#### 9.4.1 Partialwellen im Potential $V(\mathbf{r})$

$$\varphi_{klm}(\vec{r}) = R_{kl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) = \frac{1}{r} u_{kl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$$

mit  $u_{kl}(r)$  Lösung der Radialgleichung

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + V(r) \right] u_{kl}(r) = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} u_{kl}(r)$$

mit Bedingung  $u_{kl}(0) = 0$

Für große r findet man

$$u_{kl}(r) \cong^{r \rightarrow \infty} C \cdot \sin(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l)$$

Phasenverschiebung  $\delta_l$  heißt Streuphase.

Physikalische Bedeutung der Streuphase

Vergleich Partialwellen und freie Kugelwellen:

$$\begin{aligned}\varphi_{klm}(\vec{r}) &\cong^{r \rightarrow \infty} C \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l)}{r} Y_l^m(\theta, \varphi) \\ &= -CY_l^m(\theta, \varphi) \frac{e^{-ikr} e^{i(l\frac{\pi}{2} - \delta_l)} - e^{ikr} e^{-i(\frac{\pi}{2} - \delta_l)}}{2ir}\end{aligned}$$

Vergleich mit freier Kugelwelle: Modifikation von  $\varphi_{klm}^{(r)} \rightsquigarrow$

$$\tilde{\varphi}_{klm}(\vec{r}) \cong^{r \rightarrow \infty} -Y_l^m(\theta, \varphi) \frac{e^{-ikr} e^{il\frac{\pi}{2}} - e^{ikr} e^{-il\frac{\pi}{2}} e^{2i\delta_l}}{2ikr}$$

#### 9.4.2 Streuquerschnitt als Funktion der Streuphasen

Rotationssymmetrie um Streuachse bedeutet keine Abhängigkeit von  $\varphi$

$$\psi_k(\vec{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \tilde{\varphi}_{kl}$$

Bestimmung der Koeffizienten  $c_l$  :

Herleitung intuitiv:

$$V(r) \equiv 0 : \psi_k(\vec{r}) = e^{ikz}$$

und Partialwellen=freie Kugelwellen

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} j_l(kr) Y_l^0(\theta) \quad (*)$$

$V(r) \neq 0 : \psi_k(\vec{r})$

$$\psi_k(\vec{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} \tilde{\varphi}_{klo}(\vec{r}) \quad (\Delta)$$

Herleitung explizit: Zeigen, dass  $(\Delta)$  die gesuchte Entwicklung ist

$$\begin{aligned}&\sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} \tilde{\varphi}_{klo}(\vec{r}) \\ &\cong^{r \rightarrow \infty} - \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} Y_l^0(\theta) \frac{e^{-ikr} e^{il\frac{\pi}{2}} - e^{ikr} e^{-il\frac{\pi}{2}} e^{2i\delta_l}}{2ikr}\end{aligned}$$

Mit  $e^{2i\delta_l} = 1 + 2ie^{i\delta_l} \sin\delta_l$

$$\Rightarrow \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} \tilde{\varphi}_{klo}(\vec{r})$$

$$\cong^{r \rightarrow \infty} - \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} Y_l^0(\theta) \left[ \frac{e^{-ikr} e^{il\frac{\pi}{2}} - e^{ikr} e^{-il\frac{\pi}{2}}}{2ikr} - \frac{e^{ikr}}{r} \frac{1}{k} e^{-il\frac{\pi}{2}} e^{i\delta_l} \sin\psi \right]$$

$$\Rightarrow \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} \tilde{\varphi}_{klo}(\vec{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\cong} e^{ikz} + f_k(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}$$

mit

$$f_k(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2l+1)} e^{i\delta_l} Y_l^0(\theta)$$

$\Rightarrow$  Entwicklung ( $\Delta$ ) ist richtig

Berechnung des Streuquerschnitts

differentiell.

$$\sigma(\theta) = |f_k(\theta)|^2 = \frac{1}{k^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2l+1)} e^{i\delta_l} \sin\delta_l Y_l^0(\theta) \right|^2$$

$$\sigma = \int d\Omega \sigma(\theta) = \frac{1}{k^2} \sum_{l,l'} 4\pi \sqrt{2l+1} \sqrt{2l'+1} e^{i(\delta_l - \delta_{l'})} \sin\delta_l \sin\delta_{l'} \int d\Omega Y_{l'}^{0*}(\theta) Y_l^0(\theta)$$

$$\Rightarrow \sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2\delta_l = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l$$

$$\sigma_l \equiv \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2\delta_l$$

$\sigma_l \leq \frac{4\pi}{k^2} (2l+1)$ Partialwellenunitaritat
--

Partialwellen und Streuphasenbestimmung

Bestimmbar  $\sigma_{tot}$ : Annahme: nur  $\delta_0, \delta_1 \neq 0$

$$[P_0(\cos\theta) = 1, P_1(\cos\theta) = \cos\theta]$$

$$\left[ Y_l^0(\theta) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos\theta) \right]$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \sigma(\theta) = |f_k(\theta)|^2 = \frac{1}{k^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin\delta_l \cdot P_l(\cos\theta) \right|^2$$

$$f_k(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2l+1)} e^{i\delta_l} \sin\delta_l Y_l^0(\theta)$$

$\delta_0, \delta_1 \neq 0$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{k^2} |e^{i\delta_0} \sin\delta_0 + 3e^{i\delta_1} \sin\delta_1 \cos\theta|^2$$

Beitrag von  $\delta_0$ : isotrop

Beitrag von  $\delta_1$ :  $\sim \cos^2\theta \Rightarrow$  Messung  $\Rightarrow \delta_0, \delta_1$

Interferenzterm:  $\sim \cos\theta$

Konstistenztest: Tauchen hohere Potenzen in  $\cos\theta$  auf?

### 9.4.3 Optisches Theorem

Wir hatten  $f_k(\theta, \varphi) = \sum_l (2l+1) f_l P_l(\cos\theta)$

mit  $f_l = \frac{1}{k} e^{i\delta_l} \sin\delta_l$   $P_l(\cos\theta = 1) = 1$

$\Rightarrow f_k(\theta, \varphi) = \frac{1}{k} \sum_l (2l+1) e^{i\delta_l} \sin\delta_l$

und  $Im f_k(0, \varphi) = \frac{1}{k} \sum_l (2l+1) \sin^2\delta_l$

Mit  $\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2\delta_l$  und  $\sigma_{tot} = \sum_l \sigma_l$

$\sigma_{tot} = \frac{4\pi}{k} Im f_k(0, \varphi) \text{ Optisches Theorem}$
--

## 10 Stationäre (zeitunabhängige) Störungstheorie

### 10.1 Problemstellung

Störungstheorie anwendbar, wenn Hamiltonoperator von der Form

$$H = H_0 + W$$

Eigenzustände und EW von  $H_0$  bekannt, und  $W \ll H_0$

$H_0$  : ungestörter Hamiltonoperator,

W: Störung;

Sei W unabhängig von der Zeit: stationäre Störung

$W = \lambda \hat{W}$   $\lambda \ll 1$  (da  $W \ll H_0$ )

$\lambda$  = Entwicklungsparameter

$\hat{W}$  = Matricelemente vergleichbar mit denen von  $H_0$

Eigenwertgleichung von  $H_0$  :

$$H_0 |\varphi_p^i\rangle = E_p^0 |\varphi_p^i\rangle$$

p: zählt Niveaus (Annahme: diskretes Spektrum)

i: zählt Entartung

0  $\triangleq$  ungestörtes Problem

$|\varphi_p^i\rangle$  orthonormiert, vollständig

$\langle \varphi_p^i | \varphi_{p'}^{i'} \rangle = \delta_{pp'} \delta_{ii'}$  orthonormiert

$\sum_{p,i} |\varphi_p^i\rangle \langle \varphi_p^i| = 1$  vollständig

Mit Störung: Suche EW und EZ als Funktion von  $\lambda$ , ausgedrückt  $E_p^0$  und

$|\varphi_p^i\rangle$

Hamilton-Operator mit Störung:  $H(\lambda) = H_0 + \lambda \hat{W}$

(Skizze mit  $E_i^0$  auf der y-Achse und  $\lambda$  auf der x-Achse)

----- Vorlesung 14. Juli fehlt -----

vorlesung 16. juli

$$E_n(\lambda) = E_n^0 + \langle \varphi_n | W | \varphi_n \rangle + \sum_{p,i;p \neq n} \frac{\langle \varphi_n | W | \varphi_p^i \rangle \langle \varphi_p^i | W | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_p^0} + \mathcal{O}(\lambda^3)$$

$$|\psi_n(\lambda)\rangle = |\varphi_n\rangle + \sum_{p \neq n} \frac{\langle \varphi_p^i | W | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_p^0} |\varphi_p^i\rangle + \mathcal{O}(\lambda^2)$$

## 10.2 Störungstheorie bei Entartung

$E_n^0$  sei  $g_n$ -fach entartet ( $g_n \geq 1, < \infty$ )

Pröblem:  $|0\rangle$  ist nicht mehr eindeutig festgelegt  $\epsilon_0 = E_n^0$  da  $H_0|0\rangle = \epsilon_0|0\rangle$  kann durch jede Linearkombination der  $g_n$  Vektoren  $|\varphi_n^i\rangle$  ( $i = 1, \dots, g_n$ ) erfüllt werden.

Störung:  $E_n^0$  spaltet in mehrere Unterniveaus auf Anzahl der Unterniveaus  $f_n: 1 \leq f_n \leq g_n$

$f_n < g_n \rightsquigarrow$  einige Unterräume entartet

Ausgangspunkt:

$$H_0|1\rangle + \hat{W}|0\rangle - (\epsilon_1|0\rangle + \epsilon_0|1\rangle) = 0$$

Projektion auf  $|\varphi_n^i\rangle, i = 1, \dots, g_n$ :

$$\left\langle \underbrace{\varphi_n^i | H_0 | 1}_{E_n^0 < \varphi_n^i} \right\rangle + \langle \varphi_n^i | \hat{W} | 0 \rangle - (\epsilon_1 \langle \varphi_n^i | 0 \rangle + \epsilon_0 \langle \varphi_n^i | 1 \rangle) = 0$$

( $H_0$  ist hermitesch)  $\rightsquigarrow \langle \varphi_n^i | \hat{W} | 0 \rangle = \epsilon_1 \langle \varphi_n^i | 0 \rangle$  (\*)

$|0\rangle = \sum_{j=1}^{g_n} |\varphi_n^j\rangle \langle \varphi_n^j | 0 \rangle$

$\rightsquigarrow$  (\*)

$$\sum_{j=1}^{g_n} \underbrace{\langle \varphi_n^i | \hat{W} | \varphi_n^j \rangle}_{g_n + g_n \text{ Matrixel.} \equiv (\hat{W}^{(n)})} \underbrace{\langle \varphi_n^j | 0 \rangle}_{\text{Vek-el.d. Dim } g_n} = \epsilon_1 \langle \varphi_n^i | 0 \rangle$$

$\Rightarrow w_{ij} \varphi_j = \epsilon_1 \varphi_i$  EW-Gleichung  $\langle \cdot | W | \cdot \rangle$

## 10.3 Gestörter harmonischer Oszillator

### 10.3.1 Störung durch ein lineares Potential

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 X^2$$

mit den EV

$$|\varphi_n\rangle$$

und EW

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

Störung:

$$W = \lambda \hbar \omega \hat{X} = \lambda \hbar \omega \sqrt{\frac{\omega m}{\hbar}} X$$

$\lambda \ll 1, \hbar \omega \hat{X} \sim \mathcal{O}(H_0)$

$H = H_0 + W$

Exakte Lösung:

$$\begin{aligned}
 V_0 + H &= \frac{1}{2}m\omega^2 \left( X^2 + 2\lambda\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}X + \left( \lambda\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \right)^2 \right) \frac{1}{2}m\omega^2\lambda^2\frac{\hbar}{m\omega} \\
 &= \frac{1}{2}m\omega^2 \left( \underbrace{X + \lambda\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}}_{X'} \right)^2 - \frac{1}{2}\lambda^2\hbar\omega = \frac{1}{2}m\omega^2 X'^2 - \frac{1}{2}\lambda^2\hbar\omega
 \end{aligned}$$

⇒ Energie-EW:

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

Störungsentwicklung

$$\hat{X} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^+ + a) \rightsquigarrow W = \lambda\frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}}(a^+ + a)$$

Ferner gilt:

$$a^+|\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1}|\varphi_{n+1}\rangle$$

$$a|\varphi_n\rangle = \sqrt{n}|\varphi_{n-1}\rangle$$

Damit

$$\langle\varphi_{n+1}|W|\varphi_n\rangle = \lambda\frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}}$$

$$\langle\varphi_{n-1}|W|\varphi_n\rangle = \lambda\frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}}\sqrt{n}$$

$$E_n(\lambda) = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega + 0 + \frac{\lambda^2(n+1)}{2} \frac{\hbar^2\omega^2}{(-\hbar\omega)} + \lambda^2 \frac{\hbar^2\omega^2}{2} n \frac{1}{\hbar\omega} + \mathcal{O}(\lambda^3)$$

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

Bem: Terme  $\mathcal{O}(\lambda^3)$ , ...verschwinden

$$\langle\varphi_{n-1}|W|\varphi_n\rangle = \lambda\sqrt{\frac{n+1}{2}}\hbar\omega$$

$$\langle\varphi_{n-1}|W|\varphi_n\rangle = \lambda\sqrt{\frac{n}{2}}\hbar\omega$$

---


$$|\psi_n(\lambda)\rangle = |\varphi_n\rangle + \lambda\sqrt{\frac{n+1}{2}}\frac{\hbar\omega}{-\hbar\omega}|\varphi_{n+1}\rangle + \lambda\sqrt{\frac{n}{2}}\frac{\hbar\omega}{\hbar\omega}|\varphi_{n-1}\rangle + \dots$$

$$= |\varphi_n\rangle - \lambda\sqrt{\frac{n+1}{2}}|\varphi_{n+1}\rangle + \lambda\sqrt{\frac{n}{2}}|\varphi_{n-1}\rangle + \dots$$

### 10.3.2 Störung durch quadratische Potential

$$W = \frac{1}{2}\rho\hbar\omega\hat{X}^2 = \frac{1}{2}\rho m\omega^2 X^2 \quad \rho \ll 1$$

$$H = H_0 + W = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(1+\rho)X^2 \quad | \cdot \frac{1}{2}m\omega^2 X^2$$

$$\omega'^2 = \omega^2(1+\rho)$$

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega' = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega\sqrt{1+\rho}$$

Entwicklung der Wurzel:

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

Störungstheorie:

$$\begin{aligned} W &= \frac{1}{4}\rho\hbar\omega(a^+ + a)^2 \\ &= \frac{1}{4}\rho\hbar\omega(a^{+2} + a^2 + a^+a + aa^+) \\ &= \frac{1}{4}\rho\hbar\omega(a^{+2} + a^2 + 2a^+a + 1) \end{aligned}$$

nicht-verschwindende Beiträge:

$$\begin{aligned} \langle \varphi_n | W | \varphi_n \rangle &= \frac{1}{4}\rho\hbar\omega(2n+1) \\ \langle \varphi_{n+2} | W | \varphi_n \rangle &= \frac{1}{4}\rho\hbar\omega\sqrt{(n+2)(n+1)} \\ \langle \varphi_{n-2} | W | \varphi_n \rangle &= \frac{1}{4}\rho\hbar\omega\sqrt{n(n-1)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} E_n &= E_n^0 + \frac{\rho}{2}\hbar\omega(n + \frac{1}{2}) + \frac{\rho^2}{16}\hbar^2\omega^2 \frac{(n+2)(n+1)}{-\hbar\omega} + \frac{\rho^2}{16}\hbar^2\omega^2 \frac{n(n-1)}{2\hbar\omega} \\ &= E_n^0 + \frac{\rho}{2}\hbar\omega(n + \frac{1}{2}) - (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \frac{\rho^2}{\rho} + \dots \\ &= (n - \frac{1}{2})\hbar\omega \left[ 1 + \frac{\rho}{2} - \frac{\rho^2}{\rho} + \dots \right] \end{aligned}$$

## 10.4 Stark-Effekt des Wasserstoffatoms

Wasserstoffatom in statischem el.Feld parallel zur z-Richtung.  $W_s = q\epsilon Z$ ;  $\epsilon = \text{El.Feld}$

1. quadratischer Stark-Effekt

Niveau  $n=1, l=0, m=0$  Grundzustand

1. Ordnung:  $\langle n=1, l=0, m=0 | n=1, l=0, m=0 \rangle_{\psi_\infty} \quad \psi_{100} \sim Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$

$W \sim z$ ,  $\psi_{100}$  rotationssymm.

$$= -q\epsilon \int d^3r |f(r)|^2 z = 0$$

2. Ordnung  $q^2 \epsilon^2 \sum_{n' \neq 1; l', m'} \frac{|\langle n' l' m' | z | n=1, l=0, m=0 \rangle|^2}{(E_1 - E_{n'})} \neq 0$

denn es gibt  $n' l' m' >$  mit entgegengesetzter Parität zu  $|100 \rangle$