

# **Theoretische Physik D**

Gehört bei Prof. Dr. Kühn

KIT - Karlsruher Institut für Technologie

Sommersemester 2012

Mitschriebe ausgearbeitet von

Philipp Basler, Nils Braun, Larissa Bauer

20. Juli 2012



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einführung, einfache Probleme in einer Dimension</b>	<b>5</b>
1.1	Elektromagnetische Wellen und Photonen . . . . .	6
1.2	Materiewellen . . . . .	9
1.3	Wellenpakate . . . . .	9
1.4	Zeitunabhängiges Potential . . . . .	14
<b>2</b>	<b>Mathematische Hilfsmittel</b>	<b>25</b>
2.1	Wellenfunktion als Zustandsraum . . . . .	25
2.2	Dirac-Notation . . . . .	30
2.3	Darstellungen im Zustandsraum . . . . .	33
2.4	Eigenwertgleichung . . . . .	35
<b>3</b>	<b>Postulate der Quantenmechanik</b>	<b>41</b>
3.1	Allgemeine Prinzipien . . . . .	41
3.2	Schrödinger Gleichung / Allgemeine Resultate . . . . .	45
<b>4</b>	<b>Harmonischer Oszillator</b>	<b>51</b>
4.1	Einführung . . . . .	51
4.2	Harmonischer Oszillator in der Quantenmechanik . . . . .	51
<b>5</b>	<b>Zweizustandssysteme</b>	<b>63</b>
5.1	Spin und magnetisches Moment . . . . .	63
5.2	Allgemeines Zwei-Zustand-System . . . . .	68
<b>6</b>	<b>Drehimpuls</b>	<b>73</b>
6.1	Vertauschungsrelation für Bahndrehimpuls . . . . .	73
6.2	Eigenwerte, Eigenzustände, algebraische Behandlung . . . . .	74
6.3	Bahndrehimpuls in Polarkoordinaten . . . . .	78
6.4	Drehimpuls als Erzeugender (Generator) der Drehungen . . . . .	81
6.5	Integrale der Bewegung und Symmetrieeigenschaften . . . . .	82

6.6	Rotation eines zweiatomigen Moleküls . . . . .	83
6.7	Geladene Teilchen im konstanten Magnetfeld . . . . .	84
<b>7</b>	<b>Zentralpotentiale, Wasserstoffatom</b>	<b>85</b>
7.1	Allgemeine Überlegung . . . . .	85
7.2	Wasserstoffatom . . . . .	88
7.3	Dichten und Ströme beim Wasserstoffatom . . . . .	92
7.4	Paramagnetismus/Diamagnetismus . . . . .	96
<b>8</b>	<b>Streutheorie in der nichtrelativistischen Quantenmechanik</b>	<b>99</b>
8.1	Einführung . . . . .	99
8.2	Partialwellen . . . . .	104
8.3	Behandlung mit Integralgleichung / Bornsche Näherung . . . . .	108
<b>9</b>	<b>Störungstheorie (zeitunabhängig)</b>	<b>113</b>
9.1	Methode . . . . .	113
9.2	Störung für ein nicht entartetes Niveau mit $E_n^0$ als Eigenwert . . . . .	115
9.3	Störungstheorie bei ( $g_n$ -facher) Entartung . . . . .	117
9.4	Beispiel: Eindimensionaler Harmonischer Oszillator mit Störpotential . . . . .	118
9.5	Näherungsmethoden . . . . .	124
9.6	Störungstheorie und Bändermodell . . . . .	126

# Kapitel 1

## Einführung, einfache Probleme in einer Dimension

**Historisch:** 1900 - 1925/27

Planck'sches Strahlungsgesetz bis Heisenberg/Schrödinger.

*Kopenhagener Interpretation:* Dualität zwischen Wellen und Teilchenbeschreibung für Photonen und auch für jedes andere Teilchen. Beschreibung der Bewegung eines Teilchens durch eine klassische Bahn ist nicht beliebig genau gültig.

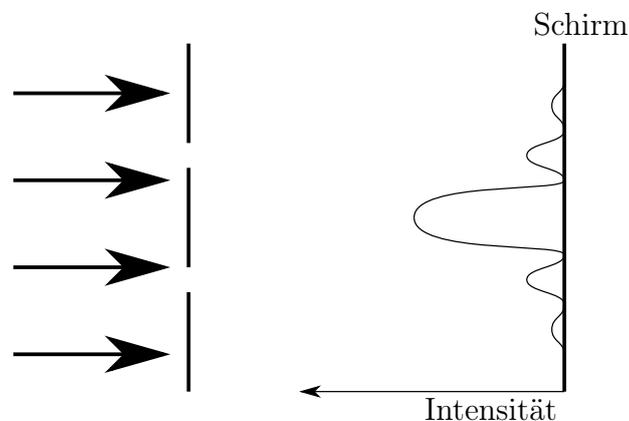


Abbildung 1.1: Doppelspalt-Experiment

Intensität ist nicht identisch mit der Summe der Intensitäten durch Spalt 1 und Spalt 2. Es gibt eine Interferenz und eine Wellenausbreitung. Was passiert wenn die einlaufende Intensität abnimmt? Wir beobachten das Eintreffen einzelner Teilchen, die individuell auf dem Schirm registriert werden.

*Intensität* entspricht einer Wahrscheinlichkeitsverteilung für Teilchen.

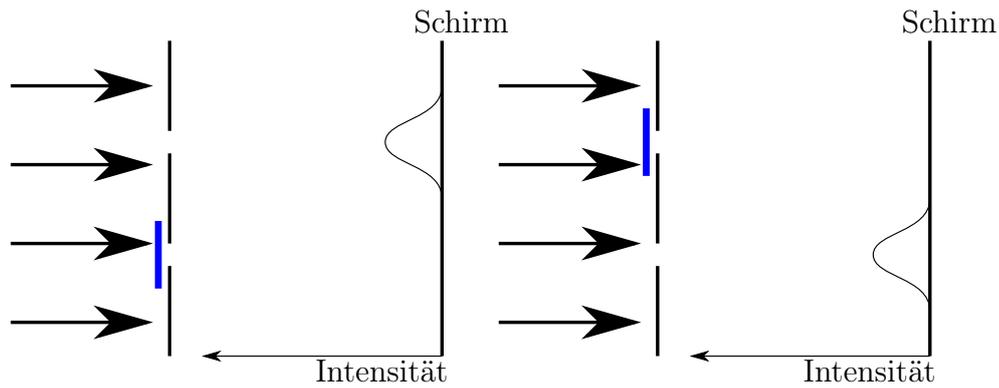


Abbildung 1.2: Doppelspalt-Experiment mit jeweils einem geschlossenen Spalt

Bedeutung der Quantenmechanik in fast allen Gebieten der Physik

- Grundlage der Stabilität der Materie. Elektronen haben Fermistatistik.

$$\psi(x_1, x_2) \rightsquigarrow -\psi(x_2, x_1)$$

Atombau, Chemie, Diskrete Atomniveaus

- Relativitätstheorie und Quantenmechanik verbindet ergibt die relativistische Quantenfeldtheorie. Daraus folgt die Existenz von Antiteilchen.

## 1.1 Elektromagnetische Wellen und Photonen

### 1.1.1 Zusammenhang zwischen Energie und Frequenz

Planck

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

Die Strahlungsenergie in einem Kasten ist quantisiert.

Es gilt

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} \quad h = 6.62 \cdot 10^{-34} \text{ Joule} \cdot \text{Sekunde}$$

Das Wirkungsquantum  $\left( \text{Erinnerung: Wirkung} = \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L}(q, \dot{q}, t) dt \right)$

Energiedifferenz von Atomniveaus

$$E_1 - E_2 = \hbar\omega_{\text{photon}}$$

Entsprechend bei Impuls und Wellenlänge. Bei der Compton-Streuung gilt

$$\gamma + e \rightarrow \gamma + e \quad \vec{p} = \hbar \vec{k}$$

Wobei  $\vec{k}$  den Wellenvektor bezeichnet mit

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

### 1.1.2 Ausbreitung

Intensität (Energiedichte pro Zeiteinheit)

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

Beitrag der durch Spalt 1 bzw 2 fallenden Welle:  $E_1(x), E_2(x)$  und damit

$$I(x) \propto |E_1(x) + E_2(x)|^2 \propto I_1(x) + I_2(x) + \underbrace{2E_1(x) \cdot E_2(x)}_{\text{Interferenzterm}}$$

entsprechend für die Wellenfunktion

$$I(x) \equiv \text{Wahrscheinlichkeitsverteilung der Photonen auf dem Schirm}$$

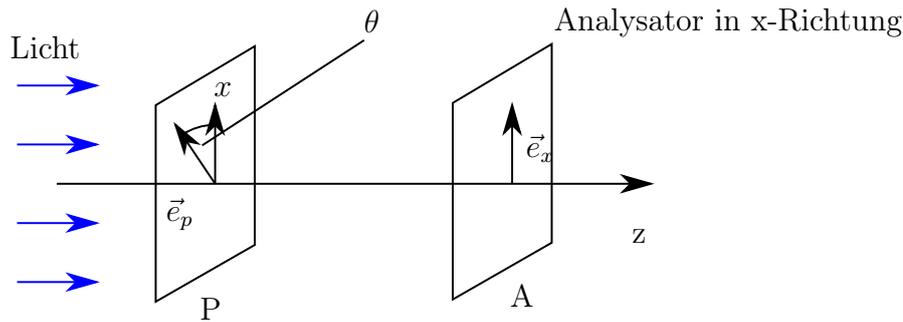
Die Bahn eines einzelnen Photons kann nicht angegeben werden.

### Anmerkungen

- (i) Superpositionsprinzip ist gültig für Wellenphänomene. Wenn  $E_1(x)$  und  $E_2(x)$  Lösungen der Maxwellgleichungen sind, so ist es auch  $E(x) = \lambda_1 E_1(x) + \lambda_2 E_2(x)$ .  $E$  genügt einer linearen Differentialgleichung, dies gilt auch in der Quantenmechanik.
- (ii) Eine große Zahl von Photonen (oder Experimenten) für das Interferenzmuster erforderlich.
- (iii) *Wichtigster Unterschied*: Elektromagnetisches Feld ist reell! Gelegentliche Beschreibung durch komplexe Zahlen ist nur ein Trick.  
In der Quantenmechanik ist  $\Re(\psi)$  und  $\Im(\psi)$  wesentlich.

### 1.1.3 Spektralzerlegung

Polarisiertes Licht mit Ausbreitungsrichtung  $z$  und Polarisation  $\vec{e}_p$ .



### Klassisches Resultat

- nach  $P$  : Licht polarisiert in  $\vec{e}_p$  Richtung.

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

$$I \propto E_0^2$$

- Nach Analysator:

$$\vec{E} = E'_0 \vec{e}_x \exp(i(kz - \omega t))$$

wobei

$$E'_0 = E_0 \vec{e}_p \cdot \vec{e}_x = E_0 \cos \theta$$

$$I' \propto E_0'^2 = E_0^2 \cos^2 \theta$$

**Quantenmechanik** Das Photon wird im Analysator gestoppt ( mit Wahrscheinlichkeit  $\sin^2 \theta$  ) oder durchgelassen (mit Wahrscheinlichkeit  $\cos^2 \theta$  ). Einzelwahrscheinlichkeit kann nicht mit Sicherheit vorhergesagt werden. Nach dem Analysator würde das Photon weitere Analysatoren (bezüglich  $x$ -Richtung) mit Sicherheit durchlaufen. Nach dem Analysator  $A$  ist es in einem *Eigenzustand*.

Für den Analysator  $A$  gibt es zwei Eigenzustände, mit Polarisation in Richtung  $\vec{e}_x$  und Polarisation in Richtung  $\vec{e}_y$ . Für diese Eigenzustände ist das Messresultat in  $A$  sicher: Durchgang ( $\vec{e}_x$ ) oder Stoppen ( $\vec{e}_y$ ).

Jeder Zustand mit Polarisation  $\vec{e}_p$  kann in Eigenzustände von  $A$  zerlegt werden

$$\vec{e}_p = \cos \theta \vec{e}_x + \sin \theta \vec{e}_y$$

Spektrale Zerlegung nach Eigenzuständen.

## 1.2 Materiewellen

de Broglie: Übertragung des Konzepts der Dualität von Welle und Teilchen von Photon auf beliebige Teilchen mit Masse.

- (i) klassische Trajektorie  $\vec{r}(t)$  wird ersetzt in der Quantenmechanik durch eine zeitlich veränderliche Wellenfunktion  $\psi(\vec{r}, t)$
- (ii) Wahrscheinlichkeitsdichte, gegeben durch  $|\psi(\vec{r}, t)|^2$ , das Teilchen am Ort  $\vec{r}$  zur Zeit  $t$  zu finden. Daraus folgt mit Normierung

$$\int |\psi|^2 dV = 1$$

- (iii) klassische Bewegungsgleichung  $\implies$  Schrödingergleichung

### Schrödingergleichung

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

Dies ist eine partielle DGL, die linear und homogen ist. Es gilt also das Überlagerungsprinzip.

1.Ordnung in  $t$ , Anfangswertproblem  $\implies \psi(\vec{r}, t)|_{t=t_0}$  bestimmt  $\psi(\vec{r}, t)$  für alle  $t$ .

## 1.3 Wellenpakete

### 1.3.1 Freies Teilchen

$$V = 0 : \quad i\hbar\partial_t\psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r}, t)$$

DGL mit konstanten Koeffizienten. Lösungsansatz :

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = A \exp\left(i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega_k t)\right)$$

Dies ist eine ebene Welle.  $A, \vec{k}$  ist beliebig. Die DGL liefert

$$\omega_k = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad \left(\hat{=} E = \frac{p^2}{2m}\right)$$

$$|\psi|^2 = |A|^2 = \text{const}$$

nicht integrierbar, da  $\int |A|^2 dV = \infty$ .

Lineare DGL: Jede Überlagerung von Lösungen mit verschiedenen  $\vec{k}$  und Gewicht als Funktion von  $\vec{k}$  ist wieder eine Lösung.

### Wellenpaket

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int g(\vec{k}) \exp(i(\vec{k}\vec{r} - \omega_k t)) d\vec{k}$$

Dies ist eine Lösung der Schrödingergleichung.

Bei fester Zeit  $t_0$  ( $t_0 = 0$  per Konvektion).

$$g(\vec{k}) = \mathcal{F}(\psi(\vec{r}, t = 0))$$

*Bemerkung:*  $\mathcal{F}(\psi)$  bezeichnet die Fouriertransformierte von  $\psi$ .

$$g(\vec{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}) \psi(\vec{r}, t = 0) d\vec{r}$$

zu einer festen Zeit ( $t = 0$ ) kann zu  $\psi$  immer die Fouriertransformierte angegeben werden.

Die Gleichung  $\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int g(\vec{k}) \exp(i(\vec{k}\vec{r} - \omega_k t)) d\vec{k}$  legt dann  $\psi(\vec{r}, t)$  für alle Zeiten fest. Die Gleichung gilt jedoch nicht bei Anwesenheit eines Potentials.

### 1.3.2 Zusammenhang zwischen $\psi(x, t = 0)$ und $g(k)$

Dies wird eindimensional besprochen.

Zusammenhang der Breite von  $\psi$  und  $g$ .

Ansatz (o.B.d.A.)

$$g(k) = |g(k)| \exp(i\alpha(k))$$

*Annahme*

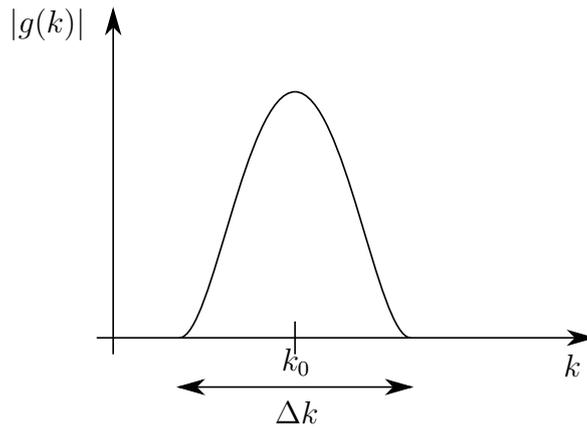
(1)  $g$  sei glatt und nur im Intervall  $[k_0 - \frac{\Delta k}{2}, k_0 + \frac{\Delta k}{2}]$  wesentlich von Null verschieden.

(2)  $\alpha(k)$  variiert nur wenig in diesem Bereich. Taylor Entwicklung:

$$\alpha(k) = \alpha(k_0) + (k - k_0) \frac{d\alpha}{dk} \Big|_{k=k_0}$$

Definiere

$$X_0 := - \frac{d\alpha}{dk} \Big|_{k=k_0}$$



$$\begin{aligned}
 \psi(x, t = 0) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int g(k) \exp(ikx - \omega_k \cdot 0) \, dk \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int |g(x)| \exp(i(\alpha(k_0) - (k - k_0)X_0) + k_0x - k_0x + kx) \, dk \\
 &= \exp(i(\alpha(k_0) + k_0x)) \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \int |g(x)| \exp(i(k - k_0)(x - X_0)) \, dk
 \end{aligned}$$

Falls  $x = X_0$ . nur positive Beiträge  $|\psi|$  wird maximal.

Falls  $|x - X_0| \gg \frac{1}{\Delta k}$ . viele Oszillationen im Integrationsgebiet  $\implies |\psi|$  klein.

**Beispiel** Sei nun

$$|x - X_0| \Delta k = 5 \cdot 2\pi$$

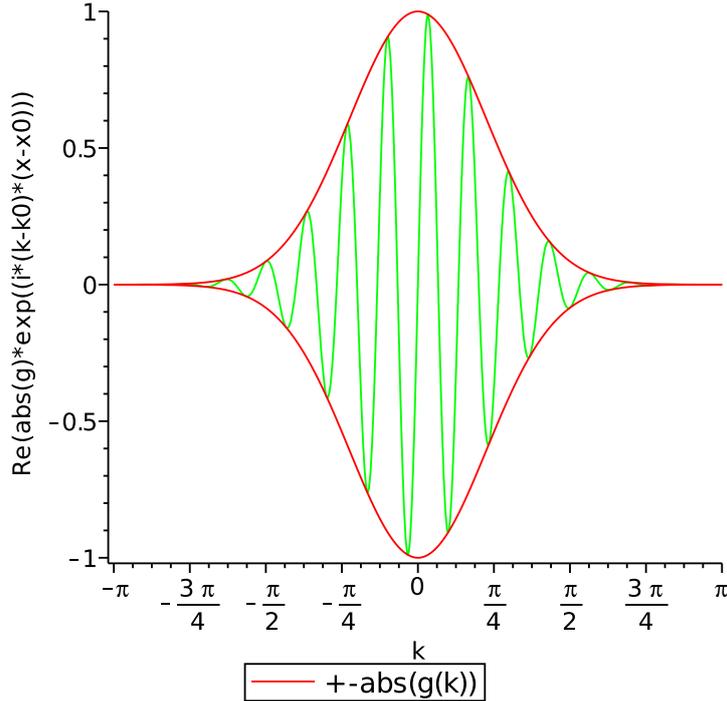


Abbildung 1.3: Die Breite des Wellenpakets ist  $\Delta k$

Starke Oszillation liefert also kleines Integral. Maximum des Wellenpakets im Ortsraum bei  $X_0 = -\frac{d\alpha}{dk}\bigg|_{k=k_0}$ . Breite im Ortstraum

$$\Delta x \approx \frac{1}{\Delta k}$$

Aus der Mathematik bekannt gibt es bei Fouriertransformationen den Zusammenhang zwischen  $f$  und  $\tilde{f} = \mathcal{F}(f)$ . In der Quantenmechanik  $p = \hbar k$ . Zusammenhang zwischen der Breite von

$$\frac{dN}{dx} = |\psi(x, 0)|^2 \quad \frac{dN}{dp} = |\tilde{\psi}(p, 0)|^2$$

mit

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \tilde{\psi}(p, 0) \exp\left(ip\frac{x}{\hbar}\right) dp \quad g(k) = \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \tilde{p}$$

### 1.3.3 Zeitliche Entwicklung eines freien Wellenpakets

Ebene Welle  $\psi(x, t) = \exp(i(kx - \omega t))$  wobei i.A.  $\omega = \omega(k)$  die *Dispersionsrelation* beschreibt.

Ebene Welle: von der Form  $f\left(x - \frac{\omega}{k}t\right)$ .

$$v_\varphi(k) = \frac{\omega}{|k|} = \text{Phasengeschwindigkeit}$$

Bei elektromagnetischen Wellen im Vakuum

$$\omega = c|k|$$

Überlagerung von Wellen mit verschiedenen  $k$  führt zu

$$f_1(x - ct) + f_2(x + ct)$$

Wellen im Medium: Phasengeschwindigkeit

$$v_\varphi(k) = \frac{c}{n(k)}$$

Wobei  $n(k)$  den Brechungsindex beschreibt.

In der Quantenmechanik

$$\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m} \implies v_\varphi(k) = \frac{\hbar k}{2m}$$

Welle im Abschnitt 2

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int |g(k)| \exp(i(\alpha(k) - \omega(k)t) + ikx) dk$$

Es wird  $\alpha(k)$  durch  $\alpha(k) - \omega(k)t$  ersetzt.

$$X_{max}(t) = -\frac{d}{dk} (\alpha(k) - \omega(k)t) \Big|_{k=k_0}$$

verschiebt sich um

$$|X_{max}(t) - X_{max}(0)| = \frac{d\omega(k)}{dk} \Big|_{k=k_0} t$$

Die Gruppengeschwindigkeit

$$v_G(k_0) = \frac{d\omega}{dk} \Big|_{k=k_0} = \frac{\hbar k_0}{m} = \frac{p_0}{m}$$

wie das klassische Resultat.

## 1.4 Zeitunabhängiges Potential

### 1.4.1 Separation der Variablen $\vec{r}, t \implies$ stationäre Zustände

Schrödingergleichung

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

Wähle einen Produktansatz

$$\psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r})\chi(t)$$

Also

$$i\hbar\frac{\partial_t\chi(t)}{\chi(t)} = \frac{1}{\varphi(\vec{r})} \left( -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\varphi(\vec{r}) \right)$$

Da jeweils beide Seiten Funktionen unterschiedlicher Variablen sind, müssen sie die gleiche Konstante ergeben. Wähle als Konstante  $\hbar\omega$ .

(a) Lösung für  $\chi(t)$

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t\chi(t) &= \hbar\omega\chi(t) \\ \chi(t) &= A \exp(-i\omega t) \end{aligned}$$

(b) Lösung für  $\varphi(\vec{r})$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi(\vec{r}) + V(\vec{r})\varphi(\vec{r}) = \hbar\omega\varphi(\vec{r})$$

Nach Planck, Einstein gilt  $E = \hbar\omega$ . Dann

#### Zeitunabhängige Schrödingergleichung

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

Dies ist eine Eigenwertgleichung zum Operator

$$H := \left( -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}) \right)$$

mit Eigenwert  $E$  und  $\varepsilon_E$  Eigenfunktion.

Es ist also

$$\psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r}) \exp(-i\omega t)$$

ein stationärer Zustand. Für ein festes  $\omega$  ist die Wahrscheinlichkeitsdichte  $|\psi|^2$  unabhängig von der Zeit.

Die Schrödingergleichung gibt uns die Zeitentwicklung der Wellenfunktion und die zeitunabhängige Schrödingergleichung liefert uns die stationären Zustände und deren Energien. Überlagerung von stationären Zuständen

$$H\varphi_n(\vec{r}) = E_n\varphi_n(\vec{r})$$

Die stationären Zustände sind

$$\psi_n(\vec{r}, t) = \varphi_n(\vec{r}) \exp\left(-i\frac{E_n t}{\hbar}\right)$$

Dann ist

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_n c_n \varphi_n(\vec{r}) \exp\left(-i\frac{E_n t}{\hbar}\right)$$

für beliebige komplexe  $c_n$  Lösung der Schrödingergleichung. Dann ist  $|\psi(\vec{r}, t)|^2$  im Allgemeinen zeitabhängig. Beispiel: Zwei Energien  $E_1, E_2$ . Später: Jede Lösung der Schrödingergleichung kann in der Form  $\psi(\vec{r}, t) = \sum_n c_n \varphi_n(\vec{r}) \exp\left(-i\frac{E_n t}{\hbar}\right)$  geschrieben werden.

### 1.4.2 Stufenpotentiale (qualitativ)

Idealisierung von Stufenprozessen.

Eindimensionale Bewegung : Klassisches Teilchen läuft weiter, solange  $E > V_0$  oder zurück falls  $E < V_0$ .

Die stationäre Schrödingergleichung liefert

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

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

Analogie zur Optik:

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

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{n^2\omega^2}{c^2}\right] E(x) = 0$$

Wellengleichung im Medium ( $n$  = Brechungsindex). Großer Brechungsindex entspricht einer kleinen Phasengeschwindigkeit.

Übertragung in die Quantenmechanik:

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

Eine abrupte Zunahme von  $V$  entspricht einer Abnahme von  $n^2$ .

$$n^2 \begin{cases} > 0 & \text{transparenten} \\ < 0 & \text{totalreflektieren} \end{cases} \quad \text{Medium, z.b. Glas, Luft bzw. Metall.}$$

$$\text{Ausbreitung} \begin{cases} \exp(\pm ikx) & k = \frac{\omega}{c} \sqrt{n^2} & n^2 > 0 \\ \exp(\pm \rho x) & \rho = \frac{\omega}{c} \sqrt{-n^2} & n^2 < 0 \end{cases}$$

## Beispiele

(a) Stufe

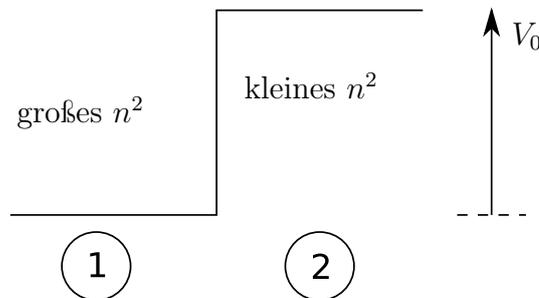


Abbildung 1.4: 1. großes  $n^2$  und 2. kleines  $n^2$

Brechungsindex :

$$n_1 = \frac{c}{\hbar\omega} \sqrt{2mE} \quad n_2 = \frac{c}{\omega\hbar} \sqrt{2m(E - V_0)}$$

Da

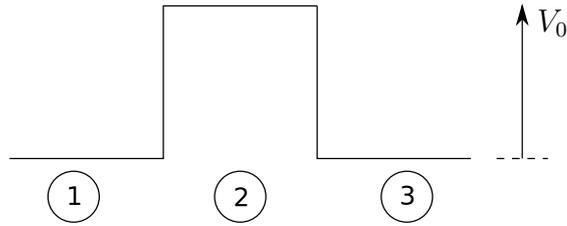
$$E > V_0 \implies n_1^2 > n_2^2 > 0$$

Teilreflexion an der Grenzschicht zwischen zwei Medien mit verschiedenen  $n$  ( klassisches Teilchen läuft langsamer weiter)

$$0 < E < V_0 \implies n_2^2 < 0 \quad n_2 = i \frac{c}{\hbar\omega} \sqrt{2m(V - E_0)}$$

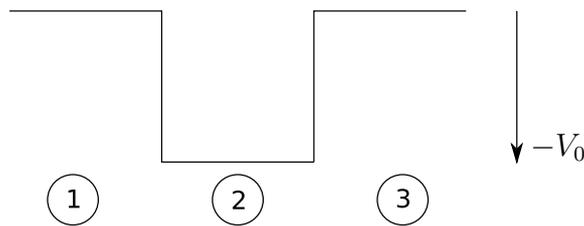
Totalreflexion! aber trotzdem ein Eindringen in die Grenzschicht.

(b) Barriere



Für  $0 < E < V_0$  : klassisches Teilchen hat Totalreflexion am Rand. Optik: Welle dringt von 1 nach 2 ein, läuft zum Teil weiter nach 3, wird aber zum Teil auch reflektiert.

(c) Topf



Sei  $-V_0 < E < 0$ : klassisch : beliebige Energien  $-V_0 < E < 0$  sind zulässig nach 1,3.

Optik: oszillierende Wellen nur in 2, Dämpfung in 1, 3.

Lösungen nur für diskrete Werte von  $k$ .

$E > 0$  teilweise Transmission, teilweise Reflexion.

### 1.4.3 Stufen-Potential (quantitativ)

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

$V$  sei konstant

(i)

$$E > V \quad \varphi(x) = A \exp(ikx) + A' \exp(-ikx)$$

$$A, A' \text{ komplex, beliebig, } \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E - V$$

(ii)

$$E < V \quad \varphi(x) = B \exp(\rho x) + B' \exp(-\rho x)$$

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

(iii)

$$E = V \quad \varphi(x) = c + c'x$$

**Anschlussbedingung bei Sprungstelle** Ersetze den Sprung durch glatten Übergang im Intervall  $[-\varepsilon, \varepsilon]$ . Integriere die Schrödingergleichung von  $x_0 - \varepsilon$  bis  $x_0 + \varepsilon$

$$\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} \frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) dx = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} \underbrace{(V_\varepsilon(x) - E)}_{\text{beschränkt}} \varphi(x) dx$$

$$\frac{2m}{\hbar^2} \int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} (V_\varepsilon(x) - E) \varphi(x) dx \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0$$

$$\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} \frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) dx = \frac{d}{dx} \varphi(x) \Big|_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} = \frac{d}{dx} \varphi(x_0 + \varepsilon) - \frac{d}{dx} \varphi(x_0 - \varepsilon)$$

$$\xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0$$

Daraus folgt, dass die Ableitung stetig ist an der Grenze. Ebenso ist  $\varphi(x)$  stetig (Integral einer stetigen Funktion). Ferner gilt

$$\frac{d^2}{dx^2} \varphi(x + \varepsilon_0) - \frac{d^2}{dx^2} \varphi(x_0 - \varepsilon) = \frac{2m}{\hbar^2} \Delta V \varepsilon(x_0)$$

Dies ist nicht unabhängig, sondern folgt aus den Stetigkeitsbedingungen und der Schrödingergleichung.

Zusammengefasst haben wir also die Bedingungen

$$\varphi(x) \text{ ist stetig} \quad (\text{Bed1})$$

$$\varphi'(x) \text{ ist stetig} \quad (\text{Bed2})$$

$$\frac{d^2}{dx^2} \varphi(x + \varepsilon_0) - \frac{d^2}{dx^2} \varphi(x_0 - \varepsilon) = \frac{2m}{\hbar^2} \Delta V \varepsilon(x_0) \quad (\text{Bed3})$$

## Beispiele

(a) Stufe bei  $x_0 = 0$   $E > V_0$

Wir setzen an

$$k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad \varphi_1(x) = A_1 \exp(-ik_1x) + A_1' \exp(ik_2x)$$

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} \quad \varphi_2(x) = A_2 \exp(ik_2x) + A_2' \exp(-ik_2x)$$

Die Bedingungen Bed1 bis Bed3 liefern nun

$$A_1 + A'_1 = A_2 + A'_2 \quad (1.1)$$

$$k_1(A_1 - A'_1) = k_2(A_2 - A'_2) \quad (1.2)$$

Die Bedingung Bed3 ist wegen der Wahl von  $k_1, k_2$  und Bed1 erfüllt.

- Die Normierung ist unbestimmt  $\implies$  nur Verhältnisse von  $A, A'$  oder man setzt  $A_1 = 1$ .
- wähle  $A'_2 = 0$  als Randbedingung  $\implies$  im zweiten Bereich nur auslaufende Welle.

$$\begin{aligned} 1 + A'_1 &= A_2 \\ k_1(1 - A'_1) &= k_2 A_2 \end{aligned}$$

Dies liefert

$$\begin{aligned} A'_1 &= \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \\ A_2 &= \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \end{aligned}$$

Wir haben also als Lösung

$$\varphi(x) = \begin{cases} \exp(ik_1x) + \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \exp(-ik_1x) & x < 0 \\ \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \exp(ik_2x) & x \geq 0 \end{cases}$$

Die Intensitäten sind  $\propto |\varphi|^2$ . Die reflektierte Intensität läuft mit dem Reflexionskoeffizient

$$R = \left( \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2$$

Der Transmissionskoeffizient beträgt

$$T = \left( \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \right)^2 \cdot \frac{k_2}{k_1} = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

Der zusätzliche Faktor  $\frac{k_2}{k_1}$  ist das Verhältnis der klassischen Geschwindigkeiten bzw der Stromdichten.

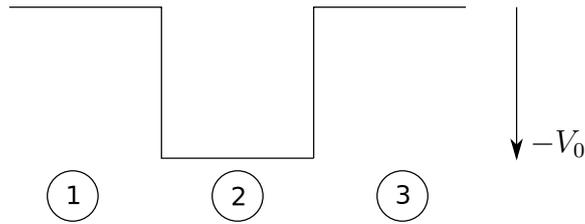


Abbildung 1.5: Potentialtopf

Wir sehen

$$R + T = 1$$

(b) Stufe bei  $x_0 = 0$  mit  $E < V_0$

$$k_2 \rightarrow i\rho_2 = i\sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

Die Lösung ist dann

$$\varphi_2(x) = B_2 \exp(\rho_2 x) + B'_2 \exp(-\rho_2 x)$$

Forderung  $B_2 = 0 \implies$  exponentieller Abfall im verbotenen Bereich.

Normierung :  $A_1 = 1$  . Die Lösung für  $A'_1$  wie zuvor mit  $k_2 = i\rho_2$ . Der Reflexionskoeffizient liefert

$$|A'_1|^2 = \left| \frac{k_1 - i\rho_2}{k_1 + i\rho_2} \right|^2 = 1$$

Transmission ist also  $T = 0$ .

Änderung der Phase : Phasensprung liefert Laufzeitunterschied.

$$\varphi(x) = \begin{cases} \exp(ik_1 x) + \frac{k_1 - i\rho_2}{k_1 + i\rho_2} \exp(-ik_1 x) & x < 0 \\ \frac{2k_1}{k_1 + i\rho_2} \exp(-\rho_2 x) & x \geq 0 \end{cases}$$

Für die Phase gilt

$$\frac{k_1 - i\rho_2}{k_1 + i\rho_2} = \exp(-2i\delta) \quad \tan(\delta) = \frac{\rho_2}{k_1}$$

(c) Potentialtopf mit  $-V_0 < E < 0$  zu sehen in 1.5

Hier haben wir

$$\begin{aligned}
\varphi_1(x) &= B_1 \exp(\rho x) + B'_1 \exp(-\rho x) \\
\varphi_3(x) &= B_3 \exp(\rho x) + B'_3 \exp(-\rho x) \\
\varphi_2(x) &= A_2 \exp(ikx) + A'_2 \exp(-ikx) \\
\rho &= \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} \\
k &= \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 + E)}
\end{aligned}$$

Damit die Lösungen im unendlichen verschwinden, folgt

$$B'_1 = B_3 = 0$$

Es gibt weiterhin vier Konstanten und mit den Anschlussbedingungen folgt

$$\begin{aligned}
B_1 \exp\left(-\frac{\rho a}{2}\right) &= A_2 \exp\left(-k\frac{a}{2}\right) + A'_2 \exp\left(ik\frac{a}{2}\right) \\
\rho \exp\left(-\frac{\rho a}{2}\right) &= ikA_2 \exp\left(-k\frac{a}{2}\right) - ikA'_2 \exp\left(ik\frac{a}{2}\right) \\
A_2 &= B_1 \left(\frac{ik + \rho}{2ik}\right) \exp\left(\left(ik - \rho\right)\frac{a}{2}\right) \\
A'_2 &= B_1 \left(\frac{ik - \rho}{2ik}\right) \exp\left(-\left(ik + \rho\right)\frac{a}{2}\right) \\
\frac{A_2}{A'_2} &= \left(\frac{ik + \rho}{ik - \rho}\right) \exp(ika)
\end{aligned}$$

Da  $\left\|\frac{A_2}{A'_2}\right\| = 1$  ist dies also nur ein Phasenunterschied,  $B$  fällt raus.

Entsprechend bei  $x = \frac{a}{2}$ . Ersetze also  $\rho \rightarrow -\rho$ ,  $a \rightarrow -a$ .

Daraus folgt

$$\frac{A_2}{A'_2} = \left(\frac{ik - \rho}{ik + \rho}\right) \exp(-ika)$$

Normierung ist zunächst unbestimmt, aber Forderung der Normierbarkeit liefert  $B'_1 = B_3 = 0$ . Daraus folgt eine Eigenwertgleichung für  $E$  aus der Forderung

$$\left(\frac{ik - \rho}{ik + \rho}\right) \exp(-ika) = \left(\frac{ik + \rho}{ik - \rho}\right) \exp(ika)$$

Dies ergibt umgeformt

## Eigenwertgleichung für die Energie

$$\left(\frac{ik - \rho}{ik + \rho}\right)^2 = \exp(2ika)$$

mit

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 + E)} \quad \rho = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(-E)}$$

Es gibt zwei Lösungstypen ( Gerade und ungerade).

**Fall 1**

$$\frac{ik - \rho}{ik + \rho} = \exp(ika)$$

**Fall 2**

$$\frac{ik - \rho}{ik + \rho} = -\exp(ika)$$

Winkelfunktionen:

•

$$\frac{k + i\rho}{k - i\rho} = \exp(2i\theta)$$

Wobei  $\theta$  die Phase von  $k + i\rho$  ist.

•

$$\tan(\theta) = \frac{\rho}{k} \iff \arctan(\theta) = \frac{\rho}{k}$$

•

$$\exp(ika) = \exp(2i\theta) \iff \exp\left(ik\frac{a}{2}\right) = \exp(i\theta)$$

Dies liefert

$$\frac{\rho}{k} = \tan\left(\frac{ka}{2}\right)$$

Umformen liefert

$$\tan\left(\frac{ka}{2}\right) > 0 \implies \left|\cos\left(\frac{ka}{2}\right)\right| = \frac{k}{k_0} \quad k_0 = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}$$

Der zweite Fall liefert analog

$$\tan\left(\frac{ka}{2}\right) < 0 \implies \left|\sin\left(\frac{ka}{2}\right)\right| = \frac{k}{k_0}$$

Die graphische Lösung ist in 1.6 zu sehen.

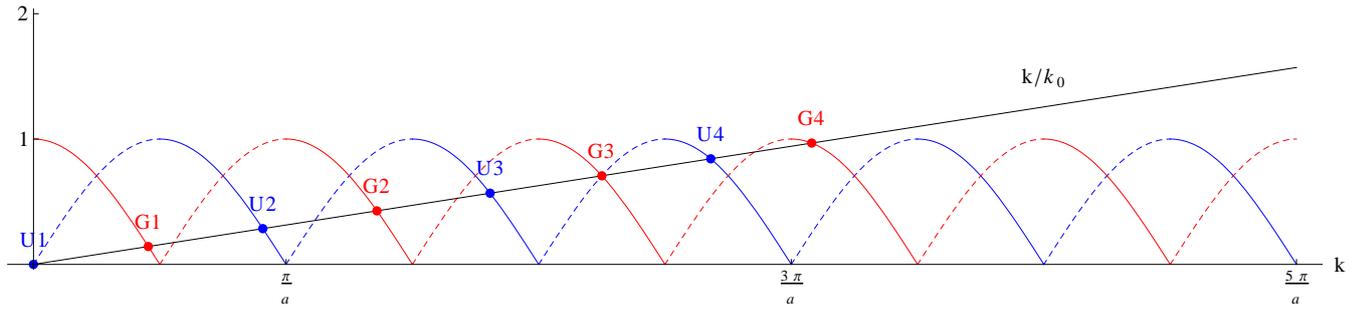


Abbildung 1.6: Graphische Lösung

Gerade und ungerade Lösung für  $\varphi(x)$  mit wachsenden  $v_0$  bzw  $k_0$  wird die Gerade immer flacher. Es gibt also immer mehr Lösungen bei etwa  $n\frac{\pi}{a}$ . Für sehr tiefen Topf

$$E \approx \frac{1}{2m} \left( \frac{n\pi\hbar}{a} \right)^2$$

### Verhalten von Wellenpaketen bei der Streuung Zeitunabhängige Lösung

$$\varphi_{k_1} = \begin{cases} \exp(ik_1x) + \frac{k_1-k_2}{k_1+k_2} \exp(-ik_1x) & x < 0 \\ \frac{2k_1}{k_1+k_2} \exp(ik_2x) & x > 0 \end{cases}$$

Weiterhin

$$k_2 = \sqrt{k_1^2 - V_0 \frac{2m}{\hbar^2}} \quad \omega = \frac{\hbar k_1^2}{2m}$$

Für die zeitabhängige Lösung gilt

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int g(k_1) \varphi_{k_1}(x) \exp(-i\omega_{k_1}t) dk_1$$

wobei  $g(k_1)$  bei  $k_0$  konzentriert ist. Verhalten im Ortsraum über die Bedingung der stationäre Phase.

**Bereich  $x < 0$**  Zwei Beiträge

•

$$\begin{aligned} \frac{d}{dk_1} (k_1x - \omega_{k_1}t) \Big|_{k_1=k_0} &= 0 \\ \implies \left( x - \frac{\hbar k_1}{m} t \right) \Big|_{k_1=k_0} &= 0 \end{aligned}$$

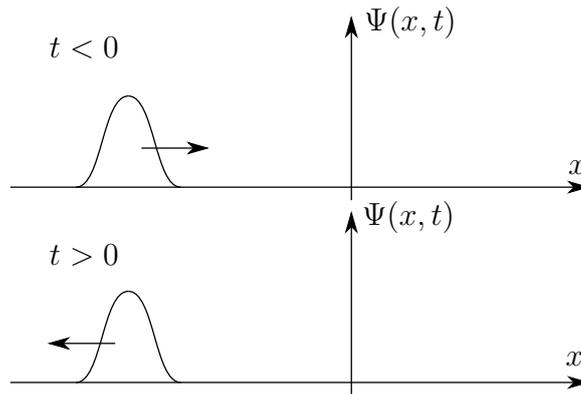


Abbildung 1.7: Graphik der einzelnen Bereiche

$\psi(x, t)$  hat ein Maximum bei

$$x = \frac{\hbar k_0}{m} t \implies t < 0$$

•

$$x = -\frac{\hbar k_0}{m} t$$

Mit der Forderung  $x < 0$  folgt  $t > 0$ . Zu sehen in Bild 1.7.

**Bereich  $x > 0$**

$$\begin{aligned} \frac{d}{dk_1} (k_2 x - \omega_{k_1} t) \Big|_{k_1=k_0} &= 0 \\ \implies \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{k_0^2 - V_0^2 \frac{2m}{\hbar^2}}} \cdot 2k_0 x - \frac{\hbar k_0}{m} t &= 0 \end{aligned}$$

$$x = \sqrt{k_0^2 - \frac{2mV_0}{\hbar^2}} \frac{\hbar}{m} t = \sqrt{\frac{2(E_0 - V_0)}{m}} t \quad E_0 = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}$$

gilt also für  $t > 0$ .

# Kapitel 2

## Mathematische Hilfsmittel

Wellenfunktion  $\psi(x, t)$ ,  $|\psi(x, t)|^2$  ist die Wahrscheinlichkeitsdichte als Funktion vom Ort. Alternativ  $\tilde{\psi}$ ,  $|\tilde{\psi}|^2$  als Funktion des Impulses.

Alternativ: Angabe von  $E_n$  (falls Energie-Eigenzustand) oder des relativen Gewichtes. Verschiedenartige Beschreibungen der gleichen Messungen. Erwartungswert des Impulses (Mittelwert)

$$\begin{aligned}\langle p \rangle &= \int \tilde{\psi}^*(p) p \tilde{\psi}(p) dp \\ &= \int \psi^*(x) \frac{\hbar}{i} \partial_x \psi(x) dx\end{aligned}$$

*Ziel:* Abstrakte Beschreibung eines Zustands (statt Bahnkurve in der klassischen Physik) als Element eines linearen Raums (Hilbertraum) und der Messgrößen (Observable) durch hermitesche (genauer : selbstadjungierte) Operatoren unabhängig von der Basis. Messung  $\iff$  Matrixelement.

## 2.1 Wellenfunktion als Zustandsraum

### 2.1.1 Zustandsraum $\mathcal{F}$

Wir betrachten den  $L^2$ , den Raum der quadratintegriblen Funktionen. Oft zusätzliche Einschränkungen, abhängig von der Problemstellung. (z.B. stetig, diffbar, beschränkter Träger). Sei

$$\mathcal{F} = \{\text{genügend reguläre Funktionen} \in L^2\}$$

- $\mathcal{F}$  soll ein linearer Raum sein

$$- \psi_1, \psi_2 \in \mathcal{F} \implies \psi = \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2 \in \mathcal{F} \text{ da } |\psi|^2 \text{ ebenfalls integribel ist.}$$

**Beweis:**

$$|\psi|^2 = |\lambda_1|^2 |\psi_1|^2 + |\lambda_2|^2 |\psi_2|^2 + 2\Re(\lambda_1 \cdot \lambda_2 \psi_1 \cdot \psi_2^*)$$

$$< |\lambda_1 \lambda_2| (|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2)$$

Da  $\psi_1, \psi_2 \in L^2$  ist dies also endlich.

– Skalarprodukt:

$$(\varphi, \psi) \equiv \int \varphi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) d\vec{r}$$

Es gilt

$$(\varphi, \psi)^* = (\psi, \varphi)$$

$$(\varphi, \psi) \text{ ist } \begin{cases} \text{linear} \\ \text{antilinear} \end{cases} \text{ bezüglich } \begin{cases} \psi \\ \varphi \end{cases} \iff \begin{cases} (\varphi, \lambda\psi) = \lambda(\varphi, \psi) \\ (\lambda\varphi, \psi) = \lambda^*(\varphi, \psi) \end{cases}$$

Falls  $(\varphi, \psi) = 0 \iff \varphi$  und  $\psi$  sind orthogonal. Ferner  $(\psi, \psi) = 0 \iff \psi = 0$ .

Weiterhin definiert das Skalarprodukt eine Norm  $|\cdot|$  mit

$$|\psi|^2 = (\psi, \psi)$$

*Schwarz'e Ungleichung*

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

**Beweis:** Betrachte

$$\psi = \psi_1 - \frac{(\psi_2, \psi_1)}{(\psi_2, \psi_2)} \psi_2$$

$$\dots (\psi_1, \psi_1) (\psi_2, \psi_2) > (\psi_1, \psi_2) (\psi_2, \psi_1)$$

- Lineare Operatoren

Lineare Abbildung  $A: \varphi(\vec{r}) = A\psi(\vec{r})$  mit  $\psi, \varphi \in \mathcal{F}$  wobei

$$A(\lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2) = \lambda_1 A\psi_1 + \lambda_2 A\psi_2$$

**Beispiele**

– Ortsoperator  $X \hat{=} \text{Multipliziere mit } x$ .

$$X\psi(x, y, z) = x\psi(x, y, z)$$

– Ableitungsoperator

$$D_x \psi(x, y, z) = \frac{d}{dx} \psi(x, y, z)$$

– Paritätsoperator

$$\Pi \psi(x, y, z) = \psi(-x, -y, -z)$$

– Hamiltonoperator

$$H \psi(x, y, z) = \left( -\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} + V(x, y, z) \right) \psi(x, y, z)$$

*Anmerkung:* Ein Operator  $A$  ist im Allgemeinen nicht für alle Zustände definiert.

### Beispiel

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{a}{2}} \frac{1}{a + |x|}$$

mit  $\int |\psi|^2 dx = 1$  aber  $\int x^2 |\psi|^2 dx \rightarrow \infty$ . Also ist  $x\psi(x)$  kein normierbarer Zustand.

- Produkt  $AB$  definiert durch

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

Im Allgemeinen

$$AB \neq BA$$

Definiere hierfür den *Kommutator*

$$[A, B] \equiv AB - BA$$

### Beispiel

$$[x, D_x] \psi(\vec{r}) = \left( x \frac{d}{dx} - \frac{d}{dx} x \right) \psi = x \frac{d\psi}{dx} - \frac{dx\psi}{dx} = -\psi$$

Also

$$[x, D_x] = -1$$

oder

$$\left[ x, \frac{\hbar}{i} D_x \right] = i\hbar$$

## 2.1.2 Orthonormierte Basis

Vektor wird charakterisiert durch Komponenten bzgl einer orthonormierten Basis  $\{u_i\}, u_i(\vec{r}) \in \mathcal{F}, i = 1, \dots, n$  und

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

$\{u_i\}$  ist eine Basis von  $\mathcal{F}$ , wenn jedes  $\psi \in \mathcal{F}$  geschrieben werden kann als

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

Berechnung von  $c_i$

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

- Skalarprodukte in Komponentenschreibweise

$$\varphi = \sum_i b_i u_i \quad \psi = \sum_i c_i u_i$$

Dann

$$(\varphi, \psi) = \sum_i b_i^* c_i$$

$$(\psi, \psi) = \sum_i |c_i|^2$$

- Vollständigkeitsrelation Für jede Funktion  $\psi \in \mathcal{F}$  gilt

$$\begin{aligned} \psi &= \sum_i c_i u_i \\ &= \sum_i (u_i, \psi) u_i \\ &= \int \psi(\vec{r}') \sum_i u_i^*(\vec{r}') u_i(\vec{r}) d\vec{r}' \end{aligned}$$

Also folgt mit  $\psi(\vec{r}) = \int \psi(\vec{r}') \delta(\vec{r}' - \vec{r})$

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

Dies gilt, da  $\psi$  beliebig war. Dies nennt sich *Vollständigkeitsrelation*

### 2.1.3 Ebene Wellen und andere verallgemeinerte Basiszustände

- Ebene Welle  $v_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right)$ .  $p$  ist hier ein kontinuierlicher Index und  $v_p \notin \mathcal{F}$ . Zerlegung eines Wellenpakets nach ebenen Wellen entspricht einer Entwicklung nach Basis  $\{v_p\}$ , dies ist eine Fourier-Transformation (Betrachte eindimensionalen Fall).

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \tilde{\psi}(p) \exp(ipx) dp$$

$$\underbrace{\int dp}_{\Sigma_i} \underbrace{\tilde{\psi}(p)}_{c_i} \underbrace{\frac{\exp(ipx)}{\sqrt{2\pi\hbar}}}_{u_i}$$

und ebenso bei der Rücktransformation.

*Parseval'sche Identität*

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

Diese sind auch vollständig und orthonormal.

- Weiteres Beispiel ist  $\{\xi_{x_0}(x)\}$  mit  $\xi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0)$
- beliebige kontinuierliche Basis  $\{w_\alpha\}$ 
  - orthonormiert  $(w_\alpha, w_\beta) = \delta(\alpha - \beta)$
  - vollständig  $\int w_\alpha^*(x)w_\alpha(x') d\alpha = \delta(x - x')$
- gemischte Basis aus diskreten und kontinuierlichen Basisvektoren. Potentialtopf :  $\{w_{E_n}\} : E < 0$  endliche Anzahl von Zuständen mit  $E < 0$ .  $\{w_E\} : E > 0$  unendlich viele kontinuierliche Lösungen mit  $E > 0$ .

Mögliche Basis  $\{w_{E_n}, w_E\}$  .

Eigenschaft einer gemischten Basis  $\{w_\alpha, u_i\}$

- orthonormiert

$$(u_i, u_j) = \delta_{ij} \quad (w_\alpha, w_\beta) = \delta(\alpha - \beta) \quad (u_i, w_\alpha) = 0$$

- Vollständigkeitsrelation

$$\sum_i u_i^*(x)u_i(x') + \int w_\alpha^*(x)w_\alpha(x') d\alpha = \delta(x - x')$$

## 2.2 Dirac-Notation

### 2.2.1 Einführung

Der Zustand eines Teilchens wird durch die Wellenfunktion  $\psi(x)$  oder ihre Komponenten bezüglich einer Basis beschrieben.

Basis	Index	Komponenten	$\psi(\vec{r})$	Bezeichnung
$u_i$	$i$	$c_i$	$\sum_i c_i u_i$	Allgemeinen
$v_p(x)$	$p$	$\tilde{\psi}(p)$	$\int \tilde{\psi}(p) v_p \, dp$	Impulsdarstellung mit ebenen Wellen
$\xi_{x_0}$	$x_0$	$\psi(x)$	$\int \psi(x_0) \xi_{x_0}(x) \, dx_0$	Ortsdarstellung
$w_{E_n}(x)$	$E_n$	$c_n$	$\sum c_n w_{E_n}(x)$	Energiedarstellung
$w_E(x)$	$E$	$c(E)$	$\int c(E) w_E(x) \, dE$	Energiedarstellung

Wechsel zwischen Impuls und Ortsdarstellung über FT.

### 2.2.2 Ket und Bra Zustände

Beschreibung eines Zustandes ohne Bezug auf Ortsvariablen .

- (a) Ket ist ein Element des Zustandsraum, wird bezeichnet mit  $|\alpha\rangle$ .

$$\psi(\vec{r}) \in \mathcal{F} \iff |\psi\rangle .$$

Ket  $|\psi\rangle$  bezeichnet den Zustand ohne Bezug auf ein spezielles Koordinatensystem oder eine Basis.

Es gilt für  $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$

$$|\lambda_1 \varphi_1 + \lambda_2 \varphi_2\rangle = \lambda_1 |\varphi_1\rangle + \lambda_2 |\varphi_2\rangle$$

- (b) Bra  $\langle\psi|$  ist ein lineares Funktional (Element des Dualraums), das jedem Ket  $|\varphi\rangle$  eine komplexe Zahl zuordnet.

$$\langle\psi|\varphi\rangle \in \mathbb{C}$$

Dies entspricht dem Skalarprodukt  $(\psi, \varphi)$ .

$$\langle\psi| : \mathcal{F} \rightarrow \mathbb{C} : (\psi, \cdot)$$

Es gilt

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

$$\langle\psi|\lambda_1 \varphi_1 + \lambda_2 \varphi_2\rangle = \lambda_1 \langle\psi|\varphi_1\rangle + \lambda_2 \langle\psi|\varphi_2\rangle$$

### 2.2.3 Lineare Operatoren

Ist  $A$  ein linearer Operator (im endlichdimensionalen Raum entsprechend einer Matrix), dann ist  $A|\psi\rangle$  wieder ein Ket-Vektor und  $\langle\phi|(A|\psi\rangle)$  ist einerseits ein Skalarprodukt von  $\langle\phi|$  mit  $(A|\psi\rangle)$  aber andererseits kann dieser Ausdruck als Matrixelement aufgefasst werden.

**Beispiel** Gegeben sei  $|\psi\rangle_1$  und  $\langle\phi|_1$ . Dann definiert

$$|\phi\rangle_1 \langle\phi|_1$$

einen linearen Operator für ein beliebiges Ket  $|\psi\rangle$  mit

$$|\phi\rangle_1 \langle\phi|_1 |\psi\rangle$$

Erinnerung an komplexe Vektoren  $(a_1, \dots, a_n)^T, (b_1, \dots, b_n)^T$ . Das Skalarprodukt ist definiert über

$$a^\dagger \cdot b = \sum a_i^* b_i \quad b \cdot a^\dagger = \begin{pmatrix} a_1^* b_1 & \dots & a_n^* b_1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_1^* b_n & \dots & a_n^* b_n \end{pmatrix}$$

Die letzte Operation nennt man auch *dyadisches Produkt*.

Als wichtigstes Beispiel hierfür gilt der *Projektor*. Es sei dafür  $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ . Dann definiere den Operator

$$P_\psi = |\psi\rangle \langle\psi|$$

Es ist

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

die Projektion von  $\phi$  auf  $\psi$ . Eine Eigenschaft von Projektoren ist (trivialerweise)

$$P_\psi^2 = P_\psi$$

Im  $\mathbb{R}^3$  können wir beispielsweise

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

betrachten. Dafür ist der Projektor

$$P_{\vec{a}} = \vec{a} \cdot \vec{a}^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Jeder beliebige Vektor  $cb$  wird durch diesen Projektor auf  $b_3 \hat{e}_z$  abgebildet (wenn  $b_3$  die 3-Komponente ist).

Allgemein: Es seien  $|\psi\rangle_1, \dots, |\psi\rangle_d$  orthonormierte ket und

$$\langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{ij}$$

Damit ist

$$P = \sum_{1 \leq i \leq d} |\psi\rangle_i \langle \psi|_i$$

der Projektor auf den durch die Vektoren aufgespannten Raum (die Projektoreigenschaft lässt sich leicht nachweisen).

## 2.2.4 Hermitesch konjugierte (adjungierte) Operatoren

Sei  $A$  ein linearer Operator.  $A$  angewendet auf  $|\psi\rangle$  liefert  $A|\psi\rangle$ . Die Wirkung auf  $\langle\phi|$  liefert  $\langle\phi|A$ . Diese Definition muss aber bestimmte Eigenschaften erfüllen. So ist festgelegt, dass

$$(\langle\phi|A)|\psi\rangle = \langle\phi|(A|\psi\rangle)$$

für alle  $\psi$ . Wir schreiben abkürzend in Analogie zur Matrix-Notation

$$\langle\phi|A|\psi\rangle$$

Zu  $A$  existiert ein adjungierter Operator  $A^\dagger$ , welcher definiert ist durch

$$\langle\phi|A^\dagger|\psi\rangle = \langle\psi|A|\phi\rangle$$

(Analogie bei Matrizen:  $(M^\dagger)_{i,j} = M_{i,j}^*$ ) **Achtung** Es ist zwar

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

aber

$$\langle A\phi| = \langle\phi|A^\dagger$$

wie auch für komplexe Zahlen  $\lambda$

$$\langle \lambda \psi | = \lambda^* \langle \psi |$$

Es gelten einige Eigenschaften:

$$(A^\dagger)^\dagger = A \quad (\lambda A)^\dagger = \lambda^* A^\dagger \quad (AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$$

**Spezieller Operator**  $|u\rangle\langle v|$  Der adjungierte Operator wäre dann

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

Für beliebige  $\phi$  und  $\psi$  gilt

$$|\phi\rangle(|u\rangle\langle v|)^\dagger|\psi\rangle = (\langle\psi|u\rangle\langle v|\phi\rangle)^* = \langle\psi|v\rangle\langle u|\phi\rangle$$

Speziell ist

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

Solche Operatoren mit  $A^\dagger = A$  nennt man *hermitesche Operatoren*. In Matrixschreibweise erfüllen sie also

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

## 2.3 Darstellungen im Zustandsraum

Die Wahl einer Darstellung entspricht der Wahl einer orthonormierten Basis im Zustandsraum. Dies ist eine Menge von Kets. Die Zustände werden dargestellt durch die Komponenten bezüglich dieser Basis. Es reicht also auch, nur die Komponenten anzugeben. Operatoren entsprechen dann Matrizen. Zu beachten ist, dass diese Basen auch kontinuierliche Indizes haben können.

Seien jetzt  $|u\rangle_i$  eine orthonormierte Basis. Das bedeutet

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

und, dass jeder Ket eindeutig als Linearkombination dieser Vektoren dargestellt werden kann (Vollständigkeit), also

$$|\psi\rangle = \sum c_i |u\rangle_i$$

Diese Eigenschaft ist äquivalent zur Forderung

$$\sum P_i = \mathbf{1} \quad P_i = |u\rangle_i \langle u|_i$$

Beispiele:

$$\langle \phi | \psi \rangle = \langle \phi | \mathbf{1} | \psi \rangle = \langle \phi | \left( \sum |u\rangle_i \langle u|_i \right) | \psi \rangle = \sum \langle \phi | u \rangle_i \langle u|_i | \psi \rangle$$

Dabei entspricht  $|\psi\rangle$  der einspaltigen Matrix

$$\begin{pmatrix} \langle u|_1 | \psi \rangle \\ \vdots \\ \langle u|_n | \psi \rangle \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \\ \vdots \end{pmatrix}$$

und  $\langle \psi |$  gerade der einzeilige Matrix

$$\left( \langle \psi | u \rangle_1 \quad \dots \quad \langle \psi | u \rangle_n \right) = \left( c_1^* \quad \dots \quad c_n^* \quad \dots \right)$$

Wir können auch Operatoren  $A$  in dieser Basis darstellen. Seine Elemente sind gegeben durch

$$A_{ij} = \langle u|_i A |u\rangle_j$$

Das Ergebnis eines Operators - also  $A|\psi\rangle$  - kann auch dargestellt werden:

$$\langle u|_i A |\psi\rangle = \sum A_{ij} c_j$$

wenn  $c_j$  die Komponenten von  $\psi$  sind. Außerdem ist

$$\langle \phi | A |\psi\rangle = \sum b_i^* A_{ij} c_j$$

wenn  $b_i$  die Darstellung von  $\phi$  ist und  $c_i$  analog die Darstellung von  $\psi$ . Für adjungierte Operatoren gilt

$$A_{ij}^\dagger = A_{ji}^*$$

## Basiswechsel

Für den Übergang von einer Basis  $\{|u\rangle_i\}$  zur Basis  $\{|t\rangle_i\}$  benötigen wir vor allem die Darstellung der neuen Basisvektoren bezüglich der alten Basis. Also

$$|t\rangle_k = \sum \langle u|_i |t\rangle_k |u\rangle_i$$

Wir definieren dafür eine Matrix  $S$  mit

$$S_{ik} = \langle u|_i |t\rangle_k$$

welche diesen Basiswechsel vollständig definiert. Vor allem ist

$$(S^\dagger)_{ki} = S_{ik}^* = \langle t|_k |u\rangle_i$$

also gerade die Matrix, welche den Rückwechsel der Basis angibt. Auch ist  $S$  unitär, also

$$SS^\dagger = S^\dagger S = \mathbb{1} \quad S^{-1} = S^\dagger$$

denn

$$(SS^\dagger)_{ij} = \sum_k \langle u|_i |t\rangle_k \langle t|_k |u\rangle_j = \langle u|_i \mathbb{1} |u\rangle_j = \delta_{ij}$$

Dies entspräche den Drehmatrizen (orthogonalen Matrizen) im reellen Vektorraum. Der Begriff wurde jetzt auf allgemeine Drehungen von komplexen Vektoren ausgedehnt. Die neuen Komponenten von  $|\psi\rangle$  in der neuen Basis sind dann gerade gegeben durch

$$\langle t|_k |\psi\rangle = \sum_i (S^\dagger)_{ki} c_i$$

und von  $\langle\psi|$

$$\langle\psi| |t\rangle_k = \sum_i b_i^* S_{ik}$$

Eine Matrix  $A$  wird jetzt dargestellt durch

$$A'_{kl} = S_{ki}^\dagger A_{ij} S_{jl}$$

## 2.4 Eigenwertgleichung

### 2.4.1 Eigenwerte / Eigenvektoren

Sei  $A$  ein linearer Operator. Wenn

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

dann nennt man  $\lambda$  Eigenwert mit dem dazugehörigen Eigenvektor  $|\psi\rangle$ . Wenn  $\lambda$  ein einfacher Eigenwert ist (nicht entartet), dann ist der zu  $\lambda$  gehörige Eigenvektor eindeutig (bis auf konstante Faktoren). Wenn stattdessen  $\lambda$   $g$ -fach entartet ist, dann gibt es  $g$  linear un-

abhängige Eigenvektoren  $|\psi\rangle^i$  zu  $\lambda$ . Diese Eigenvektoren spannen einen  $g$ -dimensionalen Unterraum auf, den Eigenraum. Jede Linearkombination dieser Vektoren ist wieder ein Eigenvektor.

Zur Bestimmung der Eigenwerte benutzt man die Eigenwertgleichung in einer bestimmten Darstellung. Sei  $\{|u\rangle_i\}$  eine Basis. Dann können die Koeffizienten  $c_i$  von  $\psi$  bestimmt werden durch

$$c_i = \langle u_i | \psi \rangle$$

und die Matrixelemente durch

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

Die Eigenwertgleichung lautet dann

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

Wir schieben in die linke Seite die Vollständigkeitsoperation ein und erhalten

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

Also

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

Dies führt auf ein homogenes Gleichungssystem, welches nur dann eine Lösung hat, wenn die Determinante von  $A - \lambda \mathbb{1}$  Null ist (charakteristische Gleichung / Säkulargleichung). Für  $N \times N$ -Matrizen hat die Gleichung  $N$ -ten Grad in  $\lambda$ , also  $N$  Lösungen (die reell oder komplex sein können). Der Vektor  $c_i$  ist eine Lösung des homogenen Gleichungssystem. Für hermitesche Operatoren gilt: Falls der Eigenwert  $\lambda$   $n$ -fach entartet ist, dann gibt es  $n$  linear unabhängige Eigenvektoren zu  $\lambda$ .

## 2.4.2 Observable

Sei  $A$  hermitesch. Dann sind die Eigenwerte von  $A$  reell. Außerdem stehen zwei Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten senkrecht aufeinander.

**Beweis:** Seien  $\lambda$  und  $\mu$  zwei Eigenwerte mit den Eigenvektoren  $|\psi\rangle, |\phi\rangle$ . Dann ist

$$\langle \phi | A | \psi \rangle = \begin{cases} \lambda \langle \phi | \psi \rangle \\ \mu \langle \phi | \psi \rangle \end{cases}$$

Daraus folgt, dass  $\langle \phi | \psi \rangle$  Null sein muss, da  $\lambda \neq \mu$ .

In einem endlich dimensionalen Raum entspricht jeder hermitesche Operator einer hermiteschen  $N \times N$ -Matrix. Die  $N$  Eigenvektoren bilden in diesem Raum eine Basis.

**Bemerkung** In unendlich dimensionalen Räumen ist diese Aussage nicht mehr richtig.

### Definition Observable

*Ein hermitescher Operator, dessen Eigenvektoren eine Basis des Raumes bilden, nennt man Observable.*

**Folgerung:** Sei  $O$  eine Observable. Jeder Zustand kann dann nach Eigenvektoren entwickelt werden.

**Beispiele für Observablen:**

- Hamiltonoperator mit den Energieeigenzuständen (diese sind vollständig)
- Der Projektor auf einen normierten Zustand  $|\psi\rangle$

$$P_\psi = |\psi\rangle \langle \psi|$$

ist eine Observable.  $P_\psi$  ist trivialerweise hermitesch. Außerdem sind die Eigenwerte des Projektors gerade 0 und 1. Zum Eigenwert  $\lambda = 1$  gibt es nur den Eigenvektor  $|\psi\rangle$ , denn

$$P_\psi |\psi\rangle = |\psi\rangle \langle \psi | \psi \rangle = 1 |\psi\rangle$$

Der Eigenwert  $\lambda = 0$  ist hingegen unendlich oft entartet. Die dazugehörigen Eigenvektoren sind alle  $|\chi\rangle$ , welche senkrecht auf  $|\psi\rangle$  stehen. Ein beliebiger Zustand  $|\phi\rangle$  lässt sich schreiben also

$$|\phi\rangle = \underbrace{P_\psi |\phi\rangle}_{\text{Eigenvektor zu } \lambda = 1} + \underbrace{(\mathbf{1} - P_\psi) |\phi\rangle}_{\text{Eigenvektor zu } \lambda = 0}$$

denn

$$P_\psi(P_\psi |\phi\rangle) = P_\psi |\phi\rangle \quad P_\psi(\mathbf{1} - P_\psi) |\phi\rangle = (P_\psi - P_\psi^2) |\phi\rangle = 0$$

Also lässt sich jeder Zustand nach Eigenvektoren entwickeln. Damit ist  $P_\psi$  eine Observable.

### 2.4.3 Kommutierende Observable

Falls  $[A, B] = 0$  gibt es eine orthonormierte Basis mit Basisvektoren, die simultan Eigenvektoren von  $A$  und  $B$  sind.

#### Definition vollständiger Satz kommutierender Observablen

Die Observablen  $A, B, \dots$  bilden einen v.S.k.O., falls

- (1) Alle Observablen paarweise miteinander kommutieren
- (2) Das System der Eigenvektoren ist nicht mehr entartet, d.h. zwei Eigenvektoren unterscheiden sich mindestens in einem Eigenwert.

Die Eigenvektoren sind eindeutig durch die Angabe der Eigenwerte charakterisiert.

#### Anmerkungen

- Wenn ein Operator  $O$  mit allen Operatoren eines v.S.k.O. kommutiert, dann ist er eine Funktion dieser Operatoren.
- Die Ket (oder Bra) werden oft durch die Eigenwerte bezüglich eines v.S.k.O. bezeichnet. Z.B. ist  $|p\rangle$  eine ebene Welle mit Impuls  $p$ . Und  $|E\rangle_0$  der Grundzustand (Zustand niedrigster Energie) des Hamilton-Operators.

#### Wichtige Beispiele:

- (a) Observable Impuls: Die Eigenvektoren sind  $\{|p\rangle\}$  mit

$$\langle p|p'\rangle = \delta(p - p')$$

Alle Zustände lassen sich in die Impulsdarstellung bringen, mit

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

- (b) Observable Ort: Diesmal mit den Eigenvektoren  $\{|x\rangle\}$  mit

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x - x')$$

. Die Ortsdarstellung lautet

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

- Funktionen von Operatoren

(i) Verwende Darstellung, in der der Operator diagonal ist:

$$\langle i | A | j \rangle = a_i \delta_{ij}$$

Dann ist

$$\langle i | f(A) | j \rangle = f(a_i) \delta_{ij}$$

(ii) Entwickle die Funktion in eine Potenzreihe:

$$f(A) = \sum_i c_i A^i$$

**Beispiele** Sei  $f(P) = e^{iaP/\hbar}$  mit einer Konstanten  $A$  und dem Impulsoperator  $P$ . In der Impulsdarstellung gilt

$$\langle p' | e^{iaP/\hbar} | p \rangle'' = \langle p' | e^{iap''/\hbar} | p \rangle'' = e^{iap''/\hbar} \langle p' | p'' \rangle = e^{iap'/\hbar} \delta(p' - p'')$$

Für einen beliebigen Zustand

$$\langle p' | e^{iaP/\hbar} | \psi \rangle = \int dp'' \langle p' | e^{iaP/\hbar} | p \rangle'' \langle p'' | \psi \rangle = \int dp'' e^{iap''/\hbar} \delta(p' - p'') \tilde{\psi}(p'') = e^{iap'/\hbar} \tilde{\psi}(p')$$

In der Ortsdarstellung ist

$$P = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$$

also

$$e^{iaP/\hbar} = \sum \frac{1}{n!} a^n \left( \frac{d}{dx} \right)^n$$

Vor allem ist

$$\langle x | e^{iaP/\hbar} | \psi \rangle = \sum \frac{1}{n!} a^n \left( \frac{d}{dx} \right)^n \psi(x) = \psi(x + a)$$



# Kapitel 3

## Postulate der Quantenmechanik

### 3.1 Allgemeine Prinzipien

#### Klassisches System

Zur Zeit  $t_0$  als Zustand festgelegt durch (Verallgemeinerte) Koordinaten  $q_i(t_0)$  und dazugehörigen Impulsen  $p_i(t_0)$ . Für beliebige Zeiten kann mit den Anfangsbedingungen und den Hamiltongleichungen der neue Zustand berechnet werden.

#### Quantenmechanik

Zur Zeit  $t_0$  als Zustand festgelegt durch  $|\psi(t_0)\rangle$ . Jede Messung wird beschrieben durch einen Operator  $A$ , der auf  $|\psi(t_0)\rangle$  wirkt. Dieser Operator wird Observable genannt. Eine Messung liefert immer nur einen Eigenwert von  $A$  (muss jedoch nicht immer der selbe sein, sondern mit bestimmten Wahrscheinlichkeiten). Die Wahrscheinlichkeit, den Eigenwert  $a_n$  (nicht entartet zur Vereinfachung) von  $A$  zu finden / messen, beträgt

$$P(a_n) = |\langle u_n | \psi \rangle|^2$$

wenn  $u_n$  der Eigenvektor zu  $a_n$  ist, also

$$A |u_n\rangle = a_n |u_n\rangle$$

**Bemerkung:** Falls  $a_n$   $g$ -fach entartet ist, dann

$$P(a_n) = \sum_{i=1}^g |\langle u_n^i | \psi \rangle|^2$$

Falls  $A$  ein kontinuierliches Spektrum besitzt, dann ist die Wahrscheinlichkeit  $W$  für einen Eigenwert  $\alpha$  gegeben durch

$$dW(\alpha) = |\langle v_\alpha | \psi \rangle|^2 d\alpha$$

**Beispiel:** Die Ortsmessung liefert ein kontinuierliches Spektrum. Die Wahrscheinlichkeit, einen gewissen Ort  $x$  zu messen, beträgt

$$dW(x) = |\langle x | \psi \rangle|^2 dx = |\psi(x)|^2 dx$$

Auch die Impulsmessung ist solch ein Operator. Also ist die Wahrscheinlichkeit einen Impuls  $p$  zu messen gegeben durch

$$dW(p) = |\langle p | \psi \rangle|^2 = |\tilde{\psi}(p)|^2 dp$$

Ein großer Unterschied zur klassischen Mechanik ist die "Reduktion des Wellenpaketes". Nach der Messung mit dem Resultat  $a_n$  ist das System mit Sicherheit (also Wahrscheinlichkeit 1) im Eigenraum zum Eigenwert  $a_n$ . Der Zustand  $|\psi\rangle$  vor der Messung ist projiziert durch den Projektor  $P_n$  auf den Eigenraum, also

$$|\psi\rangle \xrightarrow{(a_n)} \frac{P_n |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | P_n | \psi \rangle}}$$

Jede weitere Messung von  $A$  unmittelbar nach der ersten Messung ändert den Zustand nicht mehr und liefert das gleiche Resultat, da  $P_n$  eine Projektion ist. Also

$$A \frac{P_n |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | P_n | \psi \rangle}} = a_n \frac{P_n |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | P_n | \psi \rangle}}$$

**Beispiel:**

(a) Stern-Gerlach Versuch:

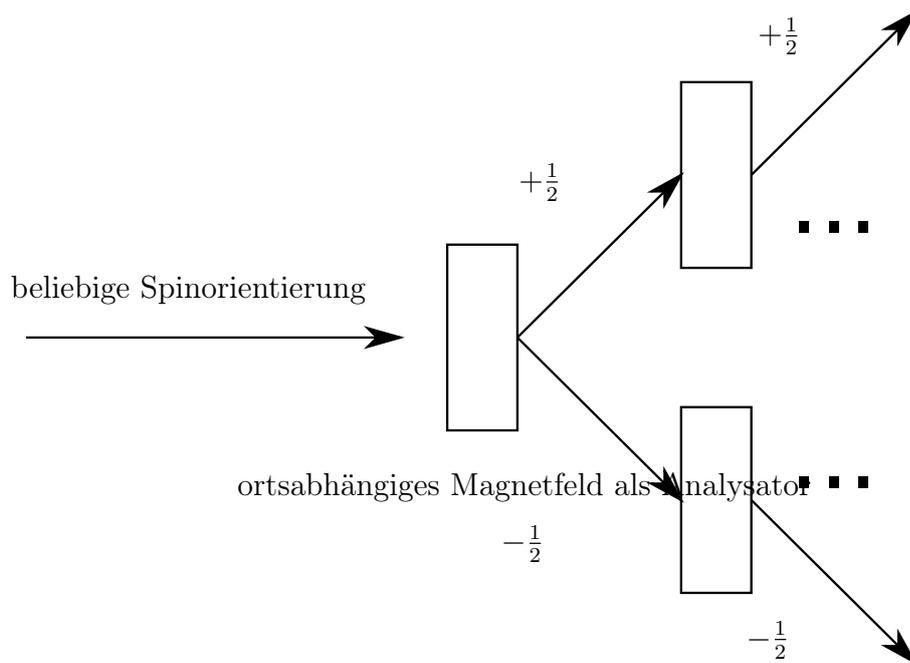


Abbildung 3.1: Stern-Gerlach-Versuch

(b) Ortsmessung

Ausgangszustand: Teilchen befindet sich zwischen unendlich hohen Potential-Wänden im 1. angeregten Zustand.

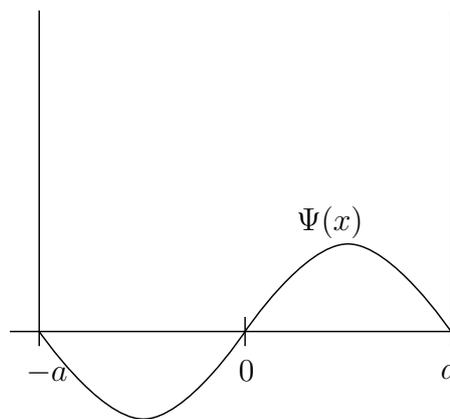


Abbildung 3.2: Stern-Gerlach-Versuch

Wir messen, ob das Teilchen sich in der rechten Hälfte von 0 bis  $a$  befindet. Die Messung ergebe das Ergebnis, dass das Teilchen sich in der linken Hälfte aufhält. Nach der Messung kollabiert die Wellenfunktion dann zu einer neuen Wellenfunktion, welche in  $(-a, 0)$  ungestört ist und in  $(0, a)$  Null beträgt. Die Wellenfunktion muss wieder normiert sein.

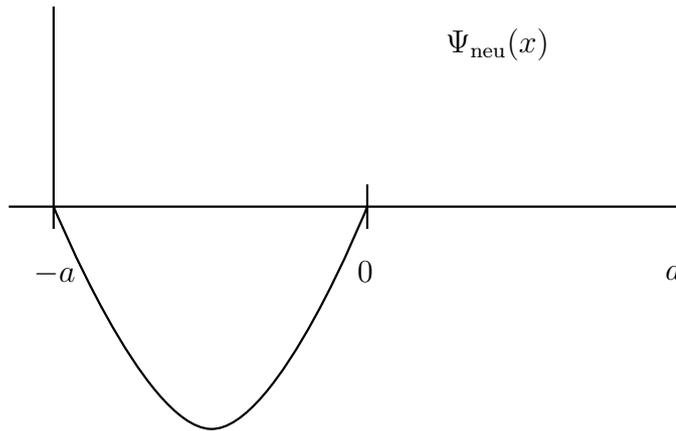


Abbildung 3.3: Stern-Gerlach-Versuch - Neue Wellenfunktion nach Messung

Um den Zustand nach einer gewissen Zeit zu bestimmen, benutzt man die **Zeitentwicklung**. Sie ist gegeben durch

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

Viele Observablen in der Quantenmechanik werden aus klassischen Größen deduziert. Der Hamiltonoperator ist zum Beispiel in der Ortsdarstellung gegeben, indem man die Größe  $x$  durch den Ortsoperator  $X$  und  $p$  durch  $P = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$  ersetzt. Alle anderen Observablen welche klassisch als Funktion von  $x$  und  $p$  gegeben sind, werden durch die entsprechende Substitution gewonnen (Korrespondenzprinzip). Zu beachten ist

$$[X_i, P_j] = i\hbar \delta_{ij}$$

Nicht alle quantenmechanischen Größen haben ein klassisches Analogon, z.B. Spin 1/2. Jede Messung kann aber im allgemeinen Fall verschiedene Ergebnisse liefern. Der Erwartungswert eines Operators gibt an, welches Ergebnis im Mittel bei unendlich vielen Messungen zu erwarten ist. Wir betrachten dazu einen Operator  $A$  mit diskretem, nicht antartetem Spektrum und  $\langle \phi | \phi \rangle = 1$ . Eine einzelne Messung liefert einen der Eigenwerte  $a_n$  mit Wahrscheinlichkeit

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

Viele Messungen liefern

$$\sum a_n W_n = \sum \langle \psi | u_n \rangle a_n \langle u_n | \psi \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle$$

Ein Maß für die Schwankung um den Mittelwert (also die Varianz) ist gegeben durch  $\Delta A$  mit

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

**Heisenbergsche Unschärferelation** Es seien  $Q$  und  $P$  zwei kanonische Koordinaten mit

$$[Q, P] = i\hbar$$

Betrachte

$$|\phi\rangle = (Q + i\lambda P) |\psi\rangle$$

Dann ist

$$0 \geq \langle \phi | \phi \rangle = \langle \psi | (Q - i\lambda P)(Q + i\lambda P) | \psi \rangle = \langle \psi | Q^2 + \lambda^2 P^2 + i\lambda [Q, P] | \psi \rangle$$

Der Kommutator ist gegeben, deshalb (in verkürzter Schreibweise)

$$\langle Q^2 \rangle_\psi + \lambda^2 \langle P^2 \rangle_\psi - \lambda \hbar \leq 0$$

für alle  $\lambda$ . Wähle jetzt

$$\lambda = \frac{\hbar}{2\langle P^2 \rangle_\psi}$$

Also

$$\langle Q^2 \rangle_\psi \langle P^2 \rangle_\psi \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

Dies gilt insbesondere für

$$Q = X - \langle \psi | X | \psi \rangle = \Delta x \quad P = P - \langle \psi | P | \psi \rangle = \Delta P$$

Also

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

Das Gleichheitszeichen gilt für ein gausförmiges Wellenpaket.

## 3.2 Schrödinger Gleichung / Allgemeine Resultate

### Definition Schrödingergleichung

Die Schrödingergleichung lautet

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

Für ein gegebenes  $|\psi(t_0)\rangle$  ist  $|\psi(t)\rangle$  festgelegt für alle Zeiten  $t$ .

- Erhaltung der Gesamtwahrscheinlichkeit, also

$$\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \text{const.}$$

Denn

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

Nach Schrödingergleichung ist

$$\frac{d | \psi(t) \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} H(t) | \psi(t) \rangle \quad \frac{d \langle \psi(t) |}{dt} = -\frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | H(t)$$

Da der Hamiltonoperator hermitesch ist. Oben eingesetzt führt zur Behauptung (Dies gilt nicht, wenn  $H$  einen Imaginärteil hat. Dann würde das Teilchen zerfallen).

Im Ortsraum ist also

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

zeitlich konstant.

- Wahrscheinlichkeitsdichten und Ströme

Dichte :

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

Stromdichte

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$$

Plausibilität :

$$\vec{v} = \frac{\vec{p}}{m} \hat{=} \frac{\hbar \nabla}{im}$$

Für ebene Welle

$$\psi(\vec{r}, t) = A \exp\left(i \frac{\vec{p}\vec{r} - Et}{\hbar}\right)$$

Also

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

**Lokale Erhaltung der Wahrscheinlichkeitsdichte** In der Elektrodynamik gilt

$$\partial_t \rho(\vec{r}, t) + \nabla \cdot \vec{j}(\vec{r}, t) = 0$$

Dies entspricht

$$\underbrace{\int_V \rho \, dV}_{\text{Veränderung von } Q \text{ in } V} + \underbrace{\int_{\partial V} \vec{j}(\vec{r}, t) \, d\vec{F}}_{\text{Fluss durch die Oberfläche von } V} = 0$$

Hier

$$\begin{aligned} \partial_t (\psi^*(\vec{r}, t)\psi(\vec{r}, t)) + \nabla \left[ \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \right] &= (\partial_t \psi^*) \psi + \psi^* \partial_t \psi + \frac{\hbar}{2mi} (\nabla \psi^* \nabla \psi + \psi^* \nabla^2 \psi^* - \\ &= (\partial_t \psi^*) \psi + \psi^* \partial_t \psi + \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*) \\ &= \psi^* \left( \partial_t \psi + \frac{\hbar}{2mi} \nabla^2 \psi \right) + \psi \left( \partial_t \psi^* - \frac{\hbar}{2mi} \nabla^2 \psi^* \right) \\ &= 0 \end{aligned}$$

Am Ende wurde die Schrödingergleichung für  $\psi$  und  $\psi^*$  verwendet.

Dies liefert uns eine Erhaltung (Potential  $V$  ist reell)

- Zeitliche Entwicklung von Erwartungswerten

$$\begin{aligned} \langle A \rangle(t) &= \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle \\ \frac{d}{dt} \langle A \rangle(t) &= \frac{d \langle \psi(t) |}{dt} A | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | A \frac{d | \psi(t) \rangle}{dt} + \langle \psi(t) | \frac{dA}{dt} | \psi(t) \rangle \\ \frac{d \langle A \rangle(t)}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle + \langle \partial_t A \rangle(t) \end{aligned}$$

Insbesondere : falls  $[A, H] = 0$  und  $\partial_t A = 0$ , dann ist  $\langle A \rangle(t)$  unabhängig von  $t$ .

Wähle speziell  $A = \vec{R}$ , den Ortsoperator.

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

$$\begin{aligned} [\vec{R}, H] &= \left[ \vec{R}, \frac{\vec{P}^2}{2m} \right] = i\hbar \frac{\vec{P}}{m} \\ [\vec{P}, H] &= \left[ \vec{P}, V(\vec{R}) \right] = \frac{\hbar}{i} \nabla V(\vec{R}) \\ \partial_t \vec{P} &= 0 \quad \partial_t \vec{R} = 0 \end{aligned}$$

## Ehrenfest'sches Theorem

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

$\langle R \rangle$  = Schwerpunkt des Wellenpakets, klassischer Grenzfall  $r(t)$  = Ort des Teilchens.  
Ebenso geht im klassischen  $\langle \nabla V(R) \rangle \rightarrow \nabla V(r(t))$ . Dies liefert uns zusammengesetzt

$$m \frac{d^2}{dt^2} r(t) = -\nabla V(r(t))$$

Konservative Systeme  $\partial_t H = 0$ .

Eigenzustände von  $H$  bei  $t = t_0$

$$H |\psi_n(t_0)\rangle = E_n |\psi_n(t_0)\rangle$$

definieren eine Basis. Zeitliche Entwicklung eines beliebigen Zustandes

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

Dies liefert eine DGL für  $c_n(t)$  aus der Schrödingergleichung

$$\sum_n i\hbar \frac{dc_n}{dt}(t) |\psi_n(t_0)\rangle = \sum_n c_n(t) E_n |\psi_n(t_0)\rangle$$

Da  $\psi_n(t_0)$  eine orthonormierte Basis bilden, folgt

$$i\hbar \frac{dc_n}{dt}(t) = E_n c_n(t)$$
$$c_n(t) = c_n(t_0) \exp\left(-iE_n \frac{t-t_0}{\hbar}\right)$$
$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t_0) \exp\left(-iE_n \frac{t-t_0}{\hbar}\right) |\psi_n(t_0)\rangle$$

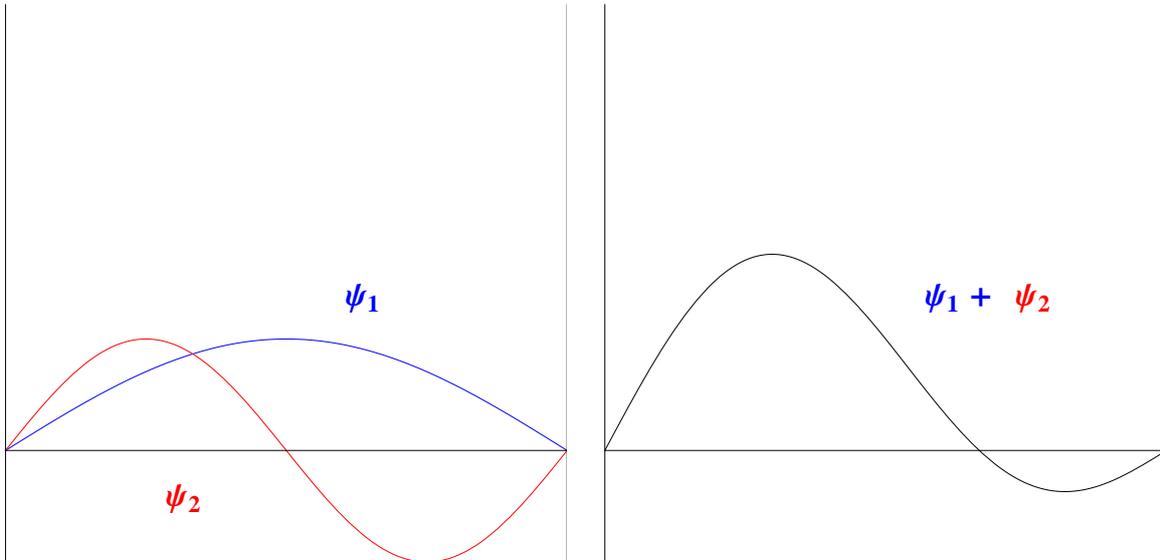


Abbildung 3.4: Stehende Welle im Potentialtopf mit diskreten Energiewerten (a) und als Überlagerung (b)

Eine wichtige Konsequenz: falls nur ein  $c_n \neq 0$

$$\begin{aligned}
 \langle A \rangle &= \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle \\
 &= \langle \psi_n(t_0) \exp\left(-iE_n \frac{t-t_0}{\hbar}\right) | A | \psi_n(t_0) \exp\left(-iE_n \frac{t-t_0}{\hbar}\right) \rangle \\
 &= \langle A \rangle(t_0)
 \end{aligned}$$

Erwartungswerte ändern sich nicht in diesem Fall. "Stationärer" Zustand  $\hat{=}$  scharfe Energie.

**Beispiele** Teilchen in  $\infty$  tiefen Topf. Stationäre Lösung

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

$$\langle x|1 \rangle = \varphi_1(x) \quad \langle x|2 \rangle = \varphi_2(x)$$

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle + |2\rangle)$$

Zeitliche Entwicklung

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(-i\frac{E_1}{\hbar}t\right) \left(|1\rangle + \exp\left(-i\frac{E_2 - E_1}{\hbar}t\right) |2\rangle\right)$$

$$\rho(x, t) = |\langle x|\psi(t)\rangle|^2 = \frac{1}{2} \left( |\varphi_1(x)|^2 + |\varphi_2(x)|^2 + 2\varphi_1(x)\varphi_2(x) \cos\left(\frac{E_2 - E_1}{\hbar}t\right) \right)$$

- *Schrödinger-Bild(Darstellung) vs. Heisenberg-Bild(Darstellung)*

**Schrödinger-Bild** Zeitabhängige Zustände

$$|\psi(t)\rangle_s = \sum_n \exp(-iE_n(t - t_0)/\hbar) c_n(t_0) |\psi_n(t_0)\rangle$$

$$= U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle_s$$

Mit

$$U(t, t_0) = \exp(-iH_s(t - t_0)/\hbar)$$

Oberservable  $A_s(t)$ : Messung

$${}_s \langle \psi(t) | A(t) | \psi(t) \rangle_s$$

**Heisenberg-Bild** Zustände zeitunabhängig.

$$|\psi\rangle_H = U^\dagger(t, t_0) |\psi(t)\rangle_s = |\psi(t_0)\rangle_s$$

Messung

$$\underbrace{{}_s \langle \psi(t) | U(t, t_0)}_{{}_H \langle \psi |} \underbrace{U^\dagger(t, t_0) A_s(t) U(t, t_0)}_{A_H(t)} \underbrace{U^\dagger(t, t_0) | \psi(t) \rangle_s}_{| \psi \rangle_H}$$

Mit

$$A_H(t) = U^\dagger(t, t_0) A_s(t) U(t, t_0)$$

Es gilt

$$i\hbar \frac{d}{dt} A_H = [A_H, H_H] + i\hbar (\partial_t A_s)_H$$

# Kapitel 4

## Harmonischer Oszillator

### 4.1 Einführung

**Klassische Mechanik** Masse  $m$  im Potential  $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$ . Bewegungsgleichung

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

Die Lösung ist dann

$$x(t) = X_M \cos(\omega t - \varphi) \quad (\text{Klassische Lösung})$$

Mit  $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ ,  $X_M, \varphi$  über Anfangsbedingungen.

Kinetische Energie

$$T = \frac{1}{2}m \left( \frac{dx}{dt} \right)^2 = \frac{p^2}{2m}$$

Gesamtenergie

$$E = T + V = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 X_M^2 = \text{const}$$

Harmonischer Oszillator: Näherung für viele Systeme

### 4.2 Harmonischer Oszillator in der Quantenmechanik

Der Hamiltonoperator für dieses Problem ist gegeben durch

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

was wir von der klassischen Lösung direkt ablesen können. Dieser führt uns auf eine stationäre Schrödingergleichung im Ortsraum (mit dem Impulsoperator  $P = \frac{\hbar}{i}\partial_X$ ):

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dX^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 \right] \phi(x) = E\phi(x)$$

Diese Eigenwertgleichung kann man auf zwei verschiedene Arten lösen:

### 4.2.1 Analytische Lösung der DGL

Zur Befreiung von den dimensionsbehafteten Größen setzen wir

$$\epsilon = \frac{E}{\hbar\omega} \quad \hat{X} = X\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

Mit diesen Ersetzungen kommt man auf

$$\left[ \frac{d^2}{d\hat{X}^2} - \hat{X}^2 + 2\epsilon \right] \phi(\hat{X}) = 0$$

Wir machen den Ansatz für große  $\hat{X}$ , der dann unabhängig von  $\epsilon$  ist:

$$G_{\pm} = e^{\pm\hat{X}^2/2}$$

Dieser löst dann die DGL

$$\left[ \frac{d^2}{d\hat{X}^2} - \hat{X}^2 \mp 1 \right] G_{\pm}(\hat{X}) = 0$$

was man durch Nachrechnen prüfen kann. Damit die Lösung normierbar ist, muss die Lösung exponentiell abfallend sind. Vor allem ist nur die Lösung  $G_-$  interessant. Mit dieser Überlegung machen wir insgesamt den Ansatz

$$\phi(\hat{X}) = h(\hat{X})e^{-\hat{X}^2/2}$$

Einsetzen in die DGL liefert (wenn man die DGL von  $G$  beachtet)

$$\left[ \frac{d^2}{d\hat{X}^2} - 2\hat{X} \frac{d}{d\hat{X}} + 2\epsilon - 1 \right] h(\hat{X}) = 0$$

Um  $h$  zu lösen, machen wir einen Potenzreihenansatz

$$h(\hat{X}) = \sum_{m=0}^{\infty} a_{2m} \hat{X}^{2m+p} \quad a_0 \neq 0, p > 0, a_i = 0 \text{ für } i < 0$$

(betrachtet man nämlich die Klammer, so hat diese immer genau einen um 2 unterschiedlichen Grad als  $h$  selbst, deswegen dieser Ansatz). Einsetzen liefert den Koeffizientenvergleich

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

Diese Gleichung lässt sich iterativ lösen. Da wir eine normierbare Lösung möchten, muss die Reihe abbrechen. Denn für  $m \gg p, \epsilon$  nähert sich dies zu

$$(2m)(2m)a_{2m+2} = (4m)a_{2m} \implies a_{2m+2} = \frac{a_{2m}}{m} \propto \frac{1}{m!}$$

Das ergäbe allerdings die Potenzreihe

$$h(\hat{X}) \propto e^{\hat{X}^2}$$

was offensichtlich nicht normierbar ist.

Also ist unsere Forderung: Die Reihe muss abbrechen. Dies erreichen wir, in dem die Klammer  $2m + 2p - 2\epsilon + 1$  für einen Wert von  $m$  verschwindet. Also muss vor allem  $\epsilon - 1/2$  ganzzahlig sein. Setzen wir also

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

Mit diesem Wissen können wir die DGL für  $h$  schreiben als

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

für jedes  $n$ .  $h_n$  ist genau dann gerade, wenn  $n$  gerade ist. Die Lösung sind die so genannten Hermite Polynome mit

$$H_n(\hat{X}) = (-1)^n e^{\hat{X}^2} \left( \frac{d}{d\hat{X}} \right)^n e^{-\hat{X}^2} \quad h_n(\hat{X}) = N_n \cdot H_n(\hat{X}) \quad N_n = (\sqrt{\pi} n! 2^n)^{-1/2}$$

Aus diesen lässt sich jetzt das  $\phi$  bauen, was noch mit  $(m\omega/\hbar)^{-1/4}$  normiert werden muss.

Insgesamt sind die stationären Zustände also gegeben durch

$$\phi_n(\hat{X}) = N_n (m\omega/\hbar)^{1/4} e^{-\hat{X}^2/2} H_n(\hat{X})$$

mit den Energieeigenwerten

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

Vor allem sind die einzelnen Energieniveaus gequantelt und die Übergänge immer gleich groß. Vor allem ist die Nullpunktsenergie gegeben durch

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$$

also insbesondere nicht Null (aufgrund der Heisenbergschen Unschärferelation).

Eigenschaften der stationären Lösungen

$$\phi_n(-X) = (-1)^n \phi_n(X)$$

Außerdem besitzen die  $\phi_n$   $n$  verschiedene Nullstellen innerhalb der klassischen Grenzen.

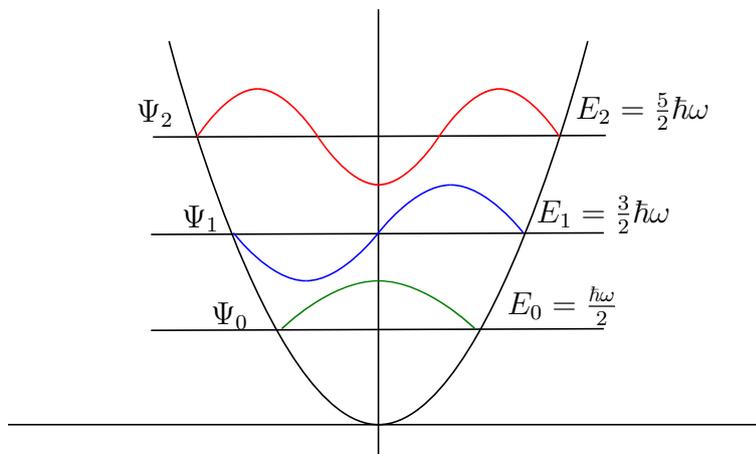


Abbildung 4.1: Potentialtopf mit Lösungen

## 4.2.2 Algebraische Lösung der DGL

Wieder betrachten wir die dimensionslosen Größen. Dann ist

$$\hat{H} = \frac{1}{\hbar\omega} H = \frac{1}{2}(\hat{X}^2 + \hat{P}^2) \quad \epsilon = \frac{E}{\hbar\omega}$$

Die Eigenwertgleichung lautet dann

$$\hat{H} |\phi_\nu\rangle = \epsilon_\nu |\phi_\nu\rangle$$

Wie definieren die beiden Operatoren

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

Damit lassen sich auch schreiben:

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

Wir wollen ihre Vertauschungseigenschaften untersuchen:

$$(1) [a, a^\dagger] = \frac{i}{2}[\hat{P}, \hat{X}] - \frac{i}{2}[\hat{X}, \hat{P}] = 1$$

(2) Definiere

$$N = a^\dagger a = \frac{1}{2}(\hat{X}^2 + \hat{P}^2 - 1)$$

als den Besetzungszahloperator.

$$(3) \hat{H} = a^\dagger a + \frac{1}{2} = N + \frac{1}{2}$$

Vor allem müssen die Eigenzustände von  $N$  auch Eigenzustände von  $\hat{H}$  sein und umgekehrt. Lösen der Eigenwertgleichung vor  $\hat{H}$  ist äquivalent zur Lösung von

$$N |\phi_\nu\rangle = \nu |\phi_\nu\rangle \quad \epsilon_\nu = \nu + \frac{1}{2}$$

Um diese Gleichung lösen zu können, benötigen wir viele Eigenschaften dieser Operatoren. Es ist

$$(a) [N, a] = [a^\dagger a, a] = a^\dagger [a, a] + [a^\dagger, a]a = -a \text{ und analog } [N, a^\dagger] = a^\dagger$$

(b) Für die Eigenwerte  $\nu$  von  $N$  muss gelten:  $\nu \geq 0$ , denn

$$0 \leq |a |\phi_\nu\rangle|^2 = \langle a\phi_\nu | a\phi_\nu\rangle = \langle \phi_\nu | a^\dagger a \phi_\nu\rangle = \langle \phi_\nu | N |\phi_\nu\rangle = \nu \langle \phi_\nu | \phi_\nu\rangle$$

Der niedrigstmögliche Wert von  $\nu$  wäre dann  $\nu = 0$ . Für ihn gilt

$$a |\phi_0\rangle = 0$$

Berechnung von  $\phi_0$  führt auf

$$0 = a |\phi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X + \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} P \right] |\phi_0\rangle$$

und im Ortsraum:

$$\left[ \frac{m\omega}{\hbar} x + \frac{d}{dx} \right] \phi_0(x) = 0$$

Eine Lösung wäre

$$\langle x | \phi_0\rangle = \phi_0(x) = \left( \frac{\pi\hbar}{\omega m} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$$

(c) Sei  $|\phi_\nu\rangle$  Eigenzustand zu  $N$  mit Eigenwert  $\nu$ . Dann ist  $a |\phi_\nu\rangle$  Eigenzustand zu  $N$  mit EW  $\nu - 1$  und  $a^\dagger |\phi_\nu\rangle$  zu  $\nu + 1$ , denn

$$N a^\dagger |\phi_\nu\rangle = (a^\dagger N + a^\dagger) |\phi_\nu\rangle = (a^\dagger \nu + a^\dagger) |\phi_\nu\rangle = (\nu + 1) a^\dagger |\phi_\nu\rangle$$

Ist die Normierung von  $|\phi_\nu\rangle$  erhalten?

$$\langle a^\dagger \phi_\nu | a^\dagger \phi_\nu \rangle = \langle \phi_\nu | a a^\dagger | \phi_\nu \rangle = \langle \phi_\nu | a^\dagger a + 1 | \phi_\nu \rangle = (\nu + 1)$$

Setze also

$$a^\dagger |\phi_\nu\rangle = \sqrt{\nu + 1} |\phi_{\nu+1}\rangle$$

Analog

$$a |\phi_\nu\rangle = \sqrt{\nu} |\phi_{\nu-1}\rangle$$

Wir wollen jetzt zeigen, dass  $\nu$  nicht negativ und ganzzahlig ist. Gäbe es ein  $\tilde{\nu}$  mit  $n < \tilde{\nu} < n + 1$ , dann müsste gelten

$$N(a^{n+1} |\phi_{\tilde{\nu}}\rangle) = \underbrace{(\tilde{\nu} - n - 1)}_{<0} a^{(n+1)} |\phi_{\tilde{\nu}}\rangle$$

und damit ein Widerspruch zu b. Damit ist die Behauptung bewiesen.

Aus c folgt

$$|\phi_{\nu+1}\rangle = \frac{a^\dagger}{\sqrt{\nu+1}} |\phi_\nu\rangle \implies |\phi_\nu\rangle = \frac{(a^\dagger)^\nu}{\sqrt{\nu!}} |\phi_0\rangle$$

Außerdem gilt dafür

$$H |\phi_\nu\rangle = \hbar\omega \left( \nu + \frac{1}{2} \right) |\phi_\nu\rangle$$

Aus den genannten Eigenschaften geben wir den Operatoren Namen. Wir wollen  $a^\dagger$  als Erzeugungsoperator und  $a$  als Vernichtungsoperator bezeichnen. Beide heißen auch Leitoperatoren.

### 4.2.3 Eigenzustände des Hamiltonoperators

Wir wiederholen, was wir bisher wissen:

$$|\phi_\nu\rangle = \frac{(a^\dagger)^\nu}{\sqrt{\nu!}} |\phi_0\rangle \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \hat{X} - \frac{d}{d\hat{X}} \right)$$

Wir werden jetzt statt  $\nu$  immer  $n$  benutzen. Für den Grundzustand gilt

$$a |\phi_0\rangle = 0$$

Was man daraus erhält, haben wir weiter oben schon berechnet:

$$0 = a |\phi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X + \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} P \right] |\phi_0\rangle$$

und im Ortsraum:

$$\left[ \frac{m\omega}{\hbar} x + \frac{d}{dx} \right] \phi_0(x) = 0$$

Eine Lösung wäre

$$\langle x | \phi_0 \rangle = \phi_0(x) = \left( \frac{\pi \hbar}{\omega m} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} X^2}$$

Damit sind die angeregten Zustände gegeben durch

$$\langle x | \phi_n \rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle x | (a^\dagger)^n | \phi_0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{n! 2^n}} \left( \hat{X} - \frac{d}{d\hat{X}} \right)^n \langle x | \phi_0 \rangle$$

Per Rekursion löst man dies und erhält die schon bekannte Lösung

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

Die explizite Form von  $N$ ,  $H$ ,  $a$ ,  $a^\dagger$ ,  $X$  und  $P$  in der Besetzungszahldarstellung ist gegeben durch (mit  $|n\rangle = |\phi_n\rangle$ )

$$N |n\rangle = n |n\rangle \quad \langle m | N |n\rangle = n \delta_{mn} \quad N = \begin{pmatrix} 0 & & \\ & 1 & \\ & & \ddots \end{pmatrix}$$

Außerdem

$$\langle m | H |n\rangle = \hbar\omega \left( N + \frac{1}{2} \right) \delta_{nm} \quad H = \hbar\omega \begin{pmatrix} 1/2 & & \\ & 3/2 & \\ & & \ddots \end{pmatrix}$$

und

$$a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \quad \langle m | a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} \delta_{m,n+1} \quad a^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & \vdots \end{pmatrix}$$

Das  $a$  ergibt sich einfach durch Transponierung.

Schließlich können wir auch Orts- und Impulsoperatoren angeben:

$$\hat{X} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger) \quad \hat{P} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger - a)$$

und als Matrixdarstellung

$$\hat{X} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} \dots \\ 0 & \sqrt{2} & \vdots \end{pmatrix} \quad \hat{P} = \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{1} & 0 \dots \\ \sqrt{1} & 0 & -\sqrt{2} \dots \\ 0 & \sqrt{2} & \vdots \end{pmatrix}$$

#### 4.2.4 Diskussion

**Erwartungswerte** Für die Orts- und Impulsoperatoren gilt:

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

für alle Zeiten. Andererseits wächst aber  $\langle n | (\Delta X)^2 | n \rangle$  mit  $n$  (da steckt die Bewegung drin). Dies entspricht dem Wert, welchen man als zeitlichen Mittelwert von  $X^2$  im klassischen Fall erhalten würde (entspr. potentieller Energie).

**Qualitative Diskussion des Grundzustandes** Im klassischen Sinne müsste das Teilchen einfach im Nullpunkt liegen bleiben. Wir haben oben schon erhalten

$$\langle X \rangle = \langle P \rangle = 0$$

Sei die Ausdehnung der Wellenfunktion über einen zunächst beliebigen Bereich  $\chi$ . Dann ist für die potentielle Energie

$$\langle V \rangle = \frac{1}{2} m \omega^2 \underbrace{\langle X^2 \rangle}_{\chi^2}$$

und für den Impuls aufgrund der Unschärferelation

$$\langle P^2 \rangle \approx \frac{\hbar^2}{\chi^2}$$

Damit gilt für die kinetische Energie

$$\langle T \rangle \approx \frac{\hbar^2}{2m\chi^2}$$

Der Hamiltonoperator ergibt dann

$$\langle H \rangle = \frac{\hbar^2}{2m\chi^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 \chi^2$$

Dies wird minimal für

$$\chi^2 = \frac{\hbar}{m\omega} \quad \langle V \rangle = \langle T \rangle \quad \langle H \rangle \approx \hbar\omega$$

und damit vor allen nicht Null!

## 4.2.5 Dreidimensionaler harmonischer Oszillator

Der Hamiltonoperator ist in diesem Fall gegeben durch

$$H\phi(\vec{R}) = \left[ \frac{\vec{P}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\vec{R}^2 \right] \phi(\vec{R}) = E\phi(\vec{R})$$

Dieser Operator lässt sich aber schreiben als

$$H = H_x + H_y + H_z$$

weswegen das Problem recht einfach zu lösen ist (da wir in jeder Dimension das Problem schon einzeln gelöst haben). In jeder Dimension gilt

$$H_{x_i} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dX_i^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 X_i^2$$

Es gilt

$$[H_x, H_y] = 0$$

und für die anderen analog. Damit sind die Probleme unabhängig voneinander (Äquivalent zu einem Problem mit drei ungekoppelten Oszillatoren mit gleicher Eigenfrequenz). Wir machen also den Ansatz (Separation der Variablen)

$$|\phi\rangle = |\phi_x \phi_y \phi_z\rangle$$

Wie man leicht nachrechnet, löst dies die Gleichung mit den Unterbedingungen

$$H_x \phi_x = E_x \phi_x \quad E = E_x + E_y + E_z$$

Jede Dimension wird dabei für sich gelöst.

$$E = \hbar\omega \left( n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2} \right) = \hbar\omega \left( n + \frac{3}{2} \right)$$

Diese Zuordnung ist aber (im Gegensatz zum eindimensionalen HO) nicht mehr eindeutig.

Zu einer gegebenen Energie ist die Zuordnung auf die Niveaus der einzelnen HO in jeder Dimension nicht eindeutig. Die Angabe von  $n$  alleine reicht nicht aus, den Zustand festzulegen. Dies nennt sich Entartung!  $H_x$ ,  $H_y$  und  $H_z$  sind ein v.S.k.O. Die Angabe von  $n_x$ ,  $n_y$  und  $n_z$  legt daher den Zustand eindeutig fest.

Es stellt sich jetzt die Frage, wie viele Möglichkeiten es gibt, zu einem gegebenen  $n$  die drei dazugehörigen  $n_x, n_y, n_z$  zu wählen. Dies entspricht dem Grad der Entartung.

Zu einem gegebenen  $n$  wähle für  $n_x$  einen der Werte  $0 \leq n_x \leq n$ . Danach muss

$$n_y + n_z = n - n_x$$

sein, damit die Bedingung passt. Also

$$\{n_y, n_z\} = \{(0, n - n_x), (1, n - n_x - 1), \dots, (n - n_x, 0)\}$$

Dies sind genau  $n - n_x + 1$  Möglichkeiten für ein festes  $n_x$ .

Insgesamt gibt es also

$$\sum_{n_x=0}^n (n - n_x + 1) = \frac{(n+1)(n+2)}{2}$$

Möglichkeiten (entspricht dem Grad der Entartung).

## 4.2.6 Kohärente oder quasiklassische Zustände

Es ist  $\langle X \rangle = 0$  für alle Zeiten. Wie konstruiert man jetzt Zustände, die einen klassischen Grenzfall haben? Durch Überlagerung von  $|n\rangle$ . Zur Zeit  $t = 0$  sei  $\varphi$  ein Eigenzustand zum Vernichtungsoperator

$$a |\varphi_\alpha\rangle = \alpha |\varphi_\alpha\rangle$$

Dabei ist  $\alpha$  kein  $\nu$  mehr.

Entwickle  $|\varphi_\alpha\rangle$  in der Basis

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

Entwicklungskoeffizienten

$$c_n = \langle n|\varphi_\alpha\rangle = \langle 0|\frac{a^n}{\sqrt{n!}}\varphi_\alpha\rangle = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \langle 0|\varphi_\alpha\rangle \quad c_0 := \langle 0|\varphi_\alpha\rangle$$

Damit insgesamt

$$|\varphi_\alpha\rangle = \sum_n \underbrace{\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}}_{=c_n} c_0 |n\rangle$$

Forderung über die Normierung

$$\begin{aligned} 1 &= \langle \varphi_\alpha | \varphi_\alpha \rangle \\ &= \sum_n \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} |c_0|^2 \\ &= \exp(|\alpha|^2) |c_0|^2 \\ \Rightarrow c_0 &= \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} |\varphi_\alpha\rangle &= c_0 \sum_n \frac{(\alpha a^\dagger)^n}{n!} |0\rangle \\ &= c_0 \exp(\alpha a^\dagger) |0\rangle \end{aligned}$$

Schrödinger-Bild: Zustand ist zeitabhängig :

$$|\varphi_\alpha\rangle = |\varphi_\alpha(t=0)\rangle \quad |n(t)\rangle = \exp\left(-i\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)t\right) |n(t=0)\rangle$$

$$|\varphi_\alpha(t)\rangle = c_0 \exp\left(-\frac{i\omega t}{2}\right) \sum_n \frac{(\alpha a^\dagger \exp(-i\omega t))^n}{n!} |0\rangle$$

Definiere nun

$$\begin{aligned} \alpha(t) &= \alpha \exp(-i\omega t) \\ |\varphi_\alpha(t)\rangle &= |\varphi_{\alpha(t)}\rangle \exp\left(-\frac{i\omega t}{2}\right) \end{aligned}$$

$|\varphi_{\alpha(t)}\rangle$  bleibt Eigenzustand zu  $a$ , aber der Eigenwert ändert sich als Funktion der Zeit. Zusätzlich haben wir eine globale Phase. Zeitliche Änderung des Erwartungswertes von

$$X = \underbrace{\sqrt{\frac{\hbar}{\omega m}}}_{=:X_0} \frac{a + a^\dagger}{\sqrt{2}}$$

$$\langle \varphi_\alpha(t) | X | \varphi_\alpha(t) \rangle = X_0 \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha(t) + \alpha^*(t))$$

Ansatz:  $\alpha(t=0) = \alpha = |\alpha| \exp(i\delta)$

$$\langle \varphi_\alpha(t) | X | \varphi_\alpha(t) \rangle = X_0 \sqrt{2} |\alpha| \cos(\omega t - \delta)$$

Nach Rechnung folgt

$$|\langle X | \varphi_\alpha(t) \rangle|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{X_0} \exp\left(-\frac{(X - X_0 \sqrt{2} |\alpha| \cos(\omega t - \delta))^2}{X_0^2}\right)$$

Für  $|\alpha| \gg 1$  klassisches Verhalten. Für  $\tilde{\varphi}(p)$  würden wir das klassische Verhalten von  $p(t)$  finden.

# Kapitel 5

## Zweizustandssysteme

Vielzahl von Beispielen: Spin im Magnetfeld, 2 Niveaus im Atom,  $K_0 - \bar{K}_0$  System, Neutrino-Osz.

### 5.1 Spin und magnetisches Moment

#### 5.1.1 Klassische Behandlung

Magnetisches Moment  $\vec{M}$

(i) potentielle Energie im Feld  $\vec{B}$

$$U = -\vec{M} \cdot \vec{B}$$

Kraft auf den Dipol :

$$\vec{K} = -\nabla U = \nabla (\vec{M} \cdot \vec{B})$$

Keine Kraft im konstanten Feld (Stern Gerlach:  $\vec{B}$  nicht konstant)

Drehmoment

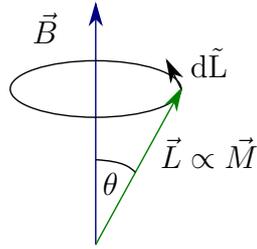
$$\vec{\Gamma} = \vec{M} \times \vec{B}$$

Es sei

$$\vec{M} = \gamma \vec{L}$$

wobei  $\gamma$  das *gyromagnetische Verhältnis* ist. Die Bewegungsgleichung für den Drehimpuls ist dann

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{\Gamma} = \gamma \vec{L} \times \vec{B}$$



$d\vec{L}$  liegt in der Ebene senkrecht zu  $\vec{B}$ . Präzession von  $\vec{L}$  und  $\vec{M}$  um  $\vec{B} = B_0\vec{e}_z$ . Damit

$$\vec{L} = l_0 \begin{pmatrix} \sin \theta \cos(\varphi + \omega t) \\ \sin \theta \sin(\varphi + \omega t) \\ \cos \theta \end{pmatrix} \quad \omega = -\gamma B_0$$

### 5.1.2 Quantenmechanik für Spin $\frac{1}{2}$

Postulat  $\vec{L}$  wird ersetzt durch

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

$S_x, S_y, S_z$  sind Operatoren im zweidimensionalen Raum. Es gibt drei spurlose, hermitesche  $2 \times 2$  Matrizen mit  $\det = -1$

$$S_{x,y,z} = \frac{\hbar}{2} \sigma_{x,y,z}$$

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

Algebra

$$[S_x, S_y] = \frac{i}{\hbar} S_z$$

Basis im Zustandsraum :  $S_z$  soll diagonal sein

$$|-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad |+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

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

Allgemeiner Zustand

$$|\psi\rangle = \alpha |+\rangle + \beta |-\rangle$$

mit

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \iff \langle \psi | \psi \rangle = 1$$

$S_z = \vec{S} \cdot \vec{e}_z$ ,  $|+\rangle, |-\rangle$  sind Eigenzustände zu  $\vec{S} \cdot \vec{e}_z$ . Gibt es eine Richtung  $\vec{u}$ , so dass  $|\psi\rangle$  bezüglich  $\vec{S}\vec{u}$  ein Eigenzustand ist?

Konstruiere  $\vec{u}$  für gegebenes  $\alpha, \beta$  : Ansatz:

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

damit

$$\begin{aligned} \vec{S}\vec{u} &= \frac{\hbar}{2} \left[ \sin \theta \cos \varphi \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \sin \theta \sin \varphi \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + \cos \theta \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right] \\ &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \exp(-i\varphi) \\ \sin \theta \exp(i\varphi) & -\cos \theta \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Dies ist die allgemeinste  $2 \times 2$  Matrix, die hermitesch und spurlos ist und  $\det = -1$  hat.

Achtung:  $\det(\vec{S}\vec{u}) = -\frac{\hbar}{2}$ .

Eigenzustand zu  $\vec{S}\vec{u}$

$$\begin{aligned} |1\rangle_u &= \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \exp\left(-i\frac{\varphi}{2}\right) |+\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \exp\left(i\frac{\varphi}{2}\right) |-\rangle & \text{Eigenwert} &= +\frac{\hbar}{2} \\ |2\rangle_u &= -\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \exp\left(-i\frac{\varphi}{2}\right) |+\rangle + \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \exp\left(i\frac{\varphi}{2}\right) |-\rangle & \text{Eigenwert} &= -\frac{\hbar}{2} \end{aligned}$$

Für gegebenes  $\alpha, \beta$  und  $|\psi\rangle = \alpha |+\rangle + \beta |-\rangle$  wählen wir

$$\cos \frac{\theta}{2} = |\alpha| \quad 0 \leq \theta < \pi \quad \theta = 2 \arccos |\alpha|$$

$$\varphi = (\varphi_\beta - \varphi_\alpha) \quad \chi = \varphi_\alpha + \varphi_\beta$$

Wobei

$$\alpha = |\alpha| \exp(i\varphi_\alpha) \quad \beta = |\beta| \exp(i\varphi_\beta)$$

Also

$$|\psi\rangle = \exp(i\chi) |1\rangle_u$$

Also gibt es zu jedem Zustand  $|\psi\rangle = \alpha |+\rangle + \beta |-\rangle$  eine Richtung  $\vec{u}$  sodass  $|\psi\rangle$  ein Eigenzustand von  $\vec{S}\vec{u}$  ist (obwohl  $\vec{u}$  im Allgemeinen nicht in z-Richtung weist).

### 5.1.3 Zeitliche Entwicklung

Betrachte ein Teilchen mit Spin 1/2 im konstanten Magnetfeld  $\vec{B} = (0, 0, B_0)$

$$U = -\vec{M}\vec{B} = -\gamma B_0 S_z$$

$$H = -\gamma B_0 S_z = \omega_0 S_z \quad \text{mit} \quad \omega_0 = -\gamma B_0$$

Zeitliche Entwicklung mit Schrödingergleichung:

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

H ist eine  $2 \times 2$  Matrix in Diagonalform:

$$H|+\rangle = \frac{\hbar\omega}{2}|+\rangle$$

$$H|-\rangle = -\frac{\hbar\omega}{2}|-\rangle$$

Zeitliche Entwicklung:

(a) Zustand sei bei  $t=0$  Eigenzustand zu  $S_z$ :

$$|\psi(t=0)\rangle = |+\rangle \quad \implies |\psi(t)\rangle = \exp\left(-i\frac{\omega}{2}t\right)|+\rangle$$

$$|\psi(t=0)\rangle = |-\rangle \quad \implies |\psi(t)\rangle = \exp\left(+i\frac{\omega}{2}t\right)|-\rangle$$

Ein Eigenzustand von  $S_z$  bleibt auch bei Anwesenheit eines Magnetfelds in z-Richtung ein Eigenzustand zu  $S_z$

(b)  $|\psi(t=0)\rangle$  sei Eigenzustand von  $\vec{S}\vec{u}$  mit Eigenwert  $\hbar/2$  Feld zeigt weiterhin in z-Richtung. Zur Zeit  $t=0$  gilt

$$|\psi(t=0)\rangle = \cos(\Theta/2) \exp\left(-i\frac{\phi}{2}\right)|+\rangle + \sin\left(\frac{\Theta}{2}\right) \exp\left(+i\frac{\phi}{2}\right)|-\rangle$$

Die relative Phase von  $|+\rangle$  und  $|-\rangle$  ändert sich mit der Zeit

$$|\psi(t)\rangle = \cos(\Theta/2) \exp\left(-i\frac{\phi + \omega t}{2}\right)|+\rangle + \sin\left(\frac{\Theta}{2}\right) \exp\left(+i\frac{\phi + \omega t}{2}\right)|-\rangle$$

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

zustand von  $\vec{S}\vec{u}$  ist.

$$\vec{u} = \vec{u} = \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \varphi \\ \sin \theta \sin \varphi \\ \cos \theta \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \Theta(t) = \Theta(0) \text{ konstant und } \phi(t) = \phi(0) + \omega t$$

Der Winkel zwischen  $\vec{B}$  und  $\vec{u}(t)$  bleibt erhalten, d.h.  $\vec{u}$  präzidiert um die z-Achse

### 5.1.4 Lamor-Präzession

$S_z$  vertauscht mit  $H$

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

Nachrechnen ergibt  $\langle S_z \rangle(t) = \frac{\hbar}{2} \cos \Theta$

Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit  $P_{++}(t)$ , den Eigenwert  $+\frac{\hbar}{2}$  bezüglich der  $\vec{U}$ -Richtung (=Ausgangsrichtung) zu finden?

$$\begin{aligned} P_{++}(t) &= |\langle \Psi(t=0) | \Psi(t) \rangle|^2 \\ &= \left| \cos^2 \frac{\theta}{2} e^{-i\omega \frac{t}{2}} + \sin^2 \frac{\theta}{2} e^{i\omega \frac{t}{2}} \right|^2 \\ &= \cos^2 \frac{\omega t}{2} + \cos^2 \theta \sin^2 \frac{\omega t}{2} \end{aligned}$$

(1)  $t = 0$ : Richtung bleibt erhalten.

(2)  $\vec{B} \perp \vec{U}$ :  $\theta = \frac{\pi}{2}$

$$\implies P_{++}(t) = \left| \frac{1}{2} \left( e^{-i\frac{\omega t}{2}} + e^{i\frac{\omega t}{2}} \right) \right|^2 = \cos^2 \frac{\omega_0 t}{2}$$

Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit,  $-\frac{\hbar}{2}$  in  $\vec{U}$ -Richtung zu messen:

$$P_{-+}(t) = \dots = \sin^2 \theta \sin^2 \frac{\omega t}{2}$$

## 5.2 Allgemeines Zwei-Zustand-System

### 5.2.1 Statik

Die allgemeine hermitesche  $2 \times 2$ -Matrix  $H = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix}$  mit  $H_{11}, H_{22}$  reell und  $H_{12} = H_{21}^*$  hat 4 reelle Parameter und kann in der Form

$$H = A\mathbb{1} + \vec{B}\vec{\sigma}$$

geschrieben werden. Daraus folgt die Behandlung in Analogie zum symmetrischen  $\frac{1}{2}$ -System.

$$\text{Zunächst } H_0 \text{ sei diagonal: } H_0 = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix}$$

$$H_0 |1\rangle = E_1 |1\rangle$$

$$H_0 |2\rangle = E_2 |2\rangle$$

Addiere Wechselwirkung zwischen den Zuständen.

$$H = H_0 + W \text{ mit } W = \begin{pmatrix} W_{11} & W_{12} \\ W_{21} & W_{22} \end{pmatrix}$$

Manchmal ist die Beschreibung bezüglich der Basis  $|1\rangle, |2\rangle$  einfacher.  $W_{12}$  ist Mischungsterm.

Eigenwerte von  $H$ :

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

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

Mit

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Eigenzustände:

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

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

Wobei  $\theta$  und  $\phi$  festgelegt sind durch

$$\tan \theta = \frac{2|W_{12}|}{E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22}} \quad 0 \leq \theta < \pi$$

$$\frac{W_{21}}{|W_{21}|} = e^{i\phi}$$

Vereinfachung:

(1)  $W_{11}$  und  $W_{22}$  tauchen nur in der Kombination  $E_1 + W_{11}$ ,  $E_2 + W_{22}$  auf. Also können in  $E_1$  und  $E_2$  absorbiert werden.

(2) Energie-Nullpunkt des Systems ist beliebig. Wähle  $E = 0$ :

$$\implies E_1 = -E_2 \quad E_1 - E_2 = 2\Delta$$

$$E_{\pm} = \pm \sqrt{\Delta^2 + |W_{12}|^2}$$

$$\tan \theta = \frac{|W_{12}|}{\Delta} \quad 0 \leq \theta < \pi$$

$$e^{i\phi} = \frac{W_{21}}{|W_{21}|}$$

$$H = \begin{pmatrix} \Delta & W_{12} \\ W_{12}^* & -\Delta \end{pmatrix} = \Delta \sigma_z + \Re(W_{12}) \sigma_x - \Im(W_{12}) \sigma_y = \begin{pmatrix} \Re(W_{12}) \\ -\Im(W_{12}) \\ \Delta \end{pmatrix} \vec{\sigma}$$

Interpretation: Falls  $|W_{12}| \ll \Delta \implies$

$$E_{\pm} \approx \pm \left( \Delta + \frac{|W_{12}|^2}{2\Delta} \right)$$

$$\Theta = \frac{|W_{12}|}{\Delta} \ll 1$$

liefert

$|\Psi_+\rangle \approx |1\rangle + \text{kleine Beimischung von } |2\rangle \quad |\Psi_-\rangle \approx |2\rangle + \text{kleine Beimischung von } |1\rangle$

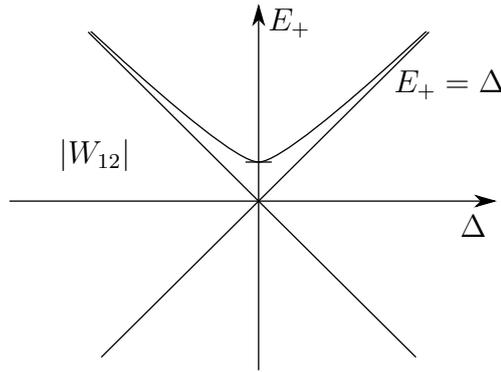
Falls  $|W_{12}| \gg \Delta$

$$E_{\pm} \approx \pm \left( |W_{12}| + \frac{\Delta^2}{2|W_{12}|} \right)$$

Dies gilt insbesondere auch für  $\Delta = 0$ , also bei Entartung der ungestörten Niveaus.

$$\tan \theta = \frac{|W_{12}|}{\Delta} \gg 1 \implies \theta = \frac{\pi}{2}$$

$$|\Psi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \exp\left(-i\frac{\phi}{2}\right) |1\rangle + \exp\left(i\frac{\phi}{2}\right) |2\rangle \right)$$



$$|\Psi_{-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( -\exp\left(-i\frac{\phi}{2}\right) |1\rangle + \exp\left(i\frac{\phi}{2}\right) |2\rangle \right)$$

Verhalten von  $E_{+}$  und  $E_{-}$  für festes  $W_{12}$  als Funktion von  $\Delta$ .

### 5.2.2 Zeitentwicklung

Die stationären Zustände sind  $|\Psi_{+}\rangle, |\Psi_{-}\rangle$ . Was erhält man für die Zeitentwicklung in der Basis  $|1\rangle, |2\rangle$ ?

$$|\Psi(t)\rangle = a_1(t) |1\rangle + a_2(t) |2\rangle$$

Also

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} a_1(t) &= E_1 a_1(t) + W_{12} a_2(t) \\ i\hbar \frac{d}{dt} a_2(t) &= W_{12} a_1(t) + E_2 a_2(t) \end{aligned}$$

Strategie: Drücke  $|1\rangle, |2\rangle$  zur Zeit  $t = 0$  aus  $|\Psi_{+}\rangle, |\Psi_{-}\rangle$  und verwende Zeitentwicklung von  $|\Psi_{+}\rangle, |\Psi_{-}\rangle$  entsprechend  $\exp\left(-i\frac{E_{\pm}t}{\hbar}\right)$ . Anschließend wird  $|\Psi_{+}\rangle, |\Psi_{-}\rangle$  wieder durch  $|1\rangle, |2\rangle$  ausgedrückt.

**Beispiel** Lösen von

$$\begin{aligned} |\Psi_{+}\rangle &= \cos\frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\phi}{2}} |1\rangle + \sin\frac{\theta}{2} e^{i\frac{\phi}{2}} |2\rangle \\ |\Psi_{-}\rangle &= \sin\frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\phi}{2}} |1\rangle + \cos\frac{\theta}{2} e^{i\frac{\phi}{2}} |2\rangle \end{aligned}$$

liefert uns  $|1\rangle, |2\rangle$ . Damit

$$|\Psi(0)\rangle = |1\rangle = \exp\left(i\frac{\phi}{2}\right) \left( \cos\frac{\theta}{2} |\Psi_{+}\rangle - \sin\frac{\theta}{2} |\Psi_{-}\rangle \right)$$

$|\Psi(0)\rangle = |1\rangle$  folgt aus der Anfangsbedingung.

$$|\Psi(t)\rangle = \exp\left(i\frac{\phi}{2}\right) \left( \cos\frac{\theta}{2} \exp\left(-i\frac{E_+}{\hbar}t\right) |\Psi_+\rangle - \sin\frac{\theta}{2} \exp\left(-i\frac{E_-}{\hbar}t\right) |\Psi_-\rangle \right)$$

Nun ersetzen wir wieder  $|\Psi_+\rangle, |\Psi_-\rangle$  durch  $|1\rangle, |2\rangle$ . Betrachten wir nun die Wahrscheinlichkeitsamplitude, den Zustand  $|2\rangle$  zur Zeit  $t \neq 0$  zu finden.

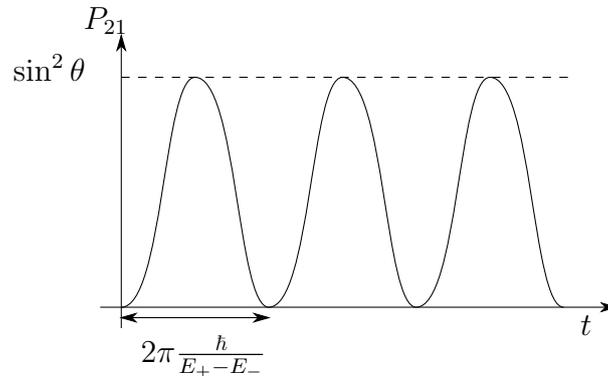
$$\begin{aligned} a_2(t) &= \langle 2|\Psi(t)\rangle \\ &= \exp\left(i\frac{\phi}{2}\right) \left( \cos\frac{\theta}{2} \exp\left(-i\frac{E_+}{\hbar}t\right) \sin\frac{\theta}{2} \exp\left(i\frac{\phi}{2}\right) - \sin\frac{\theta}{2} \exp\left(-i\frac{E_-}{\hbar}t\right) \cos\frac{\theta}{2} \exp\left(i\frac{\phi}{2}\right) \right) \\ &= \exp(i\phi) \cos\frac{\theta}{2} \sin\frac{\theta}{2} \left( \exp\left(-i\frac{E_+}{\hbar}t\right) - \exp\left(-i\frac{E_-}{\hbar}t\right) \right) \end{aligned}$$

Nun verwenden wir  $\sin\frac{\theta}{2} \cos\frac{\theta}{2} = \frac{1}{2} \sin\theta$  und  $E_+ = -E_-$  und damit

$$a_2(t) = -i \exp(i\phi) \sin\theta \sin\left(\frac{E_+ - E_-}{2\hbar}t\right)$$

und damit für die Wahrscheinlichkeit

$$P_{21}(t) = |a_2(t)|^2 = \sin^2\theta \sin^2\left(\frac{(E_+ - E_-)t}{2\hbar}\right)$$



$$P_{11} = 1 - P_{21}$$

Falls  $W_{12}$  klein gegen  $E_1 - E_2 \implies$  kleines  $\theta$ , kleine Amplitude. Falls  $E_1 = E_2 \hat{=} \Delta = 0 \implies \sin^2\theta = 1$  maximale Oszillation. Mit hoher Zeitauflösung  $P_{21}$  zwischen 0 und  $\sin^2\theta$ . Mit schlechter Zeitauflösung  $\langle P_{21} \rangle = \frac{1}{2} \sin^2\theta$  und damit keine Information über  $E_+ - E_-$ .



# Kapitel 6

## Drehimpuls

### 6.1 Vertauschungsrelation für Bahndrehimpuls

klassisch :

$$\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p}$$

In der Quantenmechanik sind  $\vec{x}, \vec{p}$  Operatoren, Reihenfolge in  $\vec{L}$  sind beliebig. Vertauschungen für  $L$

$$[L_1, L_2] = i\hbar L_3$$

$$[L_2, L_3] = i\hbar L_1$$

$$[L_3, L_1] = i\hbar L_2$$

Die folgenden Überlegungen gelten für jeden Satz von drei Operatoren mit den Vertauschungsregeln wie bei  $L, J_1, J_2, J_3$ .

Definiere

$$J^2 = J_1^2 + J_2^2 + J_3^2$$

Behauptung  $J^2$  vertauscht mit  $J_1, J_2, J_3$

$$[J_1^2, J_1] = 0$$

$$\begin{aligned} [J_2^2, J_1] &= J_2[J_2, J_1] + [J_2, J_1]J_2 \\ &= J_2(i\hbar J_3) + (-i\hbar J_3)J_2 \\ &= -i\hbar(J_2J_3 + J_3J_2) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [J_3^2, J_1] &= J_3[J_3, J_1] + [J_3, J_1]J_3 \\ &= J_3i\hbar J_2 + i\hbar J_2J_3 \\ &= i\hbar(J_2J_3 + J_3J_2) \end{aligned}$$

Damit

$$[J^2, J_1] = [J_1^2 + J_2^2 + J_3^2, J_1] = [J_1^2, J_1] + [J_2^2, J_1] + [J_3^2, J_1] = 0$$

$J^2$  und  $J_1$  sind simultan diagonalisierbar.

## 6.2 Eigenwerte, Eigenzustände, algebraische Behandlung

### 6.2.1 Notation

Suche nach einem vollständigen Satz von Operatoren, und deren Eigenwerte und Eigenzustände, welche den Raum, auf welchem  $\vec{J}$  definiert ist, aufspannen.

Operatoren:  $J^2$  und  $J_3 = J_z$ .

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

### Vertauschungsrelationen

$$[J_z, J_+] = [J_z, J_x] + i[J_z, J_y] = i\hbar J_y + i(-i\hbar J_x) = \hbar J_+ \quad (1)$$

$$[J_z, J_-] = -\hbar J_- \quad (2)$$

$$[J_+, J_-] = 2\hbar J_z \quad (3)$$

$$[J^2, J_{\pm}] = 0 \quad (4)$$

$$J_+ J_- = J^2 - J_z^2 + \hbar J_z \quad (5)$$

$$J_- J_+ = J^2 - J_z^2 - \hbar J_z \quad (6)$$

$$J^2 = \frac{1}{2} (J_+ J_- + J_- J_+) + J_z^2 \quad (7)$$

$J^2 = J_1^2 + J_2^2 + J_3^2 =$ Quadratsumme von hermiteschen Operatoren  $\implies$

$$\langle \psi | J^2 | \psi \rangle \geq 0$$

wegen  $\langle \psi | J_1^2 | \psi \rangle = \sum_{\text{Basis}} \underbrace{\langle \psi | J_1 | n \rangle \langle n | J_1 | \psi \rangle}_{\geq 0}$  Eigenwerte von  $J^2 \geq 0$ . Der Eigenwert sei

$\lambda \geq 0$ .  $\lambda$  kann immer geschrieben werden als

$$\lambda = j(j+1)\hbar^2$$

Behauptung:  $j$  ist gegeben als

$$j = \sqrt{\frac{\lambda}{\hbar^2} + \frac{1}{4}} - \frac{1}{2} \geq 0$$

Eigenwerte von  $J_z$  seien  $m\hbar$ . Notation : Eigenzustände

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

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

(a) Es gilt

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

**Beweis:**

$$\begin{aligned} |J_{\pm} |j, m\rangle|^2 &\geq 0 \\ \implies \langle j, m | J_+ J_- |j, m\rangle &\geq 0 \\ \xrightarrow{5} j(j+1) - m^2 + m &\geq 0 & (\xi) \\ \langle j, m | J_- J_+ |j, m\rangle &\geq 0 \xrightarrow{6} j(j+1) - m^2 - m \geq 0 & (\xi\xi) \\ \implies (j-m)(j+m+1) &\geq 0 \\ \xrightarrow{j \geq 0} -(j+1) &\leq m \leq j \end{aligned}$$

$\xi$  liefert uns

$$(j+m)(j-m+1) \geq 0 \implies -j \leq m \leq (j+1)$$

Insgesamt

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

(b)

$$m = -j \implies J_- |j, m\rangle = 0$$

folgt aus  $\xi$ , da  $j(j+1) - m^2 + m$  dann 0.entsprechend

$$m = j \implies J_+ |j, m\rangle = 0$$

folgt entsprechend aus  $\xi\xi$ .

Falls  $J_z |j, m\rangle = m\hbar |j, m\rangle$  und  $m > -j$  dann ist  $(J_- |j, m\rangle)$  Eigenzustand zu  $J_z$  mit Eigenwert  $(m-1)\hbar$ .

**Beweis:**

$$\begin{aligned} J_z (J_- |j, m\rangle) &= J_- J_z |j, m\rangle - \hbar J_- |j, m\rangle \\ &= (m - 1)\hbar (J_- |j, m\rangle) \end{aligned}$$

entsprechend für  $J_+$

$$J_z (J_+ |j, m\rangle) = (m + 1)\hbar (J_+ |j, m\rangle)$$

$J_+$ ,  $J_-$  sind Auf- bzw Absteigeoperatoren bezüglich  $m$ .  $j$  bleibt ungeändert, da  $[J^2, J_\pm] = 0$ .

Zwischenbilanz  $j(j+1) \geq 0, |m| \leq j$ .  $J_\pm$  erhöht bzw erniedrigt  $m$  um 1. Falls  $m = \pm j$

$$J_+ |j, m = +j\rangle = 0$$

$$J_- |j, m = -j\rangle = 0$$

Betrachten wir nun das Spektrum (zulässigen Eigenwerte)

Für jedes  $j, m$  gibt es eine nicht negative ganze Zahl  $p$  so dass

$$-j \leq m - p < -j + 1$$

$p$  ist die größte ganze Zahl, die man von  $m$  subtrahieren kann, sodass  $m - p$  noch  $\geq -j$  ist.  $|j, m\rangle$  ist Eigenzustand von  $J_2$  mit Eigenwert  $m$ ,  $J_- |j, m\rangle$  ist Eigenzustand von  $J_2$  mit Eigenwert  $m - 1$ .  $(J_-)^p |j, m\rangle$  ist Eigenzustand von  $J_2$  mit Eigenwert  $m - p$ .

Betrachte  $J_- J_-^p |j, m\rangle$ .

Falls  $(m - p) > -j$ , so wäre der Eigenwert des Zustands  $J_-^{p+1} |j, m\rangle = (m - p - 1)$  und somit  $< -j$ , dies ist ein Widerspruch zur Forderung  $|m| \leq j$

$$\implies -j = m - p$$

Entsprechend für  $J_+ \exists q \geq 0$  ganzzahlig, so dass  $j = m + q$

$$2 - 1 \quad 2j = p + q$$

$p + q$  ist ganzzahlig und nicht negativ. Also

$$j \in \left\{ n \in \mathbb{N} \cup \{0\} : \frac{n}{2} \right\}$$

und wegen  $|m| \leq j$  gibt es  $2j + 1$  erlaubte Werte von  $m$ .

### 6.2.2 Konstruktion einer Basis zu festem $j$

Der Eigenraum mit festem  $j$  ist  $(2j + 1)$  dimensional.  $|j, m\rangle$  mit  $m = \pm j$  sei normiert. Konstruiere iterativ

$$|j, m - 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}} \frac{1}{\hbar} J_- |j, m\rangle$$

$|j, m - 1\rangle$  ist normiert wegen (5).  $|j, m\rangle$  und  $|j, m'\rangle$  sind orthogonal für  $m \neq m'$  da

$$\langle j, m - 1 | J_z |j, m\rangle = 0$$

Allgemein

$$\langle j, m | J_z |j, m'\rangle = m\hbar\delta_{mm'}$$

Damit

$$\begin{aligned} \langle j, m | J_+ |j, m'\rangle &= \sqrt{j(j+1) - m'(m'+1)} \hbar \delta_{m(m'+1)} \\ \langle j, m | J_- |j, m'\rangle &= \sqrt{j(j+1) - m'(m'+1)} \hbar \delta_{m(m'-1)} \end{aligned}$$

### 6.2.3 Beispiele

(a)  $j = m = 0$  . 1 Zustand.

(b)  $j = \frac{1}{2}, m = \pm\frac{1}{2}$

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

$$\langle m | J_+ |m'\rangle : m = \frac{1}{2}, m' = -\frac{1}{2} \text{ sonst } \langle | J_+ | \rangle = 0$$

$$\sqrt{\frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2}} = 1 \quad \langle j, \frac{1}{2} | J_+ |j, -\frac{1}{2}\rangle = \hbar$$

$$J_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad J_- = (J_+)^\dagger = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

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

$$J_y = \frac{1}{2}(J_+ - J_-) = \frac{\hbar}{2i} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

(c)  $j = 1, m = 1, 0, -1$

$$J_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$J_+(m = 0, m' = -1)$  und  $(m = 1, m' = 0)$  sind von 0 verschieden.

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

$$J_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

## 6.3 Bahndrehimpuls in Polarkoordinaten

### Ausgangspunkt

$$L_x = \frac{\hbar}{i} \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \dots$$

Wir wechseln in Kugelkoordinaten

$$x = r \sin \theta \cos \phi \quad y = r \sin \theta \sin \phi \quad z = r \cos \theta$$

### Rechnung

Nach einer längeren Rechnung - die hier nicht aufgeführt werden soll - ergibt sich nach dem Wechsel in das neue Koordinatensystem

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

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}$$

Also insgesamt

$$L^2 = -\hbar^2 \left( \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)$$

Wir suchen wieder Eigenfunktionen  $Y_l^m(\theta, \phi)$  zu diesen Operatoren  $L^2$  und  $L_z$ :

$$L^2 Y_l^m(\theta, \phi) = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\theta, \phi) \quad L_z Y_l^m(\theta, \phi) = \hbar m Y_l^m(\theta, \phi)$$

Diese Differentialgleichungen müssen jetzt gelöst werden. Wir benutzen einen Separationsansatz

$$Y_l^m(\theta, \phi) = F_l^m(\theta) \Phi_m(\phi)$$

und erhält direkt eine Gleichung für  $\Phi_m$

$$\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \Phi_m(\phi) = m \Phi_m(\phi)$$

und damit die Lösung

$$\Phi_m = e^{im\phi}$$

Damit  $\Phi_m$  eindeutig und stetig ist, muss  $m$  ganzzahlig sein (außer bei Betrachtung von Spin-1/2-Systemen usw. Dies soll jetzt vernachlässigt werden!).

Als zweite Gleichung erhält man dann mit dieser Lösung eingesetzt

$$\left( \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} + l(l+1) \right) F_l^m(\theta) = 0$$

Wir fordern auch noch eine Normierung der Lösung, also

$$1 = \int d\Omega |Y_l^m|^2 = \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d \cos \theta |Y_l^m|^2$$

oder ausgeschrieben

$$2\pi \int_{-1}^1 d \cos \theta |F_l^m|^2 = 1$$

## Konstruktion einer allgemeinen Lösung

Wir gehen analog zum Lösungsverfahren des harmonischen Oszillators vor. Für  $m = l$  muss gelten:

$$L_+ F_l^l(\theta) e^{il\phi} = 0$$

Also

$$\left( \frac{\partial}{\partial \theta} - l \cot \theta \right) F_l^l = 0 \implies \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \sin \theta} - l \right) F_l^l = 0$$

Dies liefert die Lösung

$$F_l^l = c_l \sin^l \theta$$

bzw.

$$Y_l^l c_l \sin^l \theta e^{il\phi}$$

Die Normierung liefert

$$c_l = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}$$

Aus diesem (obersten) Zustand lassen sich mit dem Absteigeoperator alle anderen Zustände konstruieren. Wir benutzen:

$$|l, m-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{l(l+1) - m(m-1)}} \frac{1}{\hbar} L_- |l, m\rangle$$

mit unserer Lösung von oben

$$\frac{L_-}{\hbar} = e^{-i\phi} \left( -\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

Somit kann  $Y_l^m$  aus  $Y_l^l$  durch Differenzieren gewonnen werden. Nach längerer Rechnung kommt man auf

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}} e^{im\phi} \sin^{-m} \frac{d^{l-m}}{d \cos^{l-m} \theta} \sin^{2l} \theta$$

oder alternativ

$$Y_l^m(\theta, \phi) = (-1)^{(m+|m|)/2} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\phi}$$

mit den  $P_l^m$  die assoziierten Legendre Polynome mit

$$P_l^m(u) = (1-u^2)^{u/2} \frac{d^m}{du^m} P_l(u) \quad P_l^0(u) = P_l(u) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \frac{d^l}{du^l} (1-u^2)^l$$

Analysieren wir die Struktur von  $Y_l^m$ . Die  $P_l$  sind  $l$ -ten Grades in  $u$ .  $P_l$  ist je nach der Parität von  $l$  gerade oder ungerade. Dann sind die  $P_l^m(\cos \theta)$  Polynome  $(l-m)$ -ten Grades in  $\cos \theta$  multipliziert mit  $\sin^m \theta$ . Genau wenn  $(l-m)$  gerade ist, tritt  $\cos \theta$  in einer geraden Anzahl auf. Zusätzlich ist noch  $Y_l^{-m} = (-1)^m (Y_l^m)^*$ . Einige Beispiele:

$$Y_0^0 = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \quad Y_1^0 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos[\theta] \quad Y_1^1 = -\frac{1}{2} e^{i\phi} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin[\theta]$$

**Verhalten unter Paritätstransformationen**  $\vec{x} \rightarrow -\vec{x}$  Damit geht

$$\theta \rightarrow \pi - \theta \quad \phi \rightarrow (\phi + \pi) \pmod{2\pi}$$

und damit

$$Y_l^m(\pi - \theta, \pi + \theta) = (-1)^l Y_l^m(\theta, \phi)$$

Die Parität hängt also nur ab von  $l$  und nicht von  $m$ . Hinweise zur Notation:

$$\langle \theta, \phi | l, m \rangle = Y_l^m(\theta, \phi)$$

Die  $Y_l^m$  sind orthogonal, also

$$\langle l, m | l', m' \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'} = \int d\Omega Y_l^m Y_{l'}^{m'*}$$

und vollständig, also:

$$\sum_l Y_l^m(\theta, \phi) Y_l^m(\theta', \phi')^* = \delta(\cos \theta - \cos \theta') \delta(\phi - \phi')$$

## 6.4 Drehimpuls als Erzeugender (Generator) der Drehungen

$L_z$  in Polarkoordinaten entspricht  $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}$ . Dann ist für ein infinitesimal kleines  $\alpha$ :

$$\left(1 + \frac{i\alpha}{\hbar} L_z\right) f(\theta, \phi) = \left(1 + \alpha \frac{\partial}{\partial \phi}\right) f(\theta, \phi) \approx f(\theta, \phi + \alpha)$$

Für ein endliches  $\alpha$  (und analytisches  $f$ ) ist

$$e^{\frac{i\alpha L_z}{\hbar}} f(\theta, \phi) = \sum_n \frac{1}{n!} \left(\alpha \frac{\partial}{\partial \phi}\right)^n f(\theta, \phi) = f(\theta, \phi + \alpha)$$

Allgemein:

$$e^{i\vec{\phi}\vec{L}/\hbar} \psi(\vec{x}) = \psi(\vec{x}')$$

wobei  $\vec{x}'$  aus  $\vec{x}$  durch Drehung in Richtung  $\vec{\phi}$  mit Winkel  $|\vec{\phi}|$  hervorgeht.

## 6.5 Integrale der Bewegung und Symmetrieeigenschaften

” $A$  ist Integral der Bewegung”  $\iff$  Alle Erwartungswerte von  $A$  sind zeitlich konstant  
 $\iff$  falls  $\partial_t A = 0$  und  $[A, H] = 0$ .

(siehe (Kapitel 3 Section 2) )

Betrachte Verschiebungen oder Drehungen des Systems.

Drehungen :

$$\vec{x} \rightarrow \vec{x}' = S\vec{x}, \vec{x} = S^{-1}\vec{x}'$$

Dann  $\psi'(\vec{x}') = \psi(\vec{x})$ . Suche Operator  $R_S$ , so dass

$$\psi'(\vec{x}') = R_S\psi(\vec{x}')$$

Also gilt

$$\psi'(\vec{x}') = \psi(\vec{x}) = \psi(S^{-1}\vec{x}') = R_S\psi(\vec{x}')$$

Mit  $\vec{x}'$  beliebig. Also

$$\psi(S^{-1}\vec{x}) = R_S\psi(\vec{x})$$

- (a) Homogenität des Raumes: Eigenschaften eines abgeschlossenen Systemes bei Parallelverschiebung bleiben ungeändert  $\iff H$  bleibt bei Verschiebung ungeändert.

$$\vec{x} = \vec{x}' + \delta\vec{a}$$

$$\begin{aligned} R_{\text{Verschiebung}}\psi(\vec{x}) &= \psi(\vec{x} - \delta\vec{a}) = \left(1 - \delta\vec{a} \cdot \vec{\nabla}\right) \psi(\vec{x}) \\ &= \underbrace{\left(1 - \frac{i}{\hbar}\delta\vec{a} \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\right)}_{R_{\delta\vec{a}}} \psi(\vec{x}) \end{aligned}$$

Invarianz von  $H$  bedeutet

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \langle \psi | R_S^\dagger H R_S | \psi \rangle$$

für alle Zustände, wobei  $R_S |\psi\rangle$  der Transformierte Zustand ist. Einsetzen von  $R_{\delta\vec{a}}$  liefert

$$[H, \vec{P}] = 0$$

(b) Isotropie des Raumes (Invarianz unter Drehungen)

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \langle \psi | R_{\text{Drehung}}^\dagger H R_{\text{Drehung}} | \psi \rangle$$

Infinitesimal gilt  $R_{\text{Drehung}} = 1 - \frac{i}{\hbar} \delta \vec{\varphi} \vec{L}$  Also

$$[H, \vec{L}] = 0$$

(c) Homogenität der Zeit  $\partial_t H = 0$

Also

$$\frac{dH}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [H, H] + \partial_t H = 0$$

Also

$$\frac{d}{dt} \langle \psi | H | \psi \rangle = 0$$

Dies ist die Energie-Erhaltung.

*Allgemein:*

Unitärer Operator

$$U_\alpha = \exp\left(-\frac{i\alpha}{\hbar} A\right)$$

Wenn für alle Zustände  $|\psi\rangle$  gilt

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \langle \psi | U_\alpha^\dagger H U_\alpha | \psi \rangle$$

also

$$H = U_\alpha^\dagger H U_\alpha \implies [H, A] = 0$$

Wenn weiterhin  $\partial_t A = 0$  gilt, dann ist

$$\frac{d}{dt} \langle \psi | A | \psi \rangle = 0$$

$U$  bewirkt die Transformation.  $A$  ist der Generator.

## 6.6 Rotation eines zweiatomigen Moleküls

Hantel  $\implies$  starrer Rotator. Kann beschrieben werden durch

$$H = \frac{\vec{L}^2}{2I}$$

Wobei  $I$  das Trägheitsmoment ist.  
Energie-Eigenwerte sind dann folglich

$$E_l = \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1)$$

## 6.7 Geladene Teilchen im konstanten Magnetfeld

*Landau-Niveaus* : Kann behandelt werden wie der harmonische Oszillator.

$$\text{Spektrum } E_{\perp} = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_c$$

wobei  $\omega_c$  die Zyklotronfrequenz ist.

# Kapitel 7

## Zentralpotentiale, Wasserstoffatom

### 7.1 Allgemeine Überlegung

$$E_{Kin} = \frac{\mu}{2} V_r^2 + \frac{L^2}{2\mu r^2}$$

wobei  $V_r$  die Radialgeschwindigkeit,  $\mu$  = reduzierte Masse.

$$E = \frac{1}{2\mu} P_R^2 + \frac{L^2}{2\mu r^2} + V(R)$$

Klassische Mechanik.

**Quantenmechanik** Stationäre Schrödingergleichung in der Ortsdarstellung

$$\left[ \frac{1}{2\mu} \vec{P}^2 + V(r) \right] \phi(\vec{r}) = E \phi(\vec{r})$$

Weiterhin gilt  $\frac{1}{2\mu} \vec{P}^2 = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta$

*Laplace in Kugelkoordinaten :*

$$\Delta\psi = \frac{1}{r} \partial_r^2 (r\psi) + \frac{1}{r^2} \left( \frac{1}{\sin\theta} \partial_\theta (\sin\theta \partial_\theta \psi) + \frac{1}{\sin^2\theta} \partial_\varphi^2 \psi \right)$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \partial_r^2 r + \frac{1}{2\mu r^2} \vec{L}^2 + V(r)$$

#### 7.1.1 Separation der Variablen

Wegen

$$[H, \vec{L}] = 0 \implies [H, \vec{L}^2] = 0, [H, L_z] = 0$$

Niveaus klassifizieren nach  $E, l, m$ .

Suche Lösungen der Form

$$\phi(\vec{r}) = R(r) \cdot Y_l^m(\theta, \varphi) \implies \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \partial_r^2 r + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r) \right) R(r) = ER(r)$$

Resultat hängt ab von  $l$ , unabhängig von  $m$ .

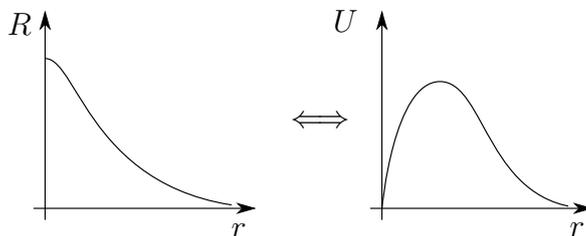
Normierung

$$\begin{aligned} 1 &= \int |\phi(\vec{r})|^2 dV \\ &= \int \int r^2 |R(r) Y_l^m|^2 dr d\Omega \\ &= \int r^2 |R(r)|^2 dr \underbrace{\int |Y_l^m|^2 d\Omega}_{=1} \end{aligned}$$

Also

$$\int r^2 |R(r)|^2 dr = 1$$

Energieeigenwert hängt ab von  $l$  und einem weiteren diskreten (Bindungszustand) oder kontinuierlichen (Streuzustand) Index ab :  $k$ . Übergang zu  $U(r) = rR(r), r \geq 0$ .



$$\left( \frac{1}{r} \partial_r^2 \right) \frac{1}{r} U(r) = \frac{1}{r} \partial_r^2 U(r)$$

Eindimensionale Schrödingergleichung

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \partial_r^2 + \hbar^2 \frac{l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r) \right) U_{k,l}(r) = E_{k,l} U_{k,l}(r)$$

mit Randbedingung

$$\lim_{r \rightarrow 0} U_{k,l}(r) = 0$$

Als effektives Potential bezeichnen wir  $\hbar^2 \frac{l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r)$ .

**Verhalten der Lösung bei kleinem  $r$**  Annahme über  $V(r)$  : regulär oder weniger singular als  $\frac{1}{r^2}$ . Ansatz

$$U(r) \propto r^s$$

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} s(s-1)r^{s-2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu} r^{s-2} + V(r)r^s \right) = Er^s$$

$V(r)r^2$  und  $Er^s$  vernachlässigbar. Also

$$s(s-1) = l(l+1) \implies s = l+1 \text{ oder } s = -l$$

### Anwendung: Grundzustand des dreidimensionalen harmonischen Oszillators

In diesem gilt  $l = 0$ . Das effektive Potential  $V_{\text{eff}}$  ist proportional zu  $r^2$ . Das effektive Potential gleicht dem eines harmonischen Oszillators (welcher schon weiter vorne behandelt wurde). Die Wellenfunktion  $U_{k,l=0}(r)$  muss bei  $r = 0$  verschwinden. Es handelt sich also um eine ungerade Lösung. In einem eindimensionalen Oszillator würde es sich um die erste Anregung handeln. Die Energie ist also

$$E_{0,0} = \hbar\omega \left( 1 + \frac{1}{2} \right) = \frac{3}{2} \hbar\omega$$

mit

$$U_{0,0} = r e^{-(r^2/\hbar/m\omega)} \quad R_{0,0} = e^{-(x^2+y^2+z^2)/\hbar/m\omega}$$

Die Ergebnisse ließen sich also direkt übertragen.

Die Normierungsbedingung für den Bindungszustand führt auf

$$1 = \int d^3\mathbf{r} |\psi(\vec{r})|^2 = \int d\Omega dr r^2 \|R(r)\|^2 Y_l^m(\theta, \phi) = \int dr |U(r)|^2$$

da die  $Y_l^m$  schon normiert sind. Für ein kontinuierliches Spektrum gilt

$$\int_0^\infty dr U_{k,l}^*(r) U_{k',l}(r) = \delta(k - k')$$

Ein allgemeiner Zustand wird also klassifiziert durch die drei Zahlen  $k, l, m$ . Wir schreiben  $|k, l, m\rangle$ .  $k$  ist die radiale Quantenzahl. Sie ist diskret oder kontinuierlich und zählt die einzelnen Energiezustände ab.  $l$  ist die azimuthale oder orbitale Quantenzahl mit ihren typischen diskreten Werten.  $m$  schließlich ist die magnetische Quantenzahl (Begründung folgt weiter unten).

Zu einem Wert von  $l$  gibt es  $2l+1$  Möglichkeiten für  $m$ . Dies entspricht einer  $2l+1$ -fachen Entartung. Diese Tatsache gilt für beliebige Zentralpotentiale. Für ein Potential vom Typ  $1/r, r^2$  oder  $1/r^2$  gibt es sogar noch weitere Energien.

## 7.2 Wasserstoffatom

### 7.2.1 Ansatz und Lösung des Eigenwertproblem

Das Potential ist in diesem Fall gegeben durch

$$V = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} = -\frac{e^2}{r}$$

Mit  $\mu$  wollen wir die reduzierte Masse bezeichnen, die ungefähr die Elektronenmasse ist. Die Schrödingergleichung lautet dann

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r} \right] U_{k,l}(r) = E_{k,l} U_{k,l}(r)$$

mit den Randbedingungen  $U_{k,l}(0) = 0$ . Für  $E < 0$  ist das Energiespektrum diskret, für  $E > 0$  kontinuierlich. Wir wollen uns hier auf den Fall mit diskretem Energiespektrum begrenzen.

Wir wechseln in dimensionslose Größen durch Division mit

$$E_I = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \text{ (Ionisationsenergie)}$$

und dem Einführen von dimensionslosen Variablen

$$\rho = \frac{r}{a_0} \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} \text{ (Bohrradius)}$$

$$\lambda_{k,l} = \sqrt{-E_{k,l}/E_I}$$

Mit dieser Notation erhält man

$$\left[ \underbrace{\frac{d^2}{d\rho^2}}_{\text{kin. Term}} - \underbrace{\frac{l(l+1)}{\rho^2}}_{\text{Zentrifugalbarriere}} + \underbrace{\frac{2}{\rho}}_{\text{Potential}} - \underbrace{\lambda_{k,l}^2}_{\text{Energie}} \right] U_{k,l}(\rho) = 0$$

**Verhalten für große  $\rho$**  Dann ergibt sich in Näherung

$$\left[ \frac{d^2}{d\rho^2} - \lambda_{k,l}^2 \right] U_{k,l}(\rho) = 0$$

Davon ist die Lösung einfach

$$U_{k,l}(\rho) \propto e^{\pm\lambda_{k,l}\rho}$$

Aus der Normierbarkeit folgt nur das negative Vorzeichen für  $\lambda_{k,l}\rho$ .

Als Ansatz wählen wir deshalb  $e^{-\lambda\rho}$  multipliziert mit einem Polynom:

$$U_{k,l} = e^{-\lambda_{k,l}\rho} Y_{k,l}(\rho)$$

Einsetzen führt auf eine Differentialgleichung für  $Y_{k,l}$ :

$$\left[ \frac{d^2}{d\rho^2} - 2\lambda_{k,l} \frac{d}{d\rho} + \lambda_{k,l}^2 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho} - \lambda_{k,l}^2 \right] Y_{k,l}(\rho) = 0$$

Für kleine  $\rho$  muss sich  $Y_{k,l}$  verhalten wie  $\rho^{l+1}$  wie wir weiter vorne gemerkt haben. Wir machen für  $Y_{k,l}$  also einen Potenzreihenansatz

$$Y_{k,l} = \rho^s \sum_{q=0}^{\infty} C_q \rho^q$$

mit  $s = l + 1$  und  $C_0 \neq 0$ . Das Einsetzen führt auf eine Rekursionsbeziehung für die  $C_q$ :

$$q(q + 2l + 1)C_q = 2[(q + l)\lambda_{k,l} - 1]C_{q-1}$$

Für große  $q$  zeigen die  $C_q$  ein Verhalten wie

$$C_q = \frac{C_{q-1}}{q} \frac{[2(q + l)\lambda_{k,l} - 1]}{q + 2l + 1} \rightarrow 2\lambda_{k,l} \frac{C_{q-1}}{q}$$

Damit wäre

$$\sum_{q=0}^{\infty} C_q \rho^q = C_0 \sum \frac{(2\lambda_{k,l}\rho)^q}{q!} = C_0 e^{2\lambda_{k,l}\rho}$$

was offensichtlich nicht die richtigen Eigenschaften besitzt (die Funktion  $Y_{k,l}$  würde asymptotisch wie  $e^{2\lambda\rho}$  wachsen). Deswegen muss die Rekursionsreihe für einen Reihenwert abbrechen. Es gibt also ein  $q$ , so dass

$$(q + l)\lambda_{k,l} = 1$$

Da  $q$  und  $l$  ganze Zahlen sind muss

$$\lambda_{k,l} = \frac{1}{k + l} \quad k \geq 1$$

Es gibt also einen diskreten Satz von Energieeigenwerten mit

$$E_{k,l} = -\frac{E_I}{(k + l)^2} \quad k = 1, 2, \dots \quad l = 0, 1, \dots$$

Die  $Y_{l,k}$  sind dann gegeben durch

$$Y_{k,l} = \rho^{l+1} \sum_{q=0}^{k-1} C_q \rho^q \quad C_q \neq 0$$

mit

$$C_q = \frac{2}{q} \frac{1}{q+2l+1} \frac{1}{k+l} (q+l-k-l) C_{q-1}$$

oder explizit

$$C_q = \left( \frac{2}{k+l} \right)^q \frac{1}{q!} \frac{(2l+1)!}{(q+2l+1)!} \frac{(-1)^q (k-1)!}{(k-q-1)!} C_0$$

Aus der Normierungsbedingung ergibt sich dann  $C_0$ .

### Beispiele

$$R_{k=1,l=0}(r) = 2a_0^{-3/2} e^{-r/a_0}$$

$$R_{k=1,l=1}(r) = 2a_0^{-3/2} \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0}$$

$$R_{k=2,l=0}(r) = 2a_0^{-3/2} \left( 1 - \frac{r}{2a_0} \right) e^{-r/2a_0}$$

Bis auf einen Faktor sind die  $R(r)$  identisch mit den verallgemeinerten Laguerre-Polynomen:

$$L_n^m(z) = (-1)^m \frac{n!}{(n-m)!} e^z z^{-m} \frac{d^{n-m}}{dz^{n-m}} e^{-z} z^n$$

denn für  $n = k + l$  ist

$$R(\rho) = -\frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}} e^{-\rho/n} \left( \frac{2\rho}{n} \right)^l L_{n+l}^{2l+1} \left( \frac{2\rho}{n} \right)$$

## 7.2.2 Diskussion der Resultate

Wir führen die Feinstrukturkonstante

$$\alpha \approx \frac{1}{137}$$

ein mit

$$E_I = \frac{1}{2} \frac{\mu e^4}{\hbar^2} = \frac{1}{2} \alpha^2 \mu c^2 \approx 13.6 \text{ eV}$$

mit

$$e = -\frac{q}{\sqrt{4\pi\epsilon}} \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} = \frac{1}{\alpha} \lambda_{\text{Compton}}$$

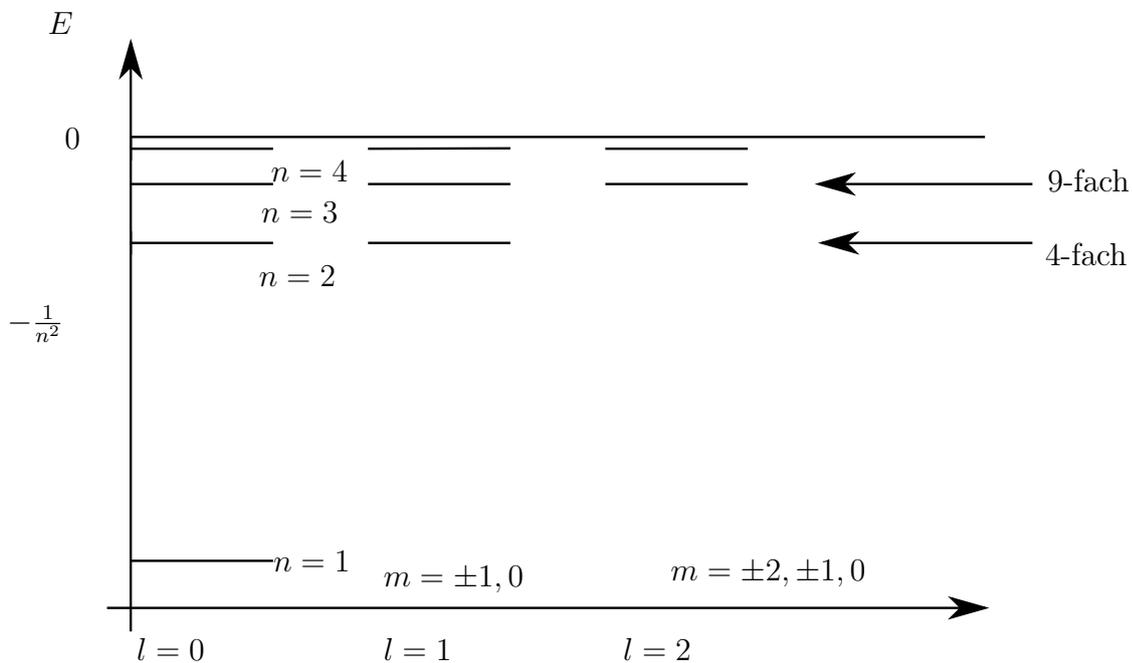
Also

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \quad \lambda_{\text{Compton}} = \frac{\hbar}{\mu c}$$

Die Bindungsenergie ist proportional zu  $\alpha^2 m_e c^2$  also viel kleiner als die Ruheenergie des Elektrons ( $137^2$ ). Das Virialtheorem liefert in diesem Fall

$$\text{kinetische Energie} \sim \alpha^2 m_e c^2 \implies v/c \approx \alpha$$

also ist die nichtrelativistische Behandlung gerechtfertigt. Aber bei schwereren Atomen ( $Z \sim 100$ ) gibt es größere relativistische Geschwindigkeiten.



**Entartung:** Insgesamt ist jeder Energiezustand  $n^2$ -fach entartet, denn

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

In manchen Fällen nutzt man die so genannte spektroskopische Notation

1	0	1	2	3	4
s	p	d	f	g	

Die Zustände werden dann nach der Hauptquantenzahl klassifiziert, z.B.

$$1s, 2s, 3s, 2p, 3p, 3d \text{ usw.}$$

Für ein allgemeines Potential ist dies jedoch unzweckmäßig (nur in diesem speziellen Fall ist diese Bezeichnung aufgrund der Entartung sinnvoll). Durch eine Veränderung des Potentials (z.B. durch Quantenfeldtheoriebeiträge) wird die Entartung aufgehoben (Feinstruktur, Hyperfeinstruktur, Zeemaneffekt, Paschen-Back-Effekt usw.).

## Wasserstoff-artige Systeme

z.B. Deuterium oder Tritium, welche sich von Wasserstoff durch eine etwas verschiedene reduzierte Masse unterscheiden (bei Deuterium ist der Unterschied ungefähr  $1/4000$ ). Ein weiteres Beispiel ist ein gebundener Zustand aus einem Myon und einem Elektron (Myonium), aus einem positivem Elektron und einem Elektron (Positronium) oder aus einem Proton und einem Myon (myonisches Atom) mit  $m_\mu/m_e = 207$ .

## 7.3 Dichten und Ströme beim Wasserstoffatom

Das Wasserstoffatom ist stationär aber nicht statisch (vgl. Teich mit Fluss. Ein Teich ist statisch, ein Fluss bei gleichbleibender Fließgeschwindigkeit ist stationär).

### 7.3.1 Ohne Magnetfeld

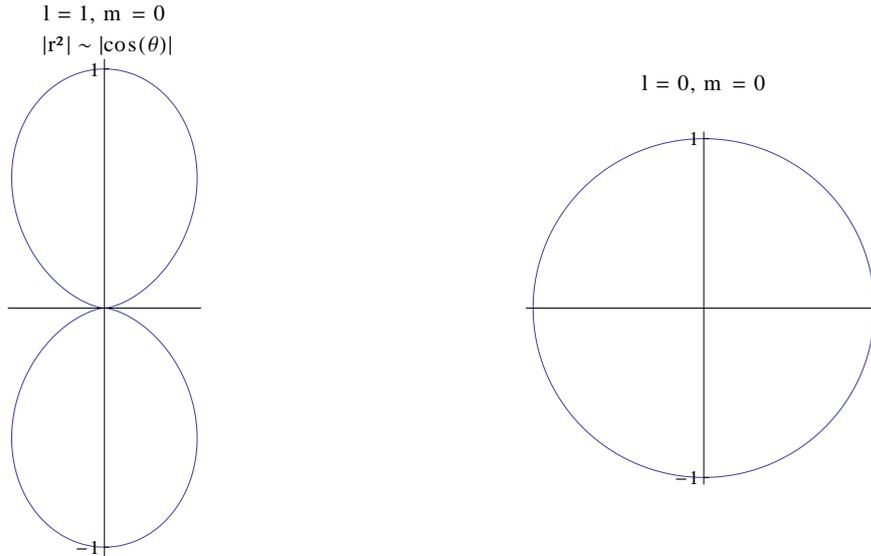
Wir hatten die Lösung

$$\psi_{n,l,m}(\vec{r}) = R_{n,l}(r)Y_l^m(\theta, \phi)$$

Damit ist die Dichte gegeben durch

$$\rho_{n,l,m} = |R_{n,l}(r)|^2 |Y_l^m(\theta, \phi)|^2$$

Die Dichte ist somit unabhängig von  $\phi$ , welches nämlich nur als Phasenfaktor auftritt.



Nun zur Stromdichte:

$$\vec{J} = \frac{1}{2\mu} \left( \psi^* \frac{\hbar \vec{\nabla}}{i} \psi - \psi \frac{\hbar \vec{\nabla}}{i} \psi^* \right)$$

Zerlege  $\psi$  in Betrag und Phase:

$$\psi(\vec{r}) = \alpha(\vec{r}) e^{i\chi(\vec{r})}$$

In diesem Fall ist

$$\rho = \alpha^2(\vec{r}) \quad \vec{J}(\vec{r}) = \frac{\hbar}{\mu} \alpha^2(\vec{r}) \vec{\nabla} \chi(\vec{r})$$

Die Umkehrung funktioniert ebenfalls: Gegeben sei  $\rho$  und  $\vec{J}$  bei einem stationären Problem.  $\psi$  lässt sich dann bestimmen aus

$$\alpha = \sqrt{\rho} \quad \vec{\nabla} \chi = \frac{\mu}{\hbar} \frac{\vec{J}}{\rho}$$

Falls  $\vec{\nabla} \times \frac{\vec{J}}{\rho} = 0$  so ist  $\frac{\vec{J}}{\rho}$  der Gradient einer skalaren Funktion und damit ist  $\chi$  in diesem Fall bestimmbar (bis auf ortsunabhängige Konstanten). Falls  $\vec{\nabla} \times \frac{\vec{J}}{\rho} \neq 0$  wäre die Gleichung ungültig.

Wenn wir die Ergebnisse für die  $\psi$  einsetzen, so ist

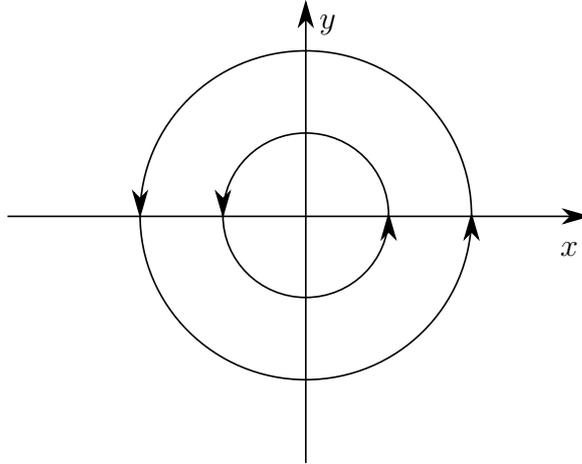
$$\alpha_{n,l,m}(\vec{r}) = |R_{n,l}| |Y_l^m(\theta, \phi)| \quad \chi(\vec{r}) = m\phi$$

Fast haben wir das Ergebnis von oben. Wir benötigen noch den Gradienten in Kugelkoordinaten

$$\vec{\nabla} = e_\phi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} + e_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + e_r \frac{\partial}{\partial r}$$

und erhalten

$$\vec{J} = \frac{\hbar}{\mu} \rho(\vec{r}) \frac{1}{r \sin \theta} m e_\phi$$



Die Stromdichte wirkt nur in  $\phi$ -Richtung und ist unabhängig von  $\phi$ . Sie entspricht einer Drehung um die  $z$ -Achse. Die Drehimpulsdichte ist (klassisch)

$$d\vec{L} = \mu \vec{r} \times \vec{J} d^3r$$

$\mu\rho$  ist die Massendichte und  $\mu\vec{J}$  die Massenstromdichte oder Impulsdichte. Da  $e_z$  und  $\vec{J}$  senkrecht stehen ist

$$dL_z = \mu r \sin\theta |\vec{J}| d^3r$$

$$\mu r \sin\theta |\vec{J}| d^3r$$

$$= \mu \frac{\hbar}{m} \rho$$

$$dL_z = \hbar m \rho(\vec{r}) d^3\vec{r}$$

$$\int \rho d^3r = 1$$

$$L_z = \hbar m$$

### 7.3.2 Stromdichte bei Anwesenheit eines Magnetfeldes

Gegeben sei  $\vec{A}(\vec{r})$ , zeitlich konstant, so dass  $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$ ,  $\vec{E} = 0$

$$H = \frac{1}{2\mu} (\vec{P} - q\vec{A})^2 + qU(\vec{r})$$

wobei  $\vec{P}$  der kanonische Impuls ist  
Stromdichte:

$$\vec{J} = \frac{1}{2\mu} \left( \varphi^* \underbrace{\left( \frac{\hbar\nabla}{i} - q\vec{A} \right)}_{\mu \cdot \text{Geschwindigkeit}} \varphi + c.c. \right)$$

Erfüllt  $\partial_i \rho - \nabla \cdot \vec{J} = 0$

$$\vec{J} = \frac{1}{\mu} \rho \left( \hbar \nabla \chi(\vec{r}) - q\vec{A} \right)$$

Speziell

$$\vec{B} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B \end{pmatrix} \implies \vec{A} = -\frac{1}{2} \vec{r} \times \vec{B}$$

$$\vec{J} = \frac{1}{\mu} \rho \left( \hbar \nabla \chi + \frac{q}{2} \vec{r} \times \vec{e}_z B \right)$$

Betrachte  $l = 0 \implies \chi = 0$

$$\vec{J} = -\frac{qB}{\mu 2} \vec{e}_z \times \vec{r} \rho_{100}$$

Feld induziert Strom!

### 7.3.3 Eichtransformation der Wellenfunktion

$\vec{E}, \vec{B}$ -Felder sind invariant unter den Eichtransformationen:

$$\vec{A} \rightarrow \vec{A}' = \vec{A} + \nabla \Lambda$$

$$\phi \rightarrow \phi' = \phi - \frac{\partial}{\partial t} \Lambda$$

Schrödinger-Gleichung bei Anwesenheit von elektromagnetischem Feld:

$$\left( \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - q\vec{A} \right)^2 + q\phi \right) \Psi(\vec{x}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{x}, t)$$

Wie muss  $\Psi$  geändert werden ( $\Psi \rightarrow \Psi'$ ), so dass  $\Psi'$  die Schrödingergleichung mit  $\vec{A}$  und  $\phi'$  erfüllt.

Lösung:  $\Psi \rightarrow \Psi' = e^{\frac{iq\Lambda(\vec{x}, t)}{\hbar}} \Psi$

## 7.4 Paramagnetismus/Diamagnetismus

### 7.4.1 Allgemeine Diskussion

Hamiltonoperator eines Teilchen im magnetischen Feld

$$H = \frac{1}{2m_e} \left[ \vec{P} - q\vec{H}(\vec{r}) \right]^2 + V(\vec{r})$$

Konstantes magnetisches Feld  $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ ,  $\vec{A} = -\frac{1}{2}\vec{r} \times \vec{B}$ . Also

$$H = \frac{1}{2m_e} \left[ \vec{P} + \frac{q}{2}\vec{r} \times \vec{B} \right]^2 + V(\vec{r}) = \underbrace{\frac{\vec{P}^2}{2m_e} + V(\vec{r})}_{H_0} + \underbrace{\frac{\mu_B}{\hbar} \vec{L} \cdot \vec{B}}_{H_1} + \underbrace{\frac{q^2 \vec{B}^2}{8m_e} R_{\perp}^2}_{H_2}$$

mit

$$\mu_B = \frac{q\hbar}{2m_e}$$

- Größenordnung der Terme  $H_0, H_1, H_2$

- $H_0$ : bekannter Hamiltonoperator des Wasserstoffatoms,  $\Delta E_0 \approx 10 \text{ eV}$ ,  $\Delta \nu_0 = \frac{\Delta E_0}{\hbar} \approx 0.1 - 1 \text{ THz}$
- $H_1$ :  $\frac{\Delta E_1}{\hbar} \approx \frac{1}{\hbar} \left( \frac{\mu_B}{\hbar} \cdot \hbar |\vec{B}| \right) \approx \frac{\omega_L}{2\pi}$  mit Larmorfrequenz  $\omega_L = \frac{qB}{2m_e}$  und  $\frac{\nu_L}{|\vec{B}|} = \frac{\omega_L}{2\pi|\vec{B}|} \approx 14 \frac{\text{GHz}}{\text{T}}$ .

Für normale Felder  $|\vec{B}| < 10 \text{ T}$  ist

$$\nu_L \lesssim 100 \text{ GHz}$$

- $H_2$ :  $R_{\perp}^2 = x^2 + y^2 \approx a_0^2$ , falls das Magnetfeld in  $z$ -Richtung zeigt und  $a_0$  ist der Bohrsche Radius.  
 $\Delta E_2 = \frac{q^2 B^2}{m_e} a_0^2$ . Also

$$\begin{aligned} \frac{\Delta E_2}{\Delta E_1} &= \frac{q^2 B^2}{m_e} a_0^2 \frac{1}{\hbar \omega_L} \\ &= 2\hbar \frac{qB}{m_e} \frac{m_e a_0^2}{\hbar} \\ &= \frac{\Delta E_1}{\Delta E_0} \end{aligned}$$

Also

$$\Delta E_2 \ll \Delta E_1 \ll \Delta E_0$$

Der Term  $H_2$  wird vernachlässigt, falls  $L \neq 0$ .

### 7.4.2 Interpretation des paramagnetischen Terms $H_1$

Klassisch: magnetische Moment eines Stroms ergibt sich aus eingeschlossener Fläche und Strom

$$\vec{M} = A \cdot I \vec{e}_z = \pi r^2 \frac{qv}{2\pi r} \vec{e}_z = \frac{q}{2} r v \vec{e}_z = \frac{q}{2m_e} \left[ \vec{L} - \underbrace{q\vec{r} \times \vec{B}}_{\text{vernachlässigbar}} \right]$$

Kopplung von magnetischen Moment an Magnetfeld

$$H_1 = -\vec{M} \cdot \vec{B} = -\frac{q}{2m_e} \vec{L} \cdot \vec{B}$$

Dieser Term zusammen mit der Kopplung des Elektron-Spins an das externe Magnetfeld führt zu einer Aufspaltung der Spektrallinien. Dies ist der *Zeemann-Effekt*.

### 7.4.3 Interpretations des *diamagnetischen* Terms $H_2$

Betrachte  $l = 0$

$$\begin{aligned} \vec{M}_2 &= -\frac{q^2}{2m_e} \vec{r} \times \vec{A}(\vec{r}) \\ &= \frac{q^2}{4m_e} \vec{r} \times (\vec{r} \times \vec{B}) \\ &= \frac{q^2}{4m_e} \left( (\vec{r} \cdot \vec{B}) \vec{r} - r^2 \vec{B} \right) \end{aligned}$$

$\vec{M}_2$  ist proportional zu externem Feld: Durch Magnetfeld induziertes magnetisches Moment!

*Kopplungsenergie:*

$$W_2 = - \int_0^B M_2(B') dB' = -\frac{1}{2} \vec{M}_2(\vec{B}) \cdot \vec{B} = \frac{q^2}{8m_e} \left[ r^2 \vec{B}^2 - (\vec{r} \cdot \vec{B})^2 \right] = \frac{q^2}{8m_e} R_{\perp}^2 \cdot B^2$$

Kopplungsenergie positiv.



# Kapitel 8

## Streutheorie in der nichtrelativistischen Quantenmechanik

### 8.1 Einführung

#### 8.1.1 Streuung / Experiment

Informationen über Wechselwirkung zwischen "fundamentalen" Teilchen.

- Spektrum gebundener Zustände
  - Energie-Niveaus.
  - Verhalten beim Anlegen externer Felder
  - Übergangsraten

oder

- über das Verhalten in Streuexperimenten Streuexperimente entweder über Fix-Target oder Collider-Experimente.

- Fix-Target:

Vorteil Bei genügend hoher Dichte des Targets volle Ausnutzung des einfallenden Teilchenstrahls

Nachteil Energie im Schwerpunktsystem geht nur mit  $\sqrt{E_{\text{Strahl}}}$

- Collider :

Vorteil Schwerpunktenergie geht mit  $2E_{\text{Strahl}}$ , volle  $360^\circ$  Streurichtung zur Verfügung.

Nachteil Starke Fokussierung und präzise Ausrichtung der Teilchenstrahlen in Wechselwirkungsgebiet nötig um ausreichende Wechselwirkungsraten zu erzielen.

Vereinfachung: Streuung von zwei Teilchen.

$$H = \frac{P_1^2}{2m_1} + \frac{P_2^2}{2m_2} + V(r)$$

nach Übergang zu Schwerpunkt  $P_S$ - und Relativkoordinaten  $P_R$ . Dies ist dann ein Einteilchenproblem in einem effektiven Potential.

$$H = \frac{P_R^2}{2\mu} + \underbrace{\frac{P_S^2}{2M}}_{\text{Schwerpunktsbewegung, nicht interessant}} + V(r)$$

In folgendem Streuung von einem Teilchen an einem gegebenen Potential.

2012-06-27-1  
einfügen,  
Scan von  
Nils

## 8.1.2 Zeitabhängige Beschreibung mit Wellenpaketen

Betrachte das Verhalten für große Abstände vom Streuzentrum und ein Potential, das hinreichend schnell abfällt. Also  $\lim_{r \rightarrow \infty} V(r) = 0$ , schneller als  $\frac{1}{r}$ .

- Einlaufendes Wellenpaket

$$\psi^{in}(\vec{r}, t) = \int \exp(i\vec{k}\vec{r}) \exp\left(-i\frac{E_k}{\hbar}t\right) A_{\vec{k}_0}(\vec{k}) \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}$$

$A_{\vec{k}_0} \hat{=}$  Wellenpaket, das um  $\vec{k}_0 = k_0\vec{e}_z$  konzentriert ist,  $E_I = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}$

- Auslaufendes Wellenpaket  $\hat{=}$  gestreute Welle konzentriert aus Kugelwellen  $\frac{\exp(ikr)}{r}$ :  
 $(v^2 + k^2) \frac{\exp(ikr)}{r} = 0$

$$\psi^s(\vec{r}, t) = \int \frac{\exp(ikr)}{r} \exp\left(-i\frac{E_k}{\hbar}t\right) A_{k_0}(\vec{k}) F(\vec{k}, \hat{r}) \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}$$

wobei  $\hat{r}$  den Einheitsvektor in radialer Richtung angibt.

Für Wellenpaket lokalisiert um  $\vec{k} = \vec{k}_0$

$$\begin{aligned}\psi^s(\vec{r}, t) &\approx \frac{F(\vec{k}_0, \hat{r})}{r} \int \exp(ikr) \exp\left(-i\frac{E_k}{\hbar}t\right) A_{k_0}(\vec{k}) \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \\ &= \frac{f(\theta, \varphi)}{r} \int \exp(ikr) \exp\left(-i\frac{E_k}{\hbar}t\right) A_{k_0}(\vec{k}) \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}\end{aligned}$$

Für  $t \ll 0$  existiert nur die einlaufende Welle. Für die gestreute Welle gilt  $r < 0$ , was nicht erlaubt ist.

Für große Abstände gilt

$$\psi(\vec{r}, t) = \int \exp\left(-i\frac{E_k}{\hbar}t\right) A_{k_0}(\vec{k}) \left[ \exp(i\vec{k}\vec{r}) + \frac{\exp(ikr)}{r} f(\theta, \varphi) \right] \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}$$

### 8.1.3 stationäre Beschreibung

Einlaufende ebene Welle

$$N e^{i\vec{k}\vec{r}} = \phi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

gestreute Welle

$$N \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta, \varphi) = \Psi_{\vec{k}}^S(\vec{r})$$

Normierung:

$$\begin{aligned}\int d\vec{r} \phi_{\vec{k}}^*(\vec{r}) \phi_{\vec{k}'}(\vec{r}) &= \delta(\vec{k} - \vec{k}') \\ \implies N &= (2\pi)^{-\frac{3}{2}}\end{aligned}$$

stationäre Lösung der Schrödingergleichung (für  $r \rightarrow \infty$ )

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = N \left( e^{i\vec{k}\vec{r}} + f(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} \right)$$

*Bemerkung:* Dimension  $f(\theta, \varphi) = \text{Länge}$

### 8.1.4 Stromdichte, Streuquerschnitt

Stromdichte:  $\vec{j} = \frac{1}{2m} (\Psi^* \frac{\hbar\nabla}{i} \Psi + \text{c.c.})$  Beitrag der einlaufenden Welle:

$$\vec{j}_E = \frac{N^2 \hbar \vec{k}}{m}$$

Beitrag der gestreuten Welle:

$$\vec{j}_S = \frac{N^2}{m} \Re \left( \frac{e^{-ikr}}{r} f^*(\theta, \varphi) \frac{\hbar}{i} \nabla \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta, \varphi) \right)$$

Berechne Stromdichte  $\vec{j}_S$  für große  $r$ , d.h. betrachte nur die führenden Terme in  $\frac{1}{r}$ .  
 $(\nabla = \vec{e}_r \partial_r + \vec{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \theta} \partial_\varphi + \vec{e}_\theta \frac{1}{r} \partial_\theta)$

$$\begin{aligned} \nabla \left( \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta, \varphi) \right) &= \nabla \left( \frac{e^{ikr}}{r} \right) f(\theta, \varphi) + \underbrace{\frac{e^{ikr}}{r} \nabla f(\theta, \varphi)}_{\propto \frac{1}{r^2} \text{ vernachlässigen}} \\ &= \vec{e}_r \partial_r \left( \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta, \varphi) \right) \\ &= \vec{e}_r \left( ik \frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{ikr}}{r^2} \right) f(\theta, \varphi) = \vec{e}_r ik \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta, \varphi) \end{aligned}$$

also insgesamt:

$$\vec{j}_S = \frac{N^2}{m} \frac{\hbar k}{r^2} |f(\theta, \varphi)|^2 \vec{e}_r$$

## Definition des Streuquerschnitts (Wirkungsquerschnitts)

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma(\theta, \varphi)}{d\Omega} &= \frac{\text{Zahl der beobachteten Teilchen}/d\Omega/\text{Zeiteinheit}}{\text{Zahl der einlaufenden Teilchen}/F/\text{Zeiteinheit}} \\ \frac{d\sigma(\theta, \varphi)}{d\Omega} &= \frac{|j_S| r^2 d\Omega / d\Omega}{|j_E|} = |f(\theta, \varphi)|^2 \end{aligned}$$

differentieller Wirkungsquerschnitt  $\frac{d\sigma(\theta, \varphi)}{d\Omega}$  hat die Dimension einer Fläche

$$\int \frac{d\sigma(\theta, \varphi)}{d\Omega} d\Omega = \sigma_{\text{total}} = \text{totaler Wirkungsquerschnitt}$$

*Bemerkung:* Im Experiment misst man Zählraten, die proportional zu  $j_E$  und der Zahl der Streuzentren sind.

### 8.1.5 Das optische Theorem

$$\begin{aligned} \vec{j}_E(\vec{r}) &= N^2 \frac{\hbar \vec{k}}{m} \text{ räumlich konstant} \\ \vec{j}_S(r) &= N^2 \frac{\hbar |\vec{k}|}{m} \frac{|f(\theta, \varphi)|^2}{r^1} \vec{e}_r \text{ auslaufend radial} \end{aligned}$$

Betrachte Strom durch geschlossene Fläche um ein Streuzentrum:

$$\int d\vec{F} \tilde{j}_E(\vec{r}) = 0$$

$$\begin{aligned}\int d\tilde{\mathbf{F}}\tilde{j}_S(\tilde{\mathbf{r}}) &= N^2 \frac{\hbar(\tilde{\mathbf{k}})}{m} \int d\tilde{\mathbf{F}}\tilde{e}_r \frac{|f(\theta, \varphi)|^2}{r^2} \\ &= \frac{N^2 \hbar(\vec{\mathbf{k}})}{m} \int d\Omega |f(\theta, \varphi)|^2 = |\tilde{\mathbf{j}}_E| \sigma_{\text{total}}\end{aligned}$$

Dies ist ein Widerspruch zur Stromerhaltung.

*Aber:* Interferenzen zwischen einlaufender Welle  $\phi_k$  und der auslaufenden Welle  $\Psi_k^S$  wurden bislang vernachlässigt.

$$\vec{j}_{\text{int}} = \frac{\hbar}{2m} \left( (\phi_k^*(\vec{r}) \frac{\nabla}{i} \Psi_k^S(\vec{r}) + P S i_k^{S*}(\vec{r}) \frac{\nabla}{i} \phi_k(\vec{r}) + \text{c.c.}) \right)$$

*Zu zeigen:*  $\vec{j}_{\text{int}}$  liefert einen negativen Beitrag in Vorwärtsrichtung ( $\theta = 0$ ). Betrachte nur den Beitrag in radialer Richtung  $\vec{e}_r$ .

$$\nabla = \vec{e}_r \partial_r + \dots \vec{e}_\theta + \dots \vec{e}_\varphi$$

$$\nabla \Psi_k^S = \vec{e}_r N f(\theta, \varphi) \left( \frac{ik}{r} - \underbrace{\frac{1}{r^2}}_{O(\frac{1}{r^2})} \right) e^{ikr} + \dots$$

$$\nabla \phi_k = i\vec{k} n e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

radialer Anteil von  $\vec{j}_{\text{int}}$ :

$$\begin{aligned}\vec{e}_r \vec{j}_{\text{int}} &= \frac{N^2 \hbar}{2m} \left( e^{-i\vec{k}\vec{r}} \frac{k}{r} f(\theta, \varphi) e^{ikr} + \frac{e^{-ikr}}{r} f^*(\theta, \varphi) \vec{e}_r \vec{k} e^{i\vec{k}\vec{r}} + \text{c.c.} \right) \\ &= \frac{N^2 \hbar k}{2mr} \left[ \left( e^{-i\vec{k}\vec{r}+ikr} f(\theta, \varphi) + \text{c.c.} \right) + \left( e^{i\vec{k}\vec{r}-ikr} f^*(\theta, \varphi) \cos \theta + \text{c.c.} \right) \right] \\ &= \frac{N^2 \hbar k}{2mr} \left( e^{ikr(1-\cos \theta)} f(\theta, \varphi) (1 + \cos \theta) + \text{c.c.} \right)\end{aligned}$$

Die Exponentialfunktion bewirkt, dass dieser Beitrag für  $\theta \neq$  nach Faltung mit einem Wellenpaket verschwindet. Beitrag nur aus Bereich

$$1 \leq \cos \theta \leq 1 - \varepsilon \quad \varepsilon \ll 1$$

$$\begin{aligned}\int d\tilde{\mathbf{F}}\tilde{j}_{\text{int}}(\tilde{\mathbf{r}}) &= \int d\Omega r^2 \tilde{e}_r \tilde{j}_{\text{int}} \\ &= \frac{N^2 \hbar k}{2mr} r^2 2\pi \int_{-1}^1 d \cos \theta \left( e^{ikr(1-\cos \theta)} (1 + \cos \theta) f(\theta, \varphi) + \text{c.c.} \right)\end{aligned}$$

mit  $x = 1 - \cos \theta$

$$= \frac{N^2 \hbar k r \pi}{m} \int_0^\varepsilon dx (e^{ikrx} (2-x) f(\theta, \varphi) + \text{c.c.})$$

Das Integral ergibt  $\frac{2i}{kr} + \frac{1}{k^2 r^2} + (\dots) e^{ikr\varepsilon}$  und damit

$$\begin{aligned} &= \frac{N^2 \hbar k \pi}{m} r \left( \frac{2i}{kr} f(\theta = 0) - \frac{2i}{kr} f^*(\theta = 0) \right) \\ &= -\frac{N^2 \hbar 4\pi}{m} \Im(f(\theta = 0)) = -4\pi \frac{|\vec{j}_E|}{k} \Im(f(\theta = 0)) \end{aligned}$$

also muss gelten  $|\vec{j}_E| \sigma_{\text{total}} - \frac{4\pi}{k} |\vec{j}_E| \Im f(\theta = 0) = 0$  um die Stromerhaltung zu erfüllen. Daraus ergibt sich das optische Theorem

$$\implies \sigma_{\text{total}} = \frac{4\pi}{k} \Im f(\theta = 0)$$

Schwächung der einlaufenden Welle durch Interferenz mit der gestreuten Welle kompensiert den Beitrag der gestreuten Welle. *Anmerkungen:*

- (1) Das bisher gesagte gilt nur für Potentiale mit endlicher Reichweite. Insbesondere muss  $\sigma_{\text{total}}$  endlich sein. [Gilt also nicht für  $V = \frac{1}{r}$ .]  
Umgekehrt: Falls das Potential eine unendliche Reichweite hat:  $\implies \sigma_{\text{total}} = \infty \implies f(\theta = 0) = \infty$
- (2) Das optische Theorem gilt auch wenn Teilchen bei der Streuung absorbiert werden.
- (3)  $f(\theta, \varphi)$  hat immer einen Imaginärteil  $\neq 0$ , falls Streuung auftritt.
- (4) Für  $k \rightarrow 0$  muss  $\Im f(\theta = 0) \propto k$ , damit  $\sigma_{\text{total}}$  nicht divergiert.

## 8.2 Partialwellen

Annahme:  $V(\vec{r}) = V(r)$

Schrödingergleichung in Kugelkoordinaten wie bei gebundenen Zuständen

$$\psi(\vec{r}) = R(r) \cdot Y(\Theta, \varphi)$$

Wegen Rotationssymmetrie um die Streuachse keine  $\varphi$  Abhängigkeit.  $\implies$  magnetische Quantenzahl  $m = 0$ . Bei niedriger Energie, genauer kleinem Impuls, und damit großer Wellenlänge tragen nur niedrige Drehimpulse bei  $\propto$

$$\underbrace{d}_{\text{Ausdehnung des Streuzentrums}} \cdot \underbrace{P}_{\text{Impuls}}$$

Mathematisch: Eine glatte Funktion in  $[-1, 1]$  wird durch wenige Terme in der Summe  $\sum_l c_k P_l(\cos(\theta))$  gut genähert.

2012-04-07-1,2  
einfügen

## 8.2.1 Entwicklung der Streulösung im Aussenbereich

(a) *Ebene Welle*

$$\exp(ikz) = \exp(ikr \cos \theta) = \sum_l (2l + 1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta)$$

Alternativ:  $\sum_l \sqrt{4\pi(2l + 1)} i^l j_l(kr) Y_l^0(\theta)$ .

$j_l$  sind die sphärischen Besselfunktionen mit

$$j_l(\rho) = (-1)^l \rho^l \left( \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \frac{\sin \rho}{\rho}$$

Für große  $r$

$$j_l(kr) \rightarrow \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2})}{kr}$$

Für kleine  $r$

$$j_l(kr) \rightarrow \frac{(kr)^l}{(2l + 1)!!}$$

(b) *Streuamplitude*

$$f(\theta, \varphi) \hat{=} f(\cos(\theta)) = \sum_l (2l + 1) f_l P_l(\cos \theta)$$

(c)  $\psi_k(\vec{r})$

$$\begin{aligned} \psi_k(r, \cos \theta) &= N \left( \exp(ikr \cos \theta) + f(\cos \theta) \frac{\exp(ikr)}{r} \right) \\ &= N \sum_l \left[ (2l + 1) i^l j_l(kr) + (2l + 1) f_l \frac{\exp(ikr)}{r} \right] P_l(\cos \theta) \end{aligned}$$

Benutzen wir nun für  $j_l$  die Näherung für große  $r$ , so erhalten wir

$$\psi_k(r, \cos \theta) = N \sum_l \left[ (2l + 1) i^l \frac{\exp(i(kr - l\frac{\pi}{2})) \exp(-i(kr - l\frac{\pi}{2}))}{2i} + (2l + 1) f_l \frac{\exp(ikr)}{r} \right] P_l(\cos \theta)$$

Mit  $\exp(il\frac{\pi}{2}) = i^l$  folgt

$$\psi_k(r, \cos \theta) = N \sum_l \left( \frac{(2l+1)}{2ik} (-1)^{l+1} \underbrace{\frac{\exp(-ikr)}{r}}_{\text{Einl. Kugelwelle}} + \left[ \frac{2l+1}{2ik} + 2l + 1f_l \right] \underbrace{\frac{\exp(ikr)}{r}}_{\text{Ausl. Kugelwelle}} \right) P_l(\cos \theta) \quad (8.1)$$

Für  $\psi_k(r, \cos \theta)$  als Lösung der Schrödingergleichung und für

$$\psi_k(r, \cos \theta) = N \sum_l (2l+1) a_l \sin \left( kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l \right) \frac{P_l(\cos \theta)}{r} \quad (8.2)$$

stehende Welle, Strom in radialer Richtung = 0  $\implies$  ein und auslaufende Welle sind gleich stark.

(8.1) und (8.2) kombiniert ergibt sich

$$f_l = \frac{1}{k} \exp(i\delta_l) \sin(\delta_l) \quad a_l = i^l \frac{1}{k} \exp(i\delta_l)$$

wobei  $\delta_l$  = Streuphase

Anschauliche Interpretation:

Freie Lösungen zu festem Drehimpuls für große  $r$

$$\propto \frac{2l+1}{2ik} [(-1)^{l+1} \exp(-ikr) + \exp(ikr)]$$

mit  $V(r) \neq 0$

$$\begin{aligned} & \propto \frac{2l+1}{2ikr} \exp(i\delta_l) [(-1)^{l+1} \exp(-ikr - i\delta_l) + \exp(ikr + i\delta_l)] \\ & = \frac{2l+1}{2ikr} [(-1)^{l+1} \exp(ikr) + \exp(ikr + 2i\delta_l)] \end{aligned}$$

Phasensprung der auslaufenden Welle um  $2\delta_l$  gegenüber der freien Lösung.  $\delta_l$  = Streuphasen (hängt von  $l, k$  ab).  $\delta_l$  ist per Konstruktion reell (elastische Streuung). Falls Absorption stattfindet ist  $\Im\delta_l > 0$  oder statt  $\exp(i\delta_l) \rightarrow \underbrace{\eta_l}_{\leq 1} \exp(i\delta_l)$

## 8.2.2 Wirkungsquerschnitt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \sum_{l,l'} f_l^* f_{l'} (2l+1)(2l'+1) P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta)$$

Interferenz zwischen verschiedenen  $l, l'$ .

Totaler Wirkungsquerschnitt

$$\int P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) d\Omega = 2\pi \int_{-1}^1 P_l(x) P_{l'}(x) dx = 2\pi \frac{2}{(2l+1)} \delta_{ll'}$$

Also

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{total}} &= 4\pi \sum_l (2l+1) |f_l|^2 \\ &= \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \sin^2(\delta_l) \\ &= \sum_l \sigma_l \end{aligned} \tag{8.3}$$

Und

$$\sigma_l \leq \frac{4\pi}{k^2} (2l+1)$$

Wenn  $\sigma_l$  für  $k \rightarrow 0$  endlich ist, dann gilt  $\delta_l \propto k$ . Äquivalent zu (8.3)

$$\sigma_l = \frac{\pi}{k^2} (2l+1) |1 - \exp(2i\delta_l)|^2$$

Wegen  $\exp(-i\delta_l) \sin \delta_l = \frac{1 - \exp(-2i\delta_l)}{2i} \exp(2i\delta_l) = S_l(E)$  Streumatrixelement zum Drehimpuls  $l$ .

Verallgemeinerung (mit Absorption)

$$S_l(E) = \eta_l \exp(2i\delta_l)$$

mit  $|\eta_l| \leq 1$ ,  $\eta_l$  reell. Extremfall  $\eta_l = 0$  liefert zwangsläufig auch  $\sigma_{\text{elastisch}} \neq 0$ .

Analogie: Schwarze Scheibe.  $\sigma_{\text{elastisch}} = \sigma_{\text{inelastisch}} = F$ .

### 8.2.3 Partialwellen und Streuphase können aus $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ bestimmt werden

Beispiel: Nur  $\delta_0$  und  $\delta_1$  seien nichtverschwindend. Dann:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{k^2} |e^{i\delta_0} \sin \delta_0 + 3e^{i\delta_1} \sin \delta_1 \cos \theta|$$

Der Betrag von  $\delta_0$  ist isotrop (also in jede Raumrichtung gleich). Der von  $\delta_1$  ist proportional zu  $\cos^2 \theta$ . Der Interferenzterm geht mit  $\cos \theta$ .

## Beispiel: Streuung an einer harten Kugel

Das Potential für dieses Problem ist

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r > R \\ \infty & r < R \end{cases}$$

Die radiale Schrödingergleichung ist gegeben durch:

$$\left( \frac{d^2}{dr^2} + k^2 \right) u_l(r) = \left[ U(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u_l(r)$$

mit

$$\psi = \frac{u(r)}{r} Y_{lm} \quad k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2} \quad U(r) = \frac{2\mu}{\hbar^2} V(r)$$

Betrachte nun den Fall  $l = 0$ :

Die Lösung in diesem Fall ist gegeben durch:

$$u_0(r) = \sin(kr - kR) = \frac{1}{2i} (e^{i(kr-kR)} - e^{-i(kr-kR)})$$

Damit muss

$$\delta_0 = -kR < 0$$

$\delta_0$  ist proportional zu  $k$  und das Verhältnis zwischen  $\delta_0$  und  $k$  entspricht in etwa der Größe des Streuzentrums.

*Allgemein:* Ein abstoßendes Potential führt zu einer negativen Streuphase (ein anziehendes zu einer positiven).

Die Wellenfunktion oszilliert schneller im Bereich des Potentials:

$$u(r) = \sin(kr + \delta) \text{ mit } \delta > 0$$

## 8.3 Behandlung mit Integralgleichung / Bornsche Näherung

### 8.3.1 Greensche Funktionen

Allgemein betrachten wir eine allgemeine inhomogene DGL mit

$$D\psi(x) = f(x)$$

$f$  ist die Quelle und gegeben. Die Funktion  $\psi$  ist gesucht. Speziell:  $f(x) = \delta(x - x')$ . Dann

ist die Greenschefunktion zu diesem Differentialoperator  $D$  gegeben durch

$$DG(x, x') = \delta(x - x')$$

Mit dieser ist das Problem gelöst, denn die allgemeine Lösung ist dann gegeben durch

$$\psi(x) = \psi_0 + \int dx' G(x, x') f(x')$$

mit der Lösung  $\psi_0$  des homogenen Problemes

$$D\psi_0 = 0$$

Im Allgemeinen wird  $\psi_0$  durch die Randbedingungen festgelegt. Wenn  $G$  bekannt ist erhält man die Lösung der DGL als einfaches Faltungsintegral.

Betrachte nun die Schrödingergleichung mit  $V = 0$ :

$$(\nabla^2 + k^2) G(x, x') = \delta(x - x')$$

Da der  $\nabla$ -Operator translationsinvariant ist, ist  $G$  nur eine Funktion von  $x - x'$ . Bezeichne also mit  $y = x - x'$  und betrachte die Fouriertransformierte:

$$\tilde{G}(q) = \int \frac{dy}{(2\pi)^{3/2}} G(y) e^{-iqy}$$

Damit lautet die DGL

$$(-q^2 + k^2)\tilde{G}(q) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}$$

Damit die  $\tilde{G}$  bestimmt und somit auch  $G$  mit

$$G(y) = \int \frac{dq}{(2\pi)^{3/2}} \frac{1}{-q^2 + k^2} e^{iqy} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}$$

Für die Integration benutzen wir Polarkoordinaten:

$$= \int_0^\infty dq \frac{q^2}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d \cos \theta e^{iqy \cos \theta} \frac{1}{k^2 - q^2}$$

Die Integration in  $\psi$  und  $\theta$ -Richtung ist einfach. Man erhält:

$$= \frac{1}{iq} \int_0^\infty dq \frac{q^2}{(2\pi)^3} (e^{iqy} - e^{-iqy}) \frac{1}{k^2 - q^2} = \frac{1-}{(2\pi)^2} \frac{1}{iq} \int_{-\infty}^\infty dq q e^{iqy} \frac{1}{q^2 - k^2}$$

Der Integrand hat einen Pol bei  $q = \pm k$ , also muss diese gesondert betrachtet werden. Wir benutzen die s.g.  $i\varepsilon$ -Vorschrift:

$$G_{\pm} = \frac{-1}{(2\pi)^2} \frac{1}{iq} \int_{-\infty}^{\infty} dq q e^{iqy} \frac{1}{q^2 - k^2 \mp i\varepsilon}$$

Für  $G_+$  liegt der Pol bei

$$q = \pm \sqrt{k^2 + i\varepsilon} = \pm \sqrt{1 + \frac{i\varepsilon}{k^2}} \approx \pm k \left( 1 + \frac{i\varepsilon}{k^2} \right) = \pm k(1 + i\varepsilon)$$

durch Umbenennung (da  $\varepsilon$  beliebig ist).

Das Integral kann im Unendlichen in der oberen Halbebene geschlossen werden, denn  $e^{iqy}$  fällt für komplexe  $q$  mit positivem Imaginärteil exponentiell ab. Deshalb:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \dots = 2\pi i \sum_{c \in \text{Res}} \text{res}(c)$$

Es gibt nur ein Residuum bei  $q = k + i\varepsilon$ . Also

$$G_+(y) = \frac{-1}{2\pi} \frac{1}{y} \left( \frac{q e^{iqy}}{q + k + i\varepsilon} \Big|_{q=k+i\varepsilon} \right)$$

Man erhält bei Übergang zu  $\varepsilon = 0$ :

$$G_+(y) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{iky}}{y} \quad G_-(y) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{-iky}}{y}$$

Für  $k = 0$  ist das Problem schon aus der Elektrostatik bekannt. Für  $k \neq 0$  entspricht dies dem Yukawa-Potential.  $G_{\pm}$  ist eine ein-/auslaufende Kugelwelle. Alternativ kann man auch die stehenden Wellen  $G_+ + G_-$  und  $G_+ - G_-$  betrachten.

### 8.3.2 Umformung der Schrödingergleichung in Integralgleichung

$$(\nabla^2 + k^2) \psi_k(r) = \underbrace{\frac{2m}{\hbar^2} V(r)}_{U(r)} \psi_k(r)$$

Damit wäre die Lösung

$$\psi_k^+(r) = e^{i\vec{k}\vec{r}} + \int dr' G_+(r, r') U(r') \psi_k^+(r')$$

Dies ist die so genannte Lippmann-Schwinger-Gleichung (eine Integralgleichung). Eingesetzt ist dies

$$\psi_k^+(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} - \frac{1}{4\pi} \int d\vec{r}' \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} U(\vec{r}') \psi_k^+(\vec{r}')$$

$\hbar k$  ist der Impuls des einlaufenden Teilchens.  $\vec{r}$  ist der Ort des Beobachters.  $U(\vec{r}')$  sei in der Nähe des Ursprungs lokalisiert, d.h. das Integrationsgebiet und somit  $|\vec{r}'|$  beschränkt. Wir untersuchen jetzt das Verhalten für  $r \gg r'$ . Dann ist

$$|\vec{r}-\vec{r}'| = r \left( 1 - \frac{\vec{r}\vec{r}'}{r^2} \right)$$

Das am Ort  $\vec{r}$  gemessene gestreute Teilchen habe den Impuls  $\vec{k}'$ . Damit

$$\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \rightarrow \frac{e^{ikr-i\vec{k}'\vec{r}'}}{r}$$

Damit ist

$$\psi_k^+ \rightarrow e^{i\vec{k}\vec{r}} - \frac{e^{ikr}}{4\pi r} \int d\vec{r}' e^{-i\vec{k}'\vec{r}'} U(\vec{r}') \psi_k^+(\vec{r}')$$

$\vec{k}$  einlaufend,  $\vec{k}'$  auslaufend.

### 8.3.3 Bornsche Näherung

Annahme:  $V$  bzw  $U$  sind klein.  $\implies$  Iterative Lösung: Startwert

$$\psi_k^+(\vec{r})|_1 = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$$

$$\psi_k^+(\vec{r})|_2 = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) - \frac{1}{4\pi} \int \frac{\exp(ik|\vec{r}-\vec{r}'|)}{|\vec{r}-\vec{r}'|} U(\vec{r}') \psi_k^+(\vec{r}')|_1 d\vec{r}'$$

Allgemein

$$\psi_k^+(\vec{r})|_n = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) - \frac{1}{4\pi} \int \frac{\exp(ik|\vec{r}-\vec{r}'|)}{|\vec{r}-\vec{r}'|} U(\vec{r}') \psi_k^+(\vec{r}')|_{n-1} d\vec{r}'$$

Niedrigste Ordnung :  $\psi_k^+|_2$  für  $r \gg r'$

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \int U(\vec{r}') \exp(i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}') d\vec{r}'$$

$(\vec{k}-\vec{k}')\hbar =$  Impulsänderung des einlaufenden Teilchens.

Anwendung  $V(r) =$  Yukawa-Potential. Auszurechnen in einer Übung.



# Kapitel 9

## Störungstheorie (zeitunabhängig)

### 9.1 Methode

$H = H_0 + W$  sei zeitunabhängig.

Eigenwerte und -zustände zu  $H_0$  seien bekannt.

$$H_0 |\varphi_p^i\rangle = E_p^0 |\varphi_p^i\rangle$$

Index  $p$  zählt die Energieniveaus, Index  $0 \hat{=}$  ungestörten Problem, Index  $i \hat{=}$  zählt die Entartung.

$\{|\varphi_p^i\rangle\}$  orthonormiertes, vollständiges System. Matrixelemente von  $W$  seien klein gegen die Energiedifferenzen  $E_p^0 - E_{p'}^0, p \neq p'$ .

Ansatz  $W = \lambda \hat{W}$ , wobei  $\lambda$  den Entwicklungsoperator beschreibt und die Matrixelemente von  $\hat{W}$  seien vergleichbar mit  $E_p^0 - E_{p'}^0$ . Suche Eigenwerte und Zustände als Funktion von  $\lambda$

Scan Nils

$$(H_0 + \lambda \hat{W}) |\psi(\lambda)\rangle = E(\lambda) |\psi(\lambda)\rangle$$

*Potenzreihenansatz*

$$E(\lambda) = \sum_{j=0}^{\infty} \lambda^j \varepsilon_j$$
$$|\psi(\lambda)\rangle = \sum_{j=0}^{\infty} \lambda^j |j\rangle$$

$|0\rangle$  und  $|1\rangle$  (usw) stehen hier nicht für den Grundzustand oder 1. angeregten Zustand (usw) sondern sind Linearkombinationen der  $|\varphi_p^i\rangle$ .

2012-07-11-2  
einfügen

Konvergenz der Reihe ist nicht garantiert, oft nicht zutreffend, kann aber trotzdem gute Näherung sein.

*Beispiel:* Coulomb Potential + konstantes elektrisches Feld

Berechnungen von  $\varepsilon_q, |q\rangle$ .

Stationäre Schrödingergleichung: formale Potenzreihe

$$(H_0 + \lambda \hat{W}) \underbrace{\left[ \sum_{q=0}^{\infty} \lambda^q |q\rangle \right]}_{\psi(\lambda)} = \left[ \sum_{q=0}^{\infty} \lambda^q \varepsilon_q \right] \left[ \sum_{q=0}^{\infty} \lambda^q |q\rangle \right]$$

Ausmultiplizieren, sortieren nach Potenzen von  $\lambda$ .

Nullte Ordnung

$$H_0 |0\rangle = \varepsilon_0 |0\rangle \quad (0a)$$

Allgemein

$$H_0 |q\rangle + \hat{W} |q-1\rangle - \sum_{k=0}^q \varepsilon_{q-k} |k\rangle = 0 \quad \lambda^q \text{- Term}$$

insbesondere

$$H_0 |1\rangle + \hat{W} |0\rangle - (\varepsilon_1 |0\rangle + \varepsilon_0 |1\rangle) = 0 \quad (1a)$$

$$H_0 |2\rangle + \hat{W} |1\rangle - (\varepsilon_2 |0\rangle + \varepsilon_1 |1\rangle + \varepsilon_0 |2\rangle) = 0 \quad (2a)$$

$$H_0 |3\rangle + \hat{W} |2\rangle - (\varepsilon_3 |0\rangle + \varepsilon_2 |1\rangle + \varepsilon_1 |2\rangle + \varepsilon_0 |3\rangle) = 0 \quad (3a)$$

Normierung und Phase von  $\psi(\lambda)$ : *Forderung:*

(1)

$$\langle \psi(\lambda) | \psi(\lambda) \rangle = 1$$

Norm

(2)

$$\langle 0 | \psi(\lambda) \rangle \in \mathbb{R}$$

(Konvention) , keine Phasenverschiebung

0. Ordnung in  $\lambda$   $1) \hat{=} 2) \implies$

$$\langle 0 | 0 \rangle = 1 \quad (0b)$$

Phase von  $|0\rangle$  zunächst beliebig.

1. Ordnung :

$$\begin{aligned}
 1 &= (\langle 0| + \lambda \langle 1|) (|0\rangle + \lambda |1\rangle) \\
 &= \lambda (\langle 1|0\rangle + \langle 0|1\rangle) + O(\lambda^2) \\
 &\implies \langle 0|1\rangle \in \mathbb{C} \wedge \Re(\langle 0|1\rangle) = 0 \\
 \langle 0|0\rangle + \lambda \langle 0|1\rangle &\in \mathbb{R} \\
 &\implies \langle 0|1\rangle \in \mathbb{R} \\
 &\implies \langle 0|1\rangle = 0
 \end{aligned} \tag{1b}$$

2. Ordnung

$$\langle 0|2\rangle = \langle 2|0\rangle = -\frac{1}{2} \langle 1|1\rangle \tag{2b}$$

Allgemein

$$\langle 0|q\rangle = \langle q|0\rangle = -\frac{1}{2} \sum_{m=1}^{q-1} \langle m|q-m\rangle$$

wobei die rechts auftretenden Zustände bereits vorher berechnet wurden.

In der 0. Ordnung haben wir die Gleichungen (0a) + (0b) , in 1. Ordnung die Gleichungen (1a) + (1b) usw.

Im Grenzfall  $\lambda \rightarrow 0$  fallen eventuell  $g_n$  Eigenvektoren zusammen, wobei  $E_n$  der Eigenwert von  $H_0$  und  $g_n$  der Grad der Entartung ist. (Wesentlich verschiedene Behandlung.

## 9.2 Störung für ein nicht entartetes Niveau mit $E_n^0$ als Eigenwert

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

0te Ordnung: Eigenwert und Zustand sollen für  $\lambda \rightarrow 0$  mit  $E_n^0$  und  $\varphi_n^0$  zusammen fallen. Mit (0a) folgt

$$\varepsilon_0 = E_n^0 \quad |0\rangle = |\varphi_n\rangle$$

1. Ordnung

(a) Multipliziere Gl (1a) von links mit  $\langle \varphi_n | = \langle 0 |$ .

$$\underbrace{\langle \varphi_n | H_0 | 1 \rangle}_{\varepsilon_0 \langle 0 | 1 \rangle = 0} + \langle \varphi_n | \hat{W} | \varphi_n \rangle - \left( \underbrace{\varepsilon \langle 1 | 1 \rangle}_1 + \underbrace{\varepsilon_0 \langle \varphi_n | 1 \rangle}_{= \langle 0 | 1 \rangle = 0} \right) = 0$$

$$\varepsilon_1 = \langle \varphi_n | \hat{W} | \varphi_n \rangle$$

$$E_n(\lambda) = E_n^0 + \langle \varphi_n | W | \varphi_n \rangle$$

Dies genügt für viele Anwendungen.

(b) Erinnerung :  $\{|\varphi_p^i\rangle\}$  Basis,  $|\varphi_p^i\rangle$  Eigenzustände des ungestörten Problems.

Multipliziere (1a) von links mit  $\langle \varphi_p^i |$  mit  $p \neq n$

$$\langle \varphi_p^i | H_0 | 1 \rangle + \langle \varphi_p^i | \hat{W} | 0 \rangle - (\varepsilon_1 \langle \varphi_p^i | 0 \rangle + \varepsilon_0 \langle \varphi_p^i | 1 \rangle) = 0$$

$$E_p \langle \varphi_p^i | 1 \rangle + \langle \varphi_p^i | \hat{W} | 0 \rangle - \varepsilon_0 \langle \varphi_p^i | 1 \rangle = 0$$

$$\langle \varphi_p^i | 1 \rangle = \frac{\langle \varphi_p^i | \hat{W} | 0 \rangle}{E_n - E_p} \quad p \neq n$$

$$\langle \varphi_n | 1 \rangle = 0$$

Alle Matrixelemente von  $|1\rangle$  mit den Elementen der Basis sind somit bekannt und es gilt in erster Ordnung

$$|\varphi_n(\lambda)\rangle = |\varphi_n\rangle + \sum_{p \neq n} \sum_i \frac{|\varphi_p^i\rangle \langle \varphi_p^i | W | \varphi_n \rangle}{E_n - E_p}$$

## 9.2.1 Energie-Korrektur in zweiter Ordnung

Multipliziere Gl (2a) von links mit  $\langle \varphi_n | \equiv \langle 0 |$

$$0 = \varepsilon_0 \langle 0 | 2 \rangle + \langle 0 | \hat{W} | 1 \rangle - \left( \underbrace{\varepsilon_2 \langle 0 | 0 \rangle}_{=1} + \underbrace{\varepsilon_1 \langle 0 | 1 \rangle}_{=0} + \varepsilon_0 \langle 0 | 2 \rangle \right)$$

$$\varepsilon_2 = \langle 0 | \hat{W} | 1 \rangle$$

$$E_n(\lambda) = E_n^0 + \langle \varphi_n | W | \varphi_n \rangle + \sum_{p, i, p \neq n} \frac{\langle \varphi_n | W | \varphi_p^i \rangle \langle \varphi_p^i | W | \varphi_n \rangle}{E_n - E_p}$$

Falls  $n \hat{=}$  Grundzustand  $\implies (E_n - E_p) < 0 \implies$  2. Ordnungskorrektur ist negativ.

Grobe Abschätzung von  $\varepsilon_2$ :

$$\sum_{p,i,p \neq n} |\varphi_p^i\rangle \langle \varphi_p^i| = 1 - |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n|$$

$$|\varepsilon_2| < \frac{1}{\Delta E} (\langle \varphi_n | W^2 | \varphi_n \rangle - (\langle \varphi_n | W | \varphi_n \rangle)^2)$$

Wobei  $\Delta E$  Abstand zum nächsten

### 9.3 Störungstheorie bei ( $g_n$ -facher) Entartung

Problem: Wahl der Basis-Vektoren im  $g_n$ -dimensionalen Eigenraum von  $E_n$  ist nicht eindeutig. Entartete Zustände  $|\varphi_n^i\rangle, i = 1, \dots, g_n, n$  fest.

Entartung kann teilweise aufgehoben werden.

$$H_0 |1\rangle + \hat{W} |0\rangle - (\varepsilon_1 |0\rangle + \varepsilon_0 |1\rangle) = 0$$

$$\langle 0 | 1 \rangle = 0$$

(1a) von links mit  $\langle \varphi_n^i |$

$$\langle \varphi_n^i | H_0 | 1 \rangle + \langle \varphi_n^i | \hat{W} | 0 \rangle - (\varepsilon_1 \langle \varphi_n^i | 0 \rangle + \varepsilon_0 \langle \varphi_n^i | 1 \rangle) = 0$$

wegen  $E_n = \varepsilon_0$ .  $|0\rangle$  muss Linearkombination der  $g_n$  Zustände  $|\varphi_n^i\rangle$  sein.

$$|0\rangle = \sum_{i=1}^{g_n} |\varphi_n^i\rangle \underbrace{\langle \varphi_n^i | 0 \rangle}_{\text{Grundzustand}}$$

$$\sum_{j=1}^{g_n} \underbrace{\langle \varphi_n^i | \hat{W} | \varphi_n^j \rangle}_{g_n \times g_n \text{ Matrix}} \underbrace{\langle \varphi_n^j | 0 \rangle}_{\text{Vektor der Dimension } g_n} = \varepsilon_1 \langle \varphi_n^i | 0 \rangle$$

Eigenwert-Gleichung :  $\varepsilon_1$ -Eigenwerte,  $\{\varphi_n\}$  Eigenvektoren.

Zur Berechnung der Eigenzustände in *niedrigster* Ordnung und Energie in 1. Ordnung  $\implies$  Diagonalisierung der Matrix  $\hat{W}^{(n)}$  im Eigenwert zu  $E_n$ : Eigenwerte  $\varepsilon_0 + \lambda \varepsilon_1^j$  können eventuell noch entartet sein.

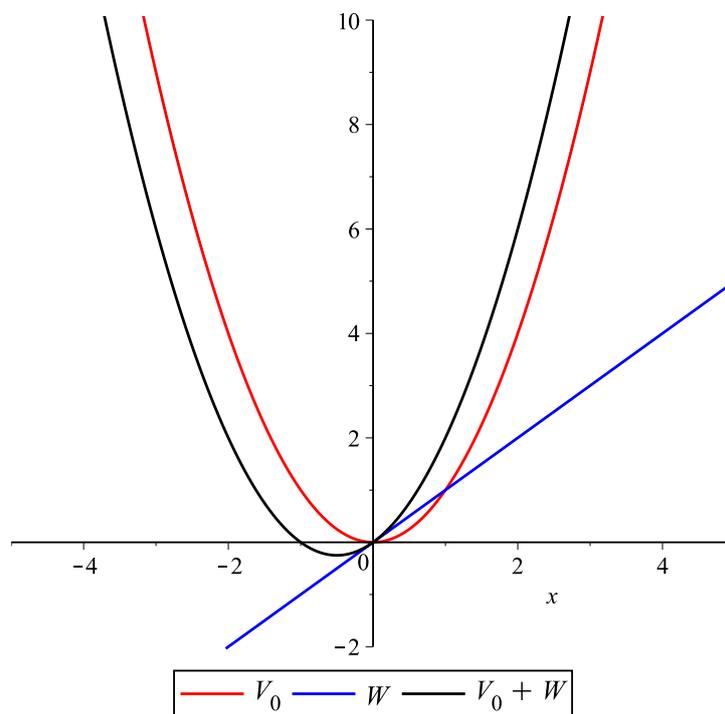
## 9.4 Beispiel: Eindimensionaler Harmonischer Oszillator mit Störpotential

$$H_0 = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2$$

Störung :  $X, X^2$  können auch exakt behandelt werden.  $X^3, X^4$ ?

Störung :  $W = \lambda\hbar\omega\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}X$  wobei  $\lambda$  dimensionslos ist und  $\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}X = \frac{a+a^\dagger}{\sqrt{2}}$

(a) Exakte Lösung



$$V_0 + W = \frac{1}{2}m\omega^2 \left( X + \lambda\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \right)^2 - \frac{1}{2}\lambda^2\hbar\omega$$

Energie-Eigenwerte

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

Zustände wie beim ungestörten Problem, aber um  $X_0 = \lambda\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$  verschoben. Ausgedrückt durch die ungestörten Zustand : über Anwendung des Verschiebungsoperators

durch Anwendung von  $\exp\left(iP\frac{X_0}{\hbar}\right)$

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

$$iP\frac{X_0}{\hbar} = \frac{a - a^\dagger}{\sqrt{2}} \cdot \lambda$$

Es sei  $\langle x|\psi\rangle = f(x) \implies \langle x|\exp\left(iP\frac{a}{\hbar}\right)|\psi\rangle = f(x+a)$  also

$$|\psi_n\rangle = \exp\left(\lambda\frac{a - a^\dagger}{\sqrt{2}}\right)|\varphi_n\rangle$$

$$\approx \left(1 + \frac{\lambda}{\sqrt{2}}(a - a^\dagger) + \dots\right)\varphi_n$$

Verwende  $a^\dagger|\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1}|\varphi_{n+1}\rangle$ ,  $a|\varphi_n\rangle = \sqrt{n}|\varphi_{n-1}\rangle$ . Damit

$$|\psi_n\rangle = |\varphi_n\rangle + \lambda\sqrt{\frac{n}{2}}|\varphi_{n-1}\rangle - \lambda\sqrt{\frac{n+1}{2}}|\varphi_{n+1}\rangle$$

(b) Störungstheorie:

Matrixelemente des "Störoperators"  $W = \lambda\hbar\omega\frac{a+a^\dagger}{\sqrt{2}}$

$$\langle\varphi_n|W|\varphi_n\rangle \hat{=} \text{Diagonalelementen} = 0$$

Verschiebung in 1. Ordnung = 0

$$\langle\varphi_{n+1}|W|\varphi_n\rangle = \lambda\hbar\omega\sqrt{\frac{n+1}{2}}$$

$$\langle\varphi_{n-1}|W|\varphi_n\rangle = \lambda\hbar\omega\sqrt{\frac{n}{2}}$$

$$\text{sonst} = 0$$

Störung der Zustände

$$|\psi_n\rangle = |\varphi_n\rangle + \sum_{p \neq n} |\varphi_p\rangle \frac{\langle\varphi_p|W|\varphi_n\rangle}{E_n - E_p}$$

$$= |\varphi_n\rangle + |\varphi_{n+1}\rangle \lambda\hbar\omega\sqrt{\frac{n+1}{2}} \frac{1}{-\hbar\omega} + |\varphi_{n-1}\rangle \lambda\hbar\omega\sqrt{\frac{n}{2}} \frac{1}{\hbar\omega}$$

$$= |\varphi_n\rangle - |\varphi_{n+1}\rangle \lambda\sqrt{\frac{n+1}{2}} + |\varphi_{n-1}\rangle \lambda\sqrt{\frac{n}{2}}$$

und somit das gleiche Ergebnis wie bei der exakten Lösung.

$$\begin{aligned} \sum_p |\langle \varphi_n | W | \varphi_p \rangle|^2 \cdot \frac{1}{E_n - E_p} &= \lambda^2 (\hbar\omega)^2 \left[ \frac{n+1}{2} \frac{1}{-\hbar\omega} + \frac{n}{2} \cdot \frac{1}{\hbar\omega} \right] \\ &= -\lambda^2 \frac{\hbar\omega}{2} \end{aligned}$$

Unabhängig von  $n$ .

Energieverschiebung in 2. Ordnung

### Anharmonischer Oszillator

$$W = \sigma \hbar \hat{X}^3 \quad \hat{X} = \frac{a + a^\dagger}{\sqrt{2}}$$

$$\langle \varphi_m | W | \varphi_n \rangle = \begin{cases} 0 & m = n \\ \neq 0 & m = n \pm 1 \\ 0 & m = n \pm 2 \\ \neq 0 & m = n \pm 3 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

2. Ordnung

$$\delta E_n = \sigma^2 \hbar \omega \left( -\frac{15}{4} \left( n + \frac{1}{2} \right)^2 - \frac{7}{16} \right)$$

#### 9.4.1 Beispiel: Stark Effekt

(a) *Quadratischer Stark-Effekt*

Wasserstoffatom in konstantem elektrischen Feld in  $z$ -Richtung. Störpotential  $W = -q\varepsilon z$ , ( $\vec{E} = \varepsilon \vec{e}_z$ )

*Einfluss auf Grundzustand:  $n = 1, l = 0, m = 0$*

1. Ordnung : Wir wissen  $\psi_{n=1, l=0, m=0}(\vec{r}) = f(r)$  (rotationssymmetrisch)

$$\langle n = 1, l = 0, m = 0 | W | n = 1, l = 0, m = 0 \rangle = -q\varepsilon \int |f(r)|^2 z dr^3 = 0$$

2. Ordnung

$$q^2 \varepsilon^2 \sum_{n' \neq 1, l', m'} |\langle n=1, l=0, m=0 | z | n', l', m' \rangle|^2 \frac{1}{E_1 - E_{n'}} \\ \forall n' > 1 \quad E_1 - E_{n'} < 0$$

$\implies$  Energieverschiebung des Grundzustands ist negativ und quadratisch im Feld.

(b) Linearer Starkeffekt

Betrachte Hauptquantenzahl  $n = 2$ . 4 Zustände  $l = 0, l = 1, m = 0, \pm 1$ .

4-dim Unterraum  $\implies 4 \cdot 4 = 16$  Matrixelemente, dann diagonalisierung.

$$\psi(\vec{r}) = R_{n,l}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \\ Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\ Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \\ Y_1^1 = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta \exp(i\varphi) \\ Y_1^{-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta \exp(-i\varphi) \\ z = r \cos \theta$$

16 Matrixelemente von  $\langle l', m' | \cos \theta | l, m \rangle$

(1) Diagonalelemente = 0 wegen Parität

(2)  $m' \neq m$  denn  $\int_0^{2\pi} \exp(i\varphi) d\varphi = 0$

(3) Wenn  $m' = m$  sein soll und kein Diagonalelement, so bleibt nur:

$$\langle l=1, m=0 | W | l=0, m=0 \rangle = \langle l=0, m=0 | W | l=1, m=0 \rangle \\ = \varepsilon \gamma \\ \neq 0 \text{ und reell}$$

Übergang zwischen Zuständen verschiedener Parität und gleichem  $m$ .

$$W = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \gamma\varepsilon \\ 0 & 0 & \gamma\varepsilon & 0 \end{pmatrix}$$

Erste Zeile:  $m = 1$ , zweite Zeile  $m = -1$ , dritte  $m = 0, l = 1$ , vierte  $m = 0, l = 0$   
wobei

$$\begin{aligned} \gamma\varepsilon &= -q\varepsilon \int R_{l=0,n=2} R_{l=1,n=2} r^2 r \int Y_0^0 Y_1^0 \cos\theta \, d\Omega \, dr \\ &= -q\varepsilon \int R_{l=0,n=2} R_{l=1,n=2} r^2 r \underbrace{\left( \frac{1}{4\pi} \sqrt{3} 2\pi \int_{-1}^1 \cos^2\theta \, d\cos\theta \right)}_{=\frac{1}{\sqrt{3}}} \, dr \end{aligned}$$

Nun mit  $a = \text{Bohrradius}$

$$R_{l=0,n=2} = 2 \left( \frac{1}{2a} \right)^{\frac{3}{2}} \left( 1 - \frac{r}{2a} \right) \exp\left(-\frac{r}{2a}\right) \quad R_{l=1,n=2} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left( \frac{1}{2a} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{r}{a} \exp\left(-\frac{r}{2a}\right)$$

$$\begin{aligned} \gamma\varepsilon &= -q\varepsilon \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{1}{\sqrt{3}} 2 \int r^2 \left( \frac{1}{2a} \right)^3 \left( 1 - \frac{r}{2a} \right) \frac{r}{a} \exp\left(-\frac{r}{a}\right) \frac{r}{a} a \, dr \\ &\stackrel{u=\frac{r}{a}}{=} -q\varepsilon a \frac{2}{3} \int u^4 \left( 1 - \frac{u}{2} \right) \exp(-u) \, du \end{aligned}$$

$$\int u^n \exp(-u) \, du = n!$$

$$\gamma = 3qa$$

Diagonalisiere Blockmatrix  $(W) = \begin{pmatrix} 0 & \varepsilon\gamma \\ \varepsilon\gamma & 0 \end{pmatrix}$

$|l = 1, m = \pm 1\rangle$  bleiben Eigenzustände und Eigenwerte bleiben ungeändert. Die Entartung wird aufgehoben für  $|l = 1, m = 0\rangle$  und  $|l = 0, m = 0\rangle$ .

Diagonalisiere  $\gamma\varepsilon \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \implies$  Energieverschiebung.

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|l = 1, m = 0\rangle + |l = 0, m = 0\rangle) \quad \gamma\varepsilon$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|l=1, m=0\rangle - |l=0, m=0\rangle) \quad - \gamma \varepsilon$$

## Störungstheorie bei wasserstoffähnlichen Atomen mit ausgedehnter Ladung

⇒ Struktur des Kerns (Protons)

$$V_C = \frac{Ze^2}{r}$$

homogene Ladungsverteilung.

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{r} & r \geq \rho_0 \\ \frac{Ze^2}{2\rho_0} \left( \left( \frac{r}{\rho_0} \right)^2 - 3 \right) & r < \rho_0 \end{cases}$$

Störpotential im Vergleich zum Coulomb-Problem :

$$W(r) = \begin{cases} 0 & r \geq \rho_0 \\ \frac{Ze^2}{2\rho_0} \left( \left( \frac{r}{\rho_0} \right)^2 - 3 + \frac{2\rho_0}{r} \right) & r < \rho_0 \end{cases}$$

Des liefert eine sehr kleine Störung, da  $a \gg \rho_0$ , Integral nur bis  $\rho_0$ . Wellenfunktion ändert sich kaum.

$$\begin{aligned} \langle |W| \rangle &\approx \int d\Omega (Y_l^m)^* Y_l^m \int_0^{\rho_0} dr r^2 R_{n,l}^* R_{n,l} W(r) \\ &= \frac{Ze^2}{2\rho_0} |R_{n,l}(0)|^2 \int_0^{\rho_0} dr r^2 \left( \left( \frac{r}{\rho_0} \right)^2 + \frac{2\rho_0}{r} - 3 \right) \\ &= \frac{Ze^2}{10} \rho_0^2 |R_{n,l}(0)|^2 \end{aligned}$$

nur  $\neq 0$  für  $l=0$

## 9.5 Näherungsmethoden

### 9.5.1 Variationsprinzip

Wir betrachten den Hamiltonoperator  $H$  in einer Basis von Eigenzuständen  $|\phi_n\rangle$

$$H_n |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle$$

Problem: Die  $E_n$  und  $|\phi_n\rangle$  sind im allgemeinen nicht bekannt (und schwierig zu ermitteln).

- (a) Gesucht ist  $E_0$  (bzw. eine obere Schranke an  $E_0$ ). Idee: Wenn  $|\phi\rangle$  ein beliebiger Zustand ist, dann muss

$$E_0 \leq \frac{\langle \phi | H | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} =: \langle H \rangle$$

Denn

$$\langle \phi | H | \phi \rangle = \sum |c_n|^2 E_n \geq E_0 \sum |c_n|^2 = E_0 \langle \phi | \phi \rangle$$

Gleichheit ergibt sich nur für  $|\phi\rangle = |\phi_0\rangle$ . Das Variationsprinzip nutzt genau diese Tatsache aus. Man wählt einen Zustand  $|\psi(\alpha)\rangle$  welcher von einem (oder mehreren) freien Parametern abhängt. Man sucht dann den Wert für  $\alpha$ , bei welchem

$$\langle H \rangle_\alpha = E(\alpha) = \frac{\langle \psi(\alpha) | H | \psi(\alpha) \rangle}{\langle \psi(\alpha) | \psi(\alpha) \rangle}$$

minimal wird. Dieses Minimum ist weiterhin nur eine obere Schranke an  $E_0$ . Ob es sich um eine gute oder schlechte Schranke handelt ist nicht zu erkennen!

- (b) Verallgemeinerung: Gesucht ist  $E_n$  und  $|\phi_n\rangle$  näherungsweise. Wir benutzen das s.g. Ritz'sche Theorem: Es sei

$$\langle H \rangle = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

stationär (also ändert sich  $\langle H \rangle$  nicht falls  $|\psi\rangle$  nur wenig geändert wird). Dann gilt

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

also ist  $|\psi\rangle$  Eigenzustand zu  $H$  mit Eigenwert  $\langle H \rangle$ .

**Beweis:** Berechne  $\delta \langle H \rangle$  aus

$$\delta (\langle H \rangle \cdot \langle \psi | \psi \rangle) = \delta (\langle \psi | H | \psi \rangle)$$

Nach der Produktregel ist dies

$$\delta \langle H \rangle \langle \psi | \psi \rangle + \langle H \rangle (\langle \psi | \delta \psi \rangle + \langle \delta \psi | \psi \rangle) = \langle \psi | H | \delta \psi \rangle + \langle \delta \psi | H | \psi \rangle$$

Mit der Annahme  $\delta \langle H \rangle = 0$  erhält man

$$\langle \psi | (H - \langle H \rangle) | \delta \psi \rangle + \langle \delta \psi | (H - \langle H \rangle) | \psi \rangle = 0$$

Mit der Abkürzung  $|\phi\rangle = (H - \langle H \rangle) |\psi\rangle$  erhält man

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

Da dies für alle  $\delta \psi$  gelten muss, können wir insbesondere

$$|\delta \psi\rangle = \delta \lambda |\phi\rangle \quad \delta \lambda \in \mathbb{R}$$

wählen, also

$$2\delta \lambda \langle \phi | \phi \rangle = 0$$

Dies funktioniert nur für  $|\phi\rangle = 0$  und damit die Behauptung.

(c) Beispiele

### Harmonischer Oszillator

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 X^2$$

Wir machen den Ansatz

$$\psi_\alpha(x) = e^{-\alpha x^2} \quad \alpha > 0$$

Damit ist

$$\langle \psi_\alpha | H | \psi_\alpha \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \left( e^{-\alpha x^2} H e^{-\alpha x^2} \right)$$

Nach ein einfachen Rechnung erhalten wir

$$\langle \psi_\alpha | H | \psi_\alpha \rangle = \left( \frac{\hbar^2}{2m} \alpha + \frac{1}{8} m \omega^2 \frac{1}{\alpha} \right) \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-2\alpha x^2}$$

und damit

$$\langle H \rangle_\alpha = \frac{\hbar^2}{2m} \alpha + \frac{1}{8} m \omega^2 \frac{1}{\alpha}$$

Diese wird minimal für

$$\alpha = \alpha_0 = \frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} \quad \langle H \rangle = \frac{1}{2} \hbar \omega$$

Dies ist sogar das genaue Ergebnis! Bei schlechtem Ansatz erhält man mitunter viel schlechtere Ergebnisse:

$$\psi_\alpha(x) = \frac{1}{x^2 + \alpha^2} \quad \alpha > 0$$

Damit erhält man

$$\langle H \rangle_\alpha = \frac{\hbar^2}{4m} \frac{1}{\alpha} + \frac{1}{2} m \omega^2 \alpha$$

und das Minimum bei

$$\alpha = \frac{\hbar}{m\omega\sqrt{2}} \quad \langle H \rangle = \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}}$$

## 9.6 Störungstheorie und Bändermodell

### 9.6.1 Qualitative Diskussion

Statt alle Elektronen im Körper zu betrachten, beziehen wir uns immer nur auf ein Elektron in einem vorgegebenen Potential (welches durch die Atomrümpfe im periodischen Gitter gegeben ist). Die WW zwischen den Elektronen können vernachlässigt werden, da sie nur zu einem homogenen "Hintergrundrauschen" führen.

Am Ausgangspunkt seien die Ionen weit entfernt.

Die Niveaus für einen Kern sind diskret. Für zwei Ionen ergibt sich ein anderes Bild:

- Für große  $R$  sind die Energieniveaus noch immer diskret und wie zuvor, jedoch 2-fach entartet.
- Für  $R$  vergleichbar mit der Ausdehnung des Potentials können Teilchen von einem ins andere Potential tunneln. Dies führt zu einer Störung des einen Potentials durch das andere. Die Entartung wird aufgehoben. Wenn  $\psi_1$  die Wellenfunktion des ungestörten Potentials zur Energie  $E_1$  ist, dann kommt es jetzt zu Störtermen

$$\langle \psi_1(r) | V_1 + V_2 | \psi_1(r - R) \rangle = \delta_1$$

Nach der Störungstheorie mit Entartung liefert der Störterm

$$\begin{pmatrix} E_1 & \delta_1 \\ \delta_1 & E_1 \end{pmatrix}$$

eine Aufspaltung mit dem Abstand  $\Delta = 2\delta$ .

Bild ein-  
fügen

Die Linearkombination  $\frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(r) - \psi_1(r - R))$  trägt hierbei die größere Energie (Allgemein haben Funktionen ohne Knoten immer die wenigste Energie). Für größere  $R$  wird  $\Delta$  immer kleiner.

Machen wir jetzt den Schritt zu  $N$  Ionen.

Bild ein-  
fügen

Für unendlich viele  $N$  bekommt man eine dichte Aufteilung der Energieniveaus, die aber nicht einen größeren Energieabstand überdeckt (weiter entfernte Ionen führen zu kleineren Aufspaltungen).  $\Delta$  wächst nicht wesentlich, wenn weitere Ionen addiert werden, aber die Aufspaltung wird immer feiner. Man erhält ein ganzes "Band" von möglichen Energien.

## 9.6.2 Eindimensionales Modell: lineare Kette von Ionen

Wir betrachten nur die Zustände in der Nähe von  $E_1$ .  $|v_n\rangle$  sei der dazugehörige Eigenzustand (des ungestörten Systems) des  $n$ -ten Ions. Der Hamiltonoperator ist dann gegeben durch

$$H = H_{\text{kin}} + \sum H_q$$

wobei  $H_q$  der Betrag des Ions  $q$  zum Potential ist. Dann ist nach Definition

$$(E_{\text{kin}} + H_n) |v_n\rangle = E_1 |v_n\rangle$$

Dieses System wird jetzt gestört durch alle anderen  $H_q$  mit  $q \neq n$

$$W_n = \sum_{q \neq n} H_q$$

Wir definieren ein Übergangselement

$$-A = \langle v_n | W_n | v_{n \pm 1} \rangle$$

alle anderen Kombinationen wie z.B.  $\langle v_n | W_n | v_{n \pm 2} \rangle = 0$  seien Null. Die Störmatrix ist in

diesem Fall

$$H = \begin{pmatrix} \ddots & & & & \\ & E_1 & -A & 0 & \\ & -A & E_1 & -A & \\ & 0 & -A & E_1 & \dots \\ & & & \ddots & \end{pmatrix}$$

Mit der Definition für die Eigenzustände für H

$$|\phi\rangle = \sum c_q |v_q\rangle$$

kommt man auf

$$-Ac_{q+1} + E_1c_q - Ac_{q-1} = Ec_q \quad (*)$$

Wir machen den Ansatz

$$c_q = e^{iqkl}$$

mit der Entfernung  $l$  zu den benachbarten Ionen und  $k$  noch zu bestimmen. Deshalb muss

$$-\frac{\pi}{l} \leq k \leq \frac{\pi}{l}$$

da sich sonst das Ergebnis wiederholen würde.  $k$  liegt in der so genannten ersten Brillouin-Zone.

In (\*) eingesetzt führt dies auf das Ergebnis

$$E = E_1 - 2A \cos(kl)$$

Bild ein-  
fügen

## Todo list

2012-06-27-1 einfügen, Scan von Nils . . . . .	100
2012-04-07-1,2 einfügen . . . . .	105
Bild einfügen . . . . .	108
Scan Nils . . . . .	113
2012-07-11-2 einfügen . . . . .	114
Bild einfügen . . . . .	126
Bild einfügen . . . . .	126
Bild einfügen . . . . .	127
Bild einfügen . . . . .	127
Bild einfügen . . . . .	128



Dieses Skript wurde heruntergeladen von  
[ugroup.hostzi.com](http://ugroup.hostzi.com)



Alle Rechte verbleiben beim lesenden Dozenten.  
Keine Garantie auf Richtigkeit oder Vollständigkeit.