

Quantenmechanik

Owe Philipsen

Goethe-Universität Frankfurt am Main – Sommersemester 2021

Version: 25. Juli 2021

Inhaltsverzeichnis

1	Versagen der klassischen Physik, Quantenphänomene	5
1.1	Das Planck'sche Strahlungsgesetz	5
1.2	Der photoelektrische Effekt	8
1.3	Der Compton-Effekt	9
1.4	Materiewellen	10
1.5	Quantisierung atomarer Energiezustände	11
2	Materiewellen und Schrödingergleichung	12
2.1	Freie Teilchen und ebene Wellen	12
2.2	Wellenpakete	13
2.3	Wellengleichung für freie Teilchen	16
2.4	Zur Deutung von Materiewellen: Doppelspalt	17
2.5	Die Wahrscheinlichkeitsinterpretation von ψ	19
2.6	Kontinuitätsgleichung für die Wellenfunktion freier Teilchen	20
2.7	Der Welle-Teilchendualismus	22
2.8	Bemerkung zu relativistischen Teilchen	24
2.9	Der Begriff des Operators	25
2.10	Die Schrödingergleichung	28
2.11	Die zeitunabhängige Schrödingergleichung (1 Teilchen)	31
3	Wellenmechanik in 1d	34
3.1	Teilchen im Kasten: Unendlich hoher Potentialtopf	35
3.2	Endlich tiefer Potenzialtopf	40
3.3	Streuung von Wellenpaketen am Kasten	52
3.4	Potenzialbarrieren	54
3.5	Allgemeine 1-d Potenziale	59
4	Statistische Deutung der QM und Unschärferelation	61
4.1	Wahrscheinlichkeiten und Statistik	61
4.2	Statistische Deutung der q.m. Orts- und Impulsvariablen	63
4.3	Die Heisenberg'sche Unschärferelation	67
4.4	Das Komplementaritätsprinzip (Bohr)	70
4.5	Die Energie-Zeit-Unschärferelation	71
5	Formalismus der Quantenmechanik	73
5.1	Der Hilbertraum	73
5.2	Vollständige Funktionensysteme und physikalischer Zustandsraum	76
5.3	Lineare Operatoren	78
5.4	Die Dirac-Notation	82
5.5	Observablen	83
5.6	Kontinuierliches Spektrum	84
5.7	Allgemeine Definition uneigentlicher Eigenvektoren	87

5.8	Der Spektralsatz	89
5.9	Wahrscheinlichkeitsinterpretation + Messung	92
5.10	Kompatible Observablen	94
5.11	Unschärferelationen	96
5.12	Die Postulate der Quantenmechanik	98
5.13	Vektoren und Basen	99
5.14	Die Ortsdarstellung	100
5.15	Die Impulsdarstellung	101
5.16	Allgemeine Darstellung	102
5.17	Basiswechsel	103
6	Die zeitliche Entwicklung	104
6.1	Das Schrödingerbild	104
6.2	Das Heisenbergbild	105
6.3	Ehrenfest'sches Theorem	106
7	Der harmonische Oszillator	107
7.1	Lösung der Schrödingergleichung	108
7.2	Die algebraische oder Operatormethode	112
8	Drehimpuls	115
8.1	Der Drehimpulsoperator	115
8.2	Teilchen im Zentralpotenzial	118
8.3	Spektrum des Drehimpulsoperators	122
8.4	Spektrum des Bahndrehimpulses	124
8.5	Eigenfunktionen zu $\hat{\mathbf{L}}^2$ und \hat{L}_3	126
8.6	Parität	128
9	Das Wasserstoffatom I	130
9.1	Spektrum und Eigenfunktionen	131
9.2	Der Zeeman-Effekt	135
10	Spin	137
10.1	Spin $\frac{1}{2}$ Operator	137
10.2	Wellenfunktionen mit Spin	139
10.3	Die Pauligleichung	141
10.4	Spinpräzession im Magnetfeld	142
10.5	Der Stern-Gerlach-Versuch	143
10.6	Der Messprozess am Beispiel Spin	145
11	Addition von Drehimpulsen	147
11.1	Allgemeiner Fall	147
11.2	Beispiel: 2 Spins $\frac{1}{2}$	151
11.3	Beispiel Bahndrehimpuls und Spin	153

12 Zeitunabhängige Störungstheorie	154
12.1 Nicht entartete Störungstheorie	154
12.2 Störungstheorie für entartete Zustände	156
12.3 Anwendung: Wasserstoffatom II	157
A Fouriertransformation und Deltafunktion	162
B EPR-Paradoxon und Bell'sche Ungleichung	163

1 Versagen der klassischen Physik, Quantenphänomene

Historisch \sim 1900: drei Arten von Experimenten, bei denen die theoretische Beschreibung durch klassische Physik versagt

1) Thermodynamik + Statistik

- a) Spektrale Verteilung der Strahlung des schwarzen Körpers
- b) Spezifische Wärme von Festkörpern bei tiefen Temperaturen
- c) Diatomare Moleküle zeigen bei tiefen Temperaturen nur 5 Freiheitsgrade statt der klassisch erwarteten 6

\Rightarrow mittlere thermische Energie des harmonischen Oszillators ungültig

2) Streuexperimente

- a) Photoelektrischer Effekt
- b) Compton-Effekt

\Rightarrow Dualer Charakter elektromagnet. Strahlung, Wellen- und Teilchennatur

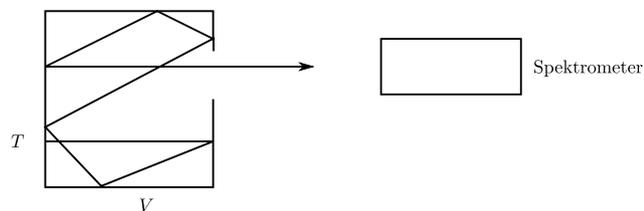
3) Atomare Spektren

\Rightarrow Diskrete Energiewerte für physikalische Systeme

1.1 Das Planck'sche Strahlungsgesetz

Herleitung in der Thermodynamik + Statistik, hier nur Befund

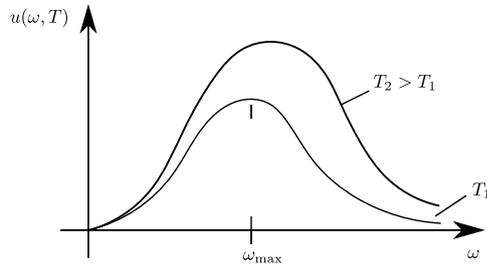
Der schwarze Strahler:



Sei

$$u(\omega, T)d\omega = \frac{\text{abgestrahlte Energie im Bereich } (\omega, \omega + d\omega)}{\text{Volumen}} \quad (1.1)$$

Experimenteller Befund:



- | | | |
|--|--|-------|
| 1) $\omega \ll \omega_{max}$ | $u(\omega) \sim \omega^2$ | |
| 2) $\omega \gg \omega_{max}$ | $u(\omega) \sim \omega^3 e^{-\alpha \frac{\omega}{T}}$ | |
| 3) $\omega_{max} \sim T$ | Wien'sches Gesetz | (1.2) |
| 4) $u(T) \equiv \int_0^\infty d\omega u(\omega, T) = \sigma T^4$ | Stefan-Boltzmann-Gesetz | |

Erklärung klassische Physik:

Elektromagnetische Strahlung im Kasten: idealisiert durch Überlagerung harmonischer stehender Wellen

Zahl der Moden im Intervall $(\vec{k}, \vec{k} + d\vec{k})$: $V \frac{d^3k}{(2\pi)^3}$

Mit Betrag des Wellenvektors in $(k, k + dk)$: $\frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi k^2 dk$

Anzahl Normalmoden /V im Frequenzbereich $(\omega, \omega + d\omega)$ (2 Polarisationen)

$$N(\omega)d\omega = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} d\omega \quad (1.3)$$

Mittlere Energie pro Normalmode: $\bar{\epsilon}(T) = k_B T$

$$\boxed{u(\omega, T)d\omega = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} k_B T d\omega} \quad (1.4)$$

Raleigh-Jeans-Gesetz

- beschreibt Experiment nur für $\omega \ll \omega_{max}$

- Integral über $d\omega$ divergiert! ζ

Max Planck 1900:

Annahme: Normalmoden eines Oszillators können bei Absorbtion und Emmission nur diskrete Energiewerte annehmen:

$$E \rightarrow E_n = n\hbar\omega \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.5)$$

$$\Rightarrow \bar{\epsilon}(\omega, T) = \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} \quad (1.6)$$

Planck: phänomenologische Interpolationsformel

Heute: theoretische Herleitung aus Quantenstatistik (in Theo 5)

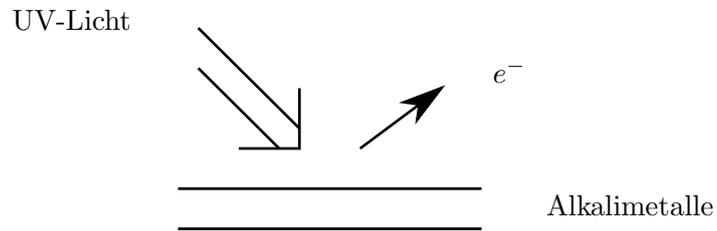
$$\Rightarrow \boxed{u(\omega, T)d\omega = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} d\omega} \quad (1.7)$$

Planck'sches Strahlungsgesetz

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.055 \cdot 10^{-34} \text{ Js} \quad (1.8)$$

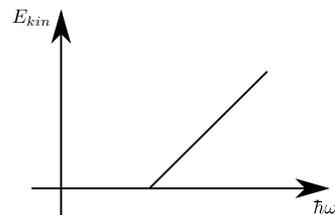
h Planck'sches Wirkungsquantum

1.2 Der photoelektrische Effekt



Experimentell: Stromstärke \sim Intensität der Strahlung

$E_{kin} \sim$ Frequenz, unabh. von Intensität



Klassische Absorptionstheorie versagt, $E_{kin} \sim$ Intensität

Einstein 1905 (Nobelpreis):

Lichtstrahlen bestehen aus Teilchen, Photonen γ

Elektronen werden aus dem Metall gestoßen

Teilchengrößen: E, \mathbf{p} Wellengrößen: ω, \mathbf{k}

Zusammenhang (De Broglie 1923, Dissertation, Nobelpreis!):

$$E = \hbar\omega, \quad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} \quad (1.9)$$

Monochromatische Welle in der Elektrodynamik:

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = A e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} \quad \text{mit} \quad \omega = c|\mathbf{k}| \quad (1.10)$$

Für Photonen folgt

$$E = c|\mathbf{p}|, \quad (1.11)$$

d.h. es sind masselose Teilchen gemäß $E^2 = c^2\mathbf{p}^2 + c^4m^2$

1.3 Der Compton-Effekt

Streuung von Röntgenstrahlen an freien e^-

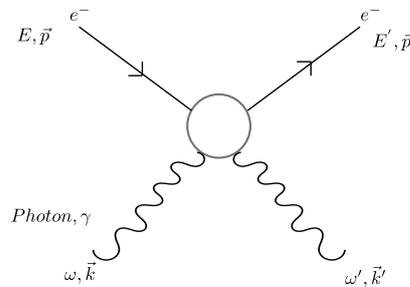
Klassisch: keine Änderung der Wellenlänge des gestreuten Lichts
(außer Doppler-Effekt)

Compton (1924):

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = 4\pi\lambda_c \sin^2 \frac{\Theta}{2} \quad (1.12)$$

$$\lambda_c = \frac{\lambda_c}{2\pi} = \frac{\hbar}{m_e c} = 3.96 \cdot 10^{-11} \text{cm} \quad (1.13)$$

Erklärung im Teilchenbild:



$$\text{Energie: } \hbar\omega + m_e c^2 = \hbar\omega' + E'$$

$$\text{Impuls: } \hbar\vec{k} = \hbar\vec{k}' + \vec{p}'$$

$$\text{mit } E'^2 = m_e^2 c^4 + \vec{p}'^2 c^2$$

$$\omega^2 = c^2 \vec{k}^2$$

Mit $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ und Auflösen nach λ, λ' folgt Compton

1.4 Materiewellen

Photoeffekt, Compton-Effekt \Rightarrow Licht hat Teilchencharakter

De Broglie 1923: Teilchen haben Wellencharakter!

$E = \hbar\omega$, $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ gilt ebenso

Beispiel Elektronen e^- , beschleunigt durch Spannung U

$$E_{kin} = \frac{p^2}{2m} = eU \quad (1.14)$$

$$\Rightarrow \lambda_e = \frac{2\pi}{|\mathbf{k}|} = \frac{2\pi\hbar}{|\mathbf{p}|} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2meU}} = \frac{1.226 \text{ nm}}{\sqrt{U/1V}} \quad (1.15)$$

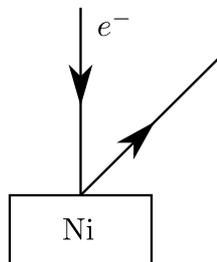
$$U = 1000V \Rightarrow \lambda_e = 3.9 \cdot 10^{-11} \text{ m} \quad (1.16)$$

$$U = 100V \Rightarrow \lambda_e = 1.2 \cdot 10^{-10} \text{ m} \sim \text{Röntgenstrahlung} \quad (1.17)$$

2. Staubkorn $m = 10^{-6}g$, $v = 1 \frac{m}{s}$ $\Rightarrow \lambda = 6.6 \cdot 10^{-25} \text{ m}$ nicht messbar

Experimente:

- Elektronenbeugung an Kristallen, Davisson, Germer 1927; Thomson 1927



e^- streuen am Kristallgitter,
Gitterkonstante $d = 2.15 \cdot 10^{-11} \text{ m}$
 \Rightarrow Beugungsmuster!

Aus Beugungsmuster und d (Röntgenbeugung) Bestimmung von $\lambda(U)$ für e^-

Gute Übereinstimmung mit De Broglie!

- Beugung am Doppelspalt

- Neutronenbeugung

- Atom- und Molekülbeugung, O. Stern 1929

Klassisch: Keine Beugung von Teilchenstrahlen!

1.5 Quantisierung atomarer Energiezustände

Rutherford'sches Atommodell 1911

Kerndurchmesser $\approx 10^{-17}$ cm, Ladungswolke $\approx 10^{-8}$ cm

Unverstanden: Stabilität der Atome

Klassisch: beschleunigte Ladungen strahlen (Kreisbahn!), verlieren Energie
 e^- sollten in den Kern stürzen $\sim 10^{-8}s$

Experimentell beobachtete Serien im Spektrum des H -Atoms

Balmer-Serie 1885: empirisch

$$\frac{1}{\lambda} = \tilde{\nu} = R \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n' = 2, n = 3, 4, 5 \quad (1.18)$$

Rydbergkonstante $R = 1.097 \cdot 10^7 \text{m}^{-1}$

Deutung durch Bohr'sches Atommodell

Postulate:

- a) Existenz strahlungsloser e^- -Bahnen
- b) Frequenzregel $\hbar\omega = E_{n'} - E_n$

Quantisierungsregel für Drehimpulse:

$$J = \frac{1}{2\pi} \oint dq p \stackrel{!}{=} n\hbar \quad (1.19)$$

Kritik: Ad-hoc, gilt nur für periodische Systeme, spontane Emmission nicht erklärbar

2 Materiewellen und Schrödingergleichung

Aufgabe: einheitliche Beschreibung von physikalischen Objekten, die Welle-Teilchen-Dualismus zeigen + Deutung \rightarrow Quantenfeldtheorie
Nichtrelativistisch \rightarrow Quantenmechanik

2.1 Freie Teilchen und ebene Wellen

Teilchenbewegung ohne Kräfte, z. B. Elektronenstrahl im Vakuum

Ausgangspunkt: De Broglie-Beziehungen (experimentell bestätigt)

$$E = \hbar\omega, \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} \quad (2.1)$$

Nichtrelativistische Mechanik: $E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$ Teilchenbild

\Rightarrow Dispersionsrelation: $\omega = \frac{\hbar}{2m}\mathbf{k}^2$ Wellenbild

Beachte: Unterschied zu Licht, für das $\omega = c \cdot k, k = |\mathbf{k}|$

Mathematische Beschreibung durch "Wellenfunktion" $\psi(\mathbf{r}, t)$

Ebene Wellen:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = Ae^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \quad (2.2)$$

Wellenfronten: Ebenen konstanter Phase $\perp \mathbf{k}$

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t = \text{konst.} \quad (2.3)$$

Wellenfronten bewegen sich mit Phasengeschwindigkeit

$$v_p = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p} \quad (2.4)$$

(Def: $v_p = \frac{\lambda}{T} = \lambda \cdot f = \frac{\lambda}{2\pi} 2\pi f$)

Mit $E = \frac{m}{2}v^2, p = mv$ folgt $v_p = \frac{1}{2}v$

Beachte: Die Phasengeschwindigkeit kennzeichnet weder den Transport von Information noch von Energie

2.2 Wellenpakete

Teilchen: idealisiert durch Massenpunkt (Ortsraum)

Ebene Welle: idealisiert monochromatisch (k -Raum),
unendlich ausgedehnt (im Ortsraum)

Verknüpfung beider Konzepte durch Wellenpakete:

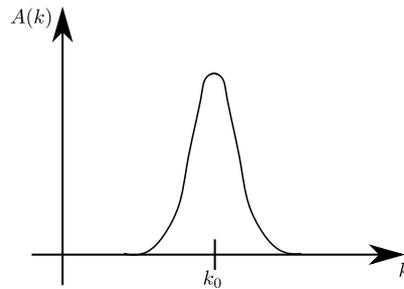
Überlagerung ebener Wellen

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} A(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega(\mathbf{k})t)} \quad (2.5)$$

Wir verlangen

$$\omega = \frac{\hbar}{2m} \mathbf{k}^2 \quad (2.6)$$

Betrachte enge Impulsverteilung



$A(\mathbf{k}) \neq 0$ nur für kleine $(k - k_0)$

$$\Rightarrow \omega(\mathbf{k}) = \omega_0 + \underbrace{\frac{d\omega}{dk_i}}_{\equiv v_{gi}} \Big|_{\mathbf{k}_0} (k_i - k_{0i}) + \dots \quad (2.7)$$

mit

$$\omega_0 = \omega(\mathbf{k}_0) = \frac{\hbar}{2m} \mathbf{k}_0^2 \quad (2.8)$$

$$\mathbf{v}_g = \nabla_k \omega(\mathbf{k}_0) = \frac{\hbar}{m} \mathbf{k}_0 \quad \text{Gruppengeschwindigkeit} \quad (2.9)$$

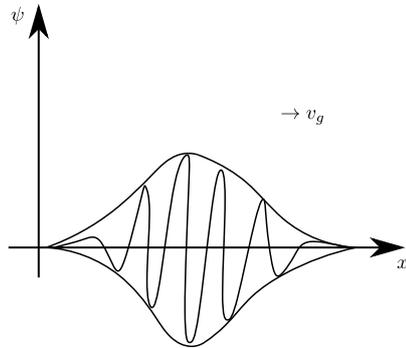
$$\left(= 2 \frac{\omega_0}{k_0} \cdot \frac{\mathbf{k}_0}{k_0} = 2v_p \cdot \hat{\mathbf{k}}_0 \right) \quad (2.10)$$

Damit:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} A(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega_0 t - \mathbf{v}_g \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)t + \dots)} \quad (2.11)$$

$$\approx e^{i(\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{v}_g t - \omega_0 t)} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} A(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \mathbf{v}_g \cdot \mathbf{k}t)} \quad (2.12)$$

$$= e^{i\omega_0 t} \psi(\mathbf{r} - \mathbf{v}_g t, 0) \quad (2.13)$$



Form erhalten in dieser Näherung,
d.h. $\omega(k)$ linear

$\mathbf{v}_g = \frac{\hbar}{m} \mathbf{k}_0$ physikalisch messbar, Transport von Energie und Information, identifiziere mit \mathbf{v} des Teilchens

N.B.: Identifikation von $\mathbf{v} = \mathbf{v}_g$ ergibt De Broglie-Beziehung!

$$\mathbf{v} = \frac{\mathbf{P}}{m} = \nabla_p E = \nabla_k \omega \quad \text{mit } E = \hbar \omega \quad (2.14)$$

$$\Rightarrow \mathbf{p} = \hbar \mathbf{k} \quad (2.15)$$

Beispiel: 1.dim-Gauß'sches Wellenpaket

$$\psi(x, t) = \int \frac{dk}{2\pi} A(k) e^{i(kx - \omega t)}, \quad \omega = \frac{\hbar}{2m} k^2 \quad (2.16)$$

$$\text{mit } A(k) = N e^{-(k - k_0)^2 d^2} \quad (2.17)$$

$$\text{Mit } \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-\alpha k^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \quad \text{exakt berechenbar} \quad (2.18)$$

Im Exponenten des Integranden:

$$-(k - k_0)^2 d^2 + ikx - i \frac{\hbar}{2m} k^2 t \quad (2.19)$$

$$= - \left[k^2 \left(d^2 + i \frac{\hbar t}{2m} \right) - 2k \left(k_0 d^2 + i \frac{x}{2} \right) + k_0^2 d^2 \right] \quad (2.20)$$

$$= - \left(d^2 + i \frac{\hbar t}{2m} \right) \left[k - \frac{k_0 d^2 + i \frac{x}{2}}{\left(d^2 + i \frac{\hbar t}{2m} \right)} \right]^2 \quad (2.21)$$

$$+ \underbrace{\frac{(k_0 d^2 + i \frac{x}{2})^2}{d^2 + i \frac{\hbar t}{2m}} - k_0^2 d^2}_{\text{}} \quad (2.22)$$

$$= \frac{k_0^2 d^4 + ik_0 d^2 x - \frac{x^2}{4} - k_0^2 d^2 \left(d^2 + i \frac{\hbar t}{2m} \right)}{d^2 + i \frac{\hbar t}{2m}} \quad (2.23)$$

$$= \frac{-\frac{x^2}{4} + id^2 k_0 \left(x - \frac{k_0 \hbar t}{2m} \right)}{d^2 + i \frac{\hbar t}{2m}} \quad (2.24)$$

Jetzt integrieren mit (2.18)

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk \exp \left[- \left(d^2 + i \frac{\hbar t}{2m} \right) (k - \text{konst.})^2 \right] \quad (2.25)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dk \exp \left[- \left(d^2 + i \frac{\hbar t}{2m} \right) k^2 \right] = \left[\frac{\pi}{d^2 + i \frac{\hbar t}{2m}} \right]^{1/2} \quad (2.26)$$

Damit

$$\psi(x, t) = \frac{N}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi}{d^2 + i \frac{\hbar t}{2m}}} \exp \left\{ \frac{-\frac{x^2}{4} + id^2 k_0 (x - \frac{\hbar k_0 t}{2m})}{d^2 + i \frac{\hbar t}{2m}} \right\} \quad (2.27)$$

Betrachte Betragsquadrat:

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{N^2}{4\pi \sqrt{d^4 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2}}} \exp \left\{ - \frac{(x - \frac{\hbar k_0 t}{m})^2}{2d^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{2m^2 d^2}} \right\} \quad (2.28)$$

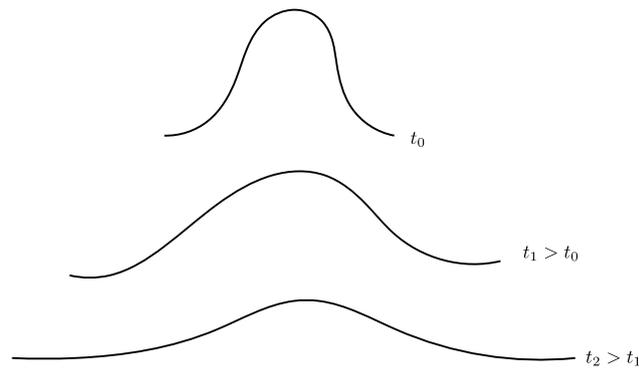
$$\hat{=} \text{Gauß-Fkt.} \exp \left\{ - \frac{(x - \bar{x})^2}{2(\Delta x)^2} \right\} \quad (2.29)$$

$$\text{mit Schwerpunkt } \bar{x} = v_0 t = \frac{\hbar k_0}{m} t \quad (2.30)$$

$$\text{Breite } (\Delta x)^2 = d^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 d^2} \quad (2.31)$$

Beachte: Breite nimmt mit t zu, Wellenpaket zerfließt!

Einhüllende des Wellenpakets, schematisch:



Aber was bedeutet das für ein Elektron?!?

2.3 Wellengleichung für freie Teilchen

Ebene Welle, 1-dim.:

$$\psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)} \quad \text{mit} \quad \omega = \frac{\hbar}{2m}k^2 \quad (2.32)$$

Konstruiere Wellengleichung durch Ausprobieren: (vgl. $\frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{E} = c^2 \Delta \mathbf{E}$)

Es ist

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -i \frac{\hbar}{2m} k^2 \psi(x, t) \quad (2.33)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t) = ik \psi(x, t) \quad (2.34)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) = -k^2 \psi(x, t) \quad (2.35)$$

Damit erfüllt $\psi(x, t)$ die Differenzialgleichung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) \quad (2.36)$$

Außerdem gilt:

$$\hbar\omega \psi(x, t) = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \psi(x, t) \quad (2.37)$$

$$E\psi(x, t) = \frac{p^2}{2m} \psi(x, t) \quad (2.38)$$

⇒ Dgl. entspricht Energie-Impulsbeziehung für nichtrelativistische Teilchen, vgl. Wellengleichung E-Dynamik ⇒ Dispersionsrelation (Batt 1, Aufg. 4)

Mit der ebenen Welle erfüllt auch jede lineare Überlagerung, d.h. jedes Wellenpaket, die Differenzialgleichung

Verallgemeinerung 3 Raumdimensionen:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t)} \quad (2.39)$$

Schrödinger-Gleichung für freie Teilchen

Partielle Differenzialgleichung 1. Ordnung in der Zeit,
⇒ 1 Anfangsbedingung, z. B. $\psi(\mathbf{r}, 0)$, legt die Lösung fest

In der E-Dynamik erfüllen die physikalischen Felder $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ oder die Potentiale $\psi(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ jeweils eine Wellengleichung

Hier: Was ist die physikalische Bedeutung der Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$?

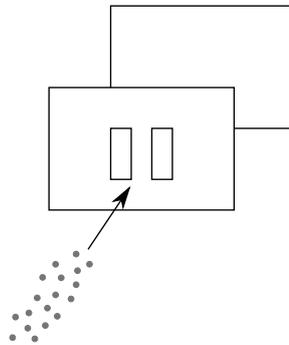
2.4 Zur Deutung von Materiewellen: Doppelspalt

- Elektronen zeigen Teilcheneigenschaften, (Kathodenstrahl)
- Elektronen zeigen Welleneigenschaften, (Doppelspalt, ...)

Offene Fragen bisher:

- Was ist ein Elektron wirklich?
- Bedeutung von $\psi(\mathbf{r}, t)$?
- Was bedeutet das Zerfließen von Wellenpaketen?

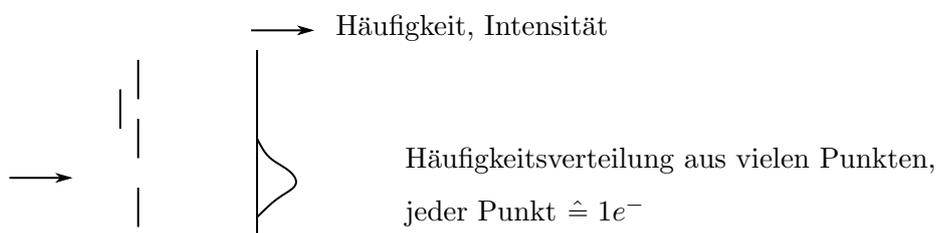
Diskussion am Beispiel Doppelspalt:



Strahl nahezu monochromatischer e^- , d.h. scharfe Geschwindigkeit
 \Rightarrow nahezu ebene Welle, d.h. sehr enges Wellenpaket um k_0

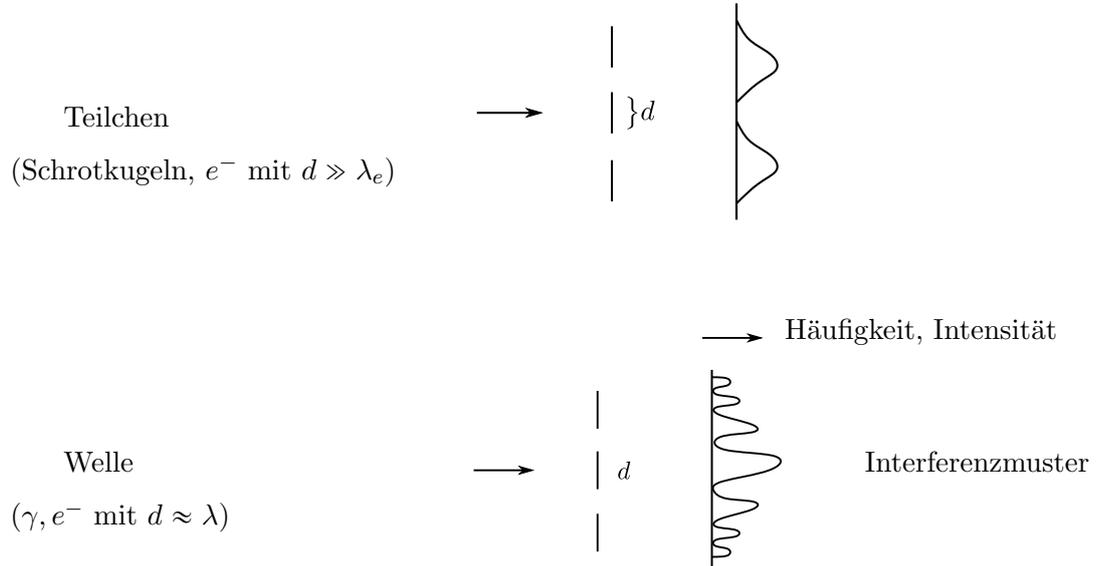
Spaltabstand vergleichbar mit λ_e der e^- -Welle \Rightarrow Beugung + Interferenz

a) Ein Spalt offen



$\Rightarrow e^-$ entsprechen Teilchen
(analog Schrotkugeln durch Lattenzaun)

b) Beide Spalte offen



Experimentell mit Teilchenstrahlen beobachtet!

c) Beide Spalte offen, aber geringe Intensität des Strahls (nur einzelne e^- nacheinander)

⇒ Interferenzmuster wird aus einzelnen Punkten aufgebaut, jeder Punkt $\hat{=}$ e^-

Feststellungen:

- einzelne e^- erscheinen auf dem Schirm lokalisiert, punktförmig, nicht "ausgeschmiert"
- hintereinander geschossene e^- interferieren ebenfalls! Interferenz beruht nicht auf Wechselwirkung zwischen e^-
- Trajektorien einzelner e^- nicht eindeutig festgelegt

2.5 Die Wahrscheinlichkeitsinterpretation von ψ

Max Born 1926 (Widerspruch Einstein: "Der liebe Gott würfeln nicht!")

Interferenzmuster: unterschiedliche Häufigkeit von Punkten, i.e. e^-

\Rightarrow Häufungspunkte: höhere Wahrscheinlichkeit für Auftreffen eines e^-

Fazit bisher:

- De Broglie-Beziehungen für freie Teilchen durch Wellenpakete realisierbar, $\psi(\mathbf{r}, t)$ Lösungen einer Wellengleichung
- Interferenz und Beugung gemäß Huygens-Prinzip
- Unterschiedliche Intensitäten ergeben Beugungsmuster

$$I \sim |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (2.40)$$

$$\text{vgl. } I \sim \mathbf{E}^2 \quad \text{Licht} \quad (2.41)$$

- $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$: räuml. Wahrscheinlichkeitsdichte für Teilchen am Ort \mathbf{r}
- Wahrscheinlichkeit, das Teilchen in Volumen V zu finden:

$$p(V, t) = \int_V d^3r |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (2.42)$$

- Bei Teilchenzahlerhaltung Normierung:

$$p(t) = \lim_{V \rightarrow \infty} p(V, t) = \int_{-\infty}^{\infty} d^3r |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \stackrel{!}{=} 1 \quad (2.43)$$

\Rightarrow Einschränkungen an Wellenfunktion:

- ψ muss quadratintegrabel sein, d.h. $\int d^3r |\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ endlich (∇ ebene Welle!)
- Normierungsbedingung muss für alle t gelten
- Für $|\psi|^2$ spielt die Phase keine Rolle, d.h. ψ selbst ist nicht messbar!
- Erwartungswert für den Ort eines Teilchens:

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \int d^3r |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \mathbf{r} \quad (2.44)$$

2.6 Kontinuitätsgleichung für die Wellenfunktion freier Teilchen

Betrachte

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 = \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \cdot \psi) = \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (2.45)$$

Aus Wellengleichung:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = i \frac{\hbar}{2m} \nabla^2 \psi, \quad \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -i \frac{\hbar}{2m} \nabla^2 \psi^* \quad (2.46)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) = -i \frac{\hbar}{2m} ((\nabla^2 \psi^*) \psi - \psi^* \nabla^2 \psi) \quad (2.47)$$

$$= -i \frac{\hbar}{2m} \nabla \cdot (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) \quad (2.48)$$

\Rightarrow Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{r}, t) + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (2.49)$$

$$\partial_t \int_V d^3r \rho = - \int_V d^3r \nabla \cdot \mathbf{j} \quad (2.50)$$

$$= - \int_{\partial V} d\mathbf{s} \cdot \mathbf{j} \quad (2.51)$$

mit

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \psi^*(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.52)$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \psi(\mathbf{r}, t) - \psi \nabla \psi^*(\mathbf{r}, t)) = \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\psi^* \nabla \psi) \quad (2.53)$$

E-Dynamik: Ladungserhaltung

Hier: Wahrscheinlichkeitserhaltung

$[\rho] = \frac{1}{m^3}$ Wahrscheinlichkeitsdichte

$$[\mathbf{j}] = \frac{[\hbar]}{[m]} \frac{[\rho]}{m} = \frac{m \cdot kg \frac{m}{s}}{kg} \frac{1}{m^4} = \frac{1}{m^2} \frac{1}{s} \quad (2.54)$$

$\Rightarrow [\mathbf{j}] = \frac{\text{Wahrscheinlichkeit}}{\text{Fläche} \cdot \text{Zeit}}, \quad \text{Wahrscheinlichkeitsstromdichte}$

Die Intensität einer Welle ist durch die Amplitude festgelegt (vgl. E-Dynamik)

$\Rightarrow \psi(\mathbf{r}, t)$ bestimmt Häufigkeitsverteilung $\hat{=}$ statistische bzw. Wahrscheinlichkeitsdeutung

Sei $\psi(\mathbf{r}, t)$ die Wellenfunktion eines Teilchens

1. $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ ist die Wahrscheinlichkeitsdichte dafür, das Teilchen am Ort \mathbf{r} zu finden

- Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen in einem Volumen V zu finden ist

$$p(V, t) = \int_V d^3r |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (2.55)$$

- $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r$ ist Wahrscheinlichkeit, das Teilchen im Volumenelement d^3r bei \mathbf{r} zu finden

2. Wellenfunktionen werden linear superponiert

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_1(\mathbf{r}, t) + \psi_2(\mathbf{r}, t) \quad (2.56)$$

Wahrscheinlichkeitsdichte für eine Superposition:

$$|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = |\psi_1(\mathbf{r}, t)|^2 + |\psi_2(\mathbf{r}, t)|^2 + \psi_1^*(\mathbf{r}, t)\psi_2(\mathbf{r}, t) + \psi_1(\mathbf{r}, t)\psi_2^*(\mathbf{r}, t) \quad (2.57)$$

Beachte:

$$|\psi_1(\mathbf{r}, t)|^2, |\psi_2(\mathbf{r}, t)|^2 \quad \text{Einzelwahrscheinlichkeiten} \quad (2.58)$$

$$\psi_1^*(\mathbf{r}, t)\psi_2(\mathbf{r}, t), \psi_1(\mathbf{r}, t)\psi_2^*(\mathbf{r}, t) \quad \text{Interferenzterme} \quad (2.59)$$

2.7 Der Welle-Teilchendualismus

Bisher: $\rho(\mathbf{r}, t) \Rightarrow$ räumliche Wahrscheinlichkeitsdichte für Auffinden von Teilchen

Aber immer noch offene Fragen:

- Ist das e^- ein Teilchen (Punkt auf Schirm) oder eine Welle (Interferenzmuster)

- Durch welchen Spalt geht ein bestimmtes Elektron?

Wodurch wird dies festgelegt?

Gibt es "verborgene Parameter", die das entscheiden?

- Wahrscheinlichkeitsinterpretation ist nötig

i) aus Unkenntnis der genauen Anfangsbedingungen

(wie bei klassischer Statistik \rightarrow Würfel, Roulette, Wetter ...)

ii) weil Naturgesetze prinzipiell statistischer Art sind

\Rightarrow Historischer Streit um Interpretation:

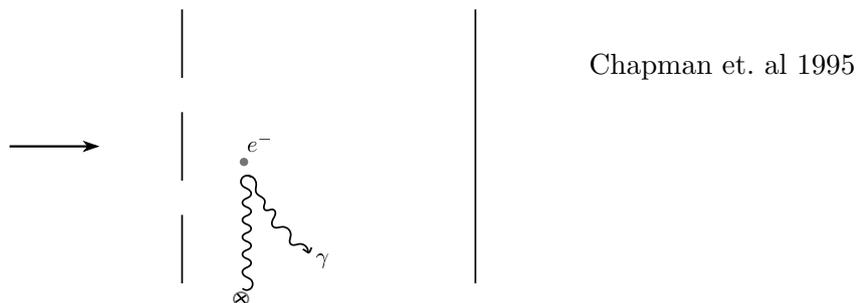
1) Theorie mit "verborgenen Parametern": Bohm'sche QM

2) Kopenhagener Deutung: Standard unter Physikern

3) Parallelwelten-Deutung: die Welt ist ein Exemplar aus einem statistischen Ensemble

Nochmals Doppelspalt-Variante

d) Wie in c), einzelne e^- nacheinander, zusätzlich Identifikation des gewählten Spalts durch γ -Streuung dahinter



Resultat: Interferenzmuster verschwindet!

Physikalisch: Impulsübertragung von γ auf e^-
 \Rightarrow Phase der Materiewelle verändert!

Folgerung: Ein e^- kann sich nicht gleichzeitig wie ein Teilchen und eine Welle verhalten

Kopenhagener Deutung:

Ein Elektron (oder Proton, Photon, ...) ist weder Teilchen noch Welle. Es ist ein physikalisches Objekt, welches sowohl Teilcheneigenschaften als auch Welleneigenschaften zeigen kann. Welche Eigenschaften es zeigt, hängt von der experimentellen Situation ab. Insbesondere ist sein Ort nicht definiert, wenn keine Ortsmessung durchgeführt wird.

Niels Bohr:

”Kein Ergebnis eines solchen Experiments kann dahin gedeutet werden, dass es Aufschluss über unabhängige Eigenschaften der Objekte gibt; es ist vielmehr unlöslich mit einer bestimmten Situation verbunden, in deren Beschreibung auch die mit den Objekten in Wechselwirkung stehenden Messgeräte als wesentliches Glied eingehen.”

\Rightarrow Klassische Welle, klassisches Teilchen:

Modellvorstellungen, nur in bestimmten Situationen angemessen!

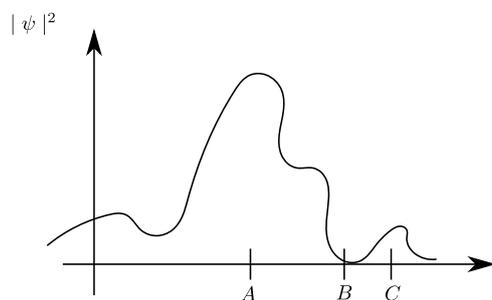
\Rightarrow Begriff ”Teilchen”:

Verwendung ab jetzt im erweiterten Sinne, ohne klassisches Teilchenbild zu implizieren

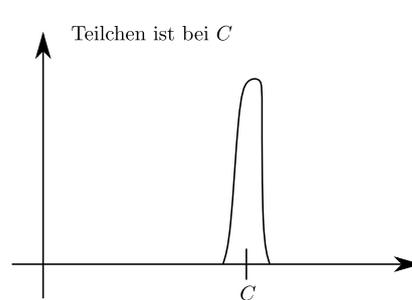
\Rightarrow Sonderrolle Messung in der QM:

Die Messung beeinflusst und erzwingt das Resultat \Rightarrow Rückwirkung auf theoretische Beschreibung!

Bsp. 1 Teilchen vor der Messung:



kurz nach der Messung:



Kollaps der Wellenfunktionen durch Messung!

2.8 Bemerkung zu relativistischen Teilchen

Durch immer höhere Spannungen können Elektronen auf signifikante Bruchteile der Lichtgeschwindigkeit c beschleunigt werden

⇒ Spezielle Relativitätstheorie nötig!

⇒ $\mathbf{E}^2 = m^2 c^4 + \mathbf{p}^2 c^2$ anstatt $E = \frac{p^2}{2m}$

$$p = \frac{mv}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \Rightarrow E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (2.60)$$

Mit $E = \hbar\omega$, $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ wird

$$\omega = \sqrt{m^2 \frac{c^4}{\hbar^2} + \mathbf{k}^2 c^2}, \quad (2.61)$$

$$\Rightarrow v_p = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p} = \frac{c^2}{v} > c \quad (2.62)$$

v_p ohne Informations- und Energietransport, kein Konflikt mit SRT!

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{kc^2}{\omega} = \frac{pc^2}{E} = v \quad \checkmark \quad (2.63)$$

⇒ Beschreibung von relativistischen Teilchen durch Wellenpakete genauso, aber Energie-Impuls-Beziehung geändert ⇒ $\omega(k)$ geändert

⇒ modifizierte Wellengleichung: Klein-Gordon-Gleichung (vgl. Blatt 3)

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi = -\hbar^2 c^2 \Delta \psi + m^2 c^4 \psi \quad (2.64)$$

Aber:

- Bei hohen Energien keine Teilchenzahlerhaltung wegen Antimaterie,
⇒ Paarerzeugung + -vernichtung

$$\gamma \rightarrow e^+ e^- \rightarrow \gamma \quad (2.65)$$

- Keine Wahrscheinlichkeitsinterpretation von ψ

⇒ Korrekte Beschreibung durch Quantenfeldtheorie QFT

Im folgenden Beschränkung auf den nichtrelativistischen Grenzfall: QM

2.9 Der Begriff des Operators

$\psi(\mathbf{r}, t)$ ist eine Funktion, $\frac{\partial\psi}{\partial t}(\mathbf{r}, t)$ ist eine Funktion

Ein Operator bildet eine Funktion auf eine andere Funktion ab:
 $\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t}$ ist ein Operator: $\psi \rightarrow \frac{\partial\psi}{\partial t}$

Allgemein: Sei $\psi \in M$ Element eines Funktionenraumes

Ein Operator \hat{A} auf M ordnet jeder Funktion $\psi \in M$ eine Fkt. $\psi' \in M$ zu:

$$\psi' = \hat{A}\psi \quad (2.66)$$

\hat{A} ist ein linearer Operator, falls mit $\lambda_{1,2} = \text{konst.}$ gilt:

$$\hat{A}(\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2) = \lambda_1(\hat{A}\psi_1) + \lambda_2(\hat{A}\psi_2) \quad (2.67)$$

Im Raum der Wellenfunktionen $\psi(\mathbf{r}, t)$ unterscheiden wir

a) Multiplikationsoperatoren der Form $\hat{A}(\mathbf{r}, t)$

$$\underbrace{\hat{A}(\mathbf{r}, t)}_{\text{Operator}} \underbrace{\psi(\mathbf{r}, t)}_{\text{Funktion}} = \underbrace{A(\mathbf{r}, t)}_{\text{Funktion}} \underbrace{\psi(\mathbf{r}, t)}_{\text{Funktion}} \quad (2.68)$$

Funktion $\psi' = A \cdot \psi$

b) Differenzialoperatoren

$$\frac{\partial}{\partial t}, \frac{\partial}{\partial x}, \nabla, \nabla \cdot, \nabla \times, \dots \quad (2.69)$$

c) Integraloperatoren, z.B.

$$\psi'(\mathbf{r}, t) = \int d^3r' \underbrace{K(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}_{\text{Operatorkernel}} \psi(\mathbf{r}', t) \quad (2.70)$$

Multiplikation eines Operators mit einer Konstante c :

$$(c\hat{A})\psi = (\hat{A}c)\psi = c(\hat{A}\psi) \quad (2.71)$$

Summe zweier Operatoren \hat{A}, \hat{B} :

$$(\hat{A} + \hat{B})\psi = \hat{A}\psi + \hat{B}\psi \quad (2.72)$$

Produkt zweier Operatoren

$$(\hat{A}\hat{B})\psi = \hat{A}(\hat{B}\psi) \quad (2.73)$$

Beachte: im Allgemeinen ist $(\hat{A}\hat{B})\psi \neq (\hat{B}\hat{A})\psi$

Def:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad \text{heißt Kommutator von } \hat{A} \text{ und } \hat{B} \quad (2.74)$$

Für $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ ist $\hat{A}\hat{B}\psi = \hat{B}\hat{A}\psi$, d.h. \hat{A} und \hat{B} "vertauschen"

Beispiel: betrachte komplexe Funktion $\psi(x)$, Multiplikationsoperator $\hat{f}(x)$, $\frac{\partial}{\partial x}$

$$\frac{\partial}{\partial x} \hat{f}(x)\psi(x) = \frac{\partial}{\partial x} (\hat{f}(x)\psi(x)) = \frac{\partial \hat{f}}{\partial x} \psi(x) + \underbrace{\hat{f}(x) \frac{\partial \psi}{\partial x}}_{=\hat{f}(x) \frac{\partial \psi}{\partial x}} \quad (2.75)$$

$$\Rightarrow \left[\frac{\partial}{\partial x}, \hat{f}(x) \right] = \frac{\partial \hat{f}}{\partial x} \quad (2.76)$$

Spezialfall:

$$\hat{f}(x) = \hat{x}, \quad f(x) = x \quad \Rightarrow \quad \left[\frac{\partial}{\partial x}, \hat{x} \right] = 1 \quad (2.77)$$

Funktion eines Operators: definiert über Taylorreihe

$$f(\hat{A}) = f(0) + f'(0)\hat{A} + \frac{1}{2}f''(0)\hat{A} \cdot \hat{A} + \dots \quad (2.78)$$

Zurück zur Wellengleichung für freie Teilchen, äquivalente Darstellungen:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.79)$$

$$\begin{array}{c} \Uparrow \\ \Downarrow \end{array} \quad \begin{array}{l} \psi \sim e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \\ \hbar\omega\psi = \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m}\psi \\ E = \hbar\omega, \quad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} \end{array}$$

$$E\psi = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}\psi \quad \text{klass. Energie-Impulsbeziehung} \quad (2.80)$$

Damit Korrespondenzregel zwischen klassischen Größen und Operatoren:

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \mathbf{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla, \quad \mathbf{p}^2 \rightarrow -\hbar^2 \Delta \quad (2.81)$$

Def:

$$\hat{\mathbf{p}} = \frac{\hbar}{i} \nabla = -i\hbar \nabla \quad \text{heißt Impulsoperator} \quad (2.82)$$

⇒ Rezept zur Konstruktion der quantenmechanischen Wellengleichung:

Starte mit Hamiltonfunktion für freies Teilchen $H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$

1. Klassischer Ausdruck für die Energie

$$E = H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \quad (2.83)$$

2. Ersetze alle Observablen ($E, \mathbf{p}, \mathbf{r}$) durch Operatoren

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad H \rightarrow \hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \quad \text{Hamiltonoperator} \quad (2.84)$$

3. Operatoren angewandt auf Wellenfunktion müssen 1. ergeben

2.10 Die Schrödingergleichung

Jetzt Verallgemeinerung auf wechselwirkende Teilchen;

Annahme: Die Wellenfunktion enthält die gesamte Information über die Dynamik des Teilchens

a) Betrachte ein Teilchen in einem skalaren Potential

Klassisch: Hamiltonfunktion $E = H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r})$

Übergang zum Quantensystem:

Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$ beschreibt Zustand des Systems

$$E\psi(\mathbf{r}, t) = H\psi(\mathbf{r}, t) = \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.85)$$

Korrespondenzregel: $E \rightarrow i\hbar\partial_t$, $\mathbf{p} \rightarrow \hat{\mathbf{p}}$, $\mathbf{r} \rightarrow \hat{\mathbf{r}}$

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r}, t) = \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{r}}) \right) \psi(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\hat{\mathbf{r}}) \right) \psi(\mathbf{r}, t)} \quad (2.86)$$

Mit dem Hamiltonoperator $\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{r}})$ allgemeine Schrödingergleichung:

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r}, t) = \hat{H}\psi(\mathbf{r}, t)} \quad (2.87)$$

b) Für geladenes Teilchen im e.m. Feld:

Klassisch:

$$\frac{d}{dt}(m\mathbf{v}) = e\left(\mathbf{E} + \frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{B}\right) \quad (2.88)$$

mit

$$\mathbf{E} = -\nabla\varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (2.89)$$

Lagrangefunktion:

$$L = \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 + e\left(\frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{A}}{c} - \varphi\right) \quad (2.90)$$

Hamiltonfunktion: Skaleres + Vektorpotenzial im Allgemeinen zeitabhängig

$$H = \frac{1}{2m}\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)\right)^2 + e\varphi(\mathbf{r}, t) \quad (2.91)$$

Korrespondenzregel:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \left[\frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 + e\varphi(\mathbf{r}, t) \right] \psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.92)$$

c) Allgemeiner Fall

Klassisches dynamisches System, Hamiltonfunktion

$$H(q_1, \dots, q_N; p_1, \dots, p_N; t) \quad (2.93)$$

mit Koordinaten q_i , konjugierten Impulsen p_i

Gesamtenergie des Systems:

$$E = H(q_1 \dots q_N; p_1 \dots p_N; t) \quad (2.94)$$

Korrespondenzregel:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(q_1, \dots, q_N; t) = \hat{H}(q_1, \dots, q_N; \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_N}; t) \psi(q_1 \dots q_N, t)} \quad (2.95)$$

Beachte: Mehrdeutigkeiten im allgemeinen Fall

i) Korrespondenzregel koordinatenabhängig!

Beispiel: freies Teilchen in 2d

$$H = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} \quad \rightarrow \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \quad (2.96)$$

Wechsel zu Polarkoordinaten: $x = r \cos \varphi, y = r \sin \varphi$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \checkmark \quad (2.97)$$

Aber: erst Koordinatenwechsel und dann Korrespondenz

$$\begin{aligned} r &= \sqrt{x^2 + y^2}, & p_r &= m\dot{r} \\ \varphi &= \arctan \frac{y}{x}, & p_\varphi &= mr^2 \dot{\varphi} \end{aligned} \quad (2.98)$$

$$H = \frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{p_\varphi^2}{r^2} \right) \quad (2.99)$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \varphi^2} \right) \quad \checkmark \quad (2.100)$$

⇒ Vereinbarung: Korrespondenzregel nur auf kartesische Koordinaten anwenden!

ii)

$$\text{Klassisch: } \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m} \frac{1}{\sqrt{q}} p q p \frac{1}{\sqrt{q}} \quad \text{äquivalent} \quad (2.101)$$

$$\text{QM: } \frac{\hat{p}^2}{2m} \neq \frac{1}{2m} \frac{1}{\sqrt{\hat{q}}} \hat{p} \hat{q} \hat{p} \frac{1}{\sqrt{\hat{q}}} \quad (2.102)$$

Mitunter zusätzliche Regeln nötig (Mehrteilchensysteme ⇒ statistische Physik) oder Anpassung durch Vergleich mit Experiment

d) Atom:

Kern der Masse M , Ladung Ze , Z Elektronen der Masse m , Ladung $(-e)$

Kernkoordinaten: \mathbf{R}, \mathbf{P}

Elektronkoordinaten: $\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i \quad i = 1, \dots, Z$

Klassische Hamiltonfunktion:

$$H = T + V \quad (2.103)$$

$$= \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \sum_{i=1}^Z \frac{p_i^2}{2m} - \sum_{i=1}^Z \frac{Ze^2}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_i|} + \sum_{i < j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \quad (2.104)$$

$$E = H(\mathbf{P}, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_Z, \mathbf{R}, \mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_Z) \quad (2.105)$$

Korrespondenzregel:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H} \psi \quad (2.106)$$

$$= \left(-\hbar^2 \frac{\nabla^2 R}{2M} - \hbar^2 \sum_{i=1}^Z \frac{\nabla_i^2}{2m} - \sum_{i=1}^Z \frac{Ze^2}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_i|} + \sum_{i < j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \right) \psi$$

$$\psi = \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_Z, t) \quad (2.107)$$

Wasserstoff: $Z = 1$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|} \right) \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t) \quad (2.108)$$

Näherung: $M \rightarrow \infty$, Proton ruht $\mathbf{R} = 0$, e^- im Zentralpotenzial

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{r} \right) \psi(\mathbf{r}, t)} \quad (2.109)$$

2.11 Die zeitunabhängige Schrödingergleichung (1 Teilchen)

Formel, allgemein:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H} \psi \quad (2.110)$$

Annahme: \hat{H} unabhängig von t

Klassisch: $\frac{\partial H}{\partial t} = 0$ konservative Systeme, Energie Konstante der Bewegung

Ansatz:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = f(t)\psi(\mathbf{r}) \quad (2.111)$$

Einsetzen:

$$i\hbar \frac{\partial f}{\partial t} \psi(\mathbf{r}) = f(t) \hat{H} \psi(\mathbf{r}) \quad (2.112)$$

Separation:

$$\frac{i\hbar}{f(t)} \frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\hat{H} \psi(\mathbf{r})}{\psi(\mathbf{r})} \quad (2.113)$$

Gültig für alle $t, \mathbf{r} \Rightarrow$ jede Seite konstant $\equiv E$

$$i\hbar \frac{\partial f}{\partial t} = E f(t), \quad \hat{H} \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}) \quad (2.114)$$

$$\Rightarrow f(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \quad (2.115)$$

Behauptung: E ist reell

Beweis:

$$E = E_r + iE_i \quad (2.116)$$

$$|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = f(t) f^*(t) \psi(\mathbf{r}) \psi^*(\mathbf{r}) = e^{-\frac{i}{\hbar} t(E-E^*)} |\psi(\mathbf{r})|^2 \quad (2.117)$$

$$= e^{\frac{2E_i t}{\hbar}} |\psi(\mathbf{r})|^2 \quad (2.118)$$

Normierbare Lösung:

$$\int d^3 r |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \int d^3 r |\psi(\mathbf{r})|^2 e^{2\frac{E_i t}{\hbar}} \stackrel{!}{=} \text{konst.} \quad (2.119)$$

$$\Rightarrow E_i = 0 \quad (2.120)$$

Eine Lösung der Form $\psi(\mathbf{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \psi(\mathbf{r})$ heißt stationärer Zustand:

$$|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = |\psi(\mathbf{r})|^2 \quad (2.121)$$

Der räumliche Teil eines stationären Zustands erfüllt die zeitunabhängige Schrödingergleichung

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (2.122)$$

Dies ist eine Eigenwertgleichung:

$\psi(\mathbf{r})$ ist Eigenfunktion zum Hamiltonoperator \hat{H} mit Eigenwert E .

Allgemeine Eigenschaften:

Betrachte 1 Teilchen im skalaren Potential mit $V(\mathbf{r}) \rightarrow 0$ für $r \rightarrow \infty$

$$\Rightarrow H\psi(\mathbf{r}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r}) \right)\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (2.123)$$

Ohne Beweis: Sei $\psi(\mathbf{r})$ (i)quadratintegabel und (ii) $\psi(\mathbf{r})$ und $\nabla\psi(\mathbf{r})$ im ganzen Raum stetig, eindeutig und beschränkt

Dann gilt

a) für $E < 0$:

Gl. (2.123) hat nur Lösungen für bestimmte Eigenwerte E , diese bilden ein diskretes Spektrum

Die zugehörigen Eigenfunktionen haben die Eigenschaften:

$\psi(\mathbf{r}) \rightarrow 0$ für $\mathbf{r} \rightarrow \infty$

$\Rightarrow |\psi(\mathbf{r})|^2 \rightarrow 0$ für $\mathbf{r} \rightarrow \infty$

\Rightarrow Teilchen hält sich in einem endliche Raumbereich auf

\Rightarrow gebundener Zustand mit diskreten Energiewerten!

b) für $E > 0$:

Gl. (2.123) kann für jeden positiven Wert von E gelöst werden, diese bilden ein kontinuierliches Spektrum

$\psi(\mathbf{r}) \rightarrow e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ für $\mathbf{r} \rightarrow \infty$

Verhalten im Unendlichen wie freies Teilchen

\Rightarrow ungebundener bzw. stationärer Streuzustand

Erstes fundamentales Ergebnis:

Beschreibung von e^- durch Schrödingergleichung

- erklärt Beugungsphänomen am Doppelspalt (per Konstruktion)
- erklärt Quantisierung von Energieniveaus im Atom (Vorhersage!)

3 Wellenmechanik in 1d

Zeitunabhängige Schrödingergleichung:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (3.1)$$

Verlange Normierbarkeit: $\int dx |\psi(x)|^2 = 1$

Sei $V(x)$ nach unten beschränkt, Unstetigkeiten (Sprünge) in $V(x)$ und seinen Ableitungen erlaubt, für das Folgende sei $|V(x)| < \infty$

a) Sei $\psi(x)$ unstetig bei x_0 , $\varphi(x)$ mindestens zweimal stetig differenzierbar

$$\psi(x) = \varphi(x) + a\Theta(x - x_0) \quad (3.2)$$

$$\Rightarrow \psi'(x) = \varphi'(x) + a\delta(x - x_0) \quad (3.3)$$

$$\psi''(x) = \varphi''(x) + a\delta'(x - x_0) \quad (3.4)$$

$$\text{aber } \psi'' = \frac{2m}{\hbar^2}(V - E)\psi \quad (3.5)$$

$\Rightarrow \psi(x)$ muss stetig sein

b) Sei $\psi'(x)$ unstetig bei x_0

$$\psi'(x) = \varphi'(x) + a\Theta(x - x_0) \quad (3.6)$$

$$\psi''(x) = \varphi''(x) + a\delta(x - x_0) \quad (3.7)$$

$\Rightarrow \psi'(x)$ muss stetig sein

c) Sei $\psi''(x)$ unstetig bei x_0

$$\psi''(x) = \varphi''(x) + a\Theta(x - x_0) \quad (3.8)$$

$$x < x_0 : \quad \varphi''(x) = \frac{2m}{\hbar^2}(V - E)\varphi(x) \quad (3.9)$$

$$x > x_0 : \quad \varphi''(x) + a = \frac{2m}{\hbar^2}(V - E)\left(\varphi(x) + \frac{a}{2}(x - x_0)^2 + b(x - x_0) + c\right) \quad (3.10)$$

ergibt inhomogene Differenzialgleichung; Lösung möglich

Falls $V(x)$ einen Sprung aufweist

$$\Rightarrow \psi''(x) = \frac{2m}{\hbar^2}(V - E)\psi(x) \text{ springt} \quad (3.11)$$

ψ', ψ trotzdem überall stetig

Allgemeine Eigenschaften der Lösung

i) $V(x), E \in \mathbb{R}$

\Rightarrow Ist $\psi(x)$ Eigenfunktion, so ist es auch $\psi^*(x)$ und daher sowohl der Real- als auch der Imaginärteil

ii) Ist $\psi(x)$ Lösung, so ist es auch $\alpha\psi(x)$ mit $\alpha = \text{konst.}$

Linear unabhängige Lösungen zum selben Eigenwert heißen entartet

iii) Def. Wronski-Determinante zweier Lösungen ψ_1, ψ_2 mit E_1, E_2

$$W(\psi_1, \psi_2) = \psi_1\psi_2' - \psi_2\psi_1' \quad (3.12)$$

Schrödingergleichung: Seien ψ_1, ψ_2 linear unabhängige Lösungen

$$\psi_1\psi_2'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E_2 - V(x))\psi_1\psi_2 = 0 \quad (3.13)$$

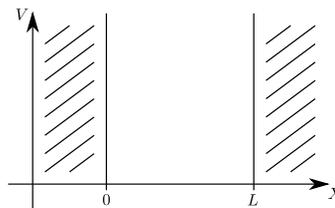
$$\psi_2\psi_1'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E_1 - V(x))\psi_1\psi_2 = 0 \quad (3.14)$$

$$\Rightarrow \underbrace{\psi_1\psi_2'' - \psi_2\psi_1''}_{=W'} + \frac{2m}{\hbar^2}(E_2 - E_1)\psi_1\psi_2 = 0 \quad (3.15)$$

$$\Rightarrow W(\psi_1, \psi_2) \Big|_{x_1}^{x_2} = (E_1 - E_2) \frac{2m}{\hbar^2} \int_{x_1}^{x_2} dx \psi_1(x)\psi_2(x) \quad (3.16)$$

\Rightarrow Für $E_1 = E_2$ (Entartung) folgt $W(\psi_1, \psi_2) = \text{konst.}$

3.1 Teilchen im Kasten: Unendlich hoher Potentialtopf



$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < L \\ \infty & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.17)$$

$\hat{=}$ Kasten mit undurchdringlichen Wänden

\Rightarrow Außerhalb: $\psi(x) = 0$

Beweis: Grenzwert aus endlich tiefem Potentialtopf:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < L \\ V_0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.18)$$

$$V_0 > E: \Rightarrow \psi'' = \underbrace{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}_{\equiv \kappa^2 > 0} \psi = \kappa^2 \psi \quad (3.19)$$

Lösung außen ($x > L$):

$$\psi(x) = Ae^{-\kappa x} + Be^{\kappa x} \quad (3.20)$$

Zweiter Term nicht normierbar $\Rightarrow B = 0$

$$\Rightarrow \psi(x) = Ae^{-\kappa x} \xrightarrow{V_0 \rightarrow \infty} 0 \quad \checkmark \quad (3.21)$$

Stetigkeitsbedingungen an ψ, ψ' bleiben unverändert im Limes $V_0 \rightarrow \infty$

Innen: $E > 0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' = E\psi \quad (3.22)$$

$$\psi'' = -\underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{\equiv \kappa^2 > 0} \psi = -k^2 \psi \quad (3.23)$$

$$\Rightarrow \psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (3.24)$$

Wegen Stetigkeit von ψ am Rand:

$$\psi(0) = \psi(L) \stackrel{!}{=} 0 \quad (3.25)$$

$$(3.26)$$

R.B.:

$$\psi(0) = 0 \Rightarrow A = -B \quad (3.27)$$

$$\Rightarrow \psi(x) = A \sin kx \quad (3.28)$$

$$\psi(L) = 0 \Rightarrow \sin kL = 0 \Rightarrow kL \stackrel{!}{=} n\pi, n \in \mathbb{Z} \quad (3.29)$$

$$\Rightarrow \boxed{\psi_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)} \quad (3.30)$$

Mögliche Energiewerte durch Einsetzen in (3.22):

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\left(-\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2\right) = E \quad (3.31)$$

$$\Rightarrow \boxed{E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \cdot n^2} \quad (3.32)$$

Diskretes Energiespektrum, Quantisierung!

Normierung:

$$\int_0^L dx |\psi(x)|^2 = A^2 \int_0^L dx \sin^2 kx \quad (3.33)$$

$$= A^2 \left[\frac{1}{2}x - \frac{1}{4k} \sin 2kx \right]_0^L = \frac{A^2 L}{2} \stackrel{!}{=} 1 \quad (3.34)$$

$$\Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{L}} \quad (3.35)$$

$E < 0$:

$$\psi'' = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi = \underbrace{\kappa^2}_{>0} \psi \quad (3.36)$$

$$\psi(x) = Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x} \quad (3.37)$$

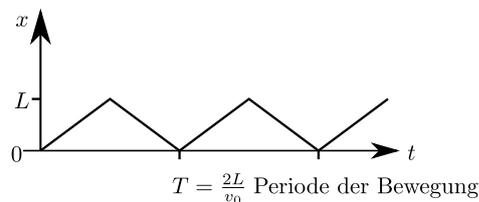
$$\psi(0) = 0 \Rightarrow \psi(x) = A \sinh \kappa x \quad (3.38)$$

$$\psi(L) = 0 \Rightarrow \sinh \kappa L = 0 \quad \nexists \quad (3.39)$$

Randbedingungen nicht erfüllbar, Lösung existiert nicht!

Diskussion:

Klassisch: alle Werte von $E > 0$ erlaubt, $E = \frac{1}{2}mv_0^2$ Bewegung periodisch zwischen den Wänden hin und her



QM: Bewegung grundlegend verschieden!

Nur diskrete Energiewerte, Quantelung

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \underbrace{[(n+1)^2 - n^2]}_{=2n+1} \quad (3.40)$$

Klassischer Limes?: $\Delta E \rightarrow 0$ für $\hbar \rightarrow 0$

$$\Delta E/E = \frac{2n+1}{n^2} \rightarrow 0 \text{ für } n \rightarrow \infty \quad (3.41)$$

Energien werden kontinuierlich für $\hbar \rightarrow 0$ bzw. große Quantenzahlen n

Klassische Kreisfrequenz der Bewegung: $\omega = \frac{2\pi}{T} = \frac{\pi}{L} v_0$

QM:

Teilchengeschwindigkeit

$$v_0 = v_g = \frac{d\omega}{dk} \underbrace{=}_{E=\hbar\omega} \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} \underbrace{=}_{k=\frac{n\pi}{L}} \frac{L}{\pi\hbar} \frac{\Delta E}{\Delta n} = \frac{L}{\pi} \frac{\Delta E}{\hbar} \quad (3.42)$$

$\Rightarrow \omega = \frac{\Delta E}{\hbar}$ ist immer endlich für $\hbar \neq 0$, $E_1 > 0$, Nullpunktsenergie!

Beobachtungen:

- Zahl der Knoten (Nullstellen ohne Rand) der Eigenfunktionen wächst mit E

$\hat{=}$ Zustände schwingender Saite (gleiche Differentialgleichung!)

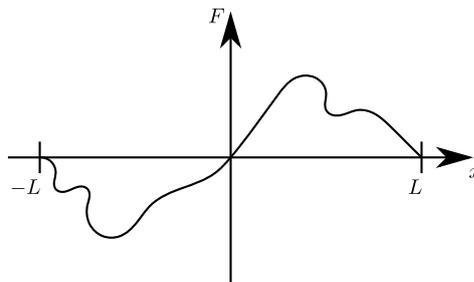
- Orthogonalität der Eigenfunktionen

$$\int_0^L dx \psi_n^*(x) \psi_m(x) = \frac{2}{L} \underbrace{\int_0^L dx \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right)}_{n \neq m: = \frac{\sin(n-m)\frac{\pi}{L}x}{2\frac{\pi}{L}(n-m)} - \frac{\sin(n+m)\frac{\pi}{L}x}{2\frac{\pi}{L}(n+m)} \Big|_0^L} = \delta_{nm} \quad (3.43)$$

- Vollständigkeit der Eigenfunktionen

Sei $f(x)$ gegeben mit $f(x) = 0$ für $x \leq 0$ und $x \geq L$

Erweiterung auf $x \in [-L, L]$ stetig, differenzierbar



$$F(x) = \begin{cases} f(x) & 0 \leq x \leq L \\ -f(-x) & -L \leq x \leq 0 \end{cases} \quad (3.44)$$

F ist periodisch auf $[-L, L]$, $F(L) = F(-L)$

\Rightarrow Fourierreihe

$$F(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(a_n \cos \frac{n\pi x}{L} + b_n \sin \frac{n\pi x}{L} \right) \quad (3.45)$$

Antisymmetrie:

$$F(x) = -F(-x) \Rightarrow a_0 = 0, a_n = 0 \quad (3.46)$$

$$\Rightarrow F(x) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n \sin \frac{\pi n x}{L} = \sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{\frac{L}{2}} b_n \psi_n(x) \quad (3.47)$$

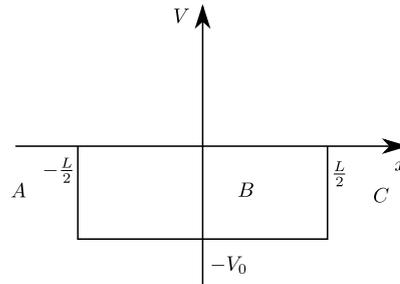
Insbesondere:

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{\frac{L}{2}} b_n \psi_n(x) \quad \text{für } 0 \leq x \leq L \quad (3.48)$$

\Rightarrow Jedes $f(x)$ mit den obigen Randbedingungen lässt sich nach den $\psi_n(x)$ entwickeln; diese bilden ein vollständiges Funktionensystem

3.2 Endlich tiefer Potenzialtopf

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & -\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.49)$$



$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (3.50)$$

$$\int dx |\psi(x)|^2 = 1, \quad \psi(x), \psi'(x) \text{ stetig} \quad (3.51)$$

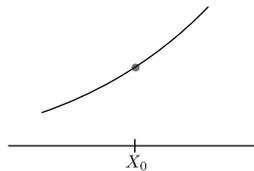
a) $E < 0$, gebundene Zustände $\psi'' = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi$

$$A, C: \quad \psi'' = \kappa^2\psi, \quad \kappa^2 = -\frac{2m}{\hbar^2}E > 0$$

$$B: \quad \psi'' = -k^2\psi, \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0)$$

Betrachte $E < -V_0$: $k^2 < 0$

\Rightarrow Für x_0 mit $\psi(x_0) > 0$ ist $\psi''(x_0) > 0 \Rightarrow$ konvexe Funktion



\Rightarrow Für $x > x_0$ ist ψ überall konvex $\Rightarrow \psi$ nicht normierbar! \nexists

$$\Rightarrow \boxed{-V_0 < E < 0} \quad (3.52)$$

Im Gebiet A:

$$\psi'' = \kappa^2 \psi \quad (3.53)$$

$$\psi_A(x) = \alpha_+ e^{\kappa x} + \alpha_- e^{-\kappa x} \quad (3.54)$$

$$\psi(x) \xrightarrow[x \rightarrow -\infty]{} 0 \Rightarrow \alpha_- = 0 \quad (3.55)$$

$$\Rightarrow \psi_A(x) = \alpha_+ e^{\kappa x} \quad (3.56)$$

Im Gebiet C: entsprechend $\psi_C(x) = \gamma_- e^{-\kappa x}$

Im Gebiet B:

$$\psi'' = -k^2 \psi, \quad (3.57)$$

$$\psi_B(x) = \beta_+ e^{ikx} + \beta_- e^{-ikx} \quad (3.58)$$

Anschlussbedingungen:

Stetigkeit von ψ bei

$$x = -\frac{L}{2} : \quad \alpha_+ e^{-\kappa \frac{L}{2}} = \beta_+ e^{-ik \frac{L}{2}} + \beta_- e^{ik \frac{L}{2}} \quad (3.59)$$

$$x = +\frac{L}{2} : \quad \gamma_- e^{-\kappa \frac{L}{2}} = \beta_- e^{-ik \frac{L}{2}} + \beta_+ e^{ik \frac{L}{2}} \quad (3.60)$$

Stetigkeit von ψ' bei

$$x = -\frac{L}{2} : \quad \kappa \alpha_+ e^{-\kappa \frac{L}{2}} = ik(\beta_+ e^{-ik \frac{L}{2}} - \beta_- e^{ik \frac{L}{2}}) \quad (3.61)$$

$$x = \frac{L}{2} : \quad \kappa \gamma_- e^{-\kappa \frac{L}{2}} = ik(\beta_- e^{-ik \frac{L}{2}} - \beta_+ e^{ik \frac{L}{2}}) \quad (3.62)$$

4 Gleichungen für $\alpha_+, \gamma_-, \beta_{\pm}$; Lösung Standard

Einfacher unter Ausnutzung von Symmetrie:

Für symmetrisches $V(x) = V(-x)$

sind Eigenfunktionen entweder symmetrisch, $\psi(x) = \psi(-x)$

oder anti-symmetrisch $\psi(x) = -\psi(-x) \rightarrow$ Übung

Symmetrischer Fall:

$$\psi_A(x) = \psi_C(-x) \Rightarrow \alpha_+ = \gamma_- \equiv \alpha \quad (3.63)$$

$$\psi_B(x) = \psi_B(-x) \Rightarrow \beta_+ = \beta_- \equiv \beta \quad (3.64)$$

Stetigkeit: Lösbarkeitsbedingung

$$\Rightarrow \left. \begin{aligned} \alpha e^{-\kappa \frac{L}{2}} &= 2\beta \cos \frac{kL}{2} \\ \kappa \alpha e^{-\kappa \frac{L}{2}} &= 2\beta k \sin \frac{kL}{2} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \kappa = k \tan \frac{kL}{2} \quad (3.65)$$

$$\frac{\kappa L}{2} = \frac{kL}{2} \tan \frac{kL}{2} \quad (3.66)$$

$$\text{und } \left(\frac{\kappa L}{2}\right)^2 + \left(\frac{kL}{2}\right)^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \left(\frac{L}{2}\right)^2 \equiv R^2 \quad \text{aus Def. von } \kappa, k \quad (3.67)$$

2 transzendente Gleichungen liefern erlaubte Werte von $\kappa, k \Rightarrow E$

Mit κ, k bekannt folgt aus Stetigkeitsbedingungen:

$$\beta = \alpha \frac{e^{-\kappa \frac{L}{2}}}{2 \cos \frac{kL}{2}} \quad \text{oder} \quad \beta = \alpha \frac{\kappa}{k} \frac{e^{-\kappa \frac{L}{2}}}{2 \sin \frac{kL}{2}} \quad (3.68)$$

Normierung:

$$\int dx |\psi|^2 = \int_{-\infty}^{-\frac{L}{2}} dx |\psi_A|^2 + \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dx |\psi_B|^2 + \int_{\frac{L}{2}}^{\infty} dx |\psi_C|^2 \quad (3.69)$$

$$= \alpha^2 \frac{e^{+2\kappa x}}{2\kappa} \Big|_{-\infty}^{-L/2} + 4\beta^2 \left(\frac{x}{2} + \frac{1}{4k} \sin 2kx \right) \Big|_{-L/2}^{L/2} \quad (3.70)$$

$$+ \alpha^2 \left(\frac{e^{-2\kappa x}}{-2\kappa} \right) \Big|_{\frac{L}{2}}^{\infty} \stackrel{!}{=} 1 \quad (3.71)$$

$$1 = \alpha^2 \frac{e^{-\kappa L}}{\kappa} + 4\beta^2 \left(\frac{L}{2} + \frac{1}{2k} \sin kL \right) \quad (3.72)$$

$$\text{aus (3.65): } 4\beta^2 = \alpha^2 e^{-\kappa L} + \alpha^2 \frac{\kappa^2}{k^2} e^{-\kappa L} = \alpha^2 e^{-\kappa L} \left(1 + \frac{\kappa^2}{k^2} \right) \quad (3.73)$$

$$\sin kL = 2 \sin \frac{kL}{2} \cos \frac{kL}{2} \quad (3.74)$$

$$\stackrel{(3.65)}{=} 2 \frac{\kappa}{k} \frac{\alpha^2}{4\beta^2} e^{-\kappa L} = 2 \frac{\kappa}{k} \frac{1}{1 + \frac{\kappa^2}{k^2}} \quad (3.75)$$

$$\Rightarrow (3.72): \quad 1 = \alpha^2 \frac{e^{-\kappa L}}{\kappa} + \alpha^2 e^{-\kappa L} \left(1 + \frac{\kappa^2}{k^2} \right) \left(\frac{L}{2} + \frac{\kappa}{k^2} \frac{1}{1 + \frac{\kappa^2}{k^2}} \right) \quad (3.76)$$

$$= \alpha^2 e^{-\kappa L} \left[\frac{1}{\kappa} + \left(1 + \frac{\kappa^2}{k^2} \right) \frac{L}{2} + \frac{\kappa}{k^2} \right] \quad (3.77)$$

$$= \alpha^2 e^{-\kappa L} \left(1 + \frac{\kappa^2}{k^2} \right) \left(\frac{L}{2} + \frac{1}{\kappa} \right) \quad (3.78)$$

$$\Rightarrow \frac{1}{\alpha} = e^{-\kappa \frac{L}{2}} \sqrt{\left(1 + \frac{\kappa^2}{k^2} \right) \left(\frac{L}{2} + \frac{1}{\kappa} \right)} \quad (3.79)$$

Antisymmetrischer Fall:

$$\psi_A(x) = -\psi_C(-x) \Rightarrow \alpha_+ = -\gamma_- = \alpha \quad (3.80)$$

$$\psi_B(x) = -\psi_B(-x) \Rightarrow \beta_+ = -\beta_+ = \beta \quad (3.81)$$

Stetigkeit bei $x = -L/2$: Lösbarkeitsbedingung

$$\Rightarrow \alpha e^{-\kappa \frac{L}{2}} = -2i\beta \sin \frac{kL}{2} \quad (3.82)$$

$$\kappa \alpha e^{-\kappa \frac{L}{2}} = 2i\beta k \cos \frac{kL}{2} \quad (3.83)$$

$$\Rightarrow \kappa = -k \cot \frac{kL}{2} \quad (3.84)$$

Man findet analog für die Koeffizienten

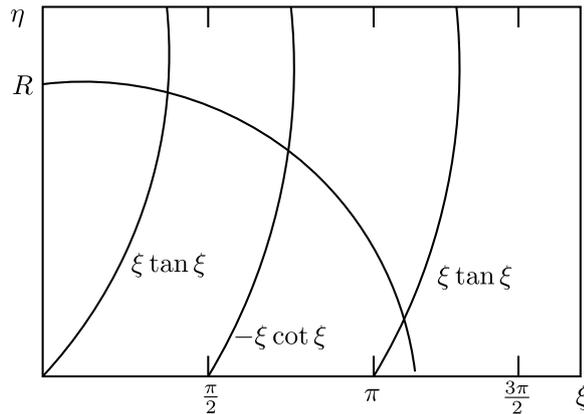
$$\beta = i \frac{e^{-\kappa \frac{L}{2}}}{2 \sin \frac{kL}{2}} \alpha, \quad \frac{1}{\alpha} = e^{-\kappa \frac{L}{2}} \sqrt{\left(1 + \frac{\kappa^2}{k^2}\right) \left(\frac{L}{2} + \frac{1}{\kappa}\right)} \quad (3.85)$$

Bestimmung der Energien:

$$\eta \equiv \frac{\kappa L}{2}, \quad \xi \equiv \frac{kL}{2} \quad (3.86)$$

$$\Rightarrow \xi^2 + \eta^2 = R^2, \quad \eta = \begin{cases} \xi \tan \xi \\ -\xi \cot \xi \end{cases} \quad \text{Bedingungen} \quad (3.87)$$

Lösung numerisch oder graphisch:



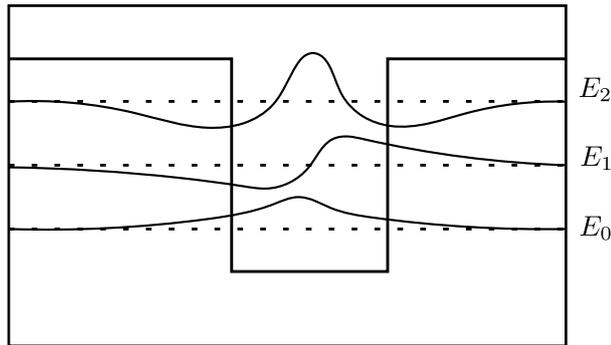
Schnittpunkte aus R und η : durch Potenzialparameter V_0, L festgelegt

$$\Rightarrow E_n = -\frac{\hbar^2}{2m} \kappa^2 = -V_0 \frac{\eta_n^2}{R^2} \quad (3.88)$$

Allgemeine Feststellungen:

- Es gibt mindestens eine symmetrische Lösung
- Für $R < \infty$ gibt es endlich viele (diskrete) Lösungen mit $E < 0$

Lösungen:



Für endlichen Potenzialtopf:

$\psi \neq 0$ im klassisch verbotenen Bereich, aber exponentieller Abfall $\psi \sim e^{-\frac{x}{d}}$

mit Eindringtiefe $d = \frac{1}{\kappa} = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m|E|}}$

\Rightarrow gebundene Zustände

- diskrete Energien (für $E \neq E_n$ keine normierbaren Lsg.)
- Wellenfunktion ψ_n hat n Knoten

Übergang zu unendlich tiefem Topf:

$$R \gg 1 \quad \Leftrightarrow \quad V_0 \gg \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2}{L}\right)^2 \quad (3.89)$$

Energiebestimmung:

Schnittpunkte rutschen nach oben zu Polstellen von

$$\frac{\tan}{\frac{\pi}{2} + n\pi} = \frac{\cot}{n\pi} \quad (3.90)$$

$$\Rightarrow \xi = \frac{\pi}{2}(n+1) \quad (3.91)$$

$$E = -V_0 \frac{\eta^2}{R^2} = -V_0 \frac{R^2 - \xi^2}{R^2} = -V_0 + V_0 \frac{\xi^2}{R^2} \quad (3.92)$$

$$\simeq -V_0 + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n+1)^2 \quad (3.93)$$

b) $E > 0$, Streuzustände

Klassisch: Gesamte x -Achse erlaubt, d.h. Teilchen $\rightarrow \infty$ für $t \rightarrow \infty$

QM:

$$A, C: \psi'' = -k_0^2 \psi, \quad k_0^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E > 0 \quad (3.94)$$

$$B: \psi'' = -k^2 \psi, \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0) > 0 \quad (3.95)$$

\Rightarrow Lsg. ebene Wellen $\hat{=}$ Streuzustände

$$A: \psi_A(x) = \alpha_+ e^{ik_0 x} + \alpha_- e^{-ik_0 x} \quad (3.96)$$

$$B: \psi_B(x) = \beta_+ e^{ikx} + \beta_- e^{-ikx} \quad (3.97)$$

$$C: \psi_C(x) = \gamma_+ e^{ik_0 x} + \gamma_- e^{-ik_0 x} \quad (3.98)$$

Bemerkung: ebene Wellen nicht normierbar!

\Rightarrow Wellenpakete aus diesen bilden \Rightarrow danach Lösungen nicht mehr stationär

Stetigkeit bei $x = -\frac{L}{2}$:

$$\psi: \alpha_+ e^{-ik_0 \frac{L}{2}} + \alpha_- e^{ik_0 \frac{L}{2}} = \beta_+ e^{-ik \frac{L}{2}} + \beta_- e^{ik \frac{L}{2}} \quad (3.99)$$

$$\psi': ik_0(\alpha_+ e^{-ik_0 \frac{L}{2}} - \alpha_- e^{ik_0 \frac{L}{2}}) = ik(\beta_+ e^{ik \frac{L}{2}} - \beta_- e^{-ik \frac{L}{2}}) \quad (3.100)$$

Matrixnotation:

$$\begin{pmatrix} e^{-ik_0 \frac{L}{2}} & e^{ik_0 \frac{L}{2}} \\ e^{-ik_0 \frac{L}{2}} & -e^{ik_0 \frac{L}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-ik \frac{L}{2}} & e^{ik \frac{L}{2}} \\ \frac{k}{k_0} e^{-ik \frac{L}{2}} & -\frac{k}{k_0} e^{ik \frac{L}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_+ \\ \beta_- \end{pmatrix} \quad (3.101)$$

Invertieren:

$$\begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} = M\left(k_0, k, -\frac{L}{2}\right) \begin{pmatrix} \beta_+ \\ \beta_- \end{pmatrix} \quad (3.102)$$

$$M\left(k_0, k, -\frac{L}{2}\right) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \left(1 + \frac{k}{k_0}\right) e^{i(k_0 - k) \frac{L}{2}} & \left(1 - \frac{k}{k_0}\right) e^{i(k_0 + k) \frac{L}{2}} \\ \left(1 - \frac{k}{k_0}\right) e^{-i(k_0 + k) \frac{L}{2}} & \left(1 + \frac{k}{k_0}\right) e^{-i(k_0 - k) \frac{L}{2}} \end{pmatrix} \quad (3.103)$$

Entsprechend bei $x = \frac{L}{2}$:

$$\begin{pmatrix} \beta_+ \\ \beta_- \end{pmatrix} = M\left(k, k_0, \frac{L}{2}\right) \begin{pmatrix} \gamma_+ \\ \gamma_- \end{pmatrix} \quad (3.104)$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} = M\left(k_0, k, -\frac{L}{2}\right) M\left(k, k_0, \frac{L}{2}\right) \begin{pmatrix} \gamma_+ \\ \gamma_- \end{pmatrix} \quad (3.105)$$

$$M\left(k_0, k, -\frac{L}{2}\right)M\left(k, k_0, \frac{L}{2}\right) = \begin{pmatrix} (\cos kL - i\frac{\varepsilon_+}{2} \sin kL)e^{ik_0L} & -i\frac{\varepsilon_-}{2} \sin kL \\ i\frac{\varepsilon_-}{2} \sin kL & (\cos kL + i\frac{\varepsilon_+}{2} \sin kL)e^{-ik_0L} \end{pmatrix}$$

mit

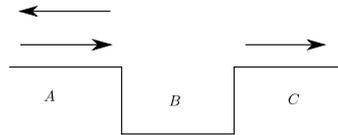
$$\varepsilon_+ = \frac{k}{k_0} + \frac{k_0}{k}, \quad \varepsilon_- = \frac{k}{k_0} - \frac{k_0}{k} \quad (3.106)$$

⇒ Für jede Vorgabe von R.B. Lösung konstruierbar

Spezielle Wahl:

C : nur auslaufende Welle, ⇒ $\gamma_- = 0$, entsprechend der physikalischen Situation:

Einlaufendes Teilchen von links, am Potenzialtopf Transmission + Reflexion



A: Wähle $\alpha_+ = 1$; dann wird aus (3.105)

$$1 = \left(\cos kL - i\frac{\varepsilon_+}{2} \sin kL \right) e^{ik_0L} \gamma_+ \quad (3.107)$$

$$\alpha_- = i\frac{\varepsilon_-}{2} \sin kL \gamma_+ \quad (3.108)$$

$$\Rightarrow \gamma_+ = \frac{e^{-ik_0L}}{\cos kL - i\frac{\varepsilon_+}{2} \sin kL} \quad (3.109)$$

$$= e^{-ik_0L} \frac{\cos kL + i\frac{\varepsilon_+}{2} \sin kL}{\cos^2 kL + \frac{\varepsilon_+^2}{4} \sin^2 kL} \quad (3.110)$$

Physikalische Interpretation:

Betrachte Wahrscheinlichkeitsstrom der Welle:

$$j = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \psi' - \psi \psi'^*) \quad (3.111)$$

A: Einlaufende Welle e^{ik_0x}

$$j_{\text{ein}} = \frac{\hbar}{2mi} (ik_0 + ik_0) = \frac{\hbar k_0}{m} \quad (3.112)$$

Reflektierte Welle $\alpha_- e^{-ik_0x}$

$$j_R = \frac{\hbar}{2mi} (-ik_0 - ik_0) |\alpha_-|^2 = -\frac{\hbar k_0}{m} |\alpha_-|^2 \quad (3.113)$$

C: Transmittierte Welle $\gamma_+ e^{ik_0 x}$

$$j_T = \frac{\hbar}{2mi} (ik_0 + ik_0) |\gamma_+|^2 = \frac{\hbar k_0}{m} |\gamma_+|^2 \quad (3.114)$$

Damit Wahrscheinlichkeiten für Transmission und Reflexion:

$$T = \left| \frac{j_T}{j_{\text{ein}}} \right| = |\gamma_+|^2 \quad \text{Transmissionskoeffizient} \quad (3.115)$$

$$R = \left| \frac{j_R}{j_{\text{ein}}} \right| = |\alpha_-|^2 \quad \text{Reflexionskoeffizient} \quad (3.116)$$

Erhaltung der Teilchenzahl: $T + R \stackrel{!}{=} 1$

Generell für ebene Wellen: $(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot j = 0)$

$$\rho = \psi^* \psi, \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial j}{\partial x} = 0, \quad j = \text{konst.} \quad \checkmark \quad (3.117)$$

Gesamtströme:

$$A: \quad \psi_A(x) = e^{ik_0 x} + \alpha_- e^{-ik_0 x} = \psi_{\text{ein}} + \psi_R \quad (3.118)$$

$$\begin{aligned} j_A &= \frac{\hbar}{2mi} (\psi_A^* \psi_A' - \psi_A \psi_A'^*) \\ &= \frac{\hbar}{2mi} (\psi_{\text{ein}}^* \psi_{\text{ein}}' - \psi_{\text{ein}} \psi_{\text{ein}}'^* + \psi_R^* \psi_R' - \psi_R \psi_R'^*) \\ &= j_{\text{ein}} + j_R \end{aligned} \quad (3.119)$$

$$C: \quad \psi_C(x) = \gamma_+ e^{ik_0 x} = \psi_T(x) \quad (3.120)$$

$$j_C = j_T \quad (3.121)$$

Wegen $j = \text{konst.}$ ist $j_T = j_{\text{ein}} + j_R$

$$\Rightarrow T + R = \left| \frac{j_T}{j_{\text{ein}}} \right| + \left| \frac{j_R}{j_{\text{ein}}} \right| = \frac{j_T}{j_{\text{ein}}} - \frac{j_R}{j_{\text{ein}}} = 1 \quad \checkmark \quad (3.122)$$

Betrachte Transmission:

$$T = |\gamma_+|^2 \quad (3.123)$$

$$= \frac{1}{(\cos kL - i \frac{\epsilon_+}{2} \sin kL)(\cos kL + i \frac{\epsilon_+}{2} \sin kL)} \quad (3.124)$$

$$= \frac{1}{\cos^2 kL + \frac{\epsilon_+^2}{4} \sin^2 kL} \quad (3.125)$$

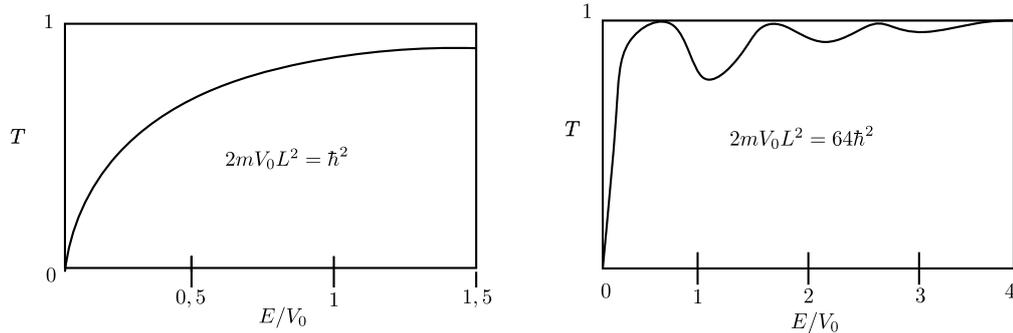
$$\epsilon_+^2 = \epsilon_-^2 + 4 \quad = \frac{1}{1 + \frac{\epsilon_-^2}{4} \sin^2 kL} \quad (3.126)$$

$$\varepsilon_-^2 = \frac{k^2}{k_0^2} + \frac{k_0^2}{k^2} - 2 = \frac{k^4 + k_0^4 - 2k^2k_0^2}{k_0^2k^2} \quad (3.127)$$

$$= \frac{(E + V_0)^2 + E^2 - 2(E + V_0)E}{(E + V_0)E} = \frac{V_0^2}{(E + V_0)E} \quad (3.128)$$

Damit

$$T(E) = \frac{4E(V_0 + E)}{4E(V_0 + E) + V_0^2 \sin^2 kL} \Rightarrow 0 \leq T \leq 1 \checkmark \quad (3.129)$$



Maxima $T(E) = 1$ bei $kL = n\pi \Rightarrow$ Resonanzen

Zugehörige Energien:

$$E_R = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - V_0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 - V_0 \quad (3.130)$$

Beachte: n_{min} für $E_R > 0$ notwendig

Grund für Resonanzen: Interferenz von transmittierter und reflektierter Welle!

Genauere Beschreibung Resonanzen:

Inverser Koeffizient der transmittierten Welle:

$$\frac{1}{\gamma_+ e^{ik_0L}} = \cos kL - i \frac{\varepsilon_+}{2} \sin kL \quad (3.131)$$

Resonanzstelle:

$$k_R = \frac{n\pi}{L}, \quad \cos k_R L = (-1)^n, \quad \sin k_R L = 0 \quad (3.132)$$

Umgebung der Resonanzstelle E_R : Taylorentwicklung

$$\left. \frac{d}{dE} \left(\cos kL - i \frac{\varepsilon_+}{2} \sin kL \right) \right|_{E_R} = -i \frac{\varepsilon_+}{2} \cos kL \left. \frac{dk}{dE} L \right|_{E_R} \quad (3.133)$$

Benutze

$$\frac{dk}{dE} = \frac{dk^2}{dE} \frac{1}{2k} = \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{1/2} \frac{1}{2\sqrt{E+V_0}} \quad (3.134)$$

$$\varepsilon_+^2 = \varepsilon_-^2 + 4 = \frac{(2E+V_0)^2}{(E+V_0)E} \quad (3.135)$$

$$(3.133) = -i \cos k_R L \sqrt{\frac{m}{2}} \frac{L}{2\hbar} \frac{2E_R+V_0}{(E_R+V_0)\sqrt{E_R}} \quad (3.136)$$

$$\equiv \left(-i \frac{2}{\Gamma}\right) \cos k_R L \quad (3.137)$$

$$\text{mit } \Gamma = \frac{(E_R+V_0)\sqrt{E_R}}{2E_R+V_0} \frac{4\hbar}{L} \sqrt{\frac{2}{m}} \quad (3.138)$$

Damit gesuchte Taylorreihe:

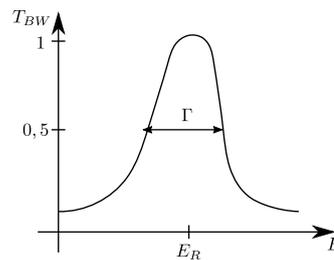
$$\frac{1}{\gamma_+ e^{ik_0 L}} = (-1)^n \left[1 - i \frac{2}{\Gamma} (E - E_R) + O((E - E_R)^2) \right] \quad (3.139)$$

$$\Rightarrow \gamma_+ e^{ik_0 L} \approx (-1)^n \frac{i \frac{\Gamma}{2}}{E - E_R + i \frac{\Gamma}{2}} \quad \text{nahe } E_R \quad (3.140)$$

Damit folgt für die Transmission für E nahe einer Resonanzenergie:

$$T = |\gamma_+|^2 \stackrel{E \approx E_R}{\approx} \frac{\left(\frac{\Gamma}{2}\right)^2}{(E - E_R)^2 + \left(\frac{\Gamma}{2}\right)^2} \quad (3.141)$$

Breit-Wigner-Funktion



Allgemein gültig für Kastenpotenziale (lediglich Modifikation von Γ)

Resonanzen treten bei Streuvorgängen in allen Bereichen der Physik auf, insbesondere Kern- und Teilchenphysik (mit abgerundeten Potenzialen)

Zusammenfassung $E > 0$:

Stationäre Streulösungen mit $k_0 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} > 0$

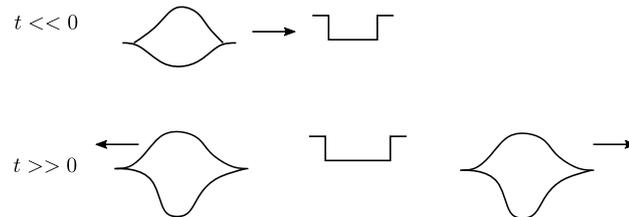
$$\psi_{k_0}(x) = V(x) = \begin{cases} e^{ik_0x} + \alpha_- e^{-ik_0x} & x < -\frac{L}{2} \\ \gamma_+ e^{ik_0x} & x > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (3.142)$$

\Rightarrow nicht normierbar, bilden 2d Lösungsraum

3.3 Streuung von Wellenpaketen am Kasten

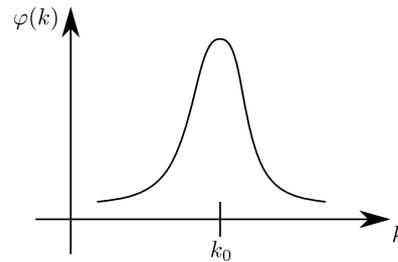
Physikalische Streuzustände: Wellenpakete (Normierbarkeit!)

Hier: Streuung am Kasten, erwarte



Freies Teilchen als Wellenpaket:

$$\chi(x, t) = \int \frac{dk}{2\pi} \varphi(k) e^{ikx - i\omega t}, \quad \omega = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad (3.143)$$



Sei $\varphi(k) = 0$ für $k < 0$ und $\chi(x, t = 0) = \chi_0(x)$

Für Teilcheninterpretation: vernachlässige Zerfließen

$\Rightarrow \omega(k)$ zu erster Ordnung (Kap. 2.2)

$$\chi(x, t) \simeq e^{+i\omega_0 t} \chi_0(x - v_0 t) \quad (3.144)$$

$$\text{mit } v_0 = \frac{\hbar k_0}{m}, \quad \omega_0 = \frac{\hbar k_0^2}{2m} \quad (3.145)$$

Für Streuproblem: Verwende Streulösungen $\psi_k(x)$ anstelle ebener Wellen $e^{ikx - i\omega t}$

$$\psi(x, t) = \int \frac{dk}{2\hbar} \varphi(k) \psi_k(x) e^{-i\omega t} \quad (3.146)$$

$x < -\frac{L}{2}$:

$$\psi(x, t) = \int \frac{dk}{2\hbar} \varphi(k) \left(e^{i(kx-\omega t)} + \alpha_-(k) e^{-i(kx+\omega t)} \right) \quad (3.147)$$

$$= \chi(x, t) + \underbrace{\int \frac{dk}{2\hbar} \varphi(k) \alpha_-(k) e^{-i(kx+\omega t)}}_{\approx \alpha_-(k_0) \chi(-x, t)} \quad (3.148)$$

$x > \frac{L}{2}$:

$$\psi(x, t) = \int \frac{dk}{2\pi} \varphi(k) \gamma_+(k) e^{i(kx-\omega t)} \quad (3.149)$$

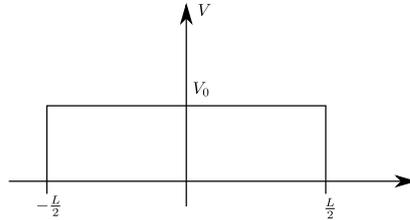
$$\simeq \gamma_+(k_0) \chi(x, t) \quad (3.150)$$

\Rightarrow Erwartetes Ergebnis für schmale Wellenpakete um k_0 mit vernachlässigbarer Dispersion!

Beachte Interpretation:

- Teilchen spaltet nicht auf!
- Wellen geben Wahrscheinlichkeiten für Transmission und Reflexion
- Unterschied zu klassischer Physik!

3.4 Potenzialbarrieren



Betrachte $0 < E < V_0$

Klassisch: Totalreflexion

QM:

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ik_0x} + \alpha_- e^{-ik_0x} & -\frac{L}{2} < x \\ \beta_+ e^{-\kappa x} + \beta_- e^{\kappa x} & -\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2} \\ \gamma_+ e^{ik_0x} & x > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (3.151)$$

mit

$$k_0^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E > 0, \quad \kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) > 0 \quad (3.152)$$

$\hat{=}$ Kastenpotenzial mit Substitution $k = i\kappa$ im Bereich B

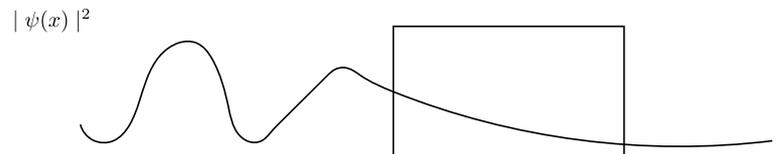
\Rightarrow Benutze Rechnung aus 3.2 b)

Dann ist

$$T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{\kappa}{k_0} + \frac{k_0}{\kappa} \right)^2 \sinh^2 \kappa L} \quad (3.153)$$

$$\text{mit } \left(\frac{\kappa}{k_0} + \frac{k_0}{\kappa} \right)^2 = \frac{(V_0 - E)^2 + E^2 + 2(V_0 - E)E}{(V_0 - E)E} = \frac{V_0^2}{E(V_0 - E)} \quad (3.154)$$

Beachte: $T \neq 0 \not\sim$ klassische Physik!



Durchdringen von klassisch verbotenen Barrieren: Tunneleffekt!

Für hohe Barriere:

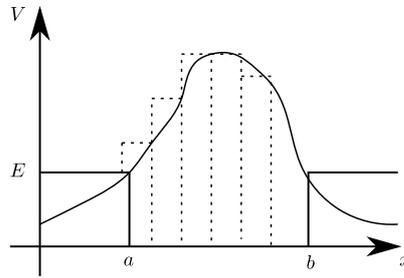
$$\kappa \sim \sqrt{V_0}, \quad \kappa L \gg 1 \quad (3.155)$$

$$\sinh^2 \kappa L \simeq \frac{1}{4} e^{2\kappa L} \quad (3.156)$$

$$\Rightarrow T \simeq \frac{1}{\frac{1}{4} \frac{V_0^2}{E(V_0-E)} \frac{1}{4} e^{2\kappa L}} \quad (3.157)$$

$$\Rightarrow T(E) = \frac{16(V_0 - E)E}{V_0^2} e^{-\frac{2L}{\hbar} \sqrt{2m(V_0-E)}} \quad (3.158)$$

Verallgemeinerung auf allgemeinen Potenzialberg (näherungsweise):



a, b klassische Umkehrpunkte

N Schwellen der Breite Δx mit approximativ

$$T_i \approx \exp \left[-\frac{2\Delta x}{\hbar} \sqrt{2m(V(x_i) - E)} \right] \quad (3.159)$$

Zusammenfügen:

$$T \approx \prod_{i=1}^N T_i = \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \sum_{i=1}^N \Delta x \sqrt{2m(V(x_i) - E)} \right] \quad (3.160)$$

$\Delta x \rightarrow 0$:

$$T \approx \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \int_a^b dx \sqrt{2m(V(x) - E)} \right] = e^{-G} \quad \text{Gamowfaktor} \quad (3.161)$$

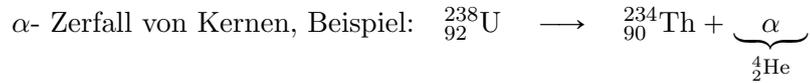
Approximation gültig für $T \ll 1$

Dann ist

$$\frac{16(V_0 - E)E}{V_0^2} \ll e^{2\kappa L} \quad (3.162)$$

$$2\kappa L \gg \underbrace{\ln \left[\frac{16(V_0 - E)E}{V_0^2} \right]}_{\approx 0 \Leftrightarrow [\dots] = 1} \quad (3.163)$$

Anwendung: Radioaktivität



Beschreibung: α -Teilchen im Potenzial der restlichen Nukleonen

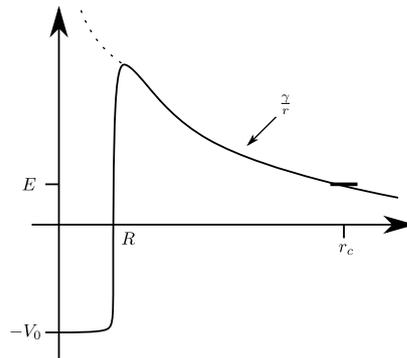
- anziehendes Potenzial: starke Wechselwirkung
(vgl. Standardmodell der Teilchenphysik)

- abstoßender Coulombterm: $\frac{\gamma}{r}$

Z Ladungszahl Restkern, $\gamma = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0}$

Kernradius: $R = A^{1/3}R_0$, $R_0 \approx 1.6 \cdot 10^{-15} \text{ m}$

Qualitativ:



$$G = \frac{2}{\hbar} \int_R^{r_c} dr \sqrt{2m \left(\frac{\gamma}{r} - E \right)} \quad \text{mit } E = \frac{\gamma}{r_c} \quad (3.164)$$

$$= \frac{2r_c}{\hbar} \sqrt{2mE} \left[\frac{\pi}{2} - \arcsin \sqrt{\frac{R}{r_c}} - \sqrt{\frac{R}{r_c} \left(1 - \frac{R}{r_c} \right)} \right] \quad (3.165)$$

Mit $R \ll r_c$ ist

$$\sqrt{1 - \frac{R}{r_c}} = 1 - \frac{1}{2} \frac{R}{r_c} + \dots \quad \arcsin \sqrt{\frac{R}{r_c}} = \sqrt{\frac{R}{r_c}} + \frac{1}{6} \sqrt{\frac{R}{r_c}}^3 + \dots \quad (3.166)$$

$$\Rightarrow G = \frac{2r_c}{\hbar} \sqrt{2mE} \left(\frac{\pi}{2} - 2\sqrt{\frac{R}{r_c}} + O\left(\sqrt{\frac{R}{r_c}}\right) \right) \quad (3.167)$$

$$r_c \underset{\approx}{=} \frac{\gamma}{E} \quad \frac{2\pi\sqrt{2me^2}}{\hbar 4\pi\epsilon_0} \frac{Z}{\sqrt{E}} - \frac{8\sqrt{mR_0}}{\hbar} \sqrt{\frac{e^2}{4\hbar\epsilon_0}} Z^{2/3} \quad (3.168)$$

$$\equiv A \frac{Z}{\sqrt{E}} + BZ^{2/3} \quad (3.169)$$

Zeit zum Durchqueren des Kerns:

$$t_0 = \frac{2R}{v} = \frac{2R}{\sqrt{\frac{2E}{m}}} \quad (3.170)$$

Mittlere Lebensdauer des Kerns:

$$\tau \approx \frac{t_0}{T} = t_0 e^G \quad (3.171)$$

$$\Rightarrow \ln \tau \approx A \frac{Z}{\sqrt{E}} - BZ^{2/3} + \underbrace{\ln t_0}_{\approx \text{konst in } E} \quad (3.172)$$

Geiger-Nuttall-Gesetz:

$$\Rightarrow \log_{10} \left(\frac{\tau}{\text{Jahr}} \right) = 1.72 \frac{Z}{\sqrt{E/\text{MeV}}} - 1.63 Z^{2/3} + \text{konst.} \quad (3.173)$$

Nebenrechnung Integral:

$$\text{Subst: } u = \frac{\gamma}{r}, \quad du = -\frac{\gamma}{r^2} dr \quad (3.174)$$

$$\begin{aligned} \int_R^{r_c} dt \sqrt{2m \left(\frac{\gamma}{r} - E \right)} &= -\gamma \int_{\frac{\gamma}{R}}^{\gamma/r_c} du \frac{\sqrt{2m(u-E)}}{u^2} \quad (3.175) \\ &= -\gamma \left[-\frac{\sqrt{2m(u-E)}}{u} + \frac{2m}{\cancel{2}} \frac{\cancel{2}}{\sqrt{2mE}} \arctan \sqrt{\frac{2m(u-E)}{2mE}} \right]_{\frac{\gamma}{R}}^{\gamma/r_c} \\ &= -\gamma \left[-\frac{\sqrt{2m(\frac{\gamma}{r_c} - E)}}{\frac{\gamma}{r_c}} + \frac{\sqrt{2m(\frac{\gamma}{R} - E)}}{\frac{\gamma}{R}} \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{\frac{2m}{E}} \arctan \sqrt{\frac{\frac{\gamma}{r_c} - E}{E}} - \arctan \sqrt{\frac{\frac{\gamma}{R} - E}{E}} \right] \\ &\stackrel{\gamma=r_c E}{=} -\sqrt{2mE} R \sqrt{\frac{r_c}{R} - 1} + \underbrace{\sqrt{2mE} r_c \arctan \sqrt{\frac{r_c}{R} - 1}}_{= \arctan \sqrt{\frac{1 - R/r_c}{R/r_c}}} \\ &= \arctan \sqrt{\frac{1 - R/r_c}{R/r_c}} \\ &= \operatorname{arccot} \frac{\sqrt{\frac{R}{r_c}}}{\sqrt{1 - \frac{R}{r_c}}} = \frac{\pi}{2} - \arcsin \sqrt{\frac{R}{r_c}} \\ &= \sqrt{2mE} r_c \left[\frac{\pi}{2} - \arcsin \sqrt{\frac{R}{r_c}} - \sqrt{\frac{R}{r_c} \left(1 - \frac{R}{r_c} \right)} \right] \checkmark \quad (3.176) \end{aligned}$$

3.5 Allgemeine 1-d Potenziale

Zusammenfassung:

$$\psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x))\psi(x) = 0 \quad (3.177)$$

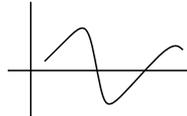
$V(x)$ stetig oder endlich viele Sprungstellen endlicher Höhe

$\psi(x), \psi'(x)$ stetig

a) klassisch erlaubt: $E > V(x)$

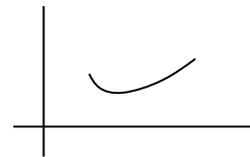
$\Rightarrow \psi''$ und ψ haben unterschiedliches Vorzeichen

$\Rightarrow \psi$ oszillatorisch

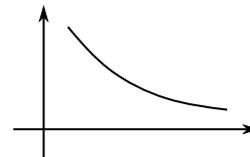


b) klassisch verboten: $E < V(x)$

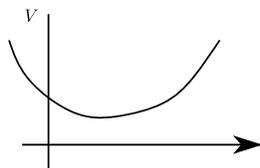
$\Rightarrow \psi'', \psi$ gleiches Vorzeichen, ψ konvex



speziell exponentielles Abklingen



c) Senke mit klassischen Umkehrpunkten $E = V(x), \psi'' = 0$

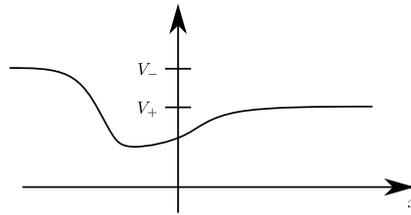


$V(x) \rightarrow \infty$ f. $|x| \rightarrow \infty$

\Rightarrow diskretes Spektrum E_0, E_1, E_2, \dots

gebundene Zustände, ψ_n hat n Knoten

2.



$$\begin{aligned}
 V(x) \rightarrow V_+, & \quad V(x) \rightarrow V_-, & V_+ \leq V_- \\
 x \rightarrow \infty & \quad x \rightarrow -\infty
 \end{aligned}
 \tag{3.178}$$

$V_{\min} < E < V_+$: diskretes Spektrum

$V_+ < E < V_-$: kontinuierliches Spektrum, 1 Streulösung pro E , nicht normierbar
 \Rightarrow Wellenpakete

$V_- < E$: 2 Streulösungen pro E

4 Statistische Deutung der QM und Unschärferelation

4.1 Wahrscheinlichkeiten und Statistik

Beispiel: ein Raum enthalte 14 Personen

Altersverteilung $N(j)$: N Personen im Alter von j Jahren

$$N(14) = 1 \quad N(22) = 2 \quad (4.1)$$

$$N(15) = 1 \quad N(24) = 2 \quad (4.2)$$

$$N(16) = 3 \quad N(25) = 5 \quad (4.3)$$

alle anderen $N(j) = 0$

Gesamtzahl Personen:

$$N = \sum_{j=0}^{\infty} N(j) = 14 \quad \checkmark \quad (4.4)$$

- Wahrscheinlichkeit, eine Person im Alter von 15 zu finden: (zufällige Auswahl)

$$\frac{1}{14} \quad \Rightarrow \quad p(j) = \frac{N(j)}{N} \quad (4.5)$$

- Wahrscheinlichkeit entweder 14 oder 15 auszuwählen?

$$p(14) + p(15) = \frac{1}{7} \quad (4.6)$$

$$\sum_{j=0}^{\infty} p(j) = 1 \quad (4.7)$$

- Was ist das wahrscheinlichste Alter?

\Rightarrow 25, das j bei dem $p(j)$ maximal ist

- Was ist der Medianwert des Alters? (genauso viele älter wie jünger)

23 \Rightarrow das j_0 für das $p(j > j_0) = p(j < j_0)$

- Was ist das mittlere Alter bzw. Durchschnittsalter?

$$\langle j \rangle = \frac{\sum_{j=0}^{\infty} j N(j)}{N} = \sum_{j=0}^{\infty} j p(j) = 0 \quad (4.8)$$

$$\frac{14 + 15 + 3 \cdot 16 + 3 \cdot 22 + 2 \cdot 24 + 5 \cdot 25}{14} = \frac{294}{14} = 21 \quad (4.9)$$

Beachte: $\langle j \rangle$ heißt Erwartungswert, i.A. \neq wahrscheinlichster Wert (abhängig von der Verteilung)

- Was ist der Mittelwert der Quadrate der Altersangaben?

$$\langle j^2 \rangle = \sum_{j=0}^{\infty} j^2 p(j) \quad (4.10)$$

Allgemein für Funktion $f(j)$:

$$\langle f(j) \rangle = \sum_{j=0}^{\infty} f(j) p(j) \quad (4.11)$$

- Was ist die mittlere Abweichung $\Delta j = j - \langle j \rangle$

$$\langle \Delta j \rangle = \sum_{j=0}^{\infty} (j - \langle j \rangle) p(j) = \sum_{j=0}^{\infty} j p(j) - \langle j \rangle \underbrace{\sum_{j=0}^{\infty} p(j)}_{=1} \quad (4.12)$$

$$= \langle j \rangle - \langle j \rangle = 0 \quad (4.13)$$

Varianz oder Standardabweichung:

$$\sigma^2 = \langle \Delta j^2 \rangle = \langle j^2 \rangle - \langle j \rangle^2 \geq 0 \quad (4.14)$$

Bisher: diskrete Variable j , Alter in ganzen Jahren

Jetzt: kontinuierliche Variable: z. B. kontinuierliches Alter t

- Wahrscheinlichkeit, dass eine beliebige Person auf der Straße 26 J, 4h, 27 min, $3.\bar{3}$ sec alt ist? $\Rightarrow 0$

Benötige ein endliches Intervall:

- Wahrscheinlichkeit, dass das Alter einer Person zwischen t und $t + \Delta t$ liegt

\Rightarrow bei kurzen Intervallen:

$$\sim \Delta t \quad \xrightarrow{\Delta t \rightarrow 0} \quad \rho(t) dt \quad \text{Wahrscheinlichkeitsdichte } \rho(t)$$

$$\Rightarrow p_{t,t+\Delta t} = \int_t^{t+\Delta t} dt \rho(t)$$

Entsprechend:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \rho(x) \quad (4.15)$$

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx x \rho(x) \quad (4.16)$$

$$\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \rho(x) \quad (4.17)$$

$$\sigma^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \quad (4.18)$$

4.2 Statistische Deutung der q.m. Orts- und Impulsvariablen

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \psi^*(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t) \quad (4.19)$$

$\hat{=}$ räumliche Wahrscheinlichkeitsdichte für Antreffen von Teilchen in $(\mathbf{r}, \mathbf{r} + d\mathbf{r})$

- Ort eines Teilchens ist nicht mehr eindeutig festgelegt

\Rightarrow Erwartungswert für den Ort eines Teilchens

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \int d^3r \rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{r} \quad (4.20)$$

Entsprechend für Funktion der Teilchenkoordinaten

$$\langle f(\mathbf{r}) \rangle = \int d^3r \rho(\mathbf{r}, t) f(\mathbf{r}) \quad (4.21)$$

Bedeutung: Erwartungswert = Mittelwert über ein Ensemble von Teilchen im entsprechenden Zustand ψ

Wiederholte Messungen streuen, unendlich viele Messungen konvergieren gegen den Erwartungswert

Impuls eines Teilchens:

Ebene Welle $\sim e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{=}$ scharfer Impuls $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$, nicht normierbar!

Wellenpakete: Superposition mit verschiedenen Impulsen

Messung eines "Teilchenimpulses" wieder nur mit

Wahrscheinlichkeit $\tilde{\rho}(\mathbf{p})d^3\mathbf{p}$ für Impuls im Intervall $(\mathbf{p}, \mathbf{p} + d\mathbf{p})$

Es muss gelten

$$\int d^3\mathbf{p} \tilde{\rho}(\mathbf{p}) = 1 \quad (4.22)$$

Außerdem: $\tilde{\rho}(\mathbf{p})$ muss vollständig durch $\psi(\mathbf{r}, t)$ bestimmt sein!

Fourier-Trafo:

Betrachte feste Zeit t , Argument weglassen

$$\tilde{\psi}(\mathbf{p}) = \int d^3r \psi(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \quad (4.23)$$

$$\psi(\mathbf{r}) = \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \tilde{\psi}(\mathbf{p}) e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \quad (4.24)$$

(A.2) $\hat{=}$ Wellenpaket

Grenzfall ebene Welle für

$$\tilde{\psi}(\mathbf{p}) = \begin{cases} 1, & \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}_0 \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \Rightarrow \psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}} \quad (4.25)$$

Sepzialfall mit Wahrscheinlichkeit 1 für Wellenvektor \mathbf{k}_0 ;

Bei Wellenpaket mit kleiner Breite um \mathbf{k}_0 : hohe Wahrscheinlichkeit ein \mathbf{k} nahe \mathbf{k}_0 zu messen

\Rightarrow Analoge Wahrscheinlichkeitsinterpretation

$$\tilde{\rho}(\mathbf{p}) \sim \tilde{\psi}^*(\mathbf{p})\tilde{\psi}(\mathbf{p}) \quad (4.26)$$

Normierung:

$$1 = \int d^3r \psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) \quad (4.27)$$

$$= \int d^3r \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \int \frac{d^3p'}{(2\pi\hbar)^3} \tilde{\psi}^*(\mathbf{p}')\tilde{\psi}(\mathbf{p}) e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p}') \cdot \mathbf{r}} \quad (4.28)$$

$$= \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \int \frac{d^3p'}{(2\pi\hbar)^3} \tilde{\psi}^*(\mathbf{p}')\tilde{\psi}(\mathbf{p}) \underbrace{\int d^3r e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p}') \cdot \mathbf{r}}}_{=(2\pi\hbar)^3\delta^3(\mathbf{p}-\mathbf{p}')} \quad (4.29)$$

$$= \int d^3p \frac{\tilde{\psi}^*(\mathbf{p})\tilde{\psi}(\mathbf{p})}{(2\pi\hbar)^3} \quad (4.30)$$

$$\Rightarrow \tilde{\rho}(\mathbf{p}) = \frac{\tilde{\psi}^*(\mathbf{p})\tilde{\psi}(\mathbf{p})}{(2\pi\hbar)^3} \quad (4.31)$$

Damit Erwartungwert des Impulses:

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \int d^3p \tilde{\rho}(\mathbf{p})\mathbf{p} \quad (4.32)$$

$$\langle f(\mathbf{p}) \rangle = \int d^3p \tilde{\rho}(\mathbf{p})f(\mathbf{p}) \quad (4.33)$$

$$(4.34)$$

Es gilt:

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \int d^3 p \frac{\tilde{\psi}^*(\mathbf{p})\tilde{\psi}(\mathbf{p})}{(2\pi\hbar)^3} \mathbf{p} \quad (4.35)$$

$$= \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 r \int d^3 r' e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot (\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \mathbf{p} \psi^*(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}) \quad (4.36)$$

$$= \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 r \int d^3 r' [i\hbar \nabla e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot (\mathbf{r}-\mathbf{r}')}] \psi^*(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}) \quad (4.37)$$

$$= \int d^3 r \int d^3 r' \psi^*(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}) i\hbar \nabla \underbrace{\int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot (\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}_{=\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \quad (4.38)$$

$$= \int d^3 r \int d^3 r' \delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \psi^*(\mathbf{r}') (-i\hbar \nabla) \psi(\mathbf{r}) \quad (4.39)$$

$$= \int d^3 r \psi^*(\mathbf{r}) \frac{\hbar}{i} \nabla \psi(\mathbf{r}) \quad (4.40)$$

$$= \int d^3 r \psi^*(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{p}} \psi(\mathbf{r}) \quad (4.41)$$

Ebenso:

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \int d^3 r \psi^*(\mathbf{r}) \mathbf{r} \psi(\mathbf{r}) \quad (4.42)$$

$$= \int d^3 r \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \int \frac{d^3 p'}{(2\pi\hbar)^3} \tilde{\psi}^*(\mathbf{p}') \mathbf{r} \tilde{\psi}(\mathbf{p}) e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p}') \cdot \mathbf{r}} \quad (4.43)$$

$$= \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \int \frac{d^3 p'}{(2\pi\hbar)^3} \tilde{\psi}^* \tilde{\psi}(\mathbf{p}) \frac{\hbar}{i} \nabla_p \underbrace{\int d^3 r e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p}') \cdot \mathbf{r}}}_{=(2\pi\hbar)^3 \delta^3(\mathbf{p}-\mathbf{p}')} \quad (4.44)$$

$$= \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \tilde{\psi}^*(\mathbf{p}) \underbrace{\left(-\frac{\hbar}{i} \nabla_p\right)}_{\equiv \hat{\mathbf{r}} \text{ im Impulsraum}} \tilde{\psi}(\mathbf{p}) \quad (4.45)$$

Mit $\psi(\mathbf{r}, t)$ ist auch die Fouriertransformierte $\tilde{\psi}(\mathbf{p}, t)$ eindeutig festgelegt. Sie heißt Wellenfunktion im Impulsraum und ist eine äquivalente Darstellung des Zustands eines quantenmechanischen Systems. Ihr Betragsquadrat entspricht der Wahrscheinlichkeitsdichte im Impulsraum.

Zusammenfassung:

$$\begin{array}{ll}
 \text{Ortsraum} & \text{Impulsraum} \\
 \hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r} & \hat{\mathbf{r}} = -\frac{\hbar}{i}\nabla_{\mathbf{p}} \\
 \hat{\mathbf{p}} = \frac{\hbar}{i}\nabla & \hat{\mathbf{p}} = \mathbf{p}
 \end{array} \quad (4.46)$$

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \int d^3r \psi^*(\mathbf{r}, t) \hat{\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r}, t) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \tilde{\psi}^*(\mathbf{p}, t) \hat{\mathbf{r}} \tilde{\psi}(\mathbf{p}, t) \quad (4.47)$$

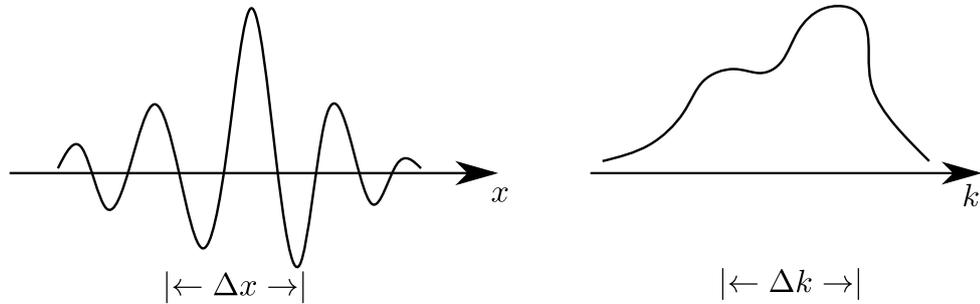
$$\langle \mathbf{p} \rangle = \int d^3r \psi^*(\mathbf{r}, t) \hat{\mathbf{p}} \psi(\mathbf{r}, t) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \tilde{\psi}^*(\mathbf{p}, t) \hat{\mathbf{p}} \tilde{\psi}(\mathbf{p}, t) \quad (4.48)$$

$$\langle f(\mathbf{r}) \rangle = \int d^3r \psi^*(\mathbf{r}, t) f(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, t) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \tilde{\psi}^*(\mathbf{p}, t) f(\hat{\mathbf{r}}) \tilde{\psi}(\mathbf{p}, t) \quad (4.49)$$

$$\langle f(\mathbf{p}) \rangle = \int d^3p \tilde{\psi}^*(\mathbf{p}, t) f(\hat{\mathbf{p}}) \tilde{\psi}(\mathbf{p}, t) = \int d^3p \tilde{\psi}^*(\mathbf{p}, t) f(\mathbf{p}) \tilde{\psi}(\mathbf{p}, t) \quad (4.50)$$

4.3 Die Heisenberg'sche Unschärferelation

Betrachte Wellenpaket in 1d



Definition der "Breiten" $\Delta x, \Delta k$ durch Varianz:

$$(\Delta x)^2 \equiv \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \quad (4.51)$$

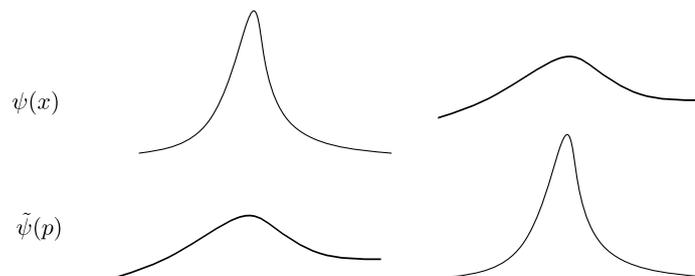
$$(\Delta k)^2 \equiv \langle (k - \langle k \rangle)^2 \rangle = \langle k^2 \rangle - \langle k \rangle^2 \quad (4.52)$$

Beispiel Gauß-Paket:

$$|\psi(x, 0)|^2 \sim e^{-\frac{x^2}{2d^2}} \Rightarrow \Delta x = d \quad (4.53)$$

$$|\tilde{\psi}(k, 0)|^2 \sim e^{-2d^2(k-k_0)^2} \Rightarrow \Delta k = \frac{1}{2d}, \Delta p = \frac{\hbar}{2d} \quad (4.54)$$

\Rightarrow Schmal im Ortsraum \Leftrightarrow breit im Impulsraum und umgekehrt



Gauß-Paket: $\Delta p \cdot \Delta x = \frac{\hbar}{2}$, vergleiche mit Optik, $\Delta x \cdot \Delta k \approx 1$

Für beliebige Wellenfunktionen zu fester Zeit t :

$$\boxed{1d : \Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad 3d : \Delta r_i \cdot \Delta p_i \geq \frac{\hbar}{2} \quad i = 1, 2, 3} \quad (4.55)$$

Heisenberg 1927

Beweis später

Beispiel 1d Gauß-Paket:

$$(\Delta x)^2 = \underbrace{d^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 d^2}}_{\text{zerfließen}} \quad (\Delta p)^2 = \frac{\hbar^2}{4d^2} \quad (4.56)$$

$$\Rightarrow \Delta p \cdot \Delta x = \frac{\hbar}{2} \sqrt{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{2m^2 d^4}} \geq \frac{\hbar}{2} \quad (4.57)$$

Physikalische Bedeutung:

a) "Unschärfe": Breite von Wahrscheinlichkeitsverteilungen

Nicht das Teilchen ist unscharf oder ausgeschmiert, sondern unsere Kenntnis davon
 \Rightarrow Unbestimmtheit

Wichtig: Diese Unbestimmtheit ist *prinzipieller Natur* und nicht mit beschränkter Messgenauigkeit zu verwechseln. Die Unschärferelation ist ein Naturgesetz und gilt auch für unendlich auflösende Messapparate!

Umgekehrt: $\hbar \rightarrow 0$, klassischer Grenzfall ohne Unschärfe.

\Rightarrow Unschärferelation erst bei hinreichender Messauflösung wahrnehmbar!

b) \Rightarrow Begriff der Teilchentrajektorie verliert seinen (fundamentalen) Sinn, nur effektiv richtig

Größenordnungen:

$$e^- \text{ im Atom: } \Delta x \approx 10^{-10} m \quad \Delta p \approx 10^{-24} kg \frac{m}{s} \quad (4.58)$$

$$\Rightarrow \Delta x \cdot \Delta p \approx \hbar \quad (4.59)$$

Unbestimmtheit der Geschwindigkeit:

$$\Delta v = \frac{\Delta p}{m} \approx 10^6 \frac{m}{s} !!! \quad (4.60)$$

$$\text{Staubteilchen: } m = 10^{-6} kg \quad \Delta v = 10^{-4} \frac{m}{s} \quad (4.61)$$

$$\Rightarrow \Delta x \geq 10^{-24} m \quad \text{irrelevant} \quad (4.62)$$

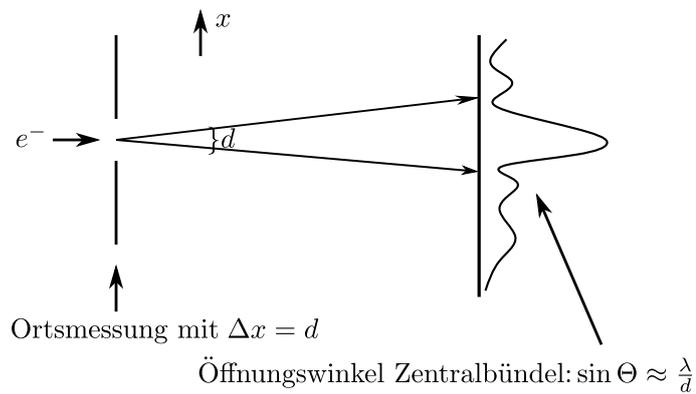
c) Aussage gilt für Messungen zur selben Zeit t , nicht für Messungen zu verschiedenen Zeitpunkten

d) Mathematisch: Unschärferelation ist Eigenschaft der Fouriertransformation
 Scharfer Impuls $\hat{=}$ ebene Welle, nicht lokalisierbar!

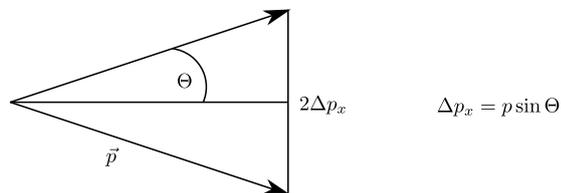
Physikalisch: Unschärfe entspricht Breiten in Wahrscheinlichkeitsdichten

Illustration:

Beugung am Spalt



$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi\hbar}{p} \Rightarrow$ Teilchen haben p_x -Komponente



$$\Rightarrow \Delta x \cdot \Delta p_x \approx d \cdot p \sin \Theta = dp \frac{\lambda}{d} = h \quad (4.63)$$

Beachte: Verkleinern von d führt zu größeren $\sin \Theta$!

4.4 Das Komplementaritätsprinzip (Bohr)

Einfluss der Messapparatur auf System:

- notwendig, ohne Wechselwirkung keine Anzeige
- mikroskopisch, unterliegt selbst der Quantenphysik
- unkontrolliert, unvorhersagbar!
- erzeugt Unschärfen

Komplementaritätsprinzip:

Koordinaten und Impulse bilden komplementäre Variablen, ihre gleichzeitige Bestimmung ist ausgeschlossen, weil sie inkompatible experimentelle Anordnungen erfordert

- Dynamische Variablen heißen kompatibel, wenn sie gleichzeitig scharf bestimmt werden können
- Die gleichzeitige Bestimmung eines vollständigen Satzes kompatibler Variablen stellt die maximale gleichzeitige Information über ein Quantensystem dar. Damit ist ψ vollständig festgelegt
- Paradoxie Welle \leftrightarrow Teilchen durch Unschärferelation aufgehoben
- Vollständige Beschreibung eines Systems durch komplementäre Variablen und deren Bestimmung durch Experimente

4.5 Die Energie-Zeit-Unschärferelation

$$\begin{array}{ccc} \text{Teilchen} & - & \text{Welle} \\ \mathbf{p} & & \mathbf{k} \\ E & & \omega \end{array} \quad (4.64)$$

Beziehung zwischen Energie und Zeit ähnlich wie bei \mathbf{x}, \mathbf{k} über Fouriertrafo

$$f(t) = \int d\omega \tilde{f}(\omega) e^{i\omega t} \quad (4.65)$$

Es gibt eine analoge Relation:

$$\Delta t \cdot \Delta E \geq \frac{\hbar}{2} \quad (4.66)$$

Deutung: Ort-Impuls-Unschärfe gilt bei fester Zeit t

Hier: E ist dynamische Variable wie \mathbf{r}, \mathbf{p} , aber t ist Parameter, Δt keine Breite einer Verteilung! \Rightarrow Zeitintervall für ein Ereignis

Bsp. freie Teilchen, 1d:

$$\Rightarrow \Delta t \simeq \frac{\Delta x}{v} \quad (4.67)$$

Zeitraum für das Passieren eines Punktes

Konsequenz aus Impulsunschärfe:

$$\Delta p \Rightarrow \Delta k \Rightarrow \Delta \omega \quad \text{wegen } \omega(k) \quad (4.68)$$

$$\Rightarrow \Delta E = \frac{dE}{dp} \Delta p = \frac{d\omega}{dk} \Delta p = v \Delta p \quad (4.69)$$

Betrachte Wellenpaket, Bewegung mit $v = \frac{d\omega}{dk}$, Breite Δx

Wann passiert das Wellenpaket (Teilchen) einen bestimmten Punkt x_0 ? Messung muss Δt dauern, bis Δx an x_0 vorbeigelaufen ist $\Rightarrow v = \Delta x / \Delta t$

$$\Rightarrow \Delta E \cdot \Delta t = \Delta x \Delta p \quad (4.70)$$

Allgemeines System:

Gegeben sei ein Zustand ψ als Superposition aus zwei stationären Zuständen

$$\psi_1(\mathbf{r}, t) = \psi_1(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_1 t} \quad (4.71)$$

$$\psi_2(\mathbf{r}, t) = \psi_2(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_2 t} \quad (4.72)$$

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_1(\mathbf{r}, t) + \psi_2(\mathbf{r}, t) \quad (4.73)$$

$$\Rightarrow \rho(\mathbf{r}, t) = |\psi_1(\mathbf{r})|^2 + |\psi_2(\mathbf{r})|^2 + 2\text{Re}\psi_1^*(\mathbf{r})\psi_2(\mathbf{r})e^{i/\hbar(E_1-E_2)t} \quad (4.74)$$

Oszilliert zeitlich zwischen Extremwerten

$$(|\psi_1|^2 - |\psi_2|^2) \text{ und } (|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2) \quad (4.75)$$

Periode $T = \frac{\hbar}{|E_1 - E_2|}$

$\hat{=}$ charakteristisches Zeitintervall für zeitliche Veränderung des Systems

\Rightarrow Messungen zu Zeiten t_1 und t_2 mit

$\Delta t = |t_1 - t_2| < T$: Wahrscheinlichkeitsverteilungen sehen nahezu gleich aus

\Rightarrow Um Veränderung/Entwicklung zu sehen, muss

$$\Delta t \Delta E \geq \hbar \quad (4.76)$$

5 Formalismus der Quantenmechanik

5.1 Der Hilbertraum

Menge aller normierbarer, komplexer Funktionen in 1d:

$$\mathcal{H}' = \left\{ \psi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C} \mid \int dx |\psi(x)|^2 < \infty \right\} \quad (5.1)$$

\mathcal{H}' ist ein komplexer Vektorraum:

Addition: $\psi_1 + \psi_2 = \psi$; für $\psi_1, \psi_2 \in \mathcal{H}'$ ist auch $\psi \in \mathcal{H}'$

$$\int dx |\psi(x)|^2 = \int dx (\psi_1^* \psi_1 + \psi_2^* \psi_2 + \psi_1 \psi_2^* + \psi_1^* \psi_2) \quad (5.2)$$

$$\psi_1^* \psi_2 + \psi_2^* \psi_1 = |\psi_1| |\psi_2| (e^{i(\Theta_2 - \Theta_1)} + e^{-i(\Theta_2 - \Theta_1)}) \quad (5.3)$$

$$= 2 |\psi_1| |\psi_2| \cos(\Theta_2 - \Theta_1) \quad (5.4)$$

$$\leq 2 |\psi_1| |\psi_2| \underbrace{\leq}_{(|\psi_1| - |\psi_2|)^2 \geq 0} |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 \quad (5.5)$$

$$\Rightarrow \int dx |\psi(x)|^2 \leq 2 \int dx |\psi_1(x)|^2 + 2 \int dx |\psi_2(x)|^2 < \infty \quad (5.6)$$

Multiplikation mit Skalar:

$$(\alpha\psi)(x) = \alpha\psi(x) \quad \text{für } \alpha \in \mathbb{C}, \alpha\psi \in \mathcal{H}' \quad (5.7)$$

Vektorraum-Axiome gelten:

a) $\psi_1 + (\psi_2 + \psi_3) = (\psi_1 + \psi_2) + \psi_3$ Assoziativität

b) \exists Nullelement $\psi(x) + 0(x) = \psi(x)$ mit $0(x) = 0$

c) \exists Inverses $(-\psi)(x) = -\psi(x)$

d) $\alpha(\psi_1 + \psi_2) = \alpha\psi_1 + \alpha\psi_2$ Distributivität

e) $(\alpha + \beta)\psi = \alpha\psi + \beta\psi$ $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$

f) $(\alpha\beta)\psi = \alpha(\beta\psi)$

Def: Skalarprodukt für $\psi_1, \psi_2 \in \mathcal{H}'$

$$(\psi_1, \psi_2) \equiv \int dx \psi_1^*(x) \psi_2(x) \quad (5.8)$$

$$a) \quad (\psi_3, \psi_1 + \psi_2) = (\psi_3, \psi_1) + (\psi_3, \psi_2) \quad (5.9)$$

$$b) \quad (\psi_1, \alpha\psi_2) = \alpha(\psi_1, \psi_2) \quad (5.10)$$

$$c) \quad (\psi_1, \psi_2) = (\psi_2, \psi_1)^* \quad (5.11)$$

$$d) \quad (\psi, \psi) \geq 0 \quad (5.12)$$

Achtung: Aus $(\psi, \psi) = 0$ folgt nicht notwendig $\psi = 0$

wegen "Nullfunktionen" $\mathcal{N} = \{f \in \mathcal{H}' \mid \int dx |f|^2 = 0\}$

Funktionen mit $f(x) \neq 0$ nur für eine Menge von x mit Maß 0

Diese schließen wir aus!

$\Rightarrow \mathcal{H} = \frac{\mathcal{H}'}{\mathcal{N}}$ ist Vektorraum mit zusätzlich

$$e) (\psi, \psi) = 0 \Leftrightarrow \psi = 0 \quad (5.13)$$

Def: Norm $\|\psi\| = \sqrt{(\psi, \psi)}$

Schwarz'sche Ungleichung:

$$\|(\psi_1, \psi_2)\| \leq \|\psi_1\| \|\psi_2\| \quad (5.14)$$

Beweis:

$$\left(\psi_1 - \psi_2 \frac{(\psi_2, \psi_1)}{(\psi_2, \psi_2)}, \psi_1 - \psi_2 \frac{(\psi_2, \psi_1)}{(\psi_2, \psi_2)} \right) \geq 0 \quad (5.15)$$

$$(\psi_1, \psi_1) - \frac{|(\psi_2, \psi_1)|^2}{(\psi_2, \psi_2)} - \frac{|(\psi_2, \psi_1)|^2}{(\psi_2, \psi_2)} + \frac{|(\psi_2, \psi_1)|^2}{(\psi_2, \psi_2)} = \quad (5.16)$$

$$(\psi_1, \psi_1) - \frac{|(\psi_2, \psi_1)|^2}{(\psi_2, \psi_2)} \geq 0 \quad (5.17)$$

$$(\psi_1, \psi_1)(\psi_2, \psi_2) \geq |(\psi_2, \psi_1)|^2 \quad \checkmark$$

Dreiecksungleichung:

$$\|\psi_1 + \psi_2\| \leq \|\psi_1\| + \|\psi_2\| \quad (5.18)$$

Def: ψ_1 und ψ_2 heißen orthogonal zueinander wenn $(\psi_1, \psi_2) = 0$

Satz: \mathcal{H} ist vollständig

d. h. jede Cauchyfolge ψ_n in \mathcal{H} konvergiert zu einem Limesvektor ψ in \mathcal{H}

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|\psi_n - \psi\| = 0 \quad (5.19)$$

Ein Raum mit diesen Eigenschaften heißt Hilbertraum

Def: Ein Funktionenraum $L^p(\mathcal{D})$ ist eine Menge von Funktionen $\{f\}$, die alle denselben Definitionsbereich \mathcal{D} haben und normierbar sind mit der Norm

$$\|f\| = \left(\int_{\mathcal{D}} dx |f(x)|^p \right)^{\frac{1}{p}} \quad (5.20)$$

Damit können wir identifizieren:

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}) \quad (5.21)$$

Raum quadratintegrierbarer komplexer Funktionen von 1 reellen Variablen

In der Physik häufige Spezialfälle sind Hilberträume mit endlich oder abzählbar unendlich vielen Dimensionen \Rightarrow separable Hilberträume

Verallgemeinerung auf 3d:

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3), \quad \int d^3r |\psi(\mathbf{r})|^2 < \infty \quad (5.22)$$

$$\text{Skalarprodukt: } (\psi_1, \psi_2) = \int d^3r \psi_1^*(\mathbf{r})\psi_2(\mathbf{r}) \quad (5.23)$$

Die Elemente des Vektorraumes werden auch als Vektoren bezeichnet
 $\Rightarrow \psi$ ist ein "Zustandsvektor"

5.2 Vollständige Funktionensysteme und physikalischer Zustandsraum

Geeignete Mengen von Vektoren bilden eine Basis

Sei $\{u_n \in \mathcal{H}\}$ ein Orthonormalsystem,

$$(u_n, u_m) = \delta_{nm} \quad (5.24)$$

Das System bildet eine Basis, falls

$$\forall \psi \in \mathcal{H} \quad \text{gilt} \quad \psi = \sum_n c_n u_n \quad (\text{Vollständigkeit}) \quad (5.25)$$

mit geeigneten Koeffizienten c_n

Dann ist

$$c_n = (u_n, \psi) \quad (5.26)$$

$$\psi = \sum_n u_n (u_n, \psi) \quad (5.27)$$

Ausgeschrieben in 1d:

$$\psi(x) = \sum_n u_n(x) \int dy u_n^*(y) \psi(y) = \int dy \sum_n u_n(x) u_n^*(y) \psi(y) \quad (5.28)$$

Muss für jede Funktion $\psi \in \mathcal{H}$ gelten!

$$\Rightarrow \psi(x) = \int dy \delta(x-y) \psi(y) \quad (5.29)$$

$$\Rightarrow \boxed{\sum_n u_n(x) u_n^*(y) = \delta(x-y)} \quad (5.30)$$

Vollständigkeitsrelation

$$\text{3d: } \boxed{\sum_n u_n(\mathbf{r}_1) u_n^*(\mathbf{r}_2) = \delta^3(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} \quad (5.31)$$

Bemerkung zur Fouriertrafo:

Für $\psi \in L^2(\mathbb{R}) \quad \exists \quad \tilde{\psi} \in L^2(\mathbb{R}) \quad \text{mit}$

$$\psi(x) = \int \frac{dk}{2\pi} \tilde{\psi}(k) e^{ikx} = \int \frac{dk}{2\pi} \tilde{\psi}(k) u_k(x) \quad (5.32)$$

Ist dies eine Entwicklung nach Basisfunktionen $\{u_k\}$ mit $k \in \mathbb{R}$?

Nein, denn $u_k \notin L^2(\mathbb{R})$, nicht quadratintegrierbar!

$\{u_k\}$ heißt uneigentliche Basis

Physikalischer Zustandsraum

Postulat: Physikalische Zustände werden beschrieben durch Vektoren in einem Hilbertraum \mathcal{H}

$$\psi(\mathbf{r}, t), \quad t \text{ fest: } \psi(\mathbf{r}, t) \in L^2(\mathbb{R}^3) = \mathcal{H} \quad (5.33)$$

Superpositionsprinzip: Für Zustände ψ_1, ψ_2 ist

$$\psi = \alpha\psi_1 + \beta\psi_2 \quad \text{mit} \quad \alpha, \beta \in \mathbb{C} \quad (5.34)$$

wieder ein physikalischer Zustand, d. h. jeder Vektor in \mathcal{H} entspricht einem möglichen Zustand

Bemerkung: Linearkombinationen führen auf anders normierte ψ

Def: Äquivalenz von ψ_1, ψ_2 :

$$\psi_1 \sim \psi_2 \quad \Leftrightarrow \quad \psi_1 = \lambda\psi_2 \quad \text{mit} \quad \lambda \in \mathbb{C}, \lambda \neq 0 \quad (5.35)$$

Erinnerung: konstanter Phasenfaktor ändert nichts an $\rho(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ oder Erwartungswerten;

$\lambda \in \mathbb{R}$ ändert nicht die Wahrscheinlichkeitsverteilungen, nur die Norm

Genauer also:

Physikalische Zustände werden beschrieben durch Äquivalenzklassen in \mathcal{H}

$$\hat{\psi} = \{\phi \mid \phi \sim \psi\} \quad (5.36)$$

Für uns: normierbare Repräsentanten $\psi, \|\psi\| = 1$

5.3 Lineare Operatoren

Gegeben sei ein Hilbertraum \mathcal{H} und ein Teilraum $D_A \subset \mathcal{H}$

Ein Operator ist eine Abbildung:

$$\hat{A}: \psi \rightarrow \hat{A}\psi, D_A \rightarrow \mathcal{H} \quad (5.37)$$

D_A ist der Definitionsbereich von \hat{A}

\hat{A} ist linear, wenn $\hat{A}(\alpha\psi_1 + \beta\psi_2) = \alpha\hat{A}\psi_1 + \beta\hat{A}\psi_2$ für $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$

Beispiele: $\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}, \hat{H}$ sind lineare Operatoren

Linearer Integraloperator:

$$\hat{A}\psi(x) = \int dy A(x, y)\psi(y) \quad (5.38)$$

die Funktion $A(x, y)$ heißt Kern des Operators \hat{A}

Beispiel:

$$A(x, y) = \delta(x - y) \quad (5.39)$$

$$\hat{A}\psi(x) = \int dy \delta(x - y)\psi(y) = \psi(x) \quad (5.40)$$

$$\Rightarrow \hat{A} = \mathbb{1} \quad (5.41)$$

Def: Zu \hat{A} adjungierter Operator \hat{A}^\dagger

$$(\chi, \hat{A}\psi) = (\hat{A}^\dagger\chi, \psi) \quad \forall \psi \in D_A, \chi \in D_{A^\dagger} \quad (5.42)$$

\Rightarrow Regel:

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger \quad (5.43)$$

Def: \hat{A} heißt hermitesch, wenn

$$(\chi, \hat{A}\psi) = (\hat{A}\chi, \psi) \quad \forall \psi, \chi \in D_A, \text{ und } D_A \subseteq D_{A^\dagger} \quad (5.44)$$

Dann gilt für alle $\chi \in D_A$: $A^\dagger\chi = A\chi$

Def: \hat{A} heißt selbstadjungiert, wenn

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A}, D_{A^\dagger} = D_A \quad (5.45)$$

Ein selbstadjungierter Operator ist auch hermitesch (aber nicht umgekehrt!)

Bsp: $\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}$ sind selbstadjungiert

Hermitezitat von \hat{p}_i :

$$(\chi, \hat{p}_i \psi) = \int d^3r \chi^*(\mathbf{r}) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi(\mathbf{r})}{\partial r_i} \quad (5.46)$$

$$= - \int d^3r \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \chi^*(\mathbf{r})}{\partial r_i} \psi(\mathbf{r}) \quad (5.47)$$

$$= \int d^3r \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \chi(\mathbf{r})}{\partial r_i} \right)^* \psi(\mathbf{r}) = (\hat{p}_i \chi, \psi) \quad (5.48)$$

Selbstadjungiertheit komplizierter zu beweisen

Def: Wenn fur einen Operator \hat{A} auf \mathcal{H} und eine Zahl $a \in \mathbb{C}$ ein Vektor $\psi \in \mathcal{H}, \psi \neq 0$ existiert, so dass

$$\hat{A}\psi = a\psi, \quad (5.49)$$

so heit a Eigenwert und ψ Eigenvektor von \hat{A}

Satz: Eigenwerte hermitescher Operatoren sind reell

Bew:

$$\hat{A}\psi = a\psi \quad (5.50)$$

$$\Rightarrow (\psi, \hat{A}\psi) = a(\psi, \psi) \quad (5.51)$$

Andererseits ist

$$(\psi, \hat{A}\psi) = (\hat{A}\psi, \psi) = (a\psi, \psi) \quad (5.52)$$

$$= a^*(\psi, \psi) \quad (5.53)$$

$$\Rightarrow a = a^* \quad (5.54)$$

Satz: Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten hermitescher Op. sind orthogonal

Bew: Sei $\hat{A}\psi_1 = a_1\psi_1, \quad \hat{A}\psi_2 = a_2\psi_2, \quad a_1 \neq a_2$

$$\begin{aligned} (\psi_2, \hat{A}\psi_1) &= a_1(\psi_2, \psi_1) \\ (\hat{A}\psi_2, \psi_1) &= a_2(\psi_2, \psi_1) \end{aligned} \Rightarrow (a_2 - a_1)(\psi_2, \psi_1) = 0, \Rightarrow (\psi_1, \psi_2) = 0 \quad (5.55)$$

Entartung: Eigenvektoren eines hermiteschen Operators \hat{A} zum gleichen Eigenwert a spannen einen Teilraum auf

$$\hat{A}\psi_1 = a\psi_1, \quad \hat{A}\psi_2 = a\psi_2 \quad \text{Eigenraum zu } a \quad (5.56)$$

$$\Rightarrow \hat{A}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = a(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) \quad (5.57)$$

Die Basis kann orthonormiert werden

Satz (ohne Beweis): Die Anzahl der Eigenwerte eines hermiteschen Operators ist höchstens abzählbar unendlich

Def: Die Menge der Eigenwerte eines Operators heißt diskretes Spektrum

Zunächst: Nur diskretes Spektrum

Satz: Sei \hat{A} selbstadjungiert und besitze ein rein diskretes Spektrum. Dann spannen die Eigenvektoren von \hat{A} den gesamten Hilbertraum auf

Beweis siehe lineare Algebra:

Sei \hat{A} Operator auf C^n , Basis $\{\psi_n\}$

Darstellung durch Matrix

$$\hat{A} \rightarrow \underline{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & \dots & A_{1n} \\ A_{n1} & \dots & A_{nn} \end{pmatrix}, \quad \underline{A}^\dagger = A^{*T} \quad (5.58)$$

Matrixelemente:

$$A_{11} = (\psi_1, \hat{A}\psi_1), \dots, A_{1n} = (\psi_1, \hat{A}\psi_n) \quad (5.59)$$

Eigenwerte und -vektoren

$$\hat{A}e_i = \lambda_i e_i \quad (5.60)$$

In der Basis $\{e_i\}$: $\hat{A} = (\lambda_1, \lambda_2 \dots \lambda_n)$

\Rightarrow "Diagonalisierung" eines Operators $\hat{A} \hat{=} Bestimmung$ der EW und EV

Beispiel:

Teilchen im unendlich hohen Potenzialtopf, E_n, ψ_n

Hilbertraum: quadratintegrale Funktionen auf $[0, L]$ mit $\psi(0) = \psi(L) = 0$

\hat{H} wurde "diagonalisiert", $\Rightarrow \psi_n$ orthogonal, vollständig

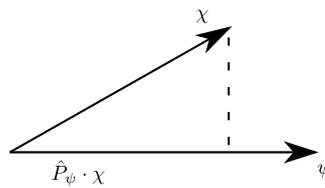
Projektionsoperatoren:

Sei $\psi \in \mathcal{H}$, $\|\psi\| = 1$

Def:

$$\hat{P}_\psi \chi = (\psi, \chi) \psi \quad (5.61)$$

Projektion des Vektors χ auf ψ -Achse



\hat{P}_ψ ist linear und selbstadjungiert, $\hat{P}_\psi^2 = \hat{P}_\psi$ idempotent

Sei $\{\psi_1, \dots, \psi_n\}$ Orthonormalbasis in Teilraum \mathcal{V}

Def:

$$\hat{P}_\mathcal{V} = \sum_i \hat{P}_{\psi_i} \quad (5.62)$$

$\hat{P}_\mathcal{V}$ ist linear und selbstadjungiert, $\hat{P}_\mathcal{V}^2 = \hat{P}_\mathcal{V}$

$\hat{P}_\mathcal{V}$ projiziert auf \mathcal{V} , $\hat{P}_\mathcal{V} \chi \in \mathcal{V}$

Def: Ein linearer, selbstadjungierter Operator heißt Projektionsoperator (Projektor), wenn

$$\hat{P}^2 = \hat{P} \quad (5.63)$$

5.4 Die Dirac-Notation

Historisch zwei Formulierungen der QM:

a) Wellenmechanik, Schrödinger

b) Matrizenmechanik (Operatoren), Heisenberg

Äquivalent, vereinheitlichte Darstellung durch Dirac-Notation:

Vektoren aus \mathcal{H}

$$|\psi\rangle, |\chi\rangle, \dots \quad \text{Ket} \quad (5.64)$$

$$\langle\psi| = |\psi\rangle^\dagger, \langle\chi| = |\chi\rangle^\dagger, \dots \quad \text{Bra} \quad (5.65)$$

Skalarprodukte:

$$\langle\psi_1 | \psi_2\rangle = (\psi_1, \psi_2) \quad (5.66)$$

Matixelemente:

$$\langle\chi | \hat{A} | \psi\rangle = (\chi, \hat{A}\psi) \quad (5.67)$$

Projektoren:

$$\hat{P}_\psi = |\psi\rangle\langle\psi| \quad (5.68)$$

Denn:

$$\hat{P}_\psi |\chi\rangle = (\psi, \chi)\psi = \langle\psi | \chi\rangle | \psi\rangle \quad (5.69)$$

$$= | \psi\rangle\langle\psi | \chi\rangle \quad (5.70)$$

Sei eine Basis gegeben durch $\{|n\rangle\}, n \in \mathbb{N}$

Orthonormiertheit:

$$\langle m | n\rangle = \delta_{mn} \quad (5.71)$$

Vollständigkeit:

$$| \psi\rangle = \sum_n c_n | n\rangle \quad (5.72)$$

Entwicklungskoeffizienten:

$$\langle m | \psi\rangle = \sum_n c_n \langle m | n\rangle = c_m \in \mathbb{C} \quad (5.73)$$

$$\Rightarrow | \psi\rangle = \sum_n | n\rangle\langle n | \psi\rangle \quad (5.74)$$

\Rightarrow Vollständigkeitsrelation:

$$\sum_n | n\rangle\langle n | = 1 \quad (5.75)$$

5.5 Observablen

... sind Messgrößen

Klassisch: Koordinaten + Impule von Teilchen, Energie, Drehimpuls etc.

QM, für gegebenen Zustand $|\psi\rangle$:

Messwerte einer Observablen sind statistisch verteilt
z. B. Impuls

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \int d^3r \psi^*(\mathbf{r}, t) \hat{\mathbf{p}} \psi(\mathbf{r}, t) \quad (5.76)$$

$$= (\psi, \hat{\mathbf{p}} \psi) \quad (5.77)$$

$$= \langle \psi | \hat{\mathbf{p}} | \psi \rangle \quad (5.78)$$

mit Varianz

$$(\Delta \hat{\mathbf{p}})^2 = \langle (\mathbf{p} - \langle \hat{\mathbf{p}} \rangle)^2 \rangle \quad (5.79)$$

Allgemein:

Observable \rightarrow lineare Operatoren

Erwartungswert einer beliebigen Observablen A im Zustand ψ :

$$\langle A \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \quad (5.80)$$

Messwerte sind reell!

$$\Rightarrow \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle^* = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle^\dagger \quad (5.81)$$

$$= \langle \psi | \hat{A}^\dagger | \psi \rangle \quad \forall \psi \quad (5.82)$$

$$(\Delta A)^2 = \langle (\hat{A} - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2 \quad (5.83)$$

Speziell für einen Eigenzustand:

$$\hat{A} | \psi \rangle = a | \psi \rangle, \quad \langle \psi | \psi \rangle = 1 \quad (5.84)$$

$$\Rightarrow \langle \psi | A | \psi \rangle = a, \quad (5.85)$$

$$(\Delta A)^2 = \langle \psi | \hat{A}^2 | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle^2 \quad (5.86)$$

$$= \langle \psi | \hat{A} \hat{A} | \psi \rangle - a^2 \quad (5.87)$$

$$= \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle a - a^2 \quad (5.88)$$

$$= a^2 - a^2 = 0 \quad (5.89)$$

d. h. die Observable ist scharf im Eigenzustand mit Messwert a

5.6 Kontinuierliches Spektrum

a) Betrachte Impulsoperator, 1d

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad (5.90)$$

wirkt auf Funktionen $\psi \in \mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$

Eigenwertgleichung:

$$\hat{p}\psi = p\psi \quad (5.91)$$

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) = p\psi(x) \quad (5.92)$$

Lösung:

$$\psi(x) = N e^{i \frac{p}{\hbar} x} = N e^{ikx} = N u_k(x) \text{ ebene Welle} \quad (5.93)$$

Aber: Nicht normierbar $(u_k, u_k) = \int dx 1 = \infty$

$$\Rightarrow u_k \notin \mathcal{H} \quad (5.94)$$

ist kein Eigenvektor, sondern uneigentlicher Eigenvektor zum uneigentlichen Eigenwert $p = \hbar k$

Def: Das kontinuierliche Spektrum eines Operators ist die Menge der uneigentlichen Eigenwerte

Bsp \hat{p} : Spektrum ist rein kontinuierlich
Jede reelle Zahl ist uneigentlicher Eigenwert

Orthogonalität:

$$(u_k, u_l) = 2\pi \delta(k - l), \quad k, l \text{ kontinuierlich} \in \mathbb{R} \quad (5.95)$$

Vollständigkeit:

$$\int \frac{dk}{2\pi} u_k^*(y) u_k(x) = \delta(x - y) \quad (5.96)$$

Vergleich diskretes Spektrum:

$$(u_m, u_n) = \delta_{mn} \quad (5.97)$$

$$\sum_n u_n(x) u_n^*(y) = \delta(x - y) \quad (5.98)$$

$$m, n \in \mathbb{N} \quad (5.99)$$

In Diracnotation: $u_k \rightarrow |k\rangle$ "Impulseigenzustand"

Beachte: $|k\rangle \notin \mathcal{H}$

Eigenwertgleichung:

$$\hat{p} |k\rangle = \hbar k |k\rangle \quad (5.100)$$

Orthonormalität und Vollständigkeit

$$\langle k | k' \rangle = 2\pi \delta(k - k') \quad (5.101)$$

$$\int \frac{dk}{2\pi} |k\rangle \langle k| = 1 \quad (5.102)$$

b) Ortsoperator

Multiplikationsoperator im Ortsraum

$$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x) \quad (5.103)$$

Annahme: Eigenfunktionen $\chi_q(x)$ zu Eigenwert q

$$\hat{x}\chi_q(x) = q\chi_q(x) \quad (5.104)$$

Dann ist

$$x\chi_q(x) = q\chi_q(x) \quad \forall x \in \mathbb{R} \quad (5.105)$$

$$\Rightarrow (x - q)\chi_q = 0 \quad (5.106)$$

$$\Rightarrow \chi_q(x) = 0 \quad \text{für } x \neq q \quad (5.107)$$

$\Rightarrow \chi_q$ ist keine Funktion! Setze $\chi_q(x) = \delta(x - q) \Rightarrow \chi_q \notin \mathcal{H}$

Diracnotation: "Ortseigenzustand"

$$\chi_q(x) \rightarrow |q\rangle \quad (5.108)$$

$$\hat{x} |q\rangle = q |q\rangle \quad (5.109)$$

$$\langle q | q \rangle = \int dx |\chi_q(x)|^2 \quad (5.110)$$

$$= \int dx \delta(x - q)\delta(x - q) = \delta(q - q) \quad (5.111)$$

$$= \delta(0) = \infty \quad (5.112)$$

$$\Rightarrow |q\rangle \notin \mathcal{H} \quad (5.113)$$

$\Rightarrow |q\rangle$ ist uneigentlicher Eigenvektor zum uneigentlichen Eigenwert q

Das Spektrum von \hat{x} ist rein kontinuierlich und besteht aus \mathbb{R}

Orthonormalität:

$$\langle q | q' \rangle = \int dx \delta(x - q) \delta(x - q') \quad (5.114)$$

$$= \delta(q - q') \quad (5.115)$$

Vollständigkeit:

$$\int dq \chi_q(x) \chi_q^*(y) = \int dq \delta(x - q) \delta(y - q) \quad (5.116)$$

$$= \delta(x - y) \quad (5.117)$$

$$\text{bzw. } \int dq |q\rangle\langle q| = 1 \quad (5.118)$$

Beachte: Vollständigkeit gilt, obwohl $\chi_q \notin \mathcal{H}$:

Sei $f(x) \in \mathcal{H}$ beliebig

$$f(x) = \int dq c(q) \chi_q(x) = \int dq c(q) \delta(x - q) = c(x) \quad \checkmark \quad (5.119)$$

5.7 Allgemeine Definition uneigentlicher Eigenvektoren

Sei \hat{A} ein linearer hermitescher Operator

Für $\psi \in \mathcal{H}$ ist

$$\langle A \rangle_\psi \equiv \frac{(\psi, A\psi)}{(\psi, \psi)} \quad (5.120)$$

$$(\Delta A)_\psi^2 = \frac{(\psi, (A - \langle A \rangle_\psi)^2 \psi)}{(\psi, \psi)} \quad (5.121)$$

Offensichtlich gilt

$(\Delta A)_\psi = 0 \Leftrightarrow \psi$ ist eigentlicher Eigenvektor

$$\hat{A}\psi = \langle A \rangle_\psi \psi \quad (5.122)$$

Sei $\varphi_n \in \mathcal{H}$ eine Folge von Vektoren mit

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \langle A \rangle_{\varphi_n} = a \quad (5.123)$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \langle \Delta A \rangle_{\varphi_n} = 0 \quad (5.124)$$

1.

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \varphi_n = \varphi \in \mathcal{H} \quad (5.125)$$

$$\Rightarrow \hat{A}\varphi = a\varphi \quad (5.126)$$

φ ist eigentlicher Eigenvektor

2.

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \varphi_n = \varphi \notin \mathcal{H} \quad (5.127)$$

φ ist uneigentlicher Eigenvektor zum uneigentlichen Eigenwert a

Vergleiche: Definition reeller Zahlen über Folgen von rationalen Zahlen, deren Grenzwert nicht rational ist:

$$x_0 = 1, \quad x_{n+1} = \frac{x_n + \frac{2}{x_n}}{2} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \sqrt{2} \quad (5.128)$$

Beispiel: Folge von Wellenfunktionen

$$\varphi_n(x) = \int \frac{dk}{2\pi} g_n(k) e^{ikx} \quad (5.129)$$

mit Folge

$$g_n(k) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 2\pi\delta(k - k_0) \quad (5.130)$$

$$\varphi = \lim_{n \rightarrow \infty} \varphi_n(x) = \int \frac{dk}{2\pi} 2\pi\delta(k - k_0) e^{ikx} \quad (5.131)$$

$$= e^{ik_0x} \notin \mathcal{H} \quad (5.132)$$

Erwartungswert Impuls:

$$\langle \hat{p} \rangle_{\varphi_n} = \frac{\int \frac{dk}{2\pi} \hbar k g_n^*(k) g_n(k)}{\int \frac{dk}{2\pi} g_n^*(k) g_n(k)} \quad (5.133)$$

$$n \rightarrow \infty : \rightarrow \frac{2\pi \int dk \hbar k \delta(k - k_0) \delta(k - k_0)}{2\pi \int dk \delta(k - k_0) \delta(k - k_0)} \quad (5.134)$$

$$,, = \frac{\hbar k_0 \delta(0),,}{\delta(0)} \quad (5.135)$$

$$= \hbar k_0 \quad (5.136)$$

$$(\Delta p)_{\varphi_n} \rightarrow 0 \quad (5.137)$$

$\Rightarrow \varphi$ entspricht uneigentlichem Eigenvektor des Impulsoperators \hat{p}

In der QM:

- Uneigentliche Eigenwerte bilden das kontinuierliche Spektrum
- Streuzustände beschrieben durch uneigentliche Eigenvektoren
- i. A. gemischtes Spektrum!

Bemerkungen zu uneigentlichen Eigenvektoren

- Kap 5.1: \mathcal{H} vollständig in dem Sinne, dass jede Cauchy-Folge gegen einen Grenzwert in \mathcal{H} konvergiert

$\varphi_n \in \mathcal{H} \rightarrow \varphi \notin \mathcal{H}$ keine Cauchy-Folge, da $\langle \varphi_n | \varphi_n \rangle \rightarrow \infty$

- Vollständigkeit von Eigenfunktionen

uneigentliche Eigenwerte sind notwendig, das diskrete Spektrum allein spannt nicht den ganzen Raum auf

Beispiel: Wellenpakete (endlich tiefer Potenzialtopf)

Streulösungen nicht durch Superposition endlich vieler gebundener Lösungen darstellbar!

5.8 Der Spektralsatz

Sei \hat{A} ein selbstadjungierter Operator,
 ψ_a ein eigentlicher oder uneigentlicher Eigenvektor zum Eigenwert a

Dann gilt:

- a) Das Spektrum von \hat{A} ist rein reell
- b) Eigentliche und uneigentliche Eigenvektoren sind orthogonal
- c) Die eigentlichen und uneigentlichen Eigenvektoren spannen zusammen den ganzen Hilbertraum auf

$$|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n|\psi\rangle + \int da |a\rangle \langle a|\psi\rangle \quad (5.138)$$

\Rightarrow Vollständigkeit:

$$\sum_n |n\rangle \langle n| + \int da |a\rangle \langle a| = 1 \quad (5.139)$$

Beispiele:

i) Impulsoperator:

$$\hat{p}|k\rangle = \hbar k|k\rangle \quad (5.140)$$

$$\langle k|k'\rangle = 2\pi\delta(k-k_0) \quad (5.141)$$

$$\int \frac{dk}{2\pi} |k\rangle \langle k| = 1 \quad (5.142)$$

$$\langle k|\psi\rangle = \int dx e^{-ikx}\psi(x) = \tilde{\psi}(k) \quad (5.143)$$

$$|\psi\rangle = \int \frac{dk}{2\pi} |k\rangle \langle k|\psi\rangle = \int \frac{dk}{2\pi} \tilde{\psi}(k) |k\rangle \quad (5.144)$$

ii) Ortsoperator

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle \quad (5.145)$$

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x-x') \quad (5.146)$$

$$\int dx |x\rangle \langle x| = 1 \quad (5.147)$$

$$\langle x|\psi\rangle = \int dx' \chi_x^*(x') = \int dx' \delta(x'-x)\psi(x') = \psi(x) \quad (5.148)$$

$$|\psi\rangle = \int dx |x\rangle \langle x|\psi\rangle = \int dx \psi(x) |x\rangle \quad (5.149)$$

iii) Hamiltonoperator des Teilchen im unendl. hohen Potenzialtopf; Spektrum rein diskret, bereits diskutiert

iv) Hamiltonoperator Teilchen im endlich tiefen Potenzialtopf (Kasten)

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x) \quad (5.150)$$

Das Spektrum hat beide Teile:

a) diskretes Spektrum $E_0 < E_1 < \dots < E_n$

$$|0\rangle, |1\rangle, \dots |N\rangle, \quad \langle i | j \rangle = \delta_{ij} \quad i, j = 1, 2, \dots N \quad (5.151)$$

b) kontinuierliches Spektrum
Streuzustände

$$\psi_k(x) \simeq |k\rangle, \quad k \in \mathbb{R}/\{0\} \quad (5.152)$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad |k\rangle \notin \mathcal{H} \quad (5.153)$$

zweifach entartet ($k \leftrightarrow -k$)

Normierung der Zustände:

$$\langle k_1 | k_2 \rangle = 2\pi \delta(k_1 - k_2) \quad (5.154)$$

$$\langle n | k \rangle = 0, \quad n = 0, 1, \dots N, \quad k \in \mathbb{R}/\{0\} \quad (5.155)$$

Für das gesamte System der eigentliche und uneigentlichen Vektoren gilt Vollständigkeit:

Für beliebiges $f(x) \in \mathcal{H}$

$$f(x) = \sum_{n=0}^N c_n \psi_n(x) + \int \frac{dk}{2\pi} c(k) \psi_k(x) \quad (5.156)$$

Bezeichnung:

$$f(x) = \sum_{\alpha} c_{\alpha} \psi_{\alpha}(x) \quad (5.157)$$

$$\text{Index } \alpha = \begin{cases} n & \in \{0, 1 \dots N\} \\ k & \in \mathbb{R}/\{0\} \end{cases} \quad (5.158)$$

Vollständigkeit:

$$\sum_{n=0}^N \psi_n(x) \psi_n^*(y) + \int \frac{dk}{2\pi} \psi_k(x) \psi_k^*(y) = \delta(x - y) \quad (5.159)$$

Diracnotation:

$$\sum_{n=0}^N |n\rangle \langle n| + \int \frac{dk}{2\pi} |k\rangle \langle k| = 1 \quad (5.160)$$

$$\text{oder } \int_{\mathcal{J}_\alpha} |\alpha\rangle \langle \alpha| = 1 \quad (5.161)$$

Spektraldarstellung von Operatoren

Sei \hat{A} selbstadjungiert, Spektrum rein diskret

$$\hat{A} |n\rangle = a_n |n\rangle \quad (5.162)$$

Zerlegung in Projektoren auf Eigenzustände:

$$\boxed{\hat{A} = \hat{A} \cdot 1 = \hat{A} \sum_n |n\rangle \langle n| = \sum_n a_n |n\rangle \langle n|} \quad (5.163)$$

Spektraldarstellung

Vergleiche Darstellung Matrizen durch Basis aus Eigenvektoren

$$\text{diag}(a_1, a_2, \dots, a_N) = a_1 \text{diag}(1, 0, \dots, 0) + \dots + a_N \text{diag}(0, \dots, 1) \quad (5.164)$$

Damit Def. Funktionen von Operatoren:

$$f(\hat{A}) = f(\hat{A}) \sum_n |n\rangle \langle n| \quad (5.165)$$

$$= \sum_n f(a_n) |n\rangle \langle n| \quad (5.166)$$

Vgl. Matrix

$$f(A) = \text{diag}(f(a_1) f(a_2) \dots f(a_N)) \quad (5.167)$$

Allgemeines Spektrum, diskret + kontinuierlich

$$\hat{A} = \sum_n a_n |n\rangle \langle n| + \int da a |a\rangle \langle a| = \int_{\mathcal{J}_\alpha} \alpha |\alpha\rangle \langle \alpha| \quad (5.168)$$

$$f(\hat{A}) = \sum_n f(a_n) |n\rangle \langle n| + \int da f(a) |a\rangle \langle a| = \int_{\mathcal{J}_\alpha} f(\alpha) |\alpha\rangle \langle \alpha| \quad (5.169)$$

5.9 Wahrscheinlichkeitsinterpretation + Messung

a) Diskreter Fall

Die Observable A habe ein diskretes Spektrum

$$\hat{A} |n\rangle = a_n |n\rangle \quad (5.170)$$

Beliebiger Zustand $|\psi\rangle$ ist Linearkombination

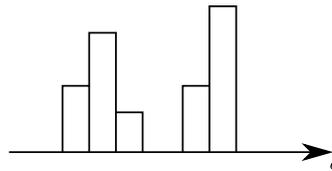
$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n | \psi \rangle, \quad \langle \psi | \psi \rangle = 1 \quad (5.171)$$

Betrachte Erwartungswert von \hat{A} :

$$\langle A \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \quad (5.172)$$

Ist dies der Wert von A im Zustand $|\psi\rangle$?

Nein! Statistische Verteilung



$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle = \sum_{m,n} \langle \psi | m \rangle \langle m | \hat{A} | n \rangle \langle n | \psi \rangle \quad (5.173)$$

$$\langle m | \hat{A} | n \rangle = a_n \delta_{m,n} \quad (5.174)$$

$$\Rightarrow \langle A \rangle = \sum_n \langle \psi | n \rangle a_n \langle n | \psi \rangle = \sum_n |c_n|^2 a_n \quad (5.175)$$

Dies hat die Form einer Wahrscheinlichkeitsverteilung!

$|c_n|^2 = p_n$ gibt die Wahrscheinlichkeit für Werte a_n an: mögliche Messwerte

Es muss gelten: $\sum_n p_n = 1$

$$\langle f(A) \rangle = \langle \psi | f(\hat{A}) | \psi \rangle \quad (5.176)$$

$$= \sum_{n,m} \langle \psi | n \rangle \langle n | f(a_m) | m \rangle \langle m | \psi \rangle \quad (5.177)$$

$$= \sum_{n,m} \langle \psi | n \rangle f(a_m) \delta_{mn} \langle m | \psi \rangle \quad (5.178)$$

$$= \sum_n |c_n|^2 f(a_n) \quad (5.179)$$

- i) Die einzigen Werte, die die Größe A annehmen kann, sind die Eigenwerte a_n
- ii) Die $p_n = |\langle n | \psi \rangle|^2$ geben die Wahrscheinlichkeit dafür an, dass A den Wert a_n annimmt
- iii) A nimmt mit Sicherheit den Wert a_n an, wenn $|\psi\rangle = |n\rangle$ Eigenzustand ist

b) Allgemeiner Fall

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle + \int da c(a) |a\rangle \quad (5.180)$$

$$c_n = \langle n | \psi \rangle, \quad c(a) = \langle a | \psi \rangle \quad (5.181)$$

$$\langle f(A) \rangle = \frac{\langle \psi | f(\hat{A}) | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (5.182)$$

$$= \frac{\sum_n f(a_n) \langle \psi | n \rangle \langle n | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} + \frac{\int da f(a) \langle \psi | a \rangle \langle a | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (5.183)$$

$$= \frac{\sum_n f(a_n) |c_n|^2}{\langle \psi | \psi \rangle} + \frac{\int da |c(a)|^2 f(a)}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (5.184)$$

$$p_n = \frac{|c_n|^2}{\langle \psi | \psi \rangle}, \quad \rho(a) = \frac{|c(a)|^2}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (5.185)$$

- i) Die einzigen Werte, die die Größe A annehmen kann, sind die Eigenwerte des ihr zugeordneten Operators \hat{A}
- ii) Die Wahrscheinlichkeit, dass A einen Wert a_n des diskreten Spektrums annimmt, ist p_n
- iii) Die Wahrscheinlichkeit, dass A einen Wert in $(a, a + da)$ annimmt, ist $\rho(a)da$

Die Summe aller Wahrscheinlichkeiten ist

$$\sum_n p_n + \int da \rho(a) = \frac{\sum_n \langle n | \psi \rangle \langle \psi | n \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} + \frac{\int da \langle a | \psi \rangle \langle \psi | a \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (5.186)$$

$$= \frac{\langle \psi | \left(\sum_n |n\rangle \langle n| + \int da |a\rangle \langle a| \right) | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (5.187)$$

$$= \frac{\langle \psi | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = 1 \quad \checkmark \quad (5.188)$$

Observable \Leftrightarrow selbstadjungierte Operatoren

$\langle A \rangle$ im Zustand $\psi \Leftrightarrow \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$

Messwerte \Leftrightarrow Eigenwerte vom Eigenzuständen

5.10 Kompatible Observablen

Sei $\hat{A} |\alpha\rangle = a |\alpha\rangle$ und sei B eine zweite Observable

Im Allgemeinen führt Messung von B an $|\alpha\rangle$ zu einer Zustandsänderung

Spezialfall: $|\alpha\rangle$ bleibt bei Messung von B erhalten \Rightarrow Eigenzustand von B

Observable A u. B heißen kompatibel (oder kommensurabel, oder verträglich), wenn alle Eigenzustände von \hat{A} auch Eigenzustände von \hat{B} sind

$$\hat{A} |\alpha\rangle = a |\alpha\rangle, \quad \hat{B} |\alpha\rangle = b |\alpha\rangle \quad (5.189)$$

In diesem Fall sind \hat{A} und \hat{B} gleichzeitig scharf messbar

Dann ist

$$\hat{A}\hat{B} |\alpha\rangle = \hat{A}b |\alpha\rangle = ba |\alpha\rangle = a\hat{B} |\alpha\rangle = \hat{B}\hat{A} |\alpha\rangle \quad (5.190)$$

$$\Rightarrow [\hat{A}, \hat{B}] = 0 \quad (5.191)$$

Zwei Observablen A, B sind kompatibel, wenn der Kommutator der zugeordneten Operatoren verschwindet

Beispiel: Ort und Impuls, Ortsraum

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{r}_x = x \quad (5.192)$$

$$[\hat{p}_x, \hat{r}_x] = \frac{\hbar}{i} \left[\frac{\partial}{\partial x}, x \right] = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial x} x - x \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad (5.193)$$

Zur Berechnung, betrachte Wirkung des Kommutators auf eine Funktion:

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} x - x \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x) = \frac{\partial}{\partial x} x \psi(x) - x \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) \quad (5.194)$$

$$= \psi(x) + x \cancel{\frac{\partial \psi}{\partial x}} - x \cancel{\frac{\partial \psi}{\partial x}} \quad (5.195)$$

$$\Rightarrow \left(\frac{\partial}{\partial x} x - x \frac{\partial}{\partial x} \right) = 1 \quad (5.196)$$

$$\left[\hat{p}_x, \hat{r}_x \right] = \frac{\hbar}{i} \quad (5.197)$$

\Rightarrow x -Komponenten von Ort und Impuls unverträglich!

Andererseits:

$$\left[\hat{p}_x, \hat{r}_y \right] = 0, \quad \left[\hat{p}_x, \hat{r}_z \right] = 0 \quad (5.198)$$

Insgesamt:

$$\boxed{[\hat{p}_j, \hat{r}_k] = \frac{\hbar}{i} \delta_{jk}} \quad (5.199)$$

Born-Jordan'sche Vertauschungsrelation

5.11 Unschärferelationen

Seien A, B Observablen mit $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$

Für diese gilt die allgemeine Unschärferelation

$$\boxed{\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|} \quad (5.200)$$

Beweis: Seien \hat{A}, \hat{B} selbstadjungiert

$$\Rightarrow [\hat{A}, \hat{B}]^\dagger = (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})^\dagger = (\hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger - \hat{A}^\dagger \hat{B}^\dagger) = -[\hat{A}, \hat{B}] \quad (5.201)$$

$$\Rightarrow [\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C} \quad \text{mit} \quad \hat{C} = \hat{C}^\dagger \quad (5.202)$$

Sei

$$\hat{A}' = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle, \quad \hat{B}' = \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle \quad (5.203)$$

$$[\hat{A}', \hat{B}'] = [\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle, \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle] \quad (5.204)$$

$$= [\hat{A}, \hat{B}] - \underbrace{[\langle \hat{A} \rangle, \hat{B}]}_{=0} - \underbrace{[\hat{A}, \langle \hat{B} \rangle]}_{=0} + \underbrace{[\langle \hat{A} \rangle, \langle \hat{B} \rangle]}_{=0} \quad (5.205)$$

$$(\Delta A)^2 = \langle \hat{A}'^2 \rangle - \langle \hat{A}' \rangle^2 = \langle \hat{A}'^2 \rangle \quad (5.206)$$

$$= \langle \hat{A}^2 \rangle - 2\langle \hat{A} \rangle \langle \hat{A} \rangle + \langle \hat{A}^2 \rangle \quad (5.207)$$

$$\text{Ebenso} \quad (\Delta B)^2 = \langle \hat{B}'^2 \rangle \quad (5.208)$$

Betrachte allgemeine Linearkombination von \hat{A}', \hat{B}' :

$$F(\alpha) = \|(\alpha \hat{A}' - i\hat{B}')\psi\|^2 \geq 0, \quad \alpha \in \mathbb{R} \quad (5.209)$$

$$F(\alpha) = \left((\alpha \hat{A}' - i\hat{B}')\psi, (\alpha \hat{A}' - i\hat{B}')\psi \right) \quad (5.210)$$

$$\underbrace{=}_{(\hat{O}^\dagger \psi, \psi) = (\psi, \hat{O} \psi)} \left(\psi, (\alpha \hat{A}' + i\hat{B}')(\alpha \hat{A}' - i\hat{B}')\psi \right) \quad (5.211)$$

$$= \left(\psi, (\alpha^2 \hat{A}'^2 - \alpha i \underbrace{[\hat{A}', \hat{B}']}_{=i\hat{C}} + \hat{B}'^2)\psi \right) \quad (5.212)$$

$$= \alpha^2 (\Delta A)^2 + (\Delta B)^2 + \alpha \langle C \rangle \quad (5.213)$$

$$\geq 0 \quad \forall \alpha \in \mathbb{R} \quad (5.214)$$

Wähle α so, dass $F(\alpha)$ minimal wird, $\frac{dF}{d\alpha} = 0$

$$\alpha = -\frac{\langle C \rangle}{2(\Delta A)^2} \quad (5.215)$$

$$\Rightarrow \frac{\langle C \rangle^2}{4(\Delta A)^2} + (\Delta B)^2 - \frac{\langle C \rangle^2}{2(\Delta A)^2} \geq 0 \quad (5.216)$$

$$(\Delta B)^2 - \frac{\langle \hat{C} \rangle^2}{4(\Delta A)^2} \geq 0 \quad (5.217)$$

$$\Rightarrow (\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq \frac{1}{4} \langle \hat{C} \rangle^2 \quad (5.218)$$

Spezialfall:

$$\hat{A} = \hat{r}_x, \hat{B} = \hat{p}_x \Rightarrow C = \hbar \quad (5.219)$$

ergibt Heisenberg'sche Unschärferelation

5.12 Die Postulate der Quantenmechanik

- Physikalische Zustände werden beschrieben durch normierte Vektoren (bzw. Äquivalenzklassen, Kap 5.1) eines komplexen Hilbertraums
- Den Observablen eines Systems entsprechen selbstadjungierte Operatoren. Die möglichen Messwerte sind die Eigenwerte der Operatoren
- Erwartungswert der Observablen A im Zustand ψ :

$$\langle A \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \quad (5.220)$$

- Die zeitliche Entwicklung von Zuständen wird durch die Schrödingergleichung bestimmt:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \psi \rangle = \hat{H} | \psi \rangle \quad (5.221)$$

- Wird am System im Zustand $| \psi \rangle$ die Observable A mit Messwert a gefunden, so geht das System bei der Messung in den zugehörigen Eigenzustand über (Zustandsreduktion)

5.13 Vektoren und Basen

Lineare Algebra:

Sei \mathcal{H} ein n -dim. komplexer Vektorraum mit Orthonormalbasis $\mathbf{e}_i, i = 1, \dots, n$

$$\text{Vektor } \mathbf{v} = \sum_{i=1}^n v_i \mathbf{e}_i \quad (5.222)$$

$$\text{Vektorkomponenten } v_i = (\mathbf{e}_i, \mathbf{v}) = \sum_j v_j \underbrace{(\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j)}_{\delta_{ij}} \quad (5.223)$$

\mathbf{v} ist Objekt im Vektorraum, unabhängig von der Basis, Komponenten basisabhängig

Beachte Skalarprodukt:

$$(\mathbf{v}, \mathbf{w}) = v_i^* w_i = (\mathbf{w}, \mathbf{v})^* = (\mathbf{w}, \mathbf{v})^\dagger \quad (5.224)$$

Matrizen:

$$A\mathbf{v} = \mathbf{w} \quad (5.225)$$

In Komponenten:

$$\sum_j A_{ij} v_j = w_i, \quad A_{ij} = (\mathbf{e}_i, A\mathbf{e}_j) \quad (5.226)$$

Basiswechsel:

$$\mathbf{e}'_i = \sum_j \mathbf{e}_j S_{ji}, \quad \mathbf{e}_k = \sum_i \mathbf{e}'_i S_{ik}^\dagger \quad (5.227)$$

mit

$$S_{ij} = (\mathbf{e}_i, \mathbf{e}'_j), \quad (S_{ij})^\dagger = (\mathbf{e}'_j, \mathbf{e}_i), \quad S_{ij}^\dagger \equiv (S^\dagger)_{ij} = (\mathbf{e}'_i, \mathbf{e}_j), \quad SS^\dagger = 1 \quad (5.228)$$

$$\mathbf{v} = \sum_i v'_i \mathbf{e}'_i = \sum_{i,j} v'_i S_{ji} \mathbf{e}_j = \sum_j v_j \mathbf{e}_j \quad (5.229)$$

$$\Rightarrow v_j = \sum_i S_{ji} v'_i, \quad v'_k = \sum_j S_{kj}^\dagger v_j \quad (5.230)$$

5.14 Die Ortsdarstellung

Analog im Hilbertraum $\psi \in \mathcal{H}$ mit $\psi(x) = \langle x | \psi \rangle$

$\Rightarrow \psi(x)$ ist Komponente von $|\psi\rangle$ bezüglich uneigentlicher Basis $\{|x\rangle | x \in \mathbb{R}\}$

$\Rightarrow |\psi\rangle$ ist basisunabhängiges Objekt, $\psi(x)$ sind Komponenten in Ortsdarstellung

Sei \hat{A} ein linearer Operator

$$(\hat{A}\psi)(x) = \langle x | \hat{A} | \psi \rangle = \int dy \langle x | \hat{A} | y \rangle \langle y | \psi \rangle = \int dy A(x, y)\psi(y) \quad (5.231)$$

Mit Operatorkern $A(x, y)$ in Matrixdarstellung, mit kontinuierlichen Indizes x, y
 “Matrizelemente” des Operators \hat{A}

Sei $\hat{A} = \hat{r}$ in 1d

$$r(x, y) = \langle x | \hat{r} | y \rangle = \langle x | y | y \rangle = y \langle x | y \rangle = y \delta(x - y) \quad (5.232)$$

$\Rightarrow \hat{r}$ in Ortsdarstellung ist diagonal \checkmark

$$(\hat{r}\psi)(x) = \int dy r(x, y)\psi(y) = \int dy y\delta(x - y)\psi(y) = x\psi(x) \quad (5.233)$$

Sei $\hat{A} = \hat{p}$

$$p(x, y) = \langle x | \hat{p} | y \rangle = \int dz \chi_x^*(z) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \chi_y(z) \quad (5.234)$$

$$= \int dz \delta(z - x) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \delta(z - y) = \frac{\hbar}{i} \delta'(x - y) \quad (5.235)$$

$$\Rightarrow (\hat{p}\psi)(x) = \int dy p(x, y)\psi(y) \quad (5.236)$$

$$= \frac{\hbar}{i} \int dy \delta'(x - y)\psi(y) \quad (5.237)$$

$$= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) \quad (5.238)$$

5.15 Die Impulsdarstellung

$$\hat{p} | p \rangle = p | p \rangle, \quad \langle p | p' \rangle = 2\pi\hbar\delta(p' - p) \quad (5.239)$$

Wellenfunktion im Impulsraum (Fourier-Trafo)

$$\tilde{\psi}(p) = \langle p | \psi \rangle \quad (5.240)$$

Operator in Impulsdarstellung

$$(\tilde{A}\psi)(p) = \langle p | \hat{A} | \psi \rangle = \int dq \langle p | \hat{A} | q \rangle \langle q | \psi \rangle \quad (5.241)$$

$$= \int dq A(p, q) \tilde{\psi}(q) \quad (5.242)$$

Impulsoperator: $\hat{A} = \hat{p}$

$$p(k, q) = \langle k | \hat{p} | q \rangle = \langle k | q | q \rangle = q 2\pi\hbar \delta(k - q) \quad (5.243)$$

$$(\tilde{\hat{p}}\psi)(q) = \int \frac{dk}{2\pi\hbar} p(q, k) \tilde{\psi}(k) = \int \frac{dk}{2\pi\hbar} q 2\pi\hbar \delta(q - k) \tilde{\psi}(k) \quad (5.244)$$

$$= q \tilde{\psi}(q) \quad (5.245)$$

Ortsoperator: $\hat{A} = \hat{r}$

$$\langle p | \hat{r} | q \rangle = \int dx e^{-\frac{i}{\hbar}px} x e^{\frac{i}{\hbar}qx} \quad (5.246)$$

$$= -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} \int dx e^{\frac{i}{\hbar}(q-p)x} \quad (5.247)$$

$$= -\frac{\hbar}{i} 2\pi\hbar \delta'(q - p) \quad (5.248)$$

$$(\tilde{\hat{r}}\psi)(p) = \langle p | \hat{r} | \psi \rangle = \int \frac{dq}{2\pi\hbar} \langle p | \hat{r} | q \rangle \langle q | \psi \rangle \quad (5.249)$$

$$= \int \frac{dq}{2\pi\hbar} r(p, q) \tilde{\psi}(q) \quad (5.250)$$

$$= -\frac{\hbar}{i} \int dq \delta'(p - q) \tilde{\psi}(q) \quad (5.251)$$

$$= -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} \tilde{\psi}(p) \quad (5.252)$$

5.16 Allgemeine Darstellung

Basis für physikalisches System, i. A. diskrete und kontinuierliche Anteile

$$\{|\alpha\rangle\} = \{|n\rangle\} \cup \{|a\rangle\} \quad (5.253)$$

$$|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle \underbrace{\langle n | \psi \rangle}_{\equiv \psi_n} + \int da |a\rangle \underbrace{\langle a | \psi \rangle}_{\equiv \psi(a)} \quad (5.254)$$

diskr. Komponenten von ψ kont. Komp. von ψ

Matrixelemente eines linearen Operators

$$\hat{A}(\alpha, \beta) = \langle \alpha | \hat{A} | \beta \rangle \quad (5.255)$$

mit

$$A_{m,n} = \langle m | \hat{A} | n \rangle \quad (5.256)$$

$$A_{a,n} = \langle a | \hat{A} | n \rangle \quad (5.257)$$

$$A_{a,b} = \langle a | \hat{A} | b \rangle \quad (5.258)$$

α -Komponente des Vektors $\hat{A} | \psi \rangle$:

$$\langle \alpha | \hat{A} | \psi \rangle = \sum_{\beta} \langle \alpha | \hat{A} | \beta \rangle \langle \beta | \psi \rangle \quad (5.259)$$

Beispiel Energiedarstellung:

$$\hat{H} | n \rangle = E_n | n \rangle, \quad \hat{H} | e \rangle = E | e \rangle \quad (5.260)$$

$$\psi_n = \langle n | \psi \rangle, \quad \psi(E) = \langle e | \psi \rangle \quad (5.261)$$

$$H_{m,n} = \langle m | \hat{H} | n \rangle \quad (5.262)$$

usw.

5.17 Basiswechsel

Analog lineare Algebra

Beispiel: Orts- und Energiedarstellung (rein diskretes Spektrum o. B. d. A)

$$\text{Basen: } \{|x\rangle | x \in \mathbb{R}\}, \quad \{|n\rangle | n \in \mathbb{N}\} \quad (5.263)$$

Vollständigkeit von $\{|x\rangle\}$:

$$|n\rangle = \int dx |x\rangle \langle x | n\rangle \quad (5.264)$$

$\langle x | n\rangle = \varphi_n(x)$ Komponenten der E-Eigenzustände in Ortsbasis

Def: $S_{x,n} \equiv \langle x | n\rangle = \varphi_n(x)$

Beliebiger Zustand $|\psi\rangle$, Komponenten in E-Basis:

$$\psi_n = \langle n | \psi\rangle \quad (5.265)$$

Komponenten in Ortsbasis:

$$\psi(x) = \sum_n S_{x,n} \psi_n = \langle x | \psi\rangle = \sum_n \langle x | n\rangle \langle n | \psi\rangle \quad (5.266)$$

Umkehrung: $(S^\dagger)_{n,x} = S_{x,n}^* = \varphi_n^*(x) = \langle n | x\rangle$

Es ist

$$SS^\dagger(x, y) = \sum_n S_{x,n} (S^\dagger)_{n,y} = \sum_n S_{x,n} S_{y,n}^* \quad (5.267)$$

$$= \sum_n \varphi_n(x) \varphi_n^*(y) = \sum_n \langle x | n\rangle \langle y | n\rangle^* = \sum_n \langle x | n\rangle \langle n | y\rangle \quad (5.268)$$

$$= \langle x | y\rangle = \delta(x - y) \quad (5.269)$$

$$\Rightarrow SS^\dagger = 1 \Leftrightarrow \sum_n \varphi_n(x) \varphi_n^*(y) = \delta(x - y) \quad (5.270)$$

$$(S^\dagger S)_{n,m} = \int dx (S^\dagger)_{n,x} S_{x,m} = \int dx S_{x,n}^* S_{x,m} \quad (5.271)$$

$$= \int dx \varphi_n^*(x) \varphi_m(x) = \int dx \langle x | n\rangle^* \langle x | m\rangle \quad (5.272)$$

$$= \int dx \langle n | x\rangle \langle x | m\rangle = \delta_{n,m} \quad (5.273)$$

$$\Rightarrow S^\dagger S = 1 \Leftrightarrow \int dx \varphi_n^*(x) \varphi_m(y) = \delta_{m,n} \quad (5.274)$$

\Rightarrow Basiswechsel durch unitäre Abbildung S

6 Die zeitliche Entwicklung

6.1 Das Schrödingerbild

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle, \quad \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0 \quad (6.1)$$

Formale Lösung:

$$|\psi(t)\rangle = \underbrace{\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)}_{\equiv \hat{U}(t)} |\psi(0)\rangle \quad (6.2)$$

Es ist $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$

$$\Rightarrow \hat{U}^\dagger(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) = \hat{U}^{-1}(t) \quad (6.3)$$

$\hat{U}(t)$ heißt Zeitentwicklungsoperator und ist unitär, $\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger\hat{U} = 1$

$$\hat{U}(t) = 1 - \frac{i}{\hbar}t\hat{H} - \frac{1}{2}\frac{t^2}{\hbar^2}\hat{H}^2 + \dots \quad (6.4)$$

Operatorfunktion

Sei $\hat{H} |n\rangle = E_n |n\rangle$, mit $|n\rangle$ vollst. Orthonormalsystem

Allgemein:

$$f(\hat{H}) = \sum_n f(E_n) |n\rangle \langle n| \quad (6.5)$$

$$\Rightarrow \hat{U}(t) = \sum_n \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_n t\right) |n\rangle \langle n| \quad (6.6)$$

Damit

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\psi(0)\rangle = \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} |n\rangle \langle n | \psi(0)\rangle \quad (6.7)$$

$$\equiv \sum_n c_n(t) |n\rangle, \quad (6.8)$$

$$c_n(t) = \underbrace{\langle n | \psi(0)\rangle}_{c_n} e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \quad (6.9)$$

6.2 Das Heisenbergbild

Physikalische Observablen: Erwartungswerte, Matrixelemente

$$\langle \psi_1 | \hat{A}(t) | \psi_2 \rangle = \langle \psi_1(0) | e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} \hat{A}(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} | \psi_2(0) \rangle \quad (6.10)$$

$$\equiv \langle \psi_{H1} | \hat{A}_H(t) | \psi_{H2} \rangle \quad (6.11)$$

mit

$$| \psi_{Hi} \rangle \equiv | \psi_i(0) \rangle \quad (6.12)$$

$$A_H(t) \equiv e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} \hat{A}(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} \quad (6.13)$$

$\underbrace{\text{Zustände}}_{\text{zeitunabhängig}} \quad \text{und} \quad \underbrace{\text{Operatoren}}_{\text{zeitabhängig}} \quad \text{im Heisenbergbild}$

Zeitentwicklung des Systems jetzt in Operatoren anstatt in Zuständen!

$$\frac{\partial}{\partial t} | \psi_H \rangle = 0 \quad (6.14)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) = -\hat{H} \hat{A}_H + \hat{A}_H \hat{H} + i\hbar e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} \quad (6.15)$$

Zur kompakteren Notation definiert man:

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_H(t) \equiv \left(\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right)_H = U^\dagger \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} U \quad (6.16)$$

$$\Rightarrow \boxed{i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) = [\hat{A}_H, \hat{H}] + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_H(t)} \quad (6.17)$$

Heisenberggleichung

\Rightarrow Einfache Identifikation von Erhaltungsgrößen!

Sei $\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = 0$, dann ist $\frac{d \hat{A}_H}{dt} = 0 \Leftrightarrow [\hat{A}_H, \hat{H}] = 0$

Wegen $\frac{\partial}{\partial t} | \psi_H \rangle = 0$ ist dann auch $\frac{d}{dt} \langle \hat{A}_H \rangle = 0$

6.3 Ehrenfest'sches Theorem

Aus der Heisenberggleichung folgt sofort

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle A \rangle = \langle \psi_H | i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) | \psi_H \rangle \quad (6.18)$$

$$= \langle \psi_H | [\hat{A}_H(t), \hat{H}] + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_H(t) | \psi_H \rangle \quad (6.19)$$

$$\Rightarrow \boxed{i\hbar \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle + i\hbar \langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \rangle} \quad (6.20)$$

Gilt unabhängig vom Zeitentwicklungsbild!

Speziell: Sei

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{r}}) \quad (6.21)$$

$$[\hat{r}_j, \hat{H}] = \left[\hat{r}_j, \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \right] = i\hbar \frac{\hat{p}_j}{m} \quad (6.22)$$

$$[\hat{p}_j, \hat{H}] = [\hat{p}_j, V(\hat{\mathbf{r}})] = \frac{\hbar}{i} \left[\frac{\partial}{\partial r_j}, V(\hat{\mathbf{r}}) \right] = \frac{\hbar}{i} \nabla_j V(\mathbf{r}) \quad (6.23)$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} \langle \mathbf{r} \rangle = \frac{1}{m} \langle \mathbf{p} \rangle, \quad (6.24)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{p} \rangle = -\langle \nabla V(\mathbf{r}) \rangle \quad (6.25)$$

$$\Rightarrow \boxed{m \frac{d^2}{dt^2} \langle \mathbf{r} \rangle = -\langle \nabla V(\mathbf{r}) \rangle} \quad (6.26)$$

Achtung: \neq klassische Bewegungsgleichung, weil $\langle \nabla V(\mathbf{r}) \rangle \neq \nabla V(\langle \mathbf{r} \rangle)$

7 Der harmonische Oszillator

Hier: 1d

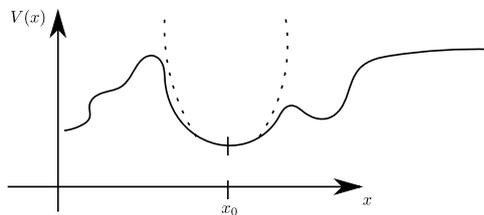
klassisch: lineares Kraftgesetz $F = -kx$

Für Teilchen mit Masse m an Feder mit Konstante k : $V(x) = \frac{k}{2}x^2$

Lineare Systeme exakt lösbar \Rightarrow untypisch

Existiert als separates System so nicht in der Natur

Anwendungen: Systeme mit kleinen Schwingungen, als Näherung:



In Umgebung von x_0 :

$$V(x) = \underbrace{V(x_0)}_{\text{irrelevante Konst.}} + \underbrace{V'(x_0)}_{=0, \text{ Minimum!}}(x - x_0) + V''(x_0)(x - x_0)^2 + \dots$$

$$\Rightarrow V(x) \approx V''(x_0)(x - x_0)^2 \quad (7.1)$$

Für kleine Auslenkungen ist jeder Schwingungsvorgang linear!

Hook'sches Gesetz:

$$F = -kx = m \frac{d^2x}{dt^2} \quad (7.2)$$

$$\Rightarrow x(t) = A \sin \omega t + B \cos \omega t \quad (7.3)$$

$$\text{mit } \omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (7.4)$$

QM Anwendungen: Molekülschwingungen, Phononen in Festkörpern, Photonen des Strahlungsfelds, allgemein in Quantenfeldtheorie

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega^2\hat{x}^2 \quad (7.5)$$

2 Lösungsmethoden

7.1 Lösung der Schrödingergleichung

Stationäre Schrödingergleichung:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi = E\psi \quad (7.6)$$

oder

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} = (z^2 - K)\psi \quad (7.7)$$

mit

$$z \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x, \quad K = \frac{2E}{\hbar\omega} \quad (7.8)$$

Betrachte zunächst $z \rightarrow \infty$ oder $z^2 \gg K$

Dort gilt:

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} \approx z^2\psi \quad (7.9)$$

$$\Rightarrow \psi(z) = Ae^{-\frac{z^2}{2}} + Be^{\frac{z^2}{2}} \quad (7.10)$$

$$\psi''(z) = Ae^{-\frac{z^2}{2}}(-1 + z^2) + Be^{\frac{z^2}{2}}(1 + z^2) \quad (7.11)$$

$B \stackrel{!}{=} 0$ wg. Normierbarkeit, $z^2 \gg 1$

$$\Rightarrow \psi \xrightarrow{z \rightarrow \infty} Ae^{-\frac{z^2}{2}} \quad (7.12)$$

Ansatz:

$$\psi(z) = h(z)e^{-z^2/2} \quad \text{mit} \quad \psi(z) \rightarrow 0 \quad \text{für} \quad z \rightarrow \infty \quad (7.13)$$

$$\psi'(z) = (h'(z) - zh(z))e^{-\frac{z^2}{2}} \quad (7.14)$$

$$\psi''(z) = (h''(z) - h'z - h - zh'(z) + z^2h(z))e^{-\frac{z^2}{2}} \quad (7.15)$$

$$= (h'' - 2h'z + (z^2 - 1)h)e^{-\frac{z^2}{2}} \quad (7.16)$$

Einsetzen Schrödingergleichung (7.7):

$$h'' - 2zh' + (K - 1)h = 0 \quad (7.17)$$

Frobenius-Methode: Schreibe $h(z)$ als Potenzreihe

$$h(z) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j z^j \quad (7.18)$$

$$\frac{dh}{dz} = \sum_{j=0}^{\infty} j a_j z^{j-1} \quad (7.19)$$

$$\frac{d^2h}{dz^2} = \sum_{j=2}^{\infty} j(j-1)a_j z^{j-2} = \sum_{j=0}^{\infty} (j+2)(j+1)a_{j+2} z^j \quad (7.20)$$

Einsetzen:

$$\sum_{j=0}^{\infty} [(j+1)(j+2)a_{j+2} - 2ja_j + (K-1)a_j]z^j = 0 \quad (7.21)$$

Soll für alle z gelten \Rightarrow jeder Koeffizient muss verschwinden

$$(j+1)(j+2)a_{j+2} - 2ja_j + (K-1)a_j = 0 \quad (7.22)$$

$$\Rightarrow a_{j+2} = \frac{2j+1-K}{(j+1)(j+2)}a_j \quad \text{Rekursionsformel} \quad (7.23)$$

Gerade j :

$$a_2 = \frac{1-K}{2}a_0 \quad (7.24)$$

$$a_4 = \frac{5-K}{12}a_2 = \frac{(5-K)(1-K)}{24}a_0 \quad (7.25)$$

$$\dots \quad (7.26)$$

Ungerade j :

$$a_3 = \frac{3-K}{6}a_1 \quad (7.27)$$

$$a_5 = \frac{7-K}{20}a_3 = \frac{(7-K)(3-K)}{120}a_1 \quad (7.28)$$

$$\dots \quad (7.29)$$

$$\Rightarrow h(z) = h_g(z) + h_u(z) \quad (7.30)$$

$$\text{mit } h_g(z) = a_0 + a_2z^2 + a_4z^4 + \dots \quad (7.31)$$

$$h_u(z) = a_1z + a_3z^3 + \dots \quad (7.32)$$

\Rightarrow zwei freie Konstanten a_0, a_1

Untersuche Normierbarkeit:

$$j \rightarrow \infty : a_{j+2} \approx \frac{2j}{j^2}a_j = \frac{2}{j}a_j \quad (7.33)$$

(große j dominant bei großen z)

$$\Rightarrow a_j \approx \frac{c}{(j/2)!} \quad (7.34)$$

$$\text{Probe: } a_{j+2} = \frac{c}{(\frac{j+2}{2})!} = \frac{c}{\frac{j+2}{2}(\frac{j}{2})!} \simeq \frac{2}{j}a_j \checkmark \quad (7.35)$$

Damit für große z :

$$h(z) \longrightarrow c \sum_j \frac{1}{(j/2)!} z^j \underset{k=\frac{j}{2}}{\simeq} c \sum_k \frac{1}{k!} z^{2k} \simeq c e^{z^2} \quad (7.36)$$

$$\Rightarrow \psi(z) = h(z)e^{-z^2/2} \text{ nicht normierbar!} \quad (7.37)$$

\Rightarrow Potenzreihe muss abbrechen, $\exists j_{\max} = n$

mit $a_{n+2} = 0$ (n gerade: $a_1 = 0$, n ungerade: $a_0 = 0$)

\Rightarrow Für n gilt mit Rekursionsformel (7.23)

$$2n + 1 - K \stackrel{!}{=} 0 \quad (7.38)$$

$$\Rightarrow K = \frac{2E}{\hbar\omega} = 2n + 1 \quad (7.39)$$

$$\boxed{E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)} \quad (7.40)$$

Erlaubte Energien für normierbare Lösungen!

Für erlaubte Werte wird die Rekursionsformel:

$$\Rightarrow a_{j+2} = \frac{-2(n-j)}{(j+1)(j+2)} a_j \quad (7.41)$$

$n = 0$:

$$j = 0, \quad a_2 = 0, a_1 = 0 \quad (7.42)$$

$$\Rightarrow h_0(z) = a_0 \quad (7.43)$$

$$\Rightarrow \psi_0(z) = a_0 e^{-z^2/2} \quad (7.44)$$

$n = 1$:

$$j = 1, \quad a_3 = 0, a_0 = 0 \quad (7.45)$$

$$\Rightarrow h_1(z) = a_1 z \quad (7.46)$$

$$\Rightarrow \psi_1(z) = a_1 z e^{-z^2/2} \quad (7.47)$$

$n = 2$:

$$j = 0, \quad a_2 = -2a_0, a_1 = 0 \quad (7.48)$$

$$j = 2, \quad a_4 = 0 \quad (7.49)$$

$$\Rightarrow h_2(z) = a_0(1 - 2z^2) \quad (7.50)$$

$$\psi_2(z) = a_0(1 - 2z^2)e^{-z^2/2} \quad (7.51)$$

$\Rightarrow h_n(z)$ ist Polynom von Grad n

Nur gerade Potenzen für n gerade

Nur ungerade Potenzen für n ungerade

Hermite'sche Polynome $H_n(z)$:

$$H_0 = 1 \quad (7.52)$$

$$H_1 = 2z \quad (7.53)$$

$$H_2 = 4z^2 - 2 \quad (7.54)$$

$$H_3 = 8z^3 - 12z \quad (7.55)$$

$$H_4 = 16z^4 - 48z^2 + 12 \quad (7.56)$$

$$\dots \quad (7.57)$$

Nach Normierung finden wir die Lösungen der stationären Schrödingergleichung:

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (7.58)$$

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(z) e^{-z^2/2} \quad (7.59)$$

7.2 Die algebraische oder Operatormethode

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega^2\hat{x}^2 \quad (7.60)$$

$$\text{Abkürzung: } z = \sqrt{m\omega/\hbar} x \quad (7.61)$$

$$\hat{p}_z = -i\frac{\partial}{\partial z} = \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}\hat{p} \quad (7.62)$$

$$\Rightarrow [\hat{p}_z, \hat{z}] = -i \quad (7.63)$$

Def:

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{z} + i\hat{p}_z) \quad \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{z} - i\hat{p}_z) \quad (7.64)$$

$$\Rightarrow \hat{p}_z = \frac{1}{i\sqrt{2}}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger) \quad \hat{z} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \quad (7.65)$$

Es ist

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \quad \Rightarrow \quad \hat{a}\hat{a}^\dagger = \hat{a}^\dagger\hat{a} + 1 \quad (7.66)$$

Schreibe \hat{H} in \hat{a}, \hat{a}^\dagger :

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}\hat{p}_z^2 + \frac{1}{2}\hbar\omega\hat{z}^2 \quad (7.67)$$

$$= \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right) \quad (7.68)$$

Eigenwertgleichung für \hat{H} :

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (7.69)$$

$\Rightarrow |\psi\rangle$ sind auch Lösung von

$$\hat{a}^\dagger\hat{a}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \quad \text{mit} \quad E = \hbar\omega\left(\lambda + \frac{1}{2}\right) \quad (7.70)$$

a) Alle Eigenwerte sind positiv, $\lambda \geq 0$:

$$\lambda = \langle\psi|\hat{a}^\dagger\hat{a}|\psi\rangle = \|\hat{a}|\psi\rangle\|^2 \geq 0 \quad (7.71)$$

b) Ist λ ein Eigenwert, so auch $\lambda + 1$

Betrachte $\hat{a}^\dagger|\psi\rangle$

$$\hat{a}^\dagger\hat{a}(\hat{a}^\dagger|\psi\rangle) = \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger|\psi\rangle = \hat{a}^\dagger(\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1)|\psi\rangle \quad (7.72)$$

$$= \hat{a}^\dagger(\lambda + 1)|\psi\rangle = (\lambda + 1)\hat{a}^\dagger|\psi\rangle \quad (7.73)$$

$$\|\hat{a}^\dagger|\psi\rangle\|^2 = \langle\psi|\hat{a}\hat{a}^\dagger|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1|\psi\rangle = \lambda + 1 \quad (7.74)$$

c) Ist $\lambda > 0$ ein Eigenwert, so auch $\lambda - 1$

Betrachte $\hat{a} | \psi \rangle$

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} (a | \psi \rangle) = (\hat{a} \hat{a}^\dagger - 1) \hat{a} | \psi \rangle \quad (7.75)$$

$$= \hat{a} (\hat{a}^\dagger \hat{a} - 1) | \psi \rangle = \hat{a} (\lambda - 1) | \psi \rangle = (\lambda - 1) a | \psi \rangle \quad (7.76)$$

$$\| a | \psi \rangle \|^2 = \langle \psi | \hat{a}^\dagger \hat{a} | \psi \rangle = \lambda \quad (7.77)$$

d) $\lambda \in \mathbb{N}_0 = \{0, 1, 2, 3, \dots\}$

Für $\lambda > 0$ EW sind auch $\lambda + 1, \lambda - 1$ EW

\Rightarrow Iterieren; nach oben unbeschränkt, nach unten beschränkt durch $\lambda \geq 0$

$\Rightarrow \exists n \in \mathbb{N}$ mit: $\lambda - n$ EW und $a | \lambda - n \rangle = 0$

$\Rightarrow \hat{a}^\dagger \hat{a} | \lambda - n \rangle = (\lambda - n) | \lambda - n \rangle = 0$

$\Rightarrow \lambda - n = 0 \Rightarrow \lambda = n \in \mathbb{N}$

Man nennt die Eigenwerte λ auch Besetzungszahlen, und den zugehörigen Operator $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ Besetzungszahloperator

e) $\lambda = 0$ ist einfacher Eigenwert

Sei $a | 0 \rangle = 0 \rightarrow a^\dagger a | 0 \rangle = 0$

Gibt es einen Zustand $| 0 \rangle$?

Umschreiben in Wellenfunktion

$$| 0 \rangle \rightarrow \varphi_0(z) \quad (7.78)$$

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{z} + i \hat{p}_z) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(z + \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad (7.79)$$

$$\hat{a} | 0 \rangle = 0 \rightarrow \left(z + \frac{\partial}{\partial z} \right) \varphi_0(z) = 0 \quad (7.80)$$

$$\Rightarrow \varphi_0(z) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-z^2/2}, \quad (\varphi_0, \varphi_0) = 1 \quad (7.81)$$

$$z \varphi_0(z) + \varphi_0'(z) = \frac{1}{\pi^{1/4}} (z e^{-z^2/2} - z e^{-z^2/2}) = 0 \quad \checkmark \quad (7.82)$$

f) Konstruktion Eigenvektoren

$$|0\rangle, \quad \lambda_0 = 0 \quad (7.83)$$

$$|1\rangle = \hat{a}^\dagger |0\rangle, \quad \lambda_1 = 1 \quad (7.84)$$

$$|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{a}^\dagger |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}^\dagger)^2 |0\rangle, \quad \lambda_2 = 2 \quad (7.85)$$

$$\dots |n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{a}^\dagger |n-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle, \quad \lambda_n = n \quad (7.86)$$

Problem gelöst!

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (7.87)$$

$$\hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \quad (7.88)$$

$$\hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \quad (7.89)$$

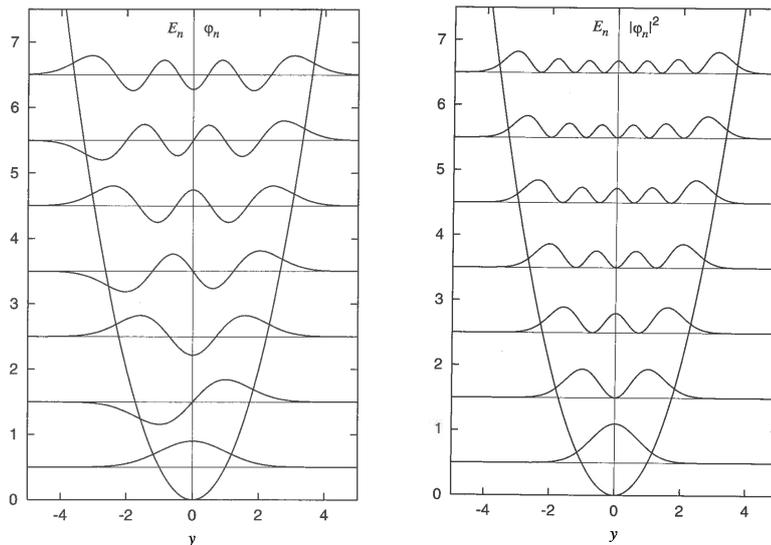
\hat{a}, \hat{a}^\dagger heißen Leiteroperatoren

”Nullpunktenergie” $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \neq 0$

Konstruktion der Eigenfunktionen:

Rekursiv aus φ_0 mit Leiteroperatoren \Rightarrow Übung

Wellenfunktionen und Aufenthaltswahrscheinlichkeiten:



Bildquelle: G.Münster, Quantentheorie, De Gruyter 2006

8 Drehimpuls

8.1 Der Drehimpulsoperator

Definition analog klassischer Mechanik:

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}, \quad \hat{L}_i = \epsilon_{ijk} \hat{r}_j \hat{p}_k \quad (8.1)$$

Selbstadjungiert: $\hat{L}_i^\dagger = \hat{L}_i$

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{L}_k \quad (8.2)$$

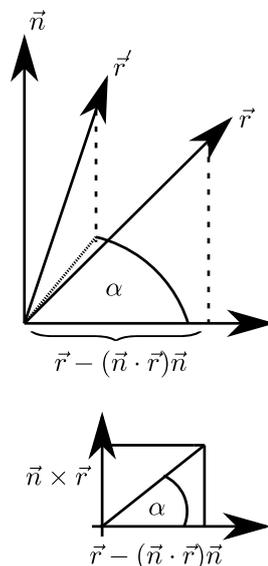
Verschiedene Komponenten sind untereinander nicht kommensurabel!

Betrachte Drehungen im Raum: Drehachse \mathbf{n} , $\mathbf{n}^2 = 1$, Drehwinkel α

$\Rightarrow \alpha = \alpha \mathbf{n}$ charakterisiert die Drehung

$$\mathbf{r} = (\mathbf{r} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n} + (\mathbf{r} - (\mathbf{r} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}) = \mathbf{r}_n + \mathbf{r}_\perp \quad (8.3)$$

$$\mathbf{r}' = \underbrace{R(\alpha)}_{\text{Drehmatrix}} \cdot \mathbf{r} = (\mathbf{r} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n} + (\mathbf{r} - (\mathbf{r} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}) \cos \alpha + \mathbf{n} \times \mathbf{r} \sin \alpha \quad (8.4)$$



Infinitesimale Drehung um $\delta\alpha$

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \mathbf{n} \times \mathbf{r} \delta\alpha + O(\delta\alpha^2) \quad (8.5)$$

$$= \mathbf{r} + \delta\alpha \times \mathbf{r} + \dots \quad (8.6)$$

Für rotationssymmetrische Probleme:
Wellenfunktion invariant unter Drehungen

$$\psi'(\mathbf{r}') = \psi(\mathbf{r}) \quad (8.7)$$

$$\psi'(R(\alpha)\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}) \quad (8.8)$$

$$\psi'(\mathbf{r}) = \psi(R(-\alpha)\mathbf{r}) \quad (8.9)$$

Infinitesimal:

$$\psi'(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} - \delta\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{r}) \quad (8.10)$$

$$= \psi(\mathbf{r}) - \nabla\psi(\mathbf{r}) \cdot (\delta\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{r}) \quad (8.11)$$

$$= \psi(\mathbf{r}) - \frac{i}{\hbar}(\delta\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{p}}\psi(\mathbf{r}) \quad (8.12)$$

$$= \psi(\mathbf{r}) - \frac{i}{\hbar}\delta\boldsymbol{\alpha} \cdot (\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}})\psi(\mathbf{r}) \quad (8.13)$$

$$= \left(1 - \frac{i}{\hbar}\delta\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{L}}\right)\psi(\mathbf{r}) \quad (8.14)$$

Für endliche Drehungen:

Zusammensetzen, $\boldsymbol{\alpha} = N\delta\boldsymbol{\alpha}$, $N \rightarrow \infty, \delta\boldsymbol{\alpha} \rightarrow 0$

$$\psi'(\mathbf{r}) = \lim_{N \rightarrow \infty} \underbrace{\left(1 - \frac{i}{\hbar}\delta\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{L}}\right) \dots \left(1 - \frac{i}{\hbar}\delta\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{L}}\right)}_{N \text{ Faktoren}} \psi(\mathbf{r}) \quad (8.15)$$

$$= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{i}{\hbar} \frac{\boldsymbol{\alpha}}{N} \cdot \hat{\mathbf{L}}\right)^N \psi(\mathbf{r}) \quad (8.16)$$

$$= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{L}}\right)\psi(\mathbf{r}) \quad \text{wg. } e^x = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{x}{N}\right)^N \quad (8.17)$$

$\Rightarrow \hat{\mathbf{L}}$ heißt "Erzeuger" für Drehungen (Gruppentheorie)

\Rightarrow Unitäre Operatoren

$$\hat{U}_R(\boldsymbol{\alpha}) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{L}}\right) \quad (8.18)$$

stellen die Drehgruppe SO(3) auf dem Hilbertraum dar

Transformation von Observablen:

$$\hat{A}' = \hat{U}_R(\boldsymbol{\alpha}) \hat{A} \hat{U}_R^\dagger(\boldsymbol{\alpha}) \quad (8.19)$$

Betrachte infinitesimale Transformation:

$$\hat{A}' = \hat{A} - \frac{i}{\hbar} \delta \boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{L}} \hat{A} + \frac{i}{\hbar} \hat{A} \delta \boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{L}} + \dots \quad (8.20)$$

$$= \hat{A} - \frac{i}{\hbar} [\delta \boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{L}}, \hat{A}] + O(\delta \alpha^2) \quad (8.21)$$

Man liest ab:

$$\hat{A} \text{ ist drehinvariant} \quad \Leftrightarrow \quad [\hat{L}_j, \hat{A}] = 0, \quad j = 1, 2, 3$$

Beispiele:

$$[\hat{\mathbf{p}}^2, \hat{L}_j] = 0, \quad [\hat{\mathbf{r}}^2, L_j] = 0, \quad [\hat{\mathbf{L}}^2, L_j] = 0 \quad (8.22)$$

8.2 Teilchen im Zentralpotenzial

$$V(\mathbf{r}) = V(r), \quad r^2 = \mathbf{r}^2$$

Stationäre Schrödingergleichung:

$$\left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (8.23)$$

Hamiltonoperator: $\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(r)$ ist dreihinvariant, $[\hat{H}, \hat{L}_j] = 0$

$\Rightarrow \hat{\mathbf{L}}$ ist Erhaltungsgröße, $\hat{\mathbf{L}}^2$ ist Erhaltungsgröße!

Umschreiben kinetische Energie: vgl. klassische Mechanik

$$\mathbf{L}^2 = \mathbf{r}^2 \mathbf{p}^2 - (\mathbf{r} \cdot \mathbf{p})^2 = r^2 p^2 - r^2 p_r^2 \quad (8.24)$$

mit Radialimpuls $rp_r \equiv \mathbf{r} \cdot \mathbf{p}$

$$\Rightarrow \mathbf{p}^2 = p_r^2 + \frac{1}{r^2} \mathbf{L}^2 \quad (8.25)$$

QM:

$$\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{L}} = \epsilon_{ijk} \epsilon_{imn} \hat{r}_j \hat{p}_k \hat{r}_m \hat{p}_n \quad (8.26)$$

$$= (\delta_{jm} \delta_{kn} - \delta_{jn} \delta_{km}) \hat{r}_j \hat{p}_k \hat{r}_m \hat{p}_n \quad (8.27)$$

$$= \hat{r}_m \hat{p}_n \hat{r}_m \hat{p}_n - \hat{r}_n \hat{p}_m \hat{r}_m \hat{p}_n \quad (8.28)$$

$$= \hat{r}_m (\hat{r}_m \hat{p}_n - [\hat{r}_m, \hat{p}_n]) \hat{p}_n \quad (8.29)$$

$$- \hat{r}_n \hat{p}_m (\hat{p}_n \hat{r}_m - [\hat{p}_n, \hat{r}_m]) \quad (8.30)$$

$$= \hat{r}^2 \hat{p}^2 + \frac{\hbar}{i} \delta_{mn} \hat{r}_m \hat{p}_n \quad (8.31)$$

$$- \hat{r}_n \hat{p}_n (\hat{r}_m \hat{p}_m - \underbrace{[\hat{r}_m, \hat{p}_m]}_{-\frac{\hbar}{i} \delta_{mm}}) + \hat{r}_n \hat{p}_m \underbrace{[\hat{p}_n, \hat{r}_m]}_{+\frac{\hbar}{i} \delta_{mn}} \quad (8.32)$$

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{r}^2 \hat{p}^2 - (\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}})^2 - \frac{\hbar}{i} \hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}} \quad (8.33)$$

Def. Radialimpuls?

Ansatz:

$$\hat{r} \tilde{p}_r \equiv \hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}} \quad (8.34)$$

Ortsdarstellung:

$$\tilde{p}_r = \frac{1}{r} \frac{\hbar}{i} r_j \frac{\partial}{\partial r_j} \quad (8.35)$$

$$r = \sqrt{\mathbf{r}^2}, \quad \frac{\partial r}{\partial r_j} = \frac{r_j}{r} \quad (8.36)$$

$$\frac{\partial}{\partial r_j} = \frac{\partial r}{\partial r_j} \frac{\partial}{\partial r} = \frac{r_j}{r} \frac{\partial}{\partial r} \quad (8.37)$$

$$\Rightarrow \tilde{p}_r = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r} \quad \not\Leftarrow \text{ denn} \quad (8.38)$$

$$(\chi, \tilde{p}_r \psi) = \int dr d\Omega r^2 \chi^*(\mathbf{r}) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r} \psi(r) \quad (8.39)$$

$$= - \int dr d\Omega \frac{\hbar}{i} \left[\frac{\partial}{\partial r} (r^2 \chi^*(\mathbf{r})) \right] \psi(\mathbf{r}) \quad (8.40)$$

$$= - \int dr d\Omega \frac{\hbar}{i} \left[(2r + r^2 \frac{\partial}{\partial r}) \chi^*(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) \quad (8.41)$$

$$= \int dr d\Omega r^2 \left[\frac{\hbar}{i} \left(\frac{2}{r} + \frac{\partial}{\partial r} \right) \chi(\mathbf{r}) \right]^* \psi(\mathbf{r}) \quad (8.42)$$

$$= (\tilde{p}_r^\dagger \chi, \psi) \quad (8.43)$$

$\Rightarrow \tilde{p}_r$ ist nicht hermitesch! Vgl. Diskussion in 2.10

Konstruiere hermiteschen Operator

$$\hat{p}_r \equiv \frac{1}{2} (\tilde{p}_r + \tilde{p}_r^\dagger) = \tilde{p}_r + \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \quad (8.44)$$

$$= \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \quad \text{Ortsdarstellung} \quad (8.45)$$

Dies ist der richtige konjugierte Impuls zu \hat{r} , denn

$$[\hat{p}_r, \hat{r}] = \frac{\hbar}{i} \quad (8.46)$$

Somit ist

$$-(\hat{r} \tilde{p}_r)^2 = - \left(\hat{r} \tilde{p}_r - \frac{\hbar}{i} \right) \left(\hat{r} \tilde{p}_r - \frac{\hbar}{i} \right) = -(\hat{r} \tilde{p}_r)^2 + 2 \frac{\hbar}{i} \hat{r} \tilde{p}_r + \hbar^2 \quad (8.47)$$

$$-\frac{\hbar}{i} \hat{r} \tilde{p}_r = -\frac{\hbar}{i} \left(\hat{r} \tilde{p}_r - \frac{\hbar}{i} \right) = -\frac{\hbar}{i} \hat{r} \tilde{p}_r - \hbar^2 \quad (8.48)$$

Damit Zerlegung Drehimpulsoperator (8.33) in Ortsdarstellung

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{r}^2 \hat{p}^2 - \hat{r}^2 \hat{p}_r^2 \quad (8.49)$$

$$\Rightarrow \hat{p}^2 = \hat{p}_r^2 + \frac{1}{r^2} \hat{\mathbf{L}}^2 \quad (8.50)$$

$$\Rightarrow \boxed{\hat{H} = \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{1}{2mr^2} \hat{\mathbf{L}}^2 + V(r)} \quad (8.51)$$

$\hat{H}, \hat{\mathbf{L}}^2$ gleichzeitig diagonalisierbar, d.h.

$$\hat{H} |E, \lambda\rangle = E |E, \lambda\rangle \quad (8.52)$$

$$\hat{\mathbf{L}}^2 |E, \lambda\rangle = \lambda |E, \lambda\rangle \quad (8.53)$$

\Rightarrow Radiale Schrödingergleichung:

$$\left(\frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\lambda}{2mr^2} + V(r) \right) |E, \lambda\rangle = E |E, \lambda\rangle \quad (8.54)$$

Übergang zu Kugelkoordinaten:

Beachte: $[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{r}] = 0$, denn $\hat{\mathbf{L}}^2$ enthält keine r -Differenziation

Außerdem

$$\hat{p}_r = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \quad (8.55)$$

$$\hat{p}_r^2 = -\hbar^2 \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) \quad (8.56)$$

Ansatz Wellenfunktion (Kugelsymmetrie!)

$$\psi(\mathbf{r}) = f(r)Y(\Theta, \varphi) \quad (8.57)$$

$$\hat{p}_r^2 \psi(\mathbf{r}) = \left(\hat{p}_r^2 f(r) \right) Y(\Theta, \varphi) \quad (8.58)$$

$$\hat{\mathbf{L}}^2 \psi(\mathbf{r}) = f(r) \hat{\mathbf{L}}^2 Y(\Theta, \varphi) = \lambda f(r) Y(\Theta, \varphi) \quad (8.59)$$

Erinnerung Laplaceoperator in Kugelkoordinaten:

$$\Delta = \sum_i \frac{\partial^2}{\partial r_i^2} = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \Delta_\Omega \quad (8.60)$$

mit

$$\Delta_\Omega = \frac{1}{\sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \Theta} \left(\sin \Theta \frac{\partial}{\partial \Theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \Theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (8.61)$$

Andererseits ist:

$$\hat{\mathbf{p}}^2 = -\hbar^2 \Delta = \hat{p}_r^2 + \frac{1}{\hat{r}^2} \hat{\mathbf{L}}^2 \quad (8.62)$$

Vergleich ergibt

$$\Rightarrow \boxed{\hat{\mathbf{L}}^2 = -\hbar^2 \Delta_\Omega} \quad (8.63)$$

Dies ist die Ortsdarstellung in Kugelkoordinaten

Ebenso Komponenten: $\mathbf{r} = r \mathbf{e}_r$

$$\nabla = \mathbf{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \mathbf{e}_\Theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \Theta} + \mathbf{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (8.64)$$

$$\Rightarrow L_1 = \frac{\hbar}{i} \left(-\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \Theta} - \cos \varphi \cot \Theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (8.65)$$

$$L_2 = \frac{\hbar}{i} \left(\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \Theta} - \sin \varphi \cot \Theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (8.66)$$

$$L_3 = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (8.67)$$

Damit lautet die radiale Schrödingergleichung in Kugelkoordinaten:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\lambda}{2mr^2} + V(r) \right) f(r) \cancel{Y(\Theta, \varphi)} = E f(r) \cancel{Y(\Theta, \varphi)} \quad (8.68)$$

Def: $u = r f(r)$

$$\boxed{\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\lambda}{2mr^2} + V(r) \right) u(r) = E u(r)} \quad (8.69)$$

$\hat{=}$ 1d Schrödingergleichung mit

$$V_{eff}(r) = V(r) + \frac{\lambda}{2mr^2} \quad (8.70)$$

für $r \geq 0$

Randbedingungen für $u(r)$:

- Bindungszustände quadratintegrabel

$$\Rightarrow \int d^3r |\psi(\mathbf{r})|^2 = \int dr |u(r)|^2 \int d\Omega |Y(\Theta, \varphi)|^2 < \infty \quad (8.71)$$

$\Rightarrow |u(r)| \sqrt{r} \rightarrow 0$ für $r \rightarrow \infty$

- Wenn $V(r)$ im Ursprung nicht singular ist, $u(0) = 0$

Sonst $f(r) \sim \frac{1}{r}$ und $\Delta \psi \sim \delta^3(\mathbf{r}) \nmid$ Schrödingergleichung

8.3 Spektrum des Drehimpulsoperators

Dimension $[\mathbf{L}]$: Wirkung

$\Rightarrow \hat{\mathbf{L}} \equiv \hbar \hat{\mathbf{M}}, \hat{\mathbf{M}}$ dimensionslos

$[\hat{M}_i, \hat{M}_j] = i\epsilon_{ijk} \hat{M}_k$ Drehimpulsalgebra

Komponenten nicht gleichzeitig diagonalisierbar

Aber $[\hat{\mathbf{M}}^2, \hat{M}_i] = 0$

Aufgabe: Finde Eigenwerte und Eigenvektoren von \mathbf{M}^2 und M_3

\Rightarrow Algebraische Methode, vgl. Harmonischer Oszillator

Eigenwertgleichungen:

$$\mathbf{M}^2 | \lambda, m \rangle = \lambda | \lambda, m \rangle \quad (8.72)$$

$$M_3 | \lambda, m \rangle = m | \lambda, m \rangle \quad (8.73)$$

mit

$$\langle \lambda, m | \lambda', m' \rangle = \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{mm'} \quad (8.74)$$

Es ist $\lambda \geq 0$ wegen

$$\| \hat{\mathbf{M}} | \lambda, m \rangle \|^2 = \langle \lambda, m | \hat{\mathbf{M}}^2 | \lambda, m \rangle \geq 0 \quad (8.75)$$

Def:

$$M_+ = M_1 + iM_2 \quad (8.76)$$

$$M_- = M_1 - iM_2 \quad (8.77)$$

$$(M_+)^{\dagger} = M_- \quad (8.78)$$

Man findet

$$a) \quad [\hat{M}_3, \hat{M}_{\pm}] = \pm \hat{M}_{\pm} \quad (8.79)$$

$$b) \quad [\hat{M}_+, \hat{M}_-] = 2\hat{M}_3 \quad (8.80)$$

$$c) \quad \hat{\mathbf{M}}^2 = \hat{M}_+ \hat{M}_- + \hat{M}_3^2 - \hat{M}_3 = \hat{M}_- \hat{M}_+ + \hat{M}_3^2 + \hat{M}_3 \quad (8.81)$$

Betrachte $\hat{M}_{\pm} | \lambda, m \rangle$; wegen $[\hat{\mathbf{M}}^2, \hat{M}_{\pm}] = 0$ ist

$$\hat{\mathbf{M}}^2(\hat{M}_{\pm} | \lambda, m \rangle) = \lambda \hat{M}_{\pm} | \lambda, m \rangle \quad (8.82)$$

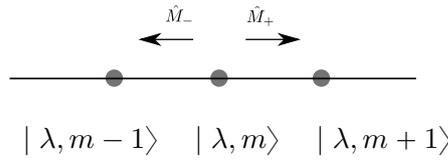
$\Rightarrow \hat{M}_{\pm} | \lambda, m \rangle$ ist Eigenvektor von $\hat{\mathbf{M}}^2$ mit Eigenwert λ

$$\hat{M}_3 \hat{M}_{\pm} | \lambda, m \rangle = (\hat{M}_{\pm} \hat{M}_3 \pm \hat{M}_{\pm}) | \lambda, m \rangle \quad (8.83)$$

$$= (m \pm 1) \hat{M}_{\pm} | \lambda, m \rangle \quad (8.84)$$

$\Rightarrow \hat{M}_{\pm} | \lambda, m \rangle$ ist Eigenvektor von \hat{M}_3 mit Eigenwert $m \pm 1$

$\Rightarrow \hat{M}_{\pm}$ sind Leiteroperatoren für m :



$$\| \hat{M}_{\pm} | \lambda, m \rangle \|^2 = \langle \lambda, m | \hat{M}_{\mp} \hat{M}_{\pm} | \lambda, m \rangle \quad (8.85)$$

$$= \langle \lambda, m | \hat{\mathbf{M}}^2 - \hat{M}_3^2 \mp \hat{M}_3 | \lambda, m \rangle \quad (8.86)$$

$$= \lambda - m^2 \mp m \geq 0 \quad (8.87)$$

Für

$$m > 0 \Rightarrow \lambda \geq m^2 + m \quad (8.88)$$

$$m < 0 \Rightarrow \lambda \geq m^2 - m \quad (8.89)$$

$$\Rightarrow \lambda \geq |m| (|m| + 1) \quad (8.90)$$

\Rightarrow Für festes λ sind die möglichen Werte von m beschränkt

Sei $m_{max} = l$

$$\Rightarrow M_+ | \lambda, l \rangle \stackrel{!}{=} 0 \quad (8.91)$$

$$\Rightarrow 0 = \| M_+ | \lambda, l \rangle \|^2 = \lambda - l^2 - l \quad (8.92)$$

$$\Rightarrow \lambda = l^2 + l = l(l + 1) \quad (8.93)$$

Für m_{min} :

$$\lambda - m_{min}^2 + m_{min} = 0 \quad (8.94)$$

$$\Rightarrow \lambda = m_{min}(m_{min} - 1) \quad (8.95)$$

$$\Rightarrow m_{min} = -l \quad (8.96)$$

\Rightarrow Mögliche Werte für m : $-l, -l + 1, \dots, l - 1, l$

$\Rightarrow 2l \in \mathbb{N}_0, \quad l \in \{0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots\}$

Wechsel Bezeichnung $| \lambda, m \rangle \rightarrow | l, m \rangle$; Insgesamt:

$$\mathbf{M}^2 | l, m \rangle = l(l + 1) | l, m \rangle \quad (8.97)$$

$$M_3 | l, m \rangle = m | l, m \rangle \quad (8.98)$$

mit $l \in \{0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots\}$ und $m \in \{l, l - 1, \dots, -l\}$

8.4 Spektrum des Bahndrehimpulses

Bisher benutzt: $[\hat{M}_j, \hat{M}_k] = \epsilon_{jkl} \hat{M}_l$, allgemeiner Drehimpuls

Es gibt noch zusätzliche Relationen für

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}, \quad \text{z. B.} \quad \hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{L}} = 0, \quad \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{L}} = 0 \quad (8.99)$$

Diese schränken das Spektrum ein

Satz: Für den Bahndrehimpuls sind die Eigenwerte von $\hat{\mathbf{M}}^2$ und \hat{M}_3 gegeben durch

$$\hat{\mathbf{M}}^2 |l, m\rangle = l(l+1) |l, m\rangle \quad (8.100)$$

$$\hat{M}_3 |l, m\rangle = m |l, m\rangle \quad (8.101)$$

mit $l \in \{0, 1, 2, 3, \dots\}$, $m \in \{-l, -l+1, \dots, l-1, l\}$

Beweis: zunächst Def. Hilfsgrößen (dimensionslos!)

$$\tilde{r}_i \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{r}_i, \quad \tilde{p}_i \equiv \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}} \hat{p}_i \quad (8.102)$$

$$\hat{a}_i \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (\tilde{r}_i + i\tilde{p}_i) \quad (8.103)$$

$$\hat{a}_i^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (\tilde{r}_i - i\tilde{p}_i) \quad (8.104)$$

Damit

$$\hat{a}_+ \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}_1 + i\hat{a}_2), \quad \hat{a}_+^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}_1^\dagger - i\hat{a}_2^\dagger) \quad (8.105)$$

$$\hat{a}_- \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}_1 - i\hat{a}_2), \quad \hat{a}_-^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}_1^\dagger + i\hat{a}_2^\dagger) \quad (8.106)$$

Man findet

$$[\hat{a}_+, \hat{a}_+^\dagger] = 1, \quad [\hat{a}_-, \hat{a}_-^\dagger] = 1, \quad [\hat{a}_+, \hat{a}_-] = 0 \quad (8.107)$$

Leiteroperatoren wie beim harmonischen Oszillator!

$$\hat{M}_3 = \frac{1}{\hbar} (\hat{r}_1 \hat{p}_2 - \hat{r}_2 \hat{p}_1) = \tilde{r}_1 \tilde{p}_2 - \tilde{r}_2 \tilde{p}_1 \quad (8.108)$$

$$= \frac{1}{2i} \left((\hat{a}_1 + \hat{a}_1^\dagger)(\hat{a}_2 - \hat{a}_2^\dagger) - (\hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger)(\hat{a}_1 - \hat{a}_1^\dagger) \right) \quad (8.109)$$

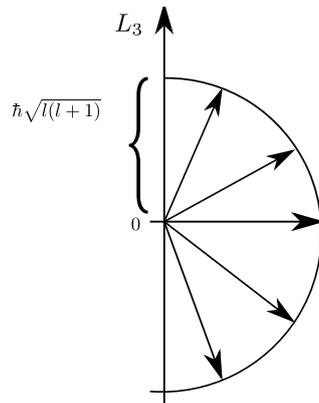
$$= \frac{1}{i} (\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 - \hat{a}_1 \hat{a}_2^\dagger) \quad (8.110)$$

$$= \hat{a}_-^\dagger \hat{a}_- - \hat{a}_+^\dagger \hat{a}_+ \quad (8.111)$$

$\Rightarrow \hat{M}_3$ hat ganzzahliges Spektrum \checkmark

Semiklassische Veranschaulichung:

\mathbf{L} als Vektor mit Länge $\hbar\sqrt{l(l+1)}$ und diskreter Komponente $L_3 = \hbar m$



8.5 Eigenfunktionen zu $\hat{\mathbf{L}}^2$ und \hat{L}_3

Analog harmonischem Oszillator mit Leiteroperatoren

Sei l gegeben, betrachte $m_{\max} = l$

$$\hat{M}_+ |l, l\rangle = 0 \quad (8.112)$$

$$\hat{M}_- |l, l\rangle \sim |l, l-1\rangle \quad (8.113)$$

$$\hat{M}_- |l, l-1\rangle \sim |l, l-2\rangle \dots \quad (8.114)$$

Normierungsfaktor:

$$\|\hat{M}_- |l, m\rangle\|^2 = \langle l, m | \hat{M}_+ \hat{M}_- |l, m\rangle \quad (8.115)$$

$$= \langle l, m | \hat{\mathbf{M}}^2 - \mathbf{M}_3^2 + \hat{M}_3 |l, m\rangle \quad (8.116)$$

$$= l(l+1) - m(m-1) \quad (8.117)$$

$$\Rightarrow |l, m-1\rangle = [l(l+1) - m(m-1)]^{-1/2} \hat{M}_- |l, m\rangle \quad (8.118)$$

$$\text{Ebenso } |l, m+1\rangle = [l(l+1) - m(m+1)]^{-1/2} \hat{M}_+ |l, m\rangle \quad (8.119)$$

Ortsdarstellung in Kugelkoordinaten:

$$|l, m\rangle \rightarrow Y_{lm}(\Theta, \varphi) \quad (8.120)$$

$$\hat{M}_3 |l, m\rangle = m |l, m\rangle \rightarrow -i \frac{\partial}{\partial \varphi} Y_{lm}(\Theta, \varphi) = m Y_{lm}(\Theta, \varphi) \quad (8.121)$$

Lösung:

$$Y_{lm}(\Theta, \varphi) = F_{lm}(\Theta) e^{im\varphi} \quad (8.122)$$

Lösung für F_{lm} :

$$\hat{M}_\pm = e^{\pm i\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \Theta} + i \cot \Theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad \left(= \frac{1}{\hbar} (L_1 \pm iL_2) \right) \quad (8.123)$$

$$\hat{M}_+ |l, l\rangle = e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \Theta} + i \cot \Theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) F_l(\Theta) e^{il\varphi} \quad (8.124)$$

$$= e^{i\varphi(l+1)} \left(\frac{\partial}{\partial \Theta} - l \cot \Theta \right) F_l(\Theta) = 0 \quad (8.125)$$

Lösung:

$$F_l(\Theta) = C_l (\sin \Theta)^l \quad (8.126)$$

Probe:

$$C_l l (\sin \Theta)^{l-1} \cos \Theta - l \frac{\cos \Theta}{\sin \Theta} C_l (\sin \Theta)^l = 0 \checkmark \quad (8.127)$$

Normierungsfaktor:

$$1 \stackrel{!}{=} \int_0^\pi d\Theta \sin \Theta \int_0^{2\pi} d\varphi |Y_{ll}(\Theta, \varphi)|^2 \quad (8.128)$$

$$= \int_0^\pi d\Theta \sin \Theta \int_0^{2\pi} d\varphi |F_{ll}(\Theta)|^2 \quad (8.129)$$

$$= 2\pi \int_0^\pi d\Theta \sin \Theta |C_l|^2 \sin^{2l} \Theta \quad (8.130)$$

$$= 2\pi |C_l|^2 \frac{2l}{2l+1} \int_0^\pi d\Theta \sin^{2l-1} \Theta \quad (8.131)$$

$$= 2\pi |C_l|^2 \frac{(2l)!!}{(2l+1)!!} 2 \quad (8.132)$$

$$\Rightarrow |C_l|^2 = \frac{2l+1}{4\pi} \frac{1}{4^l} \binom{2l}{l} \quad (8.133)$$

Absteigen mit M_- :

$$\hat{M}_- f(\Theta) e^{il\varphi} = -\left(\frac{\partial}{\partial \Theta} + l \cot \Theta\right) f(\Theta) e^{i(l-1)\varphi} \quad (8.134)$$

$$= -(\sin \Theta)^{-l} \frac{\partial}{\partial \Theta} (\sin \Theta)^l f(\Theta) e^{i(l-1)\varphi} \quad (8.135)$$

$$= (\sin \Theta)^{-(l-1)} \frac{d}{d \cos \Theta} (\sin \Theta)^l f(\Theta) e^{i(l-1)\varphi} \quad (8.136)$$

Damit

$$M_-^{l-m} f(\Theta) e^{im\varphi} = (\sin \Theta)^{-m} \left(\frac{d}{d \cos \Theta}\right)^{l-m} (\sin \Theta)^l f(\Theta) e^{im\varphi} \quad (8.137)$$

So erhalten wir

$$Y_{lm} \sim M_-^{l-m} Y_{ll} \sim (\sin \Theta)^{-m} \left(\frac{d}{d \cos \Theta}\right)^{l-m} (\sin \Theta)^{2l} e^{im\varphi} \quad (8.138)$$

Abkürzung: $t = \cos \Theta$, $\sin^2 \Theta = 1 - t^2$

$$\boxed{Y_{lm}(\Theta, \varphi) = F_{lm}(\Theta) e^{im\varphi} = C_{lm} P_l^m(t) e^{im\varphi}} \quad (8.139)$$

mit den "zugeordneten Legendrepolyomen"

$$P_l^m(t) = (-1)^{l+m} \frac{(l+m)!}{(l-m)! 2^l l!} (1-t^2)^{-\frac{m}{2}} \left(\frac{d}{dt}\right)^{l-m} (1-t^2)^l \quad (8.140)$$

$$P_l^{-m}(t) = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(t) \quad (8.141)$$

$$\Rightarrow P_l^m(t) = \frac{1}{2^l l!} (1-t^2)^{\frac{m}{2}} \left(\frac{d}{dt}\right)^{l+m} (t^2-1)^l \quad (8.142)$$

$$C_{lm} = (-1)^m \left[\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{1/2} \quad (8.143)$$

$Y_{lm}(\Theta, \varphi)$ Kugelflächenfunktionen

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad (8.144)$$

$$Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \Theta e^{i\varphi} \quad (8.145)$$

$$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \Theta \quad (8.146)$$

etc.

Es gilt:

$$Y_{l,-m}(\Theta, \varphi) = (-1)^m Y_{l,m}^*(\Theta, \varphi) \quad (8.147)$$

Orthonormalität:

$$\int d\Omega Y_{l_1, m_1}^*(\Theta, \varphi) Y_{l_2, m_2}(\Theta, \varphi) = \delta_{l_1, l_2} \delta_{m_1, m_2} \quad (8.148)$$

Vollständigkeit: Beliebige Funktion $f(\Theta, \varphi)$ auf der Einheitskugel

$$f(\Theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l f_{lm} Y_{lm}(\Theta, \varphi) \quad (8.149)$$

8.6 Parität

Def. Paritätsoperator, Spiegelung am Ursprung

$$\hat{\Pi}\psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r}) \quad (8.150)$$

Mit

$$\psi(\mathbf{r}) = f(r) Y_{lm}(\Theta, \varphi) \quad (8.151)$$

$$\psi(-\mathbf{r}) = f(r) Y_{lm}(\Theta - \pi, \varphi + \pi) \quad (8.152)$$

Wegen

$$\cos(\Theta - \pi) = -\cos \Theta \quad (8.153)$$

$$P_l^m(-\cos \Theta) = (-1)^{l+m} P_l^m(\cos \Theta) \quad (8.154)$$

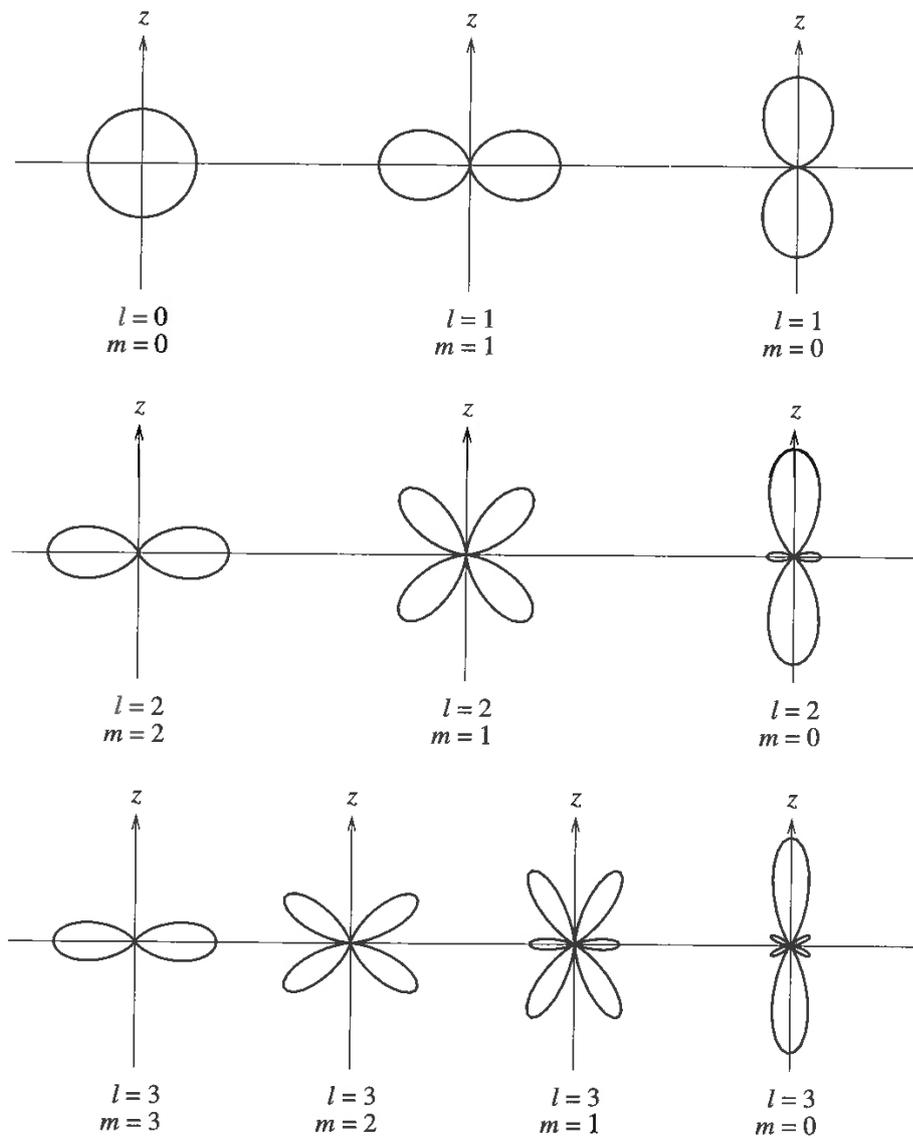
$$e^{i(\varphi+\pi)} = (-1)^m e^{im\varphi} \quad (8.155)$$

$$\Rightarrow Y_{lm}(\pi - \Theta, \varphi + \pi) = (-1)^l Y_{lm}(\Theta, \varphi) \quad (8.156)$$

Man sagt: Parität von $\psi = (-1)^l$

Damit ist die Winkelabhängigkeit der Wellenfunktion vollständig bestimmt!

Polardarstellung von $|Y_{lm}(\vartheta, \varphi)|^2$



Bildquelle: G. Münster, Quantentheorie, De Gruyter 2006

9 Das Wasserstoffatom I

Hier nichtrelativistisch: Coulombpotenzial

⇒ Proton, Elektron mit Coulombkraft

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \equiv -\frac{\gamma}{r} \quad (9.1)$$

$$e = 1.602 \cdot 10^{-19} C$$

$$m_p = 1.67 \cdot 10^{-27} kg$$

$$m_e = 9.11 \cdot 10^{-31} kg$$

$$\epsilon_0 = 8.85 \cdot 10^{-12} \frac{C}{Vm}$$



Zweikörperproblem!

Reduktion auf Einkörperproblem im Zentralfeld, vgl. Planetenproblem Mechanik

Reduzierte Masse:

$$\frac{1}{m} \equiv \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_p} \quad (9.2)$$

$$\Rightarrow m = \frac{m_e}{1 + \frac{m_e}{m_p}} \simeq m_e, \quad \frac{m_p}{m_e} = 1836.11 \quad (9.3)$$

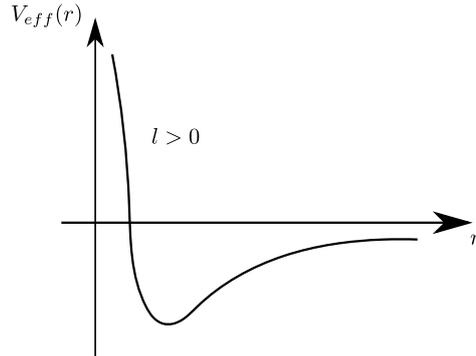
Näherungen:

- relativistische Effekte
- Vernachlässigung Spin
- Vernachlässigung Struktur des Kerns/Protons

9.1 Spektrum und Eigenfunktionen

Noch zu lösen: Radialgleichung (8.69) mit

$$V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \quad (9.4)$$



Hier: Gebundene Zustände, $E < 0$

Abkürzungen:

$$\rho = \kappa r, \quad \kappa^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2}, \quad \rho_0 = \frac{2m\gamma}{\hbar^2 \kappa} \quad (9.5)$$

⇒ Radialgleichung:

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{\rho_0}{\rho} - 1 \right) u(\rho) = 0 \quad (9.6)$$

Asymptotisches Verhalten:

$$\rho \rightarrow 0 : \quad \frac{d^2 u}{d\rho^2} - \underbrace{\frac{l(l+1)}{\rho^2}}_{\text{dominant}} u \approx 0 \quad (9.7)$$

$$\Rightarrow u \sim \rho^{l+1}, \quad \underbrace{\rho^{-l}}_{\text{divergent, nicht normierbar}} \quad (9.8)$$

$$\rho \rightarrow \infty : \quad \frac{d^2 u}{d\rho^2} - u \simeq 0 \quad \Rightarrow \quad u \sim e^{-\rho} \quad (9.9)$$

$$\Rightarrow \text{Ansatz: } u(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho} w(\rho) \quad (9.10)$$

$$u'(\rho) = \left((l+1)\rho^l w(\rho) - \rho^{l+1} w(\rho) + \rho^{l+1} w'(\rho) \right) e^{-\rho} \quad (9.11)$$

$$u''(\rho) = \left[l(l+1)\rho^{l-1} w(\rho) + (l+1)\rho^l w'(\rho) - (l+1)\rho^l w(\rho) - \rho^{l+1} w'(\rho) \right. \\ \left. + (l+1)\rho^l w'(\rho) + \rho^{l+1} w''(\rho) - (l+1)\rho^l w(\rho) + \rho^{l+1} w(\rho) - \rho^{l+1} w'(\rho) \right] e^{-\rho} \quad (9.12)$$

Einsetzen in Radialgleichung:

$$\rho^{l+1}w'' + w'[2(l+1)\rho^l - 2\rho^{l+1}] + w[-\rho^{l-1}l(l+1) + \rho_0\rho^l - \rho^{l+1} + \rho^{l-1}l(l+1) - 2(l+1)\rho^l + \rho^{l+1}] = 0 \quad (9.13)$$

$$\Rightarrow \rho w'' + 2(l+1-\rho)w' + (\rho_0 - 2(l+1))w = 0 \quad (9.14)$$

Lösung durch Potenzreihenansatz:

$$w(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k \quad (9.15)$$

$$w'(\rho) = \sum_{k=1}^{\infty} a_k k \rho^{k-1} = \sum_{k=0}^{\infty} a_{k+1} (k+1) \rho^k \quad (9.16)$$

$$w''(\rho) = \sum_{k=2}^{\infty} a_k k(k-1) \rho^{k-2} = \sum_{k=0}^{\infty} a_{k+1} (k+1)k \rho^{k-1} \quad (9.17)$$

$$(9.18)$$

$$\Rightarrow \sum_{k=0}^{\infty} [a_{k+1}(k+1)k + 2(l+1)a_{k+1}(k+1) - 2a_k k + (\rho_0 - 2(l+1))a_k] \rho^k = 0 \quad (9.19)$$

Gültig für alle $\rho \Rightarrow [\dots] \stackrel{!}{=} 0$

$$a_{k+1}((k+1)k + 2(l+1)(k+1)) = (2k - \rho_0 + 2l + 2)a_k \quad (9.20)$$

$$\text{Rekursionsformel} \Rightarrow a_{k+1} = \frac{2(k+l+1) - \rho_0}{(k+1)(k+2l+2)} a_k \quad (9.21)$$

Asymptotisches Verhalten: $\rho \rightarrow \infty$ dominiert durch $k \rightarrow \infty$

$$\Rightarrow a_{k+1} \approx \frac{2}{k} a_k \quad (9.22)$$

$$\Rightarrow a_k \rightarrow \frac{2^k}{k!} \left(= \frac{2^{k+1}}{(k+1)!} \frac{k!}{2^k} \checkmark \right) \quad (9.23)$$

$$w(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} \sum \frac{2^k}{k!} \rho^k \sim e^{2\rho} \text{ nicht normierbar!} \quad (9.24)$$

\Rightarrow Reihe für $w(\rho)$ muss abbrechen!

$\Rightarrow w(\rho)$ Polynom von Grad N mit $a_{N+1} \stackrel{!}{=} 0$

$$\Rightarrow 2(N+l+1) - \rho_0 = 0 \quad (9.25)$$

$$\Rightarrow \rho_0 = \underbrace{2(N+l+1)}_{\text{ganze, gerade Zahl}} \equiv 2n, \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (9.26)$$

⇒ Mögliche Energiewerte:

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m} \kappa^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2m\gamma}{\hbar^2 \rho_0} \right)^2 = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{\gamma^2}{\rho_0^2} \quad (9.27)$$

$$\Rightarrow \boxed{E_n = -\frac{me^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2}} \quad (9.28)$$

Balmerformel!

n : Hauptquantenzahl

N : Radialquantenzahl

Übliche Charakterisierung der Zustände: $|n, l, m\rangle$

Wegen $n = N + l + 1$ ist $l \leq n - 1$, $|m| \leq l$

l : Nebenquantenzahl

m : magnetische Quantenzahl

Niedrigste Zustände:

$$\begin{aligned} & |1, 0, 0\rangle \\ & |2, 0, 0\rangle \quad |2, 1, -1\rangle \\ & \quad \quad \quad |2, 1, 0\rangle \\ & \quad \quad \quad |2, 1, 1\rangle \\ & |3, 0, 0\rangle \quad |3, 1, -1\rangle \quad |3, 2, -2\rangle \\ & \quad \quad \quad |3, 1, 0\rangle \quad |3, 2, -1\rangle \\ & \quad \quad \quad |3, 1, 1\rangle \quad |3, 2, 0\rangle \\ & \quad \quad \quad \quad \quad \quad |3, 2, 1\rangle \\ & \quad \quad \quad \quad \quad \quad |3, 2, 2\rangle \end{aligned} \quad (9.29)$$

Allgemeiner Entartungsgrad:

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2 \quad (9.30)$$

$$\text{Rydbergkonstante: } \tilde{R}_H = \frac{me^4}{2\hbar^2(4\pi\epsilon_0)^2} = 13.6 \text{ eV} \quad (9.31)$$

$$\Rightarrow E_n = -\frac{\tilde{R}_H}{n^2} \quad (9.32)$$

Radialfunktionen: Polynome, Zurück zur Dgl. (9.14) : $\rho_0 = 2n$, $t = 2\rho$

$$\Rightarrow t \frac{d^2 w}{dt^2} + ((2l+1) + 1 - t) \frac{dw}{dt} + ((n+l) - (2l+1))w = 0 \quad (9.33)$$

Laguerre'sche Differentialgleichung

Lösung: zugeordnete Laguerre-Polynome $L_{n+l}^{2l+1}(t)$

$$L_r^s(t) = \left(-\frac{d}{dt}\right)^s e^t \left(\frac{d}{dt}\right)^r e^{-t} t^r \quad (9.34)$$

Damit komplette Wellenfunktion

$$\psi_{nlm}(r, \Theta, \varphi) = f_{nl}(r) Y_{lm}(\Theta, \varphi) \quad (9.35)$$

mit

$$f_{nl}(r) = N_{nl} (2\kappa r)^l e^{-\kappa r} L_{n+l}^{2l+1}(2\kappa r) \quad (9.36)$$

$$N_{nl}^2 = \frac{(n-l-1)!(2\kappa)^3}{2n((n+l)!)^3} \quad (9.37)$$

$$\kappa = \frac{m\gamma}{\hbar^2 n} = \frac{1}{an} \quad (9.38)$$

$$\text{Bohrradius: } a = \frac{\hbar^2}{m\gamma} = \frac{\hbar^2(4\pi\epsilon_0)}{me^2} = 0.53 \cdot 10^{-10} \text{ m} \quad (9.39)$$

$f_{nl}(r)$ hat $N = n - l - 1$ Knoten (Nullstellen)

Wahrscheinlichkeitsdichte im Raum: $|\psi_{nlm}(\mathbf{r})|^2$

Radialteil: $p(r) = r^2 |f_{nl}(r)|^2$ Wahrscheinlichkeit für Aufenthalt in $(r, r + dr)$

Niedrigste radiale Wellenfunktionen:

$$n = 1 : f_{10}(r) = 2a^{-3/2} e^{-r/a} \quad (9.40)$$

$$n = 2 : f_{20}(r) = 2(2a)^{-3/2} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-r/2a} \quad (9.41)$$

$$f_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}} (2a)^{-3/2} \frac{r}{a} e^{-r/2a} \quad (9.42)$$

etc.

Alternativ über algebraische Methode:

Runge-Lenz-Pauli-Vektor \Rightarrow Leiteroperatoren

9.2 Der Zeeman-Effekt

Auswirkung eines Magnetfeldes auf das Spektrum

Atomhülle $\hat{=}$ bewegte Ladungen = Ströme \Rightarrow erwarte magnetisches Dipolmoment!

Kap. 2.10: Teilchen im e. m. Feld

$$\begin{aligned}\mathbf{B} &= \nabla \times \mathbf{A} \\ \mathbf{E} &= -\nabla\Phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}\end{aligned}$$

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \underbrace{(\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A})^2}_{\text{}} + e\Phi \quad (9.43)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{\hbar q}{2im} (\nabla \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \nabla) + \frac{q^2}{2m} \mathbf{A}^2 \quad (9.44)$$

Beachte:

$$\nabla \cdot \mathbf{A}\psi = (\nabla \cdot \mathbf{A})\psi + \mathbf{A} \cdot \nabla\psi \quad (9.45)$$

Wähle Coulombbeichung : $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$

$$\Rightarrow \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + q\Phi + i\frac{\hbar q}{m} \mathbf{A} \cdot \nabla + \frac{q^2}{2m} \mathbf{A}^2 \quad (9.46)$$

Sei \mathbf{B} konstant, schreibe $\mathbf{A} = -\frac{1}{2}\mathbf{r} \times \mathbf{B}$

$$\mathbf{B} = -\frac{1}{2} \nabla \times \mathbf{r} \times \mathbf{B} = -\frac{1}{2} [\underbrace{\mathbf{r} \nabla \cdot \mathbf{B}}_3 - \underbrace{\mathbf{B} \nabla \cdot \mathbf{r}}_3 + \underbrace{(\mathbf{B} \cdot \nabla) \mathbf{r}}_{\mathbf{B}} - \underbrace{(\mathbf{r} \cdot \nabla) \mathbf{B}}] = \mathbf{B} \checkmark \quad (9.47)$$

Linearer Term:

$$\frac{i\hbar q}{m} \mathbf{A} \cdot \nabla = -\frac{i\hbar q}{2m} (\mathbf{r} \times \mathbf{B}) \cdot \nabla \quad (9.48)$$

$$= \frac{i\hbar}{2m} (\mathbf{r} \times \nabla) \cdot \mathbf{B} \quad (9.49)$$

$$= -\frac{q}{2m} \hat{\mathbf{L}} \cdot \mathbf{B} \equiv -\hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{B} \quad (9.50)$$

$\hat{=}$ Energie eines magnetischen Moments im Feld \mathbf{B}

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{q}{2m} \mathbf{L} \quad (9.51)$$

\Rightarrow Paramagnetismus von Atomen

vgl. klassischen Ausdruck

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{1}{2} \int d^3r \mathbf{r} \times \underbrace{\mathbf{j}}_{q\mathbf{v}} = \frac{q}{2m} \mathbf{L} \quad (9.52)$$

Quadratischer Term: $\mathbf{A}^2 \sim \mathbf{B}^2$ Beitrag zum Diamagnetismus

Für schwache Felder $|\mathbf{B}|$ vernachlässigbar

Wasserstoffatom im Feld $\mathbf{B} = (0, 0, B)$, $\Phi = 0$

$$\Rightarrow \hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{q}{2m} B \hat{L}_3 \quad (9.53)$$

mit

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{\gamma}{r} \quad (9.54)$$

$|n, l, m\rangle$ sind EV von $\hat{H}_0, \hat{L}_3 \Rightarrow$ ebenso von \hat{H}

$$\hat{H} |n, l, m_l\rangle = \left(-\frac{\tilde{R}_H}{n^2} - \frac{qB}{2m} \hbar m_l\right) |n, l, m_l\rangle \quad (9.55)$$

$$\Rightarrow E = E_n + \frac{eB}{2m} \hbar m_l = E_n + \hbar \omega_L \cdot m_l \quad (9.56)$$

Larmorfrequenz $\omega_L = \frac{eB}{2m}$ mit $q = -e$

$(2l + 1)$ Werte für m_l , \Rightarrow Aufspaltung der Energieniveaus, Aufhebung der Entartung

$$\hbar \omega_L \approx 4 \cdot 10^{-6} \tilde{R}_H \frac{B}{\text{Tesla}} \quad \text{kleiner Effekt} \quad (9.57)$$

$$l = 1 \quad \text{—} \quad \longrightarrow \quad \equiv \equiv \equiv$$

$$l = 2 \quad \text{—} \quad \longrightarrow \quad \equiv \equiv \equiv \equiv \equiv$$

Normaler Zeeman-Effekt: In der Natur nicht realisiert für $H!$
 Realisiert für Atome mit Gesamtspin 0, 2 Valenz- e^- -Systeme:
 He, Erdalkalien, Hg, Cd, Zn

10 Spin

- Eigenschaft von Elektronen und anderen Teilchen
- Wird nicht durch bisherige Schrödingergleichung beschrieben
- Natürliche Beschreibung: Diracgleichung, relativistisch

Aber experimentelle Befunde im B-Feld:

- Atomspektren: Zeeman-Effekt für H , Alkalien, 1 Valenz- e^- -Atome
Aufspaltung der Spektrallinien im magn. Feld in gerade Anzahl von Linien
⇒ halbzahlige l ?
- Stern-Gerlach: Atomstrahl durch inhomogenes Magnetfeld, Ablenkung $\sim z$ -Komponente des magnetischen Moments eines Atoms

⇒ Aufspaltung in 2 Teilstrahlen; wenn $\boldsymbol{\mu} \sim \mathbf{L}$ muss $l = \frac{1}{2}$ sein

⇒ Hinweise auf halbzahligen Drehimpuls \neq Bahndrehimpuls \mathbf{L}

⇒ Def: $\hat{\mathbf{S}}$ Drehimpulsoperator für Spin

10.1 Spin $\frac{1}{2}$ Operator

Halbzahlige Eigenwerte für Drehimpulsalgebra:

$$[\hat{S}_j, \hat{S}_k] = i\hbar \epsilon_{jkl} \hat{S}_l \quad (10.1)$$

Spektrum bereits bekannt

$$\hat{\mathbf{S}}^2 |s, m_s\rangle = s(s+1)\hbar^2 |s, m_s\rangle \quad (10.2)$$

$$\hat{S}_3 |s, m_s\rangle = \hbar m_s |s, m_s\rangle \quad (10.3)$$

Sei

$$s = \frac{1}{2}, \quad m_s = \pm \frac{1}{2}, \quad |s, m_s\rangle \rightarrow |+\rangle, |-\rangle \quad (10.4)$$

Schreibe

$$\hat{S}_3 |+\rangle = \frac{\hbar}{2} |+\rangle, \quad \hat{S}_3 |-\rangle = -\frac{\hbar}{2} |-\rangle \quad (10.5)$$

$$\langle + | - \rangle = 0, \quad \langle + | + \rangle = \langle - | - \rangle = 1 \quad (10.6)$$

⇒ 2-d komplexer Vektorraum, \mathcal{H}_2

Zerlegung:

$$|\chi\rangle = \chi_+ |+\rangle + \chi_- |-\rangle = \sum_{\sigma=\pm} \chi_\sigma |\sigma\rangle \quad (10.7)$$

mit

$$|\chi_+|^2 + |\chi_-|^2 = 1 \quad (10.8)$$

Komponentendarstellung durch 2d Basisvektoren:

$$|\chi\rangle = \begin{pmatrix} \chi_+ \\ \chi_- \end{pmatrix}, \quad |+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (10.9)$$

Diese heißen Spinoren (aus Darstellungstheorie)

⇒ Observable \hat{S}_3 diagonal, Komponentendarstellung:

$$S_3 = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle + | S_3 | + \rangle & \langle + | S_3 | - \rangle \\ \langle - | S_3 | + \rangle & \langle - | S_3 | - \rangle \end{pmatrix} \quad (10.10)$$

Konstruktion von S_1, S_2 mit Leiteroperatoren $S_{\pm} = S_1 \pm iS_2$

Wirkung auf Basisvektoren (aus (8.118),(8.119) mit $l = 1/2, m = \pm 1/2$):

$$S_+ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad S_+ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (10.11)$$

$$S_- \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad S_- \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (10.12)$$

$$\Rightarrow S_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (10.13)$$

$$\Rightarrow S_1 = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_2 = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (10.14)$$

mit σ^i Paulimatrizen

$$\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (10.15)$$

Eigenschaften:

a) $[\sigma_j, \sigma_k] = 2i \epsilon_{jkl} \sigma_l$

b) $\sigma_j^2 = 1$ ohne Summe

c) $\sigma_j \sigma_k + \sigma_k \sigma_j = 2\delta_{jk}$

d) $\sigma_j \sigma_k = \delta_{jk} + i \epsilon_{jkl} \sigma_l$

10.2 Wellenfunktionen mit Spin

Freiheitsgrade der räumlichen Bewegung:

Funktionen $\mathbf{r} \rightarrow \psi(\mathbf{r}) \in \mathcal{H}_R$ Hilbertraum

Bahndrehimpuls $\hat{=}$ räumliche Bewegung

Spin $\hat{=}$ innerer Freiheitsgrad, unabhängig von räumlicher Bewegung und Koordinaten

Spinoren bilden \mathcal{H}_2

Gesamter Raum: $\mathcal{H} = \mathcal{H}_R \otimes \mathcal{H}_2$

Basis: $|\mathbf{r}\rangle|\sigma\rangle = |\mathbf{r}\rangle \otimes |\sigma\rangle$

Zerlegung eines Zustands:

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma} \int d^3r \underbrace{\psi_{\sigma}(\mathbf{r})}_{\langle\sigma|\langle r|\psi\rangle} |\mathbf{r}\rangle |\sigma\rangle \quad (10.16)$$

mit Spinorwellenfunktion

$$\psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{r}) \\ \psi_-(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (10.17)$$

Def.:

$$\psi^\dagger(\mathbf{r}) = (\psi_+^*(\mathbf{r}), \psi_-^*(\mathbf{r})) \quad (10.18)$$

Skalarprodukt:

$$\langle\psi|\chi\rangle = \int d^3r \psi^\dagger(\mathbf{r})\chi(\mathbf{r}) = \sum_{\sigma=\pm} \int d^3r \psi_{\sigma}^*(\mathbf{r})\chi_{\sigma}(\mathbf{r}) \quad (10.19)$$

$$= \int d^3r (\psi_+^*\chi_+ + \psi_-^*\chi_-) \quad (10.20)$$

Norm:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \sum_{\sigma} \int d^3r |\psi_{\sigma}(\mathbf{r})|^2 = \int d^3r \underbrace{(|\psi_+|^2 + |\psi_-|^2)}_{=\rho(\mathbf{r})} = 1 \quad (10.21)$$

Wahrscheinlichkeitsdichte

Erwartungswerte:

$$\langle \psi | \hat{\mathbf{S}} | \psi \rangle = \int d^3r \psi^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{S}} \psi(\mathbf{r}) \quad (10.22)$$

$$= \int d^3r (\psi_+^*(\mathbf{r}), \psi_-^*(\mathbf{r})) \hat{\mathbf{S}} \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{r}) \\ \psi_-(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (10.23)$$

$$= \sum_{\sigma, \sigma'} \int d^3r \psi_\sigma^*(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{S}}_{\sigma\sigma'} \psi_{\sigma'}(\mathbf{r}) \quad (10.24)$$

Speziell

$$\langle \psi | \hat{S}_3 | \psi \rangle = \int d^3r \frac{\hbar}{2} (|\psi_+|^2 - |\psi_-|^2) \quad (10.25)$$

Interpretation:

$|\psi_\sigma(\mathbf{r})|^2$ Wahrscheinlichkeitsdichte für Teilchen am Ort \mathbf{r} mit Spinkomponente σ

10.3 Die Pauligleichung

Wie lautet der Hamiltonoperator \hat{H} für ein Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$, z. B. e^- ?

\mathbf{L} hat magnetisches Moment $\boldsymbol{\mu} = \frac{q}{2m}\mathbf{L}$

Vermutung: $\mathbf{S} \Rightarrow \boldsymbol{\mu}_s = \underbrace{g_L}_{\text{gyromagnetischer Faktor oder Landé-Faktor}} \frac{q}{2m}\mathbf{S}$

Experimentell: $g_L \simeq 2$ (Bestimmung z.B. über Zeeman-, Einstein-de Haas-Effekte)

Magnetischer Beitrag zur Energie:

$$\hat{H}_s = -\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B} = -\frac{q}{m} \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \quad (10.26)$$

Für e^- mit $q = -e$

$$\underbrace{\frac{e \hbar}{m}}_{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \quad (10.27)$$

$$\equiv \mu_B \quad (10.28)$$

Bohr-Magneton

Gesamter Beitrag in $\hat{H} \sim \mathbf{B}$ (schwache Felder):

$$\hat{H} = -\frac{q}{2m}(\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}}) \cdot \mathbf{B} \quad (10.29)$$

\Rightarrow Schrödingergleichung für Teilchen mit Spin im e. m. Feld = Pauli Gleichung

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{r}) \\ \psi_-(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \left[\frac{1}{2m}(\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A})^2 + q\Phi - \frac{q\hbar}{2m}\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \right] \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{r}) \\ \psi_-(\mathbf{r}) \end{pmatrix}} \quad (10.30)$$

Für schwaches, konstantes \mathbf{B} :

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + q\Phi - \frac{q}{2m}(\mathbf{L} + \hbar\boldsymbol{\sigma}) \cdot \mathbf{B} \quad (10.31)$$

10.4 Spinpräzession im Magnetfeld

Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$ im homogenen, konstanten Magnetfeld

Spezialfall: Teilchen ruht, Abhängigkeit ψ von \mathbf{r} wird nicht weiter betrachtet, nur der Spinfreiheitsgrad

$$\psi(t) = \begin{pmatrix} \psi_+(t) \\ \psi_-(t) \end{pmatrix} \quad (10.32)$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{d}{dt} \psi(t) = \hat{H} \psi(t) \quad \text{mit} \quad \hat{H} = -\frac{e\hbar}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \quad (10.33)$$

Wähle $\mathbf{B} = (0, 0, B)$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \psi_+(t) \\ \psi_-(t) \end{pmatrix} = -\frac{e\hbar B}{2m} \begin{pmatrix} \psi_+(t) \\ -\psi_-(t) \end{pmatrix} \quad (10.34)$$

$$\begin{pmatrix} \psi_+(t) \\ \psi_-(t) \end{pmatrix} = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \begin{pmatrix} \psi_+(0) \\ \psi_-(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\omega_L t} \psi_+(0) \\ e^{-i\omega_L t} \psi_-(0) \end{pmatrix} \quad (10.35)$$

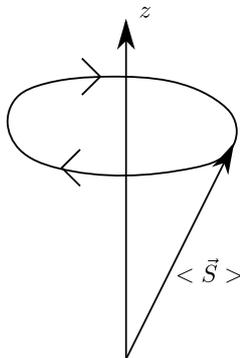
$$\text{mit } \omega_L = \frac{e\hbar B}{2m} \text{ Larmorfrequenz} \quad (10.36)$$

$$\text{Sei } \psi(0) = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, \quad a, b \in \mathbb{R} \quad (10.37)$$

$$\langle \mathbf{S} \rangle = \psi^\dagger(t) \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma} \psi(t) \quad (10.38)$$

$$\langle S_1 \rangle = \frac{\hbar}{2} (\psi_+^*(t), \psi_-^*(t)) \sigma_1 \begin{pmatrix} \psi_+(t) \\ \psi_-(t) \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} (\psi_+^* \psi_- + \psi_-^* \psi_+) \quad (10.39)$$

$$= \frac{\hbar}{2} (e^{-2i\omega_L t} ab + e^{2i\omega_L t} ba) \quad (10.40)$$



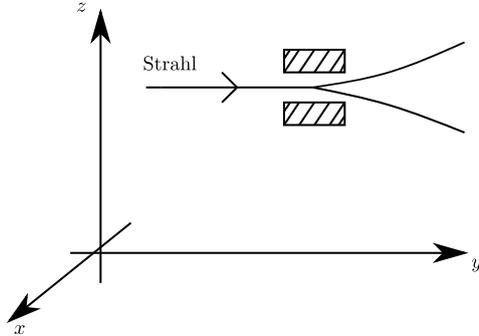
$$\langle S_1 \rangle = ab\hbar \cos(2\omega_L t) \quad (10.41)$$

$$\langle S_2 \rangle = -ab\hbar \sin(2\omega_L t) \quad (10.42)$$

$$\langle S_3 \rangle = (a^2 - b^2) \frac{\hbar}{2} \quad (10.43)$$

Larmorpräzession $\hat{=}$ klassischer Elektrodynamik für $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$

10.5 Der Stern-Gerlach-Versuch



Silberatome: Spin 1/2, elektrisch neutral \Rightarrow keine Lorentzkraft
 schwer \Rightarrow gut lokalisierte Wellenpakete (vgl. Gauß-Paket Kap. 2.2)

\Rightarrow Bewegung auf quasiklassischen Teilchenbahnen + Spinfreiheitsgrad

Hier: Betrachte Spin des Elektrons (einfacher)

Inhomogenes Magnetfeld:

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = (-B_1x, 0, B_1z) \quad (10.44)$$

Wähle

$$\mathbf{A} = (0, B_1xz, 0), \Phi = 0 \quad (10.45)$$

Schwaches Feld \Rightarrow vernachlässige $\sim \mathbf{A}^2$ Term im Hamiltonian

$$\Rightarrow \hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \frac{i\hbar q}{m} \mathbf{A} \cdot \nabla + \mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \quad (10.46)$$

$$= \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{q}{m} B_1xz \hat{p}_y - \mu_B \sigma_1 B_1x + \mu_B \sigma_3 B_1z \quad (10.47)$$

Wellenpaket um y -Achse konzentriert

\Rightarrow vernachlässige quadratische Abweichung $\sim xz$

Bewegung entkoppelt in kartesische Komponenten

$$\Rightarrow \hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z \quad (10.48)$$

$$z\text{-Bewegung: } \hat{H}_z = \frac{\hat{p}_z^2}{2m} + \mu_B \sigma_3 B_1z \quad (10.49)$$

Pauligleichung:

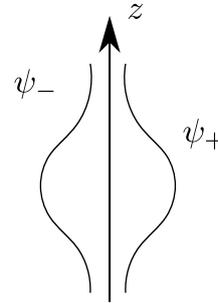
$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_+(z, t) \\ \psi_-(z, t) \end{pmatrix} = \left\{ \frac{\hat{p}_z^2}{2m} + \mu_B B_1z \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right\} \begin{pmatrix} \psi_+(z, t) \\ \psi_-(z, t) \end{pmatrix} \quad (10.50)$$

$$\text{bzw. } i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_{\pm} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \pm \underbrace{\mu_B B_1z}_{\text{=homogenes "Schwerefeld"}} \right) \psi_{\pm} \quad (10.51)$$

Anfang $t = 0$:

$\psi_{\pm}(z, 0) = \pm f(z)$, konzentriert um $z = 0$

Sei ψ Eigenzustand zu $S_1 \psi = \frac{\hbar}{2} \psi$



$t > 0$: Wellenpaket quasiklassisch im "freien Fall"

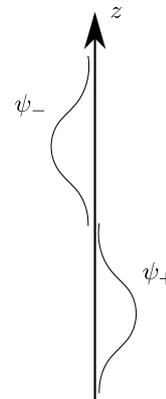
Vgl. (2.13), gleichförmige Bewegung:

$$\psi(\mathbf{r}, t) \approx e^{i\omega_0 t} \psi(\mathbf{r} - \mathbf{v}_g t, 0)$$

Beschleunigte Bewegung: $\mathbf{v}_g t \rightarrow \mathbf{a} t^2$, $a_z = \frac{\mu_B B_1}{m}$

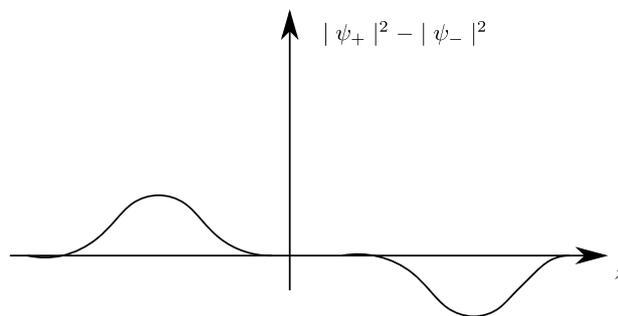
$$\psi_+(z, t) \sim f\left(z + \frac{\mu_B B_1}{2m} t^2\right)$$

$$\psi_-(z, t) \sim f\left(z - \frac{\mu_B B_1}{2m} t^2\right)$$



Es ist

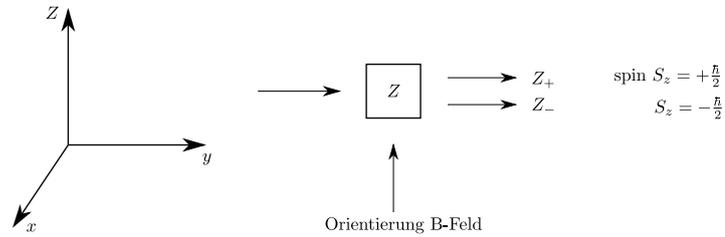
$$\psi^\dagger(z) \sigma_3 \psi(z) = |\psi_+|^2 - |\psi_-|^2 \quad (10.52)$$



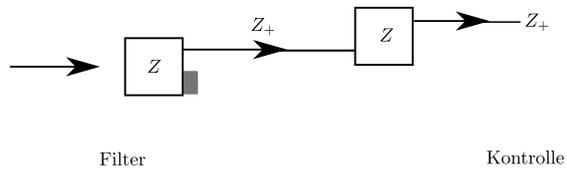
$z > 0$: wahrscheinlicher Messwert $S_z = -\frac{\hbar}{2}$
 $z < 0$: wahrscheinlicher Messwert $S_z = +\frac{\hbar}{2}$

10.6 Der Messprozess am Beispiel Spin

Stern-Gerlach Experiment: (Spin in Einheiten von $\hbar/2$)



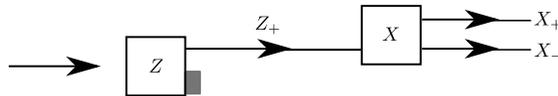
⇒ a) Filterung, Präparation von Zuständen



⇒ herausgefilterter Teilchenstrahl ist im Zustand Z_+ ,

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (10.53)$$

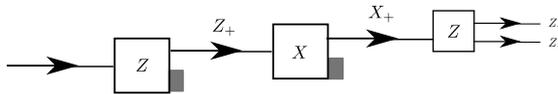
b) Zueinander verdrehte Apparate



$$|X_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |X_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (10.54)$$

Vgl. Blatt 13

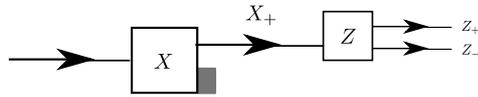
Frage: haben X_+, X_- immer noch Z_+ ?



Z_+, Z_- mit gleichen Wahrscheinlichkeiten!

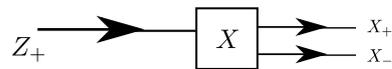
⇒ Teilchen in X_+ "erinnern sich" nicht daran, dass sie vorher in Z_+ waren!

Verallgemeinerung:



\Rightarrow Häufigkeiten Z_+, Z_- unabhängig davon, was vor X geschieht

Abschwächung des Strahls: immer nur einzelne Teilchen



Endzustand: entweder X_+ oder X_- , Eigenschaft Z_+ verloren

- Messung verändert den Zustand des Systems im Allgemeinen

- Änderung folgt Wahrscheinlichkeitsgesetzen

- Nach der Messung Eigenschaften, die man dem System vorher weder zu- noch absprechen kann

11 Addition von Drehimpulsen

Betrachte Systeme mit mehreren unabhängigen Drehimpulsen und daraus resultierendem Gesamtdrehimpuls
(In diesem Kapitel werden Operatorhüte weggelassen)

- i) $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ Bahndrehimpuls + Spin
- ii) $\mathbf{S} = \mathbf{S}^{(1)} + \mathbf{S}^{(2)}$ Gesamtspin zweier Elektronen

11.1 Allgemeiner Fall

$$\mathbf{J}^{(1)}, \mathbf{J}^{(2)} \text{ mit } [J_i^{(a)}, J_j^{(a)}] = i\hbar\epsilon_{ijk}J_k^{(a)}, \quad [J_i^{(1)}, J_j^{(2)}] = 0$$

Eigenzustände

$$\mathbf{J}^{(a)2} |j_a, m_a\rangle = \hbar^2 j_a(j_a + 1) |j_a, m_a\rangle \quad (11.1)$$

$$J_3^{(a)} |j_a, m_a\rangle = \hbar m_a |j_a, m_a\rangle \quad (11.2)$$

\Rightarrow Zwei Vektorräume mit

$$\dim \mathcal{H}^{(1)} = 2j_1 + 1, \quad \dim \mathcal{H}^{(2)} = 2j_2 + 1 \quad (11.3)$$

Insgesamt:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}, \quad \dim \mathcal{H} = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \quad (11.4)$$

Basis:

$$|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle \equiv |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle \quad (11.5)$$

mit j_1, j_2 fest und $-j_1 \leq m_1 \leq j_1, \quad -j_2 \leq m_2 \leq j_2$

Gesamtdrehimpuls: $\mathbf{J} = \mathbf{J}^{(1)} + \mathbf{J}^{(2)}$ erfüllt: $[J_i, J_k] = i\hbar\epsilon_{ikl}J_l$

Frage: Wie lauten die Eigenwerte und -vektoren von \mathbf{J}^2, J_3 in \mathcal{H} ?

Obige Basis diagonalisiert $\mathbf{J}^{(1)2}, J_3^{(1)}, \mathbf{J}^{(2)2}, J_3^{(2)}$

Suche neue Basis $|j, m; j_1; j_2\rangle$, die diagonalisiert $\mathbf{J}^2, J_3, \mathbf{J}^{(1)2}, \mathbf{J}^{(2)2}$

$$\mathbf{J}^2 |j, m; j_1; j_2\rangle = \hbar^2 j(j + 1) |j, m; j_1; j_2\rangle \quad (11.6)$$

$$J_3 |j, m; j_1; j_2\rangle = \hbar m |j, m; j_1; j_2\rangle \quad (11.7)$$

mit $j \in \{0, \frac{1}{2}, 1, \dots\}, \quad -j \leq m \leq j$

$$a) J_3 = J_3^{(1)} + J_3^{(2)}$$

$$\Rightarrow J_3 |j_1, m_1; j_2, m_2\rangle = \hbar(m_1 + m_2) |j_1, m_1; j_2, m_2\rangle \quad (11.8)$$

$$\Rightarrow m = m_1 + m_2 \quad (11.9)$$

Ausführlicher:

$$J_3 |j_1, m_1; j_2, m_2\rangle = (J_3^{(1)} + J_3^{(2)}) |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle \quad (11.10)$$

$$= (J_3^{(1)} |j_1, m_1\rangle) |j_2, m_2\rangle + |j_1, m_1\rangle (J_3^{(2)} |j_2, m_2\rangle)$$

$$b) [\mathbf{J}^2, J_3^{(a)}] \neq 0$$

$\Rightarrow |j_1, m_1; j_2, m_2\rangle$ ist im Allgemeinen kein Eigenvektor von \mathbf{J}^2

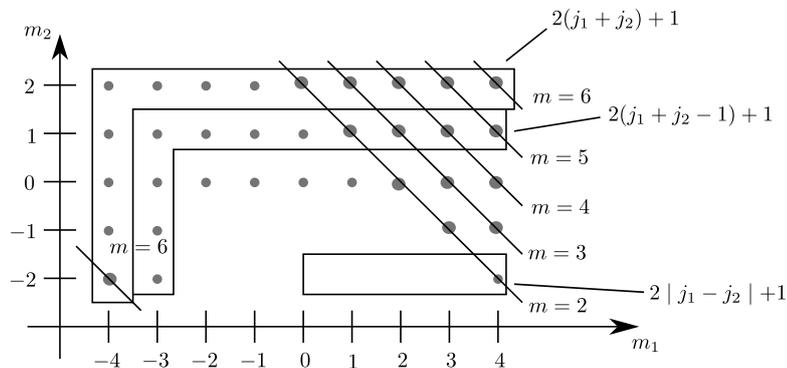
\Rightarrow Suche Linearkombinationen aus versch. m_1, m_2 so dass $m = m_1 + m_2$ fest

Beispiel: $j_1 = 4, j_2 = 2$; Zunächst: welche Multipletts gibt es?

$$m_{max} = j_1 + j_2 = 6 \Rightarrow |j_1, j_1; j_2, j_2\rangle$$

eindeutiger Zustand! $\Rightarrow j_{max} = j_1 + j_2 = 6$

$$\text{und } |\underbrace{j_1 + j_2}_j, \underbrace{j_1 + j_2}_m; j_1, j_2\rangle = |j_1, j_1; j_2, j_2\rangle$$



Zugehöriges Multiplett:

$$j = j_1 + j_2, m = -\underbrace{(j_1 + j_2), -(j_1 + j_2) + 1, \dots, j_1 + j_2}_{(2j+1)=2j_1+2j_2+1} \quad (11.11)$$

\Rightarrow Unterraum $\mathcal{H}_{j_1+j_2}$ (oberster Rahmen)

Nächstgrößtes $m_{max} - 1 = j_1 + j_2 - 1 = 5$

Zwei Zustände, ein Zustand gehört zu $\mathcal{H}_{j_1+j_2}$, der andere zu $\mathcal{H}_{j_1+j_2-1}$

Größtes m im Restraum: $j_1 + j_2 - 1$

$$\Rightarrow j = j_1 + j_2 - 1, \quad m = \underbrace{-(j_1 + j_2 - 1), \dots, (j_1 + j_2 - 1)}_{2(j_1+j_2-1)+1} \quad (11.12)$$

\Rightarrow Unterraum $\mathcal{H}_{j_1+j_2-1}$ (zweiter Rahmen von oben)

·
·
·

Fortsetzung bis zum kleinsten $m_{max} = |j_1 - j_2|$

Ingesamt: Addition von Drehimpulsen j_1, j_2 :

$$j = |j_1 - j_2|, \dots, j_1 + j_2 \quad (11.13)$$

Der Hilbertraum setzt sich zusammen aus den Unterräumen

$$\mathcal{H}_{j_1} \otimes \mathcal{H}_{j_2} = \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \mathcal{H}_j \quad (11.14)$$

Probe Dimensionszählung:

$$(2j_1 + 1)(2j_2 + 1) = \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (2j + 1) \quad \checkmark \quad (11.15)$$

Basistransformation:

$$|j, m; j_1; j_2\rangle = \sum_{\substack{m_1, m_2 \\ m_1+m_2=m}} |j_1, m_1; j_2, m_2\rangle \underbrace{\langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j, m; j_1; j_2\rangle}_{\text{Clebsch-Gordan-, Vektoradditions-Koeffizienten}} \quad (11.16)$$

Konstruktion durch Leiteroperatoren

bzw. Nachschlagen in Tabellen \Rightarrow Baym, Messiah, ...

Einfachere Notation $|j, m; j_1; j_2\rangle \rightarrow |j, m\rangle$ (j_1, j_2 fest)

$$|j, m\rangle = \sum_{m_1+m_2=m} |j_1, m_1; j_2, m_2\rangle \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j, m\rangle \quad (11.17)$$

CG-Koeffizienten sind reell; nützliche Orthogonalitätsrelationen:

$$\sum_{j,m} \langle j_1, m'_1; j_2, m'_2 | jm \rangle \langle jm | j_1, m_1; j_2, m_2 \rangle = \delta_{m_1, m'_1} \delta_{m_2, m'_2} \quad (11.18)$$

$$\sum_{\substack{m_1, m_2 \\ m_1 + m_2 = m}} \langle j, m | j_1, m_1; j_2, m_2 \rangle \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j, m \rangle = \langle j', m' | j, m \rangle \quad (11.19)$$

$$= \delta_{jj'} \delta_{mm'} \quad (11.20)$$

$$\sum_{\substack{m_1, m_2 \\ m_1 + m_2 = m}} \langle j, m | j_1, m_1; j_2, m_2 \rangle^2 = 1 \quad (11.21)$$

Rekursionsrelationen:

$$\begin{aligned} & \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j, m \pm 1 \rangle \quad (11.22) \\ &= \sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1 \mp 1)} \langle j_1, m_1 \mp 1; j_2, m_2 | j, m \rangle \\ & \quad + \sqrt{j_2(j_2+1) - m_2(m_2 \mp 1)} \langle j_1, m_1; j_2, m_2 \mp 1 | j, m \rangle \end{aligned}$$

11.2 Beispiel: 2 Spins $\frac{1}{2}$

$$j_1 = \frac{1}{2}, j_2 = \frac{1}{2} \Rightarrow \dim \mathcal{H} = 4 \quad (11.23)$$

Notation:

$$\left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2}; \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle = |++\rangle \quad (11.24)$$

$$\left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle = |-\rangle \quad (11.25)$$

$$\left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2}; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = |+-\rangle \quad (11.26)$$

$$\left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = |--\rangle \quad (11.27)$$

$$(11.28)$$

$$\mathbf{J}^2 = (\mathbf{J}^{(1)} + \mathbf{J}^{(2)})^2 = \mathbf{J}^{(1)2} + \mathbf{J}^{(2)2} + 2\mathbf{J}^{(1)} \cdot \mathbf{J}^{(2)} \quad (11.29)$$

$$= \frac{3}{2}\hbar^2 + 2J_3^{(1)}J_3^{(2)} + J_+^{(1)}J_-^{(2)} + J_-^{(1)}J_+^{(2)} \quad (11.30)$$

$$\Rightarrow \mathbf{J}^2 |++\rangle = \left(\frac{3}{2}\hbar^2 + 2\frac{\hbar\hbar}{2} \right) |++\rangle = 2\hbar^2 |++\rangle \quad (11.31)$$

$$\mathbf{J}^2 |--\rangle = \left(\frac{3}{2}\hbar^2 + 2\frac{\hbar\hbar}{2} \right) |--\rangle = 2\hbar^2 |--\rangle \quad (11.32)$$

$$\Rightarrow j(j+1) = 2 \Rightarrow j = 1, m = m_1 + m_2 = \pm 1$$

$$\mathbf{J}^2 |+-\rangle = \left(\frac{3}{2}\hbar^2 - 2\frac{\hbar\hbar}{2} \right) |+-\rangle + \hbar^2 |-\rangle \quad (11.33)$$

$$= \hbar^2 (|+-\rangle + |-\rangle) \quad (11.34)$$

$$\mathbf{J}^2 |-\rangle = \hbar^2 (|-\rangle + |+-\rangle) \quad (11.35)$$

$$\Rightarrow \mathbf{J}^2 (|+-\rangle + |-\rangle) = 2\hbar^2 (|+-\rangle + |-\rangle) \quad (11.36)$$

$$\Rightarrow j = 1, m = m_1 + m_2 = 0 \text{ für } (|+-\rangle + |-\rangle)$$

Übrige Linearkombination:

$$\mathbf{J}^2 (|+-\rangle - |-\rangle) = 0 \Rightarrow j = 0, m = 0 \quad (11.37)$$

Damit erhalten wir zwei Gesamtspin-Multipletts:

$j = 1$:

$$|1, 1\rangle = |++\rangle \quad (11.38)$$

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle) \quad (11.39)$$

$$|1, -1\rangle = |--\rangle \quad (11.40)$$

$$(11.41)$$

$j = 0$:

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle) \quad (11.42)$$

Beachte: antisymmetrische Wellenfunktion $\leftrightarrow j = 0$

Clebsch-Gordan-Koeffizienten:

$$\langle \frac{1}{2}, +\frac{1}{2}; \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} | 1, 1 \rangle = 1 \quad (11.43)$$

$$\langle \frac{1}{2}, +\frac{1}{2}; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | 1, 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (11.44)$$

$$\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} | 1, 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (11.45)$$

etc.

11.3 Beispiel Bahndrehimpuls und Spin

Betrachte

$$j_1 = l \geq 1, j_2 = \frac{1}{2} \Rightarrow j \in \left\{ l - \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2} \right\} \quad (11.46)$$

$$l = 1 \Rightarrow \dim \mathcal{H} = 6 \quad (11.47)$$

Zustände $|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle$:

$$\left| 1, 1; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \quad \left| 1, 1; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (11.48)$$

$$\left| 1, 0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \quad \left| 1, 0; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (11.49)$$

$$\left| 1, -1; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \quad \left| 1, -1; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (11.50)$$

Rechnung mit Leiteroperatoren liefert $j = l \pm \frac{1}{2}$

$$\left| l \pm \frac{1}{2}, m \right\rangle \quad (11.51)$$

$$= \sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}} \left| l, m \mp \frac{1}{2}; \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right\rangle \pm \sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}} \left| l, m \pm \frac{1}{2}; \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right\rangle \quad (11.52)$$

Spezialfall:

$$j_1 = l = 0, j_2 = \frac{1}{2} \Rightarrow j = \frac{1}{2} \quad (11.53)$$

$$\Rightarrow \left| \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle = \left| 0, 0; \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle \quad (11.54)$$

Spinorwellenfunktionen

$$\psi_{l \pm \frac{1}{2}, m}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \pm \sqrt{\frac{l \pm m + \frac{1}{2}}{2l+1}} \psi_{l, m - \frac{1}{2}}(\mathbf{r}) \\ \sqrt{\frac{l \mp m + \frac{1}{2}}{2l+1}} \psi_{l, m + \frac{1}{2}}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (11.55)$$

12 Zeitunabhängige Störungstheorie

Näherungsmethode, wenn ein System nicht exakt behandelt werden kann, sich \hat{H} aber nur um kleine Korrekturterme von einem exakt behandelbaren unterscheidet

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1 \quad (12.1)$$

\hat{H} : nicht exakt diagonalisierbar

\hat{H}_0 : Spektrum sei bekannt

$\lambda \hat{H}_1$: kleine Störung

$\lambda \in \mathbb{R}$ kleiner Parameter

Beispiele:

- Korrekturen zum H-Atom: relativistische Korrekturen, Spin-Bahn-Kopplung, ...
- Anharmonischer Oszillator $V(x) = a(x - x_0)^2 + b(x - x_0)^4$ etc.

O. B. d. A : Betrachte rein diskretes Spektrum

$$\text{Bekannt: } \hat{H}_0 |n^0\rangle = E_n^0 |n^0\rangle \quad (12.2)$$

$$\text{Gesucht: } \hat{H} |n\rangle = E_n |n\rangle \quad (12.3)$$

Annahme: $|n\rangle$ und E_n können nach Potenzen von λ entwickelt werden

$$E_n = E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots \quad (12.4)$$

$$|n\rangle = |n^0\rangle + \lambda |n^1\rangle + \lambda^2 |n^2\rangle + \dots \text{ (unnormiert)} \quad (12.5)$$

12.1 Nicht entartete Störungstheorie

$|n^0\rangle$ seien nichtentartet

Eigenwertgleichung:

$$(\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1)(|n^0\rangle + \lambda |n^1\rangle + \dots) = (E_n^0 + \lambda E_n^1 + \dots)(|n^0\rangle + \lambda |n^1\rangle + \dots) \quad (12.6)$$

Ordnen nach Potenzen:

$$\hat{H}_0 |n^0\rangle + \lambda(\hat{H}_0 |n^1\rangle + \hat{H}_1 |n^0\rangle) + \dots = E_n^0 |n^0\rangle + \lambda(E_n^0 |n^1\rangle + E_n^1 |n^0\rangle) + \dots \quad (12.7)$$

Soll für alle λ erfüllt sein!

\Rightarrow Koeffizienten jeder Potenz λ^n müssen Null sein

$$\hat{H}_0 |n^0\rangle = E_n^0 |n^0\rangle \quad (12.8)$$

$$\hat{H}_0 |n^1\rangle + \hat{H}_1 |n^0\rangle = E_n^0 |n^1\rangle + E_n^1 |n^0\rangle \quad (12.9)$$

$$\hat{H}_0 |n^2\rangle + \hat{H}_1 |n^1\rangle = E_n^0 |n^2\rangle + E_n^1 |n^1\rangle + E_n^2 |n^0\rangle \quad (12.10)$$

$$\Rightarrow (\hat{H}_0 - E_n^0) |n^1\rangle = -\hat{H}_1 |n^0\rangle + E_n^1 |n^0\rangle \quad (12.11)$$

$$(\hat{H}_0 - E_n^0) |n^2\rangle = -\hat{H}_1 |n^1\rangle + E_n^1 |n^1\rangle + E_n^2 |n^0\rangle \quad (12.12)$$

$\langle m^0 | \cdot (12.11) :$

$$\langle m^0 | \hat{H}_0 - E_n^0 |n^1\rangle = -\langle m^0 | \hat{H}_1 |n^0\rangle + E_n^1 \langle m^0 |n^0\rangle \quad (12.13)$$

$$\Rightarrow (E_m^0 - E_n^0) \langle m^0 |n^1\rangle = -\langle m^0 | \hat{H}_1 |n^0\rangle + E_n^1 \delta_{mn} \quad (12.14)$$

$$m = n : E_n^1 = \langle n^0 | \hat{H}_1 |n^0\rangle \quad (12.15)$$

$$m \neq n : \langle m^0 |n^1\rangle = \frac{\langle m^0 | \hat{H}_1 |n^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0} \quad (12.16)$$

Es fehlt noch: $\langle n^0 |n^1\rangle$

Ist $|n^1\rangle$ Lsg. zu (12.11), dann auch $|n^1\rangle + \alpha |n^0\rangle$

$\Rightarrow \langle n^0 |n^1\rangle$ ist nicht eindeutig bestimmt

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

Ebenso für höhere Ordnungen: $\langle n^0 |n^k\rangle = 0$ für $k \geq 1$

Damit:

$$\boxed{E_n^1 = \langle n^0 | \hat{H}_1 |n^0\rangle \quad |n^1\rangle = \sum_{m \neq n} |m^0\rangle \frac{\langle m^0 | \hat{H}_1 |n^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0}} \quad (12.17)$$

Aus (12.12):

$$\underbrace{\langle n^0 | \hat{H}_0 - E_n^0 |n^2\rangle}_{=0} = -\langle n^0 | \hat{H}_1 |n^1\rangle + E_n^1 \underbrace{\langle n^0 |n^1\rangle}_{=0} + E_n^2 \underbrace{\langle n^0 |n^0\rangle}_{=1} \quad (12.18)$$

$$\Rightarrow E_n^2 = \langle n^0 | \hat{H}_1 |n^1\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m^0 | \hat{H}_1 |n^0\rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0} \quad (12.19)$$

Entartung: $E_n^0 - E_m^0 = 0$, divergent!

12.2 Störungstheorie für entartete Zustände

Sei E_n^0 k -fach entartet

$$\hat{H}_0 | m_\alpha^0 \rangle = E_n^0 | m_\alpha^0 \rangle, \quad \alpha = 1, \dots, k \quad (12.20)$$

Ungestörte Eigenvektoren seien orthonormiert $\langle m_\alpha^0 | m_\beta^0 \rangle = \delta_{\alpha\beta}$

Führende Ordnung:

$$\hat{H}_0 | n^0 \rangle = E_n^0 | n^0 \rangle \quad (12.21)$$

$$| n^0 \rangle = \sum_{\alpha} c_{\alpha} | m_{\alpha}^0 \rangle \quad (12.22)$$

Wie sind die c_{α} zu wählen?

$\langle n_{\beta}^0 | \cdot (12.11)$:

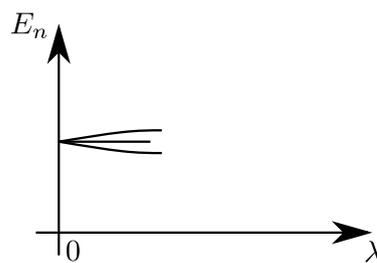
$$\underbrace{\langle n_{\beta}^0 | \hat{H}_0 - E_n^0 | n^1 \rangle}_{=0} = -\langle n_{\beta}^0 | \hat{H}_1 - E_n^1 | n^0 \rangle \quad (12.23)$$

$$\Rightarrow \sum_{\alpha} \underbrace{\langle n_{\beta}^0 | \hat{H}_1 | n_{\alpha}^0 \rangle}_{\equiv H_{1\beta\alpha}} c_{\alpha} = E_n^1 c_{\beta} \quad (12.24)$$

$\Rightarrow E_n^1$ ist Eigenwert der Matrix $\underline{H}_{1\alpha\beta}$

k Lösungen aus $\det(\underline{H}_1 - E_n^1 \mathbb{1}) = 0$ Lineare Algebra

Diese sind im Allgemeinen verschieden \Rightarrow Aufhebung der Entartung



$$E_{n,\gamma}^1 \quad \gamma = 1, \dots, k \quad (12.25)$$

$$c_{\alpha}^{(\gamma)} \Rightarrow | n^{0(\gamma)} \rangle \quad (12.26)$$

12.3 Anwendung: Wasserstoffatom II

Verbesserung der Näherungen aus Kap. 9 durch Korrekturen

a) Relativistische kinetische Energie

$$E = \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2} = mc^2 + \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{8} \frac{p^4}{m^3 c^2} + \dots \quad (12.27)$$

$$\langle p \rangle / mc \ll 1 \quad \text{im Atom} \quad (12.28)$$

Berücksichtigung des ersten Korrekturterms:

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{\gamma}{r} \longrightarrow \hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_a \quad (12.29)$$

$$\hat{H}_a = -\frac{1}{8m^3 c^2} (\hat{\mathbf{p}}^2)^2 = -\frac{1}{2mc^2} (\hat{H}_0 + \frac{\gamma}{r})^2 \quad (12.30)$$

b) Spin-Bahn-Kopplung

$$\hat{H}_b = \frac{1}{2m^2 c^2} \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}} \frac{1}{r} V'(r) = \frac{1}{2m^2 c^2} \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}} \frac{\gamma}{r^3} \quad (12.31)$$

Heuristisch: im Ruhesystem des Elektrons \exists Magnetfeld vom Kern, \mathbf{B}_K

\Rightarrow Kopplung $\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{B}}_K$ in Pauligleichung

und einige weitere ...

Anwendung Störungstheorie:

Nullte Ordnung:

$$\hat{H}_0 | n^0 \rangle = E_n^0 | n_0 \rangle \quad (12.32)$$

Lsg. Kap. 9:

$$E_n = -\frac{me^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{mc^2 \alpha^2}{2} \frac{1}{n^2} \quad (12.33)$$

$$\text{mit } \alpha = \frac{e^2}{\hbar c (4\pi\epsilon_0)} = \frac{1}{137.036} \quad \text{Feinstrukturkonstante} \quad (12.34)$$

Energien: l -entartet

Zustände:

$$| n^0 \rangle = | n; l, m; m_s \rangle \quad m_s = \pm \frac{1}{2} \quad (12.35)$$

Addition von $\mathbf{L} + \mathbf{S} = \mathbf{J}$, neue Basis

$$|n; j, m_j; l\rangle \quad j = l \pm \frac{1}{2} \quad (12.36)$$

$$\hat{H}_a = -\frac{1}{2}mc^2 \left(\hat{H}_0 + \frac{\gamma}{r} \right)^2 \quad \text{ist in dieser Basis schon diagonal, da} \quad (12.37)$$

$$[\hat{H}_a, \hat{\mathbf{L}}^2] = [\hat{H}_a, \hat{\mathbf{J}}^2] = [\hat{H}_a, \hat{\mathbf{J}}_3] = 0 \quad (12.38)$$

$\Rightarrow |n; j, m_j, l\rangle$ sind "gute Quantenzahlen"

\Rightarrow nicht entartete Störungstheorie mit Zuständen aus 11.3

a) Benötige:

$$\langle n; j', m'_j; l' | \hat{H}_a | n; j, m_j; l \rangle \quad (12.39)$$

$$= -\frac{1}{2mc^2} \langle n; j', m'_j; l' | \hat{H}_0^2 + 2\gamma \hat{H}_0 \frac{1}{r} + \gamma^2 \frac{1}{r^2} | n; j, m_j; l \rangle \quad (12.40)$$

$$= -\frac{1}{2mc^2} \left[(E_n^0)^2 \delta_{jj'} \delta_{m_j m'_j} \delta_{ll'} + 2\gamma E_n^0 \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nl} \delta_{jj'} \delta_{m_j m'_j} \delta_{ll'} \right. \quad (12.41)$$

$$\left. + \gamma^2 \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_{nl} \delta_{jj'} \delta_{m_j m'_j} \delta_{ll'} \right] \quad (12.42)$$

Es ist (vgl. Kap 9.1) Erwartungswert Radialwellenfkt (Übung):

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nl} = \frac{1}{an^2} \quad (12.43)$$

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_{nl} = \frac{1}{a^2 n^3 (l + \frac{1}{2})} \quad (12.44)$$

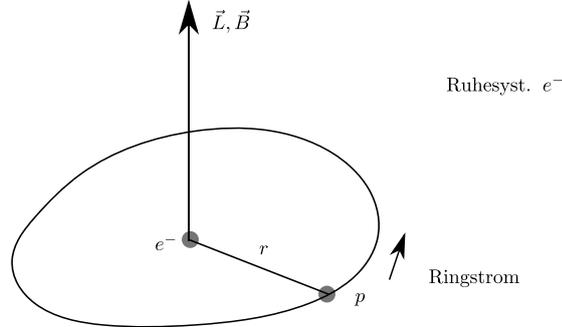
$$\Rightarrow \langle \hat{H}_a \rangle = \langle n; j, m_j; l | \hat{H}_a | n; j, m_j; l \rangle \quad (12.45)$$

$$= -\frac{1}{2mc^2} \left[\frac{\gamma^2}{4a^2 n^4} - 2 \frac{\gamma}{an^2} \gamma \frac{1}{n^2 a} + \gamma^2 \frac{1}{(l + \frac{1}{2}) n^3 a^2} \right] \quad (12.46)$$

$$a = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{mc^2} = \frac{\hbar^2}{m\gamma} \quad (12.47)$$

$$= E_n^0 \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{l + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \quad (12.48)$$

b) Magnetfeld des Protons, klassisch:



Biot-Savart: $B = \frac{\mu_0 I}{2r}$

$I = \frac{e}{T}$ T Umlaufzeit

Bahndrehimpuls: $L = r m v = r m \frac{2\pi r}{T} \Rightarrow T = \frac{2\pi m r^2}{L}$

$$\Rightarrow \mathbf{B} = \frac{\mu_0}{2r} \frac{e \mathbf{L}}{2\pi m r^2} = \frac{e}{4\pi \epsilon_0} \frac{1}{m c^2 r^3} \mathbf{L} \quad (12.49)$$

$$\boldsymbol{\mu}_s = g_L \frac{q}{2m} \mathbf{S} = -\frac{e}{m} \mathbf{S} \quad (12.50)$$

$$\Rightarrow \hat{H}_b = -\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B} = \frac{e^2}{4\hbar \epsilon_0} \frac{1}{m^2 c^2 r^3} \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}} \quad (12.51)$$

Achtung: Ruhesystem des e^- kein Inertialsystem

\Rightarrow Faktor $\frac{1}{2}$ aus "Thomas-Präzession"; alternativ gesamter Term aus Diracgleichung
Insgesamt:

$$\hat{H}_b = \frac{e^2}{8\pi \epsilon_0} \frac{1}{m^2 c^2 r^3} \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}} = \frac{1}{2m^2 c^2} \frac{\gamma}{r^3} \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}} \quad (12.52)$$

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = \hat{\mathbf{L}}^2 + \hat{\mathbf{S}}^2 + 2\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} \quad (12.53)$$

$$\Rightarrow \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}} = \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{S}}^2) \quad (12.54)$$

$$\Rightarrow \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}} |n; j, m_j; l\rangle = \frac{\hbar^2}{2} (j(j+1) - l(l+1) - \underbrace{\frac{3}{4}}_{s(s+1)}) |n; j, m_j; l\rangle \quad (12.55)$$

$$\langle \hat{H}_b \rangle = \frac{1}{2m^2 c^2} \frac{\hbar^2}{2} \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \gamma \langle \frac{1}{r^3} \rangle_{nl} \quad (12.56)$$

$$l \geq 1: \quad \langle \frac{1}{r^3} \rangle_{nl} = \frac{1}{a^3 n^3 l(l+1)(2l+1)} \quad (12.57)$$

$$l = 0: \quad \langle H_b \rangle = 0 \quad (12.58)$$

$$l \geq 1: \quad \langle \hat{H}_b \rangle = -E_n^0 \frac{\alpha^2}{n^2} \frac{n}{l(l+1)(2l+1)} \times \begin{cases} l & j = l + \frac{1}{2} \\ -(l+1) & j = l - \frac{1}{2} \end{cases} \quad (12.59)$$

$$\langle \hat{H}_a + \hat{H}_b \rangle = -E_n^0 \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{3}{4} - \frac{n}{j + \frac{1}{2}} \right) \quad (12.60)$$

Für $l = 0$: Beitrag wie $\langle H_b \rangle$ durch Darwinterm (\hat{H}_c aus Diracgleichung)

Insgesamt für alle l und $j = l \pm \frac{1}{2}$:

$$E_{nj} = -mc^2 \frac{\alpha^2}{2n^2} \left[1 - \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{3}{4} - \frac{n}{j + \frac{1}{2}} \right) \right] \quad (12.61)$$

Beachte: Potenzreihe in α^2 mit Korrekturen $\sim \alpha^2 = 5.3 \cdot 10^{-5}$

H-Termschema mit Feinstruktur: $nL_j \quad L = S, P, D, F \dots$

$$\begin{array}{l} \text{-----} \quad 3D_{5/2} \\ \text{-----} \quad 3P_{3/2} \quad 3D_{3/2} \\ \text{-----} \quad 3S_{1/2}, \quad 3P_{1/2} \\ \\ \text{-----} \quad 2P_{3/2} \\ \text{-----} \quad 2S_{1/2}, \quad 2P_{1/2} \\ \text{-----} \quad 1S_{1/2} \end{array} \quad \left. \begin{array}{l} \\ \\ \\ \end{array} \right\} \begin{array}{l} \\ 4.5 \cdot 10^{-5} \text{ eV} \\ 10.2 \text{ eV} \end{array}$$

Anormaler Zeemaneffekt

Erste Behandlung in 9.2: ohne Spin, $\mathbf{L} \cdot \mathbf{B}$

Nur gültig für Atome mit $\mathbf{S} = 0$

Ungeradzahlige Anzahl von e^- : Hinweis auf Spin \Rightarrow H-Atom

Betrachte $\mathbf{B} = (0, 0, B)$

$$\hat{H} = \underbrace{\hat{H}_0}_{\text{Hamiltonian ohne } \mathbf{B}\text{-Feld}} + \hat{H}_z$$

Hamiltonian ohne \mathbf{B} -Feld

$$H_z = -\frac{q}{2m} (L_3 + 2S_3)B = -\frac{q}{2m} (J_3 + S_3)B \quad (12.62)$$

Ungestörte Energien:

$$\hat{H}_0 |n; j, m_j; l\rangle = E_{nj} |n; j, m_j; l\rangle \quad j = l \pm \frac{1}{2} \quad (12.63)$$

Störungstheorie 1. Ordnung.

$$\Delta E_{n,l\pm\frac{1}{2}} = \langle n; l \pm \frac{1}{2}, m_j; l | \hat{H}_z | n; l \pm \frac{1}{2}, m_j; l \rangle \quad (12.64)$$

Mit Zuständen aus 11.3

$$| n; l \pm \frac{1}{2}, m_j; l \rangle = \sqrt{\frac{l + m_j + \frac{1}{2}}{2l + 1}} | l, m_j \mp \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \rangle \quad (12.65)$$

$$\pm \sqrt{\frac{l - m_j + \frac{1}{2}}{2l + 1}} | l, m_j \pm \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \mp \frac{1}{2} \rangle \quad (12.66)$$

Damit:

$$\langle J_3 \rangle = \hbar m_j \quad (12.67)$$

$$\langle S_3 \rangle = \pm \frac{\hbar m_j}{2l + 1} \quad (12.68)$$

$$\Rightarrow \Delta E_{n,l\pm\frac{1}{2}} = \underbrace{\mu_B}_{=\frac{e\hbar}{2m}} B m \left(1 \pm \frac{1}{2l + 1} \right) \quad (12.69)$$

$$j = l \pm \frac{1}{2} \quad \text{-----} \quad \begin{array}{c} \text{=====} \\ \text{=====} \\ \text{=====} \\ \vdots \\ \text{=====} \end{array} \quad \mu_B B \left(1 \pm \frac{1}{2l + 1} \right)$$

Gültig für schwaches B-Feld!

Analoge Behandlung:
Stark-Effekt, Hyperfeinstruktur, ...

A Fouriertransformation und Deltafunktion

Fouriertransformation in 1d:

$$\tilde{\psi}(k) = \int dx \psi(x) e^{-ikx} \quad (\text{A.1})$$

$$\psi(x) = \int \frac{dk}{(2\pi)} \tilde{\psi}(k) e^{ikx} \quad (\text{A.2})$$

Einsetzen ineinander muss $\psi(x) = \psi(x)$ ergeben

$$\psi(x) = \int \frac{dk}{(2\pi)} \left(\int dy \psi(y) e^{-iky} \right) e^{ikx} \quad (\text{A.3})$$

$$= \int dy \underbrace{\left(\int \frac{dk}{(2\pi)} e^{ik(x-y)} \right)}_{=\delta(x-y)} \psi(y) \quad (\text{A.4})$$

Zur Integraldarstellung der Deltafunktion:

$$\int_{-\frac{1}{\epsilon}}^{\frac{1}{\epsilon}} dk e^{ikz} = \frac{e^{ikz} \Big|_{-\frac{1}{\epsilon}}^{\frac{1}{\epsilon}}}{iz} \quad (\text{A.5})$$

$$= \frac{e^{iz/\epsilon} - e^{-iz/\epsilon}}{iz} \quad (\text{A.6})$$

$$= 2 \frac{\sin \frac{z}{\epsilon}}{z} = 2\pi \delta_{\epsilon}(z) \quad (\text{A.7})$$

Dies entspricht einer bekannten Darstellung der Deltafunktion als Funktionenfolge:

$$\delta_{\epsilon}(z) = \frac{1}{\pi} \frac{\sin \frac{z}{\epsilon}}{z} \quad \delta(z) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \delta_{\epsilon}(z) \quad (\text{A.8})$$

Deltafunktion nur innerhalb eines Integrals als Funktion behandelbar, der Limes steht dann außerhalb; Probe:

$$\int dz \delta(z) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int dz \delta_{\epsilon}(z) \quad (\text{A.9})$$

$$= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \int dz \frac{\sin \frac{z}{\epsilon}}{z} \quad (\text{A.10})$$

$$= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{2}{\pi} \underbrace{\int_0^{\infty} dz \frac{\sin \frac{z}{\epsilon}}{z}}_{=\frac{\pi}{2}} \quad (\text{A.11})$$

$$= 1 \quad \checkmark \quad (\text{A.12})$$

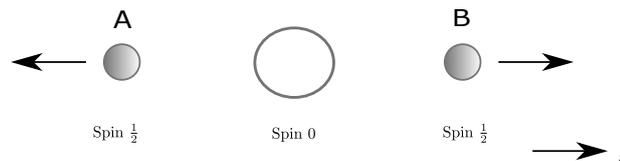
B EPR-Paradoxon und Bell'sche Ungleichung

Frage: Ist die Quantenmechanik eine vollständige physikalische Theorie?

Albert Einstein, Boris Podolsky, Nathan Rosen 1935

Gedankenexperiment zur Überprüfung: (Variante Bohm)

Zerfall eines Teilchens mit Spin 0 in Ruhe:



Messung der Spinkomponenten, Drehimpulserhaltung!
(in Einheiten von $\frac{\hbar}{2}$)

$$S_3^{(A)} = 1 \quad \Leftrightarrow \quad S_3^{(B)} = -1 \quad (\text{B.1})$$

$$S_3^{(A)} = -1 \quad \Leftrightarrow \quad S_3^{(B)} = +1 \quad (\text{B.2})$$

Wahrscheinlichkeit für Finden einer Paarung: 50 %

Es werde bei A zur Zeit t_1 $S_3^{(A)} = +1$ gemessen, Kontrollmessung bei B zu $t = t_1 + \Delta t$

Voraussetzung Lokalität: Es sei $\Delta t < c\Delta x$, d.h. es kann kein Austausch von Information zwischen A und B stattfinden

Kontrollmessung liefert $S_3^{(B)} = -1$ ✓

⇒ Vorhersage von $S_3^{(B)}$ möglich, nachdem Messung an A durchgeführt wurde, auch ohne Messung an B

⇒ Verschränkter Zustand

Einstein, Podolsky, Rosen:

- Kann man den Wert einer physikalischen Größe mit Sicherheit vorhersagen, ohne ein System zu stören, dann gibt es ein Element der physikalischen Realität, das dieser Größe entspricht

- In einer vollständigen Theorie muss jedes Element der physikalischen Realität eine Entsprechung haben

Es werde stattdessen eine Messung von $S_1^{(A)}$ ausgeführt:

\Rightarrow Vorhersage von $S_1^{(B)} = -S_1^{(A)}$

Lokalität: B kann nicht "wissen", welche Messung an A ausgeführt wird, und nicht von ihr beeinflusst werden

$\Rightarrow S_1^{(B)}$ und $S_3^{(B)}$ sind Elemente der Realität müssen gleichzeitig einen scharfen Wert haben

QM: $[S_1, S_3] \neq 0 \quad \nexists, \Rightarrow$ QM ist unvollständig als lokale, realistische Theorie!

Eine vollständige Theorie muss zusätzliche (verborgene) Parameter enthalten:
Diese legen die Spinkomponenten beim Teilchenzerfall, d. h. *vor* der Messung, fest

Kann diese Frage überhaupt experimentell entschieden werden?

John Bell, Ungleichungen 1964

Ungleichungen für die Korrelation von Messergebnissen an A und B

Gleiche Annahmen wie EPR:

- Physikalische Realität, d. h. Messwerte für Spins stehen schon vor der Messung fest
- Lokalität: Messung bei A kann Messung bei B nicht beeinflussen

Experiment: Spinmessung in beliebige Richtungen an zwei Teilchen:



Mögliche Messergebnisse: $M_A(\mathbf{a}) = \pm 1, M_B(\mathbf{b}) = \pm 1$

Bei gleichen Messrichtungen muss gelten: $M_A(\mathbf{a}) = -M_B(\mathbf{a})$

Durchführung einer Messreihe:

- Wähle Richtung an beiden Apparaten zufällig aus 3 Möglichkeiten: $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$
- Protokolliere die Messergebnisse $(\mathbf{a}+, \mathbf{c}-), (\mathbf{b}-, \mathbf{c}-), \dots$

- Anschließend Auswertung Korrelationsfunktion: $P(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \langle M_A(\mathbf{a})M_B(\mathbf{b}) \rangle$

Drehimpulserhaltung:

$$P(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = -\langle M_A(\mathbf{a})M_A(\mathbf{b}) \rangle \quad (\text{B.3})$$

Behauptung Bell'sche Ungleichung:

$$\boxed{|P(\mathbf{a}, \mathbf{b}) - P(\mathbf{a}, \mathbf{c})| \leq 1 + P(\mathbf{b}, \mathbf{c})} \quad (\text{B.4})$$

Beachte: keine Voraussetzung der QM!

Beweis:

Mögliche Messwerte: $M_A(\mathbf{a}) = \alpha, M_A(\mathbf{b}) = \beta, M_A(\mathbf{c}) = \gamma; \quad \alpha, \beta, \gamma = \pm 1$

Realismus, vollständige Theorie:

\exists Wahrscheinlichkeitsverteilung für alle Richtungen *vor* der Messung

Wahrscheinlichkeit	A	B
	$\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$	$\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$
$p(+++)$	+++	---
$p(++-)$	++-	--+
$p(+ - +)$	+ - +	- + -
$p(- + +)$	- + +	+ - -
$p(+ - -)$	+ - -	- + +
$p(- + -)$	- + -	+ - +
$p(- - +)$	- - +	+ + -
$p(- - -)$	- - -	+ + +

$$\text{mit } \sum_{\alpha, \beta, \gamma} p(\alpha, \beta, \gamma) = 1 \quad (\text{B.5})$$

Die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten z.B. der Paarung $(\mathbf{a}+; \mathbf{b}-)$ ist dann:

$$p(\mathbf{a}, +; \mathbf{b}, -) = p(+++) + p(++-) \quad (\text{B.6})$$

Auswertung Korrelationsfunktion:

$$\Rightarrow P(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = - \sum_{\alpha, \beta, \gamma} p(\alpha, \beta, \gamma) \alpha \beta \quad (\text{B.7})$$

$$P(\mathbf{a}, \mathbf{c}) = - \sum_{\alpha, \beta, \gamma} p(\alpha, \beta, \gamma) \alpha \gamma \quad (\text{B.8})$$

$$P(\mathbf{a}, \mathbf{b}) - P(\mathbf{a}, \mathbf{c}) = - \sum_{\alpha, \beta, \gamma} p(\alpha, \beta, \gamma) (\alpha \beta - \alpha \gamma) \quad (\text{B.9})$$

$$= - \sum_{\alpha, \beta, \gamma} p(\alpha, \beta, \gamma) (\alpha \beta - \alpha \underbrace{\beta^2}_{=1} \gamma) \quad (\text{B.10})$$

$$= - \sum_{\alpha, \beta, \gamma} p(\alpha, \beta, \gamma) \alpha \beta (1 - \beta \gamma) \quad (\text{B.11})$$

$$|P(\mathbf{a}, \mathbf{b}) - P(\mathbf{a}, \mathbf{c})| = \left| \sum_{\alpha, \beta, \gamma} p(\alpha, \beta, \gamma) \underbrace{\alpha \beta}_{\pm 1} \underbrace{(1 - \beta \gamma)}_{0,2} \right| \quad (\text{B.12})$$

$$\leq \sum_{\alpha, \beta, \gamma} p(\alpha, \beta, \gamma) (1 - \beta \gamma) \quad (\text{B.13})$$

$$\Rightarrow |P(\mathbf{a}, \mathbf{b}) - P(\mathbf{a}, \mathbf{c})| \leq 1 + P(\mathbf{b}, \mathbf{c}) \quad (\text{B.14})$$

Gültig wenn:

1. Messergebnisse vorher feststehen
2. Messungen bei A nicht von B beeinflusst werden

Auswertung in QM:

$$P(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \langle M_A(\mathbf{a}) M_B(\mathbf{b}) \rangle = \frac{4}{\hbar^2} \langle (\mathbf{S}^{(A)} \cdot \mathbf{a}) (\mathbf{S}^{(B)} \cdot \mathbf{b}) \rangle_{\text{Singulett}} \quad (\text{B.15})$$

Singulettzustand (Spin 0) aus Kap. 11.2:

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle - \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle \right) \quad (\text{B.16})$$

$$\langle 0, 0 | (\mathbf{S}^{(A)} \cdot \mathbf{a}) (\mathbf{S}^{(B)} \cdot \mathbf{b}) | 0, 0 \rangle \quad (\text{B.17})$$

$$= \frac{1}{2} \left(\langle + | \mathbf{S} \cdot \mathbf{a} | + \rangle \langle - | \mathbf{S} \cdot \mathbf{b} | - \rangle - \langle + | \mathbf{S} \cdot \mathbf{a} | - \rangle \langle - | \mathbf{S} \cdot \mathbf{b} | + \rangle \right. \\ \left. - \langle - | \mathbf{S} \cdot \mathbf{a} | + \rangle \langle + | \mathbf{S} \cdot \mathbf{b} | - \rangle + \langle - | \mathbf{S} \cdot \mathbf{a} | - \rangle \langle + | \mathbf{S} \cdot \mathbf{b} | + \rangle \right) \quad (\text{B.18})$$

In der S_3 -Basis sind die Matrixelemente:

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{a} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} a_3 & a_1 - ia_2 \\ a_1 + ia_2 & -a_3 \end{pmatrix} \quad (\text{B.19})$$

$$= \frac{\hbar^2}{8} \left(-a_3 b_3 - (a_1 - ia_2)(b_1 + ib_2) - (a_1 + ia_2)(b_1 - ib_2) - a_3 b_3 \right) \quad (\text{B.20})$$

$$= -\frac{\hbar^2}{4} \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \quad (\text{B.21})$$

$$\Rightarrow P(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = -\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \quad (\text{B.22})$$

Widerspruch mit Bell für spezielle Wahl der Richtungen:

$$\mathbf{a} = (1, 0, 0), \quad \mathbf{b} = (0, 1, 0), \quad \mathbf{c} = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, 1, 0) \quad (\text{B.23})$$

$$P(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = 0, \quad P(\mathbf{a}, \mathbf{c}) = P(\mathbf{b}, \mathbf{c}) = -\frac{\sqrt{2}}{2} = -0.707 \quad (\text{B.24})$$

$$|P(\mathbf{a}, \mathbf{b}) - P(\mathbf{a}, \mathbf{c})| = 0.707, \quad 1 + P(\mathbf{b}, \mathbf{c}) = 0.293 \quad \text{↯↯} \quad (\text{B.25})$$

Was stimmt nun??

Experimentelle Überprüfung \geq 1981, Alain Aspect et al.: QM-Vorhersage stimmt!

\Rightarrow Keine lokale realistische Theorie ist mit dem Experiment verträglich!