

# Theoretische Physik D: Quantenmechanik I

Sommersemester 2009

## Inhaltsverzeichnis

|          |  |           |
|----------|--|-----------|
| <b>1</b> | <b>Grundbegriffe</b>                                       | <b>1</b>  |
| 1.1      | Ursprung der Quantenphysik . . . . .                       | 3         |
| 1.2      | Zustände, Observable, Operatoren . . . . .                 | 4         |
| 1.3      | Ort, Impuls, Energie . . . . .                             | 21        |
| 1.4      | Tensorprodukt . . . . .                                    | 35        |
| 1.5      | Zeitentwicklung . . . . .                                  | 36        |
| <b>2</b> | <b>Teilchen im Potenzial</b>                               | <b>41</b> |
| 2.1      | $V = 0$ (freies Teilchen) . . . . .                        | 41        |
| 2.2      | Kastenpotential . . . . .                                  | 43        |
| 2.3      | Harmonischer Oszillator . . . . .                          | 48        |
| <b>3</b> | <b>Drehung, Drehimpuls, Spin</b>                           | <b>57</b> |
| 3.1      | Drehungen und ihre Erzeuger . . . . .                      | 57        |
| 3.2      | Eigenwerte des Drehimpulsoperator . . . . .                | 62        |
| <b>4</b> | <b>Wasserstoffatom</b>                                     | <b>72</b> |
| 4.1      | Zentralpotentiale . . . . .                                | 72        |
| 4.2      | Wasserstoffatom . . . . .                                  | 75        |
| <b>5</b> | <b>Zeitunabhängige Störungstheorie</b>                     | <b>80</b> |
| 5.1      | Nicht entartete Störungstheorie . . . . .                  | 80        |
| 5.2      | Entartete Störungstheorie . . . . .                        | 83        |
| 5.3      | Anwendung: Feinstruktur des Wasserstoffspektrums . . . . . | 86        |
| <b>6</b> | <b>Streutheorie</b>  | <b>90</b> |

## 1 Grundbegriffe

Die klassische Physik beschreibt folgende Phänomene nicht korrekt ...

- a) ...in der Physik makroskopischer Systeme
- Energieverteilung der Schwarzkörperstrahlung
  - spezifische Wärme bei niedrigen Temperaturen
  - Kondensation
  - Suprafluidität
  - Kohäsion von Festkörpern und Flüssigkeiten
  - Gitterschwingungen (Phononen)
  - elektrische Leitfähigkeit (Normal-, Halbleiter-, Supraleiter-)
  - Ferromagnetismus
- b) ...in der Atom- und Molekülphysik
- Größe und Stabilität der Atome
  - Ladungsverteilungen
  - Spektren
  - Wechselwirkung mit Licht (z.B. Photoeffekt)
  - Molekülschwingungen
  - chemische Bindungen (z.B. Van-der-Waals-Bindung)
- c) ...in der Kernphysik
- Größe und Stabilität der Kerne
  - Wechselwirkung von  $\gamma$ -Strahlen mit Kernen
  - radioaktiver Zerfall
  - Kernspaltung und -fusion
- d) ...in der Elementarphysik
- Masse, Ladung, Drehimpuls, magnetisches Moment der Elementarteilchen
  - Wechselwirkung mit Strahlung (Comptoneffekt)
  - Streuung, Zerfall
  - Teilchenerzeugung

Die Quantenmechanik (QM) bildet die Grundlage des Verständnisses dieser Phänomene.

## 1.1 Ursprung der Quantenphysik

1901: Planck: Schwarzkörperstrahlung

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

$$h \approx 6,6 \cdot 10^{-35} \text{Js} = 4 \cdot 10^{-15} \text{eVs}$$

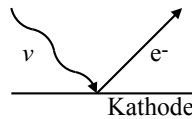


Abbildung 1: Photoeffekt

1905: Deutung des Photoeffekts (1) durch Einstein:

$$E = h\nu - W$$

$W$ : Austrittsarbeit,  $E$ : unabhängig von der Intensität  $I$  des Lichts. Photon mit Energie  $E = h\nu$ ,  $I \propto$  Zahl der Photononen.

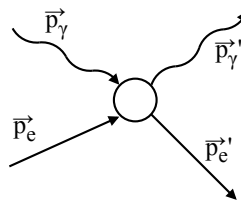


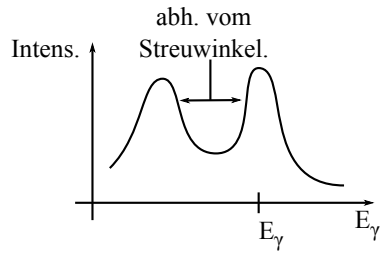
Abbildung 2: Comptoneffekt

1924: Compton-Effekt (2): Impuls der Photonen:  $0 = mc^2 = \sqrt{E^2 - \vec{p}^2 c^4}$

$$hc|\vec{k}| = \hbar\omega = E = |\vec{p}|c \implies |\vec{p}| = \hbar|\vec{k}|, \quad (2)$$

$\vec{k}$ : Wellenvektor

$$\begin{aligned} E_\gamma + E_e &= E'_\gamma + E'_e \\ \vec{p}_\gamma + \vec{p}_e &= \vec{p}'_\gamma + \vec{p}'_e \end{aligned}$$



*klassische Physik:*  $e^-$  wird kontinuierlich beschleunigt,  $\Delta E$  (aus Dopplereffekt) wächst mit Zeit.

1923: Broglie: Alle Teilchen haben Wellennatur

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} \rightsquigarrow \lambda = \frac{\hbar}{|\vec{p}|} \text{ deBroglie - Wellenlänge}$$

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

1927: Davisson, Gerner:  $e^-$  an Einkristall gestreut, Laue-Diagramm

1928: G.P. Thomsen / Rupp: Debye-Scherrer

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

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

$R$ : Rydberg-Konstante

1913: N. Bohr: Energie-Quantisierung:

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

Bohr-Sommerfeld-Quantisierung: klassische Bahn des  $e^-$  um Atomkern, Hamilton-Funktion

$$H(p, q) = \text{const.} \quad \underbrace{\oint p \, dq}_{(*)} = nh, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

(\*) = Bahn im Phasenraum

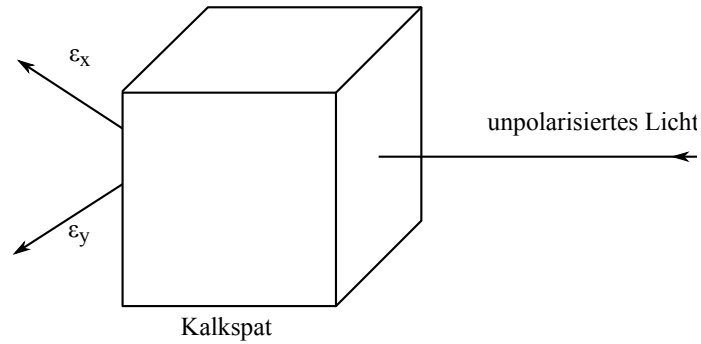
## 1.2 Zustände, Observable, Operatoren

| klassisch. | QM        |
|------------|-----------|
| Welle      | } Zustand |
| Teilchen   |           |

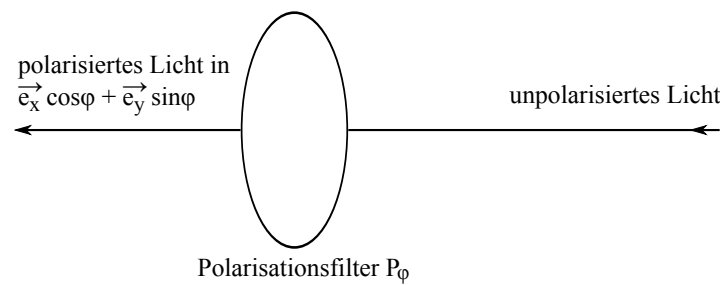
Photon mit Wellenzahlvektor  $\vec{k}$  und Polarisation  $\varepsilon \in \{\varepsilon_x, \varepsilon_y\}$ :

$$\text{Zustand : } |\vec{k}, \varepsilon\rangle, \quad \vec{p} = \hbar \vec{k}, \quad E = \hbar c |\vec{k}| \quad (3)$$

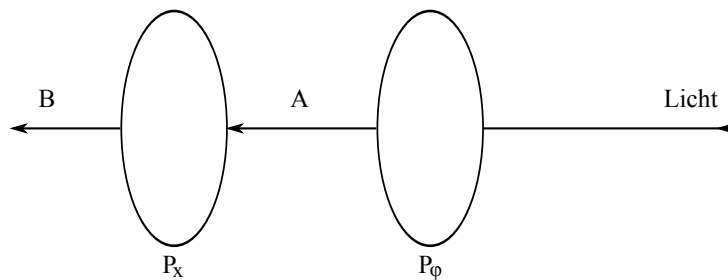
Nur Polarisation betrachtet  $\rightsquigarrow$  Doppelbrechender Kristall: Kalkspat



Polarisationsfilter  $P_\varphi$ :



$$P_x := P_{\varphi=0}, \quad P_y := P_{\varphi=\frac{\pi}{2}}$$

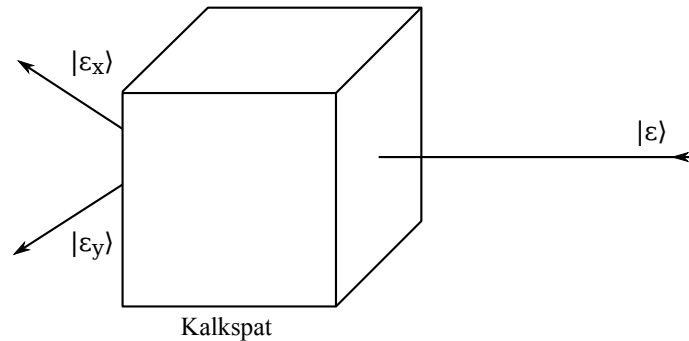


Beobachtung: Intensität ist bei  $B$  gegenüber  $A$  um  $\cos^2 \varphi$  abgeschwächt. Das entspricht dem *klassischen Wellenbild*.

*Teilchenbild*: Könnte die Photonenenergie abgeschwächt sein? Nein:  $E = \hbar \omega$  ist gleichgeblieben.

*statistische Interpretation:* Die Wahrscheinlichkeit, dass ein in  $\varphi$ -Richtung polarisiertes Photon  $P_x$  passiert, ist  $\cos^2 \varphi$ .

Kalkspat:



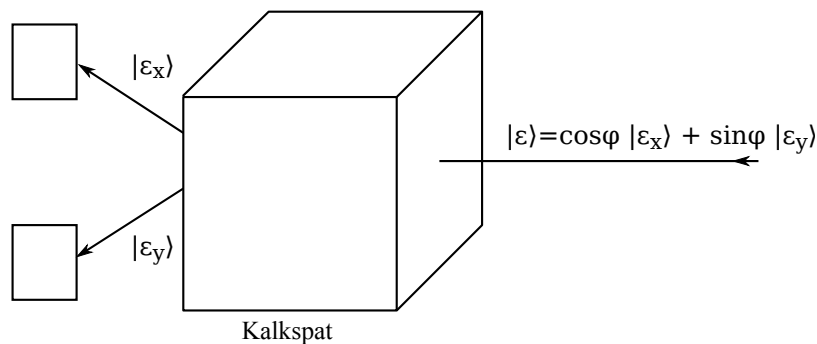
Komponenten-Zerlegung:

$$|\varepsilon\rangle = \alpha |\varepsilon_x\rangle + \beta |\varepsilon_y\rangle \quad (4)$$

Zustände bilden einen komplexen Vektorraum  $\mathcal{H}$ . Im Fall von Polarisationszuständen gilt

$$\dim \mathcal{H} = 2. \quad (5)$$

Zustandsvektoren nennt man auch *Kets*. Es beschreibe  $|\varepsilon_\varphi\rangle$  den Zustand eines in  $\vec{e}_x \cos \varphi + \vec{e}_y \sin \varphi$  Richtung linear polarisierten Photons.



Beobachtungen:

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

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

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

Man schreibt:

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

$P_\varphi$  ist Operator auf dem Vektorraum  $\mathcal{H}$ :

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

Es gilt:

$$\begin{aligned} P_\varphi |\varepsilon_\varphi\rangle &= P_\varphi [\cos \varphi |\varepsilon_y\rangle + \sin \varphi |\varepsilon_x\rangle] \\ &= \cos \varphi P_\varphi |\varepsilon_x\rangle + \sin \varphi P_\varphi |\varepsilon_y\rangle \\ &= \cos^2 \varphi |\varepsilon_\varphi\rangle + \sin^2 \varphi |\varepsilon_\varphi\rangle \\ &= |\varepsilon_\varphi\rangle \end{aligned} \quad (9 + 10)$$

## Mathematischer Exkurs

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

1.) *Skalarprodukt*: Eine Abbildung  $\mathcal{H} \times \mathcal{H} \longrightarrow \mathbb{C}$ ,  $(|\psi\rangle, |\chi\rangle) \longmapsto \langle \psi | \chi \rangle$  mit:

$$\langle \psi | \lambda_1 \chi_1 + \lambda_2 \chi_2 \rangle = \lambda_1 \langle \psi | \chi_1 \rangle + \lambda_2 \langle \psi | \chi_2 \rangle, \quad (11)$$

$$\langle \psi | \chi \rangle = \overline{\langle \chi | \psi \rangle}, \quad (12)$$

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

$\| |\psi\rangle \| := \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle}$  heißt *Norm* von  $|\psi\rangle$ . Gilt  $\langle \psi | \chi \rangle = 0$ , so heißen  $|\psi\rangle$  und  $|\chi\rangle$  *orthogonal*.

2.) *Orthonormalbasis (ONB)*: Eine endliche Teilmenge  $\{ |e_i\rangle, \dots, |e_N\rangle \} \subset \mathcal{H}$  mit

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

3.) *Linearer Operator*: Eine Abbildung  $A : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$ ,  $|\psi\rangle \longmapsto |A\psi\rangle = A|\psi\rangle$  mit

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

4.) *Zu  $A$  hermitesch konjugierter (oder adjungierter) Operator*: Ein linearer Operator  $A^\dagger : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$  mit

$$\langle \chi | A\psi \rangle = \langle A^\dagger \chi | \psi \rangle. \quad (16)$$

5.) Ein *hermitescher (oder selbstadjungierter) Operator*  $A$  ist ein Operator mit

$$A = A^\dagger \quad (17)$$

6.) *Eigenket (oder Eigenvektor) von  $A$* : Ein Ket  $|\psi_\lambda\rangle$  ( $\lambda \in \mathbb{C}$ ), mit

$$A|\psi_\lambda\rangle = \lambda|\psi_\lambda\rangle \quad (18)$$

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

$$A^{-1}A|\psi\rangle = AA^{-1}|\psi\rangle, \quad |\psi\rangle \in \mathcal{H} \quad (19)$$

gilt, so ist  $A$  *invertierbar* und  $A^{-1}$  heißt der *zu  $A$  inverse Operator*.

8.) Gilt  $U^{-1} = U^\dagger$  (d.h.  $U^\dagger U = UU^\dagger = \mathbb{1}$ ), so heißt  $U$  *unitär*. In diesem Fall gilt also:

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

9.) *Matrixdarstellung*: Betrachte eine ONB  $\{ |e_1\rangle, \dots, |e_n\rangle \}$ .

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

definiert die Matrixdarstellung  $a = (a_{ij})_{ij}$  von  $A$  bzgl.  $\{ |e_1\rangle, \dots, |e_n\rangle \}$ .

Eigenschaften dieser Objekte:

a) Dreiecksungleichung:

$$\| |\chi\rangle + |\psi\rangle \| \left\{ \begin{array}{l} <, & |\chi\rangle, |\psi\rangle \text{ l.u.} \\ =, & |\chi\rangle, |\psi\rangle \text{ l.abh.} \end{array} \right\} \| |\chi\rangle \| + \| |\psi\rangle \| \quad (22)$$

b) Schwarzsche Ungleichung:

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

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

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

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

e) Gilt in einer ONB  $\{ |e_1\rangle, \dots, |e_n\rangle \}$

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^N c_n |e_n\rangle, \quad |\xi\rangle = \sum_{k=1}^N d_k |e_k\rangle, \quad (24)$$



so folgt

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

mit

$$c = (c_1, \dots, c_n)^\dagger, \quad d = (d_1, \dots, d_n)^\dagger.$$

f) Aus 25 folgt:

- $a^{-1}$  ist Matrixdarstellung von  $A^{-1}$ ,
- $a^\dagger$  ist Matrixdarstellung von  $A^\dagger$
- $ab$  ist Matrixdarstellung von  $AB$
- mit  $|\psi_\lambda\rangle = \sum_{n=1}^N l_n |e_n\rangle$  in 18 ist  $l = (l_1, \dots, l_n)^\dagger$  EV von  $a$  zum Eigenwert  $\lambda$ .

g) Unitärer Basiswechsel:  $U^\dagger U = \mathbb{1}$ ,  $|e'_i\rangle := U |e_i\rangle$ .

$$\begin{aligned}\implies \langle e'_j | e'_i \rangle &= \langle U e_j | U e_i \rangle \\ &= \langle e_j | \underbrace{U^\dagger U}_{=\mathbb{1}} | e_i \rangle \\ &= \langle e_j | e_i \rangle = \delta_{ij}\end{aligned}$$

$\implies \{ |e'_1\rangle, \dots, |e'_n\rangle \}$  ist ONB.

Wegen f) haben hermitesche Operatoren  $A$  dieselben Spektraleigenschaften, wie hermitesche Matrizen: (26)

- (i) Es gibt ONB aus Eigenkets  $\{ |e_1\rangle, \dots, |e_n\rangle \}$  und
- (ii) alle EW sind reell.

Eigenschaft (i) schreibt man üblicherweise als

$$A = \sum_{j=1}^N \lambda_j |e_j\rangle \langle e_j|. \tag{27}$$

Die zugehörige Matrix ist  $a = \sum_{j=1}^N \lambda_j e^{(j)} e^{(j)\dagger}$ , wobei  $e^{(j)} = (e_1^{(j)}, \dots, e_N^{(j)})^\dagger$  EV von  $a$  zum EW  $\lambda_j$  ist.

Dabei ist  $P_j = |e_j\rangle \langle e_j|$  ein Projektionsoperator:

$$\begin{aligned}P_j |\psi\rangle &= |e_j\rangle \langle \psi | e_j \rangle = \langle \psi | e_j \rangle |e_j\rangle, \\ \implies P_j^2 &= |e_j\rangle \langle e_j | e_j \rangle \langle e_j| = |e_j\rangle \langle e_j| = P_j\end{aligned}\tag{28}$$

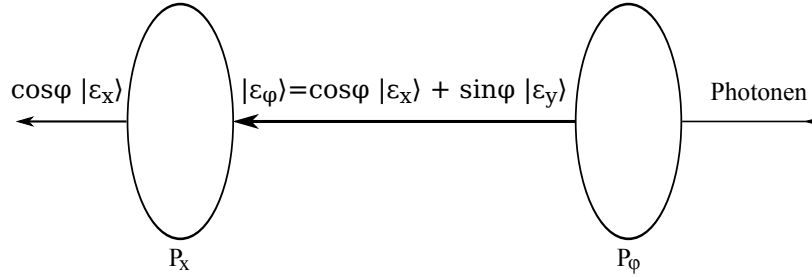
$$P_j^\dagger = P_j \iff \left[ a |\psi\rangle \langle \chi| \right]^\dagger = \alpha^* |\chi\rangle \langle \psi|, \quad \alpha \in \mathbb{C} \quad (29)$$

Zuordnung:

$$\begin{array}{ccc} \text{ket } |\psi\rangle & & \text{bra } \psi \\ \text{Spaltenvektor } c & \leftrightarrow & \text{Zeilenvektor } c^\dagger \end{array} \quad (30)$$

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

$$P_\varphi^2 = P_\varphi, \quad P_\varphi^\dagger = P_\varphi \implies P_\varphi \text{ Polarisationsoperator}$$



*Statistische Interpretation:* Wahrscheinlichkeit, dass für  $|\varepsilon_\varphi\rangle$  die Polarisation  $P_x$  gemessen wird ist

$$W_x = \cos^2 \varphi \stackrel{(17)}{=} |\langle \varepsilon_x | \varepsilon_\varphi \rangle|^2 \stackrel{(21)}{=} \langle \varepsilon_\varphi | \varepsilon_x \rangle \langle \varepsilon_x | \varepsilon_\varphi \rangle = \langle \varepsilon_\varphi | P_x | \varepsilon_\varphi \rangle \quad (31)$$

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

Ersetzt man  $P_x$  durch  $P_y$ , so findet man

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

also

$$W_x + W_y = 1, \quad P_x + P_y = \mathbb{1} \text{ und } P_x P_y = P_y P_x = 0. \quad (33)$$

(33) motiviert die

### Messpostulate der QM:

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

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

gegeben

(iii) Die statistische Varianz der wiederholten Messungen ist

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

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

Kurzschreibweise:

$$\begin{aligned}
\langle A \rangle &:= W, \\
\Delta A &:= \sigma.
\end{aligned} \tag{36}$$

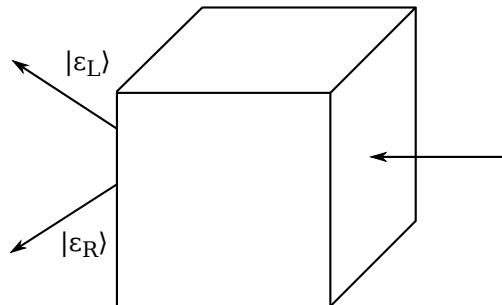
Im Fall der Polarisation  $P_x$  sind die möglichen Messwerte 0 (kein Ansprechen des Detektors) und 1 (Detektor spricht an).

$$\langle P_x \rangle = \langle \varepsilon_\varphi | P_x | \varepsilon_\varphi \rangle = \cos^2 \varphi, \tag{37}$$

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

|                           |                            |   |
|---------------------------|----------------------------|---|
| $\varphi = 0$             | $\Delta P_x = 0$           | $ \varepsilon_{\varphi=0}\rangle =  \varepsilon_x\rangle$ ist Zustand minimaler Unschärfe (EV von $P_x$ zum EW 1) |
| $\varphi = \frac{\pi}{2}$ | $\Delta P_x = 0$           | $ \varepsilon_{\varphi=\frac{\pi}{2}}\rangle =  \varepsilon_y\rangle$   |
| $\varphi = \frac{\pi}{4}$ | $\Delta P_x = \frac{1}{2}$ | Zustand maximaler Unschärfe   |

### Zirkular polarisierte Photonen



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

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

$|\varepsilon_L\rangle$  und  $|\varepsilon_R\rangle$  stehen orthogonal:

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon_R | \varepsilon_L \rangle &= \frac{1}{2} \langle \varepsilon_x + i\varepsilon_y | \varepsilon_x + i\varepsilon_y \rangle \\ &= \frac{1}{2} \langle \varepsilon_x | \varepsilon_x \rangle + \frac{i^2}{2} \langle \varepsilon_y | \varepsilon_y \rangle \\ &= 0 \end{aligned} \quad (41)$$

Operatoren:

$$\left. \begin{array}{l} P_L = |\varepsilon_L\rangle \langle \varepsilon_L| \\ P_R = |\varepsilon_R\rangle \langle \varepsilon_R| \end{array} \right\} \text{misst} \left\{ \begin{array}{l} \text{links - polarisierte} \\ \text{rechts - polarisierte} \end{array} \right\} \text{Polarisation} \dots \quad (42)$$

... bzw. präpariert links-/rechtspolarisierte zirkulare Photonen aus einem unpolarisierten Lichtstrahl.

Basiswechsel:

$$\begin{aligned} P_L = |\varepsilon_L\rangle \langle \varepsilon_L| &= \frac{1}{2} (|\varepsilon_x\rangle + i|\varepsilon_y\rangle) (\langle \varepsilon_x| - i\langle \varepsilon_y|) \\ &= \frac{1}{2} P_x + \frac{1}{2} P_y + \frac{i}{2} |\varepsilon_y\rangle \langle \varepsilon_x| - \frac{i}{2} |\varepsilon_x\rangle \langle \varepsilon_y| \end{aligned} \quad (43)$$

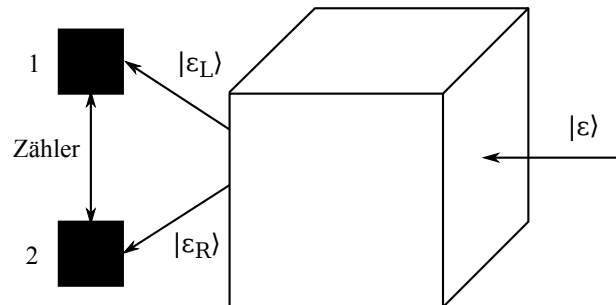
$\Rightarrow$  Matrixdarstellung bzgl  $\{ |\varepsilon_x\rangle, |\varepsilon_y\rangle \}$  ist gegeben durch

$$p_L = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix} \quad \text{links - zirkularer Polarisationsfilter} \quad (44)$$

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

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

*Messung der zirkularen Polarisation:*



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

$$\begin{aligned}\langle \varepsilon_L | P_L | \varepsilon_L \rangle &= \langle \varepsilon_L | \varepsilon_L \rangle \langle \varepsilon_L | \varepsilon_L \rangle = 1, \\ \langle \varepsilon_L | P_R | \varepsilon_L \rangle &= \langle \varepsilon_L | \varepsilon_R \rangle \langle \varepsilon_R | \varepsilon_L \rangle = 0,\end{aligned}$$

d.h. Zähler 1 klickt immer, 2 nie. Das kann man auch über die Matrixdarstellung der Operatoren berechnen:

$$\begin{aligned}\langle \varepsilon_L | P_L | \varepsilon_L \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(1, -i) \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{4}(1, -i) \begin{pmatrix} 2 \\ 2i \end{pmatrix} = 1, \\ \langle \varepsilon_L | P_R | \varepsilon_L \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(1, -i) \frac{1}{2} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}}_{=0} = 0\end{aligned}$$

Außerdem gilt für die Unschärfe

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

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

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

Ebenso

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

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

Unschärfe:

$$\begin{aligned}\langle \varepsilon_\varphi | (\Delta P_{L,R})^2 | \varepsilon_\varphi \rangle &= \langle \varepsilon_\varphi | P_{L,R}^2 | \varepsilon_\varphi \rangle - \langle \varepsilon_\varphi | P_{L,R} | \varepsilon_\varphi \rangle^2 = \frac{1}{4} \\ \Delta P_{L,R}(\varepsilon_\varphi) &= \sqrt{\frac{1}{4}} = \frac{1}{2}\end{aligned}\tag{48}$$

## Kopenhagener Interpretation des Messprozesses

Messungen verändern das physikalische Objekt, das der Messung unterzogen wird. Hat die Messung der Observablen  $A$  den Wert  $\lambda$  ergeben, so befindet sich das Objekt *nach* der Messung in einem Eigenzustand von  $A$  mit Eigenwert  $\lambda$  („spontane Zustandsreduktion“)

Erwartungswerte selbstadjungierter Operatoren  $A$  sind reell:

$$\langle \psi | A | \psi \rangle^* = \langle \psi | A^\dagger | \psi \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle \quad (49)$$

Kommutator, Anti-kommutator:

$$[A, B] := AB - BA \quad (50)$$

$$\{A, B\} := AB + BA \quad (51)$$

Seien  $A$  und  $B$  selbstadjungiert ( $A = A^\dagger, B = B^\dagger$ ). Dann gilt

$$[A, B]^\dagger = -[A, B], \quad (52)$$

$$\{A, B\}^\dagger = \{A, B\} \quad (53)$$

Operatoren mit (52) nennt man antiselbstadjungiert.

Betrachte Zustand  $|\psi\rangle$  mit  $\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle$  und  $\langle \psi | \psi \rangle = 1$  und die „Verschiebungen“

$$\begin{aligned} \bar{A} &:= A - \langle A \rangle \\ \bar{B} &:= B - \langle B \rangle \end{aligned} \quad (54)$$

Herleitung der Unschärferelation durch schwarzzsche Ungleichung (23):

$$\begin{aligned} \|\bar{A}\psi\| \cdot \|\bar{B}\psi\| &\geq |\langle \bar{A}\psi | \bar{B}\psi \rangle| \\ &= |\langle \psi | \bar{A}\bar{B} | \psi \rangle| && \text{da } \bar{A}^\dagger = \bar{A} \\ &= \frac{1}{2} \left| \underbrace{\langle \psi | [\bar{A}, \bar{B}] | \psi \rangle}_{\text{imaginär} \leftarrow (49)} + \underbrace{\langle \psi | \{\bar{A}, \bar{B}\} | \psi \rangle}_{\text{reell} \leftarrow (49)} \right| \\ &\geq \frac{1}{2} |\langle \psi | [\bar{A}, \bar{B}] | \psi \rangle| && \text{da } |z| \geq |\text{Im}z| \\ &= \frac{1}{2} |\langle \psi | [A, B] | \psi \rangle| \end{aligned} \quad (55)$$

Unschärfe:

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

Mit (55) folgt:

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle \psi | [A, B] | \psi \rangle| \quad \text{Unschärferelation} \quad (56)$$

Gilt  $[A, B] = 0$ , so nennt man  $A$  und  $B$  kommensurabel (=gemeinsam messbar) oder kompatibel. Es gibt dann eine Basis aus gemeinsamen Eigenkets  $|\alpha_i \beta_j\rangle$ ,  $\alpha_i, \beta_j \in \mathbb{R}$  mit

$$A |\alpha_i \beta_j\rangle = \alpha_i |\alpha_i \beta_j\rangle$$

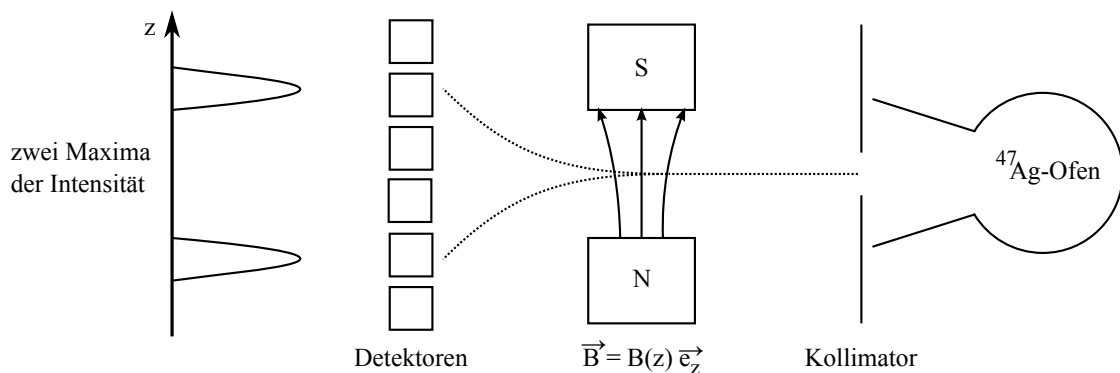
$$B |\alpha_i \beta_j\rangle = \beta_j |\alpha_i \beta_j\rangle$$

Für diese Zustände ist  $\Delta A = \Delta B = 0$ .

Die Eigenwerte  $\alpha_i, \beta_j$  nennt man auch Quantenzahlen von  $|\alpha_i \beta_j\rangle$  zu  $A$  und  $B$ .

### Stern-Gerlach-Versuch

1922; I.Stern, W. Gerlach: Silber-Atome: paramagnetisch mit magnetischem Moment  $\vec{\mu}$ .



klassisch:

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

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

$$F_z = \mu_z \frac{\partial B}{\partial z} \quad (\text{Kraftkomponente in } z\text{-Richtung})$$

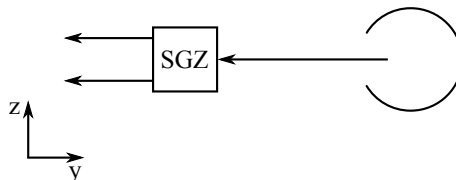
Atome können mit jedem Winkel nach oben oder unten abgelenkt werden.

1925: Goudsmit und Uhlenbeck entdeckten den Elektronenspin (=Eigendrehimpuls)

$$\vec{\mu} = \frac{e}{mc} \vec{s}, \quad e > 0 \quad (57)$$

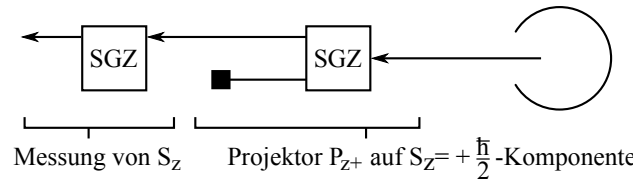
Silberatom  $^{47}\text{Ag}$ :  $\vec{\mu}$  aus dem 47.  $e^-$  (in 5s-Schale).

Schematisch:



Zwei SGZ hintereinander:

a)  $S_z = \frac{\hbar}{2}$ :



Elektron mit  $S_z = \frac{\hbar}{2}$

$$\begin{aligned} \left. \begin{matrix} P_{z+} \\ P_{z-} \end{matrix} \right\} |S_{z+}\rangle &= \begin{cases} |S_{z+}\rangle \\ 0 \end{cases} \\ \langle S_{z-} | S_{z+} \rangle &= 0 \end{aligned}$$

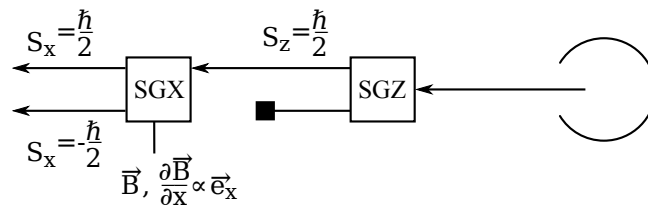
Spin-Operator:

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

Erwartungswert und Unschärfe:

$$\begin{aligned} \langle S_z \rangle &= \langle S_{z+} | S_z | S_{z+} \rangle = \frac{\hbar}{2} \\ (\Delta S_z)^2 &= \langle S_{z+} | S_z^2 - \frac{\hbar^2}{4} | S_{z+} \rangle = 0 \end{aligned} \quad (59)$$

b)



$$|S_{x+}\rangle = \frac{\alpha}{\sqrt{2}} |S_{z+}\rangle + \frac{\beta}{\sqrt{2}} |S_{z-}\rangle$$

$$\langle S_{x+} | S_{x+} \rangle = 1, |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 2 \rightsquigarrow \text{gleich gro\ss e Komponenten } |\alpha| = |\beta| = 1$$

Allgemein:  $|\psi\rangle$  und  $e^{i\varphi} |\psi\rangle$  beschreiben denselben physikalischen Zustand, denn f\u00fcr alle  $A$  gilt:

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



$\rightsquigarrow$  o.B.d.A. wähle Phasen von  $|S_{z+}\rangle$  und  $|S_{z-}\rangle$  so, dass  $\alpha = \beta = 1$  ist:

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

Projektoren:

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

$$\Rightarrow p_{x\pm} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & \pm 1 \\ \pm 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (62)$$

*Spin-Operator:*

$$S_x |S\rangle_{x\pm} = \pm \frac{\hbar}{2} |S_{x+}\rangle \quad (63)$$

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

$$\begin{aligned} |S_{z+}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} [|S_{x+}\rangle - |S_{x-}\rangle] \\ |S_{z-}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} [|S_{x+}\rangle + |S_{x-}\rangle] \end{aligned} \quad (64)$$

Es gilt:

$$\begin{aligned} \langle S_{z+} | S_x | S_{z+} \rangle &= \frac{1}{2} [\langle S_{x+} | S_x | S_{x+} \rangle - \langle S_{x-} | S_x | S_{x+} \rangle - \langle S_{x+} | S_x | S_{x-} \rangle + \langle S_{x-} | S_x | S_{x-} \rangle] \\ &= \frac{1}{2} \left[ \frac{\hbar}{2} - \frac{\hbar}{2} \right] = 0 \end{aligned}$$

Ebenso  $\langle S_{z-} | S_x | S_{z-} \rangle = 0$ .

$\rightsquigarrow$  genau gleich viele  $^{47}\text{Ag}$ -Atome mit  $S_x = \frac{\hbar}{2}$  und  $S_x = -\frac{\hbar}{2}$  beobachtet.

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

$$\Rightarrow s_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (66)$$

(65) entspricht

$$\langle S_{z+} | S_x | S_{z-} \rangle = (1, 0) \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}.$$

c) Nach SGX nochmal SGZ  $\rightsquigarrow S_z = \frac{\hbar}{2}$  und  $S_z = -\frac{\hbar}{2}$ .

Check:

$$|\psi\rangle = P_{x+} |S_{z+}\rangle = |S_{x+}\rangle \langle S_{x+} | S_{z+} \rangle \stackrel{(61)}{=} \frac{1}{2} |S_{z+}\rangle + \frac{1}{2} |S_{z-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |S_{x+}\rangle$$

Nun SGY (Apparatur drehen):  $x$ -Achse und  $y$ -Achse sind gleichberechtigt. Also:

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

mit  $|\alpha| = |\beta| = 1$ ,  $\langle S_{y\pm} | S_z | S_{y\pm} \rangle = 0$ ,  $\langle S_{y+} | S_{y-} \rangle = \frac{1}{2} [|\alpha|^2 - |\beta|^2] = 0$ . Weiter:

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

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

$$\begin{aligned} \langle S_{y\pm} | S_x | S_{y\mp} \rangle &= \langle S_{x\pm} | S_z | S_{x\mp} \rangle \\ &\stackrel{(60)}{=} \frac{1}{2} \left[ \mp \frac{\hbar}{2} \mp \frac{\hbar}{2} \right] = \mp \frac{\hbar}{2} \end{aligned} \quad (69)$$

Andererseits mit (67):

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

(68)-(70) bedeuten:

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

Lösung z.B.:  $\alpha = 1, \beta = i$ . Also:

$$|S_{y\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |S_{z+}\rangle \pm \frac{i}{\sqrt{2}} |S_{z-}\rangle \quad (71)$$

Inverse:

$$\begin{aligned} |S_{z+}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|S_{y+}\rangle + |S_{y-}\rangle) \\ |S_{z-}\rangle &= \frac{i}{\sqrt{2}} (-|S_{y+}\rangle + |S_{y-}\rangle) \end{aligned} \quad (72)$$

Matrixdarstellung:

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

### Pauli-Matrizen:

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

Spin-Operatoren:

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

*Eigenschaften der Pauli-Matrizen:* (siehe Aufgabe 6)

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

wobei  $\varepsilon_{jkl}$  das Levi-Civita-Symbol ist

$$\sigma_j = \sigma_j^\dagger \qquad \text{tr } \sigma_j = 0 \tag{77}$$

Jede hermitesche  $2 \times 2$ -Matrix  $M$  lässt sich schreiben als

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

Aus (77) folgt

$$a_0 = \frac{1}{2} \text{tr } M, \tag{79}$$

da  $\text{tr } \mathbb{1} = 2$ . Aus (76) folgt:

$$\begin{aligned}\text{tr } [M \sigma_k] &= \sum_{l=1}^3 a_l \text{tr } [\sigma_l \sigma_k] = \sum_{l=1}^3 a_l \delta_{lk} \text{tr } \mathbb{1} \\ \implies a_l &= \frac{1}{2} \text{tr } [M, \sigma_l]\end{aligned}\tag{80}$$

(75) / (76) implizieren die Vertauschungsrelationen für die Spinoperatoren:

$$[S_j, S_k] = i\hbar \sum_{l=1}^3 \varepsilon_{jkl} S_l \tag{81}$$

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

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

Damit ist

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

D.h. der Gesamtspin  $\vec{S}^2$  ändert sich durch Messung von  $S_x, S_y$  und  $S_z$  nicht.

*Seltsame Analogie:*

| Elektron   | Photon  |
|--|---|
| (58) $\uparrow  S_{z+}\rangle$   | $\left. \begin{array}{l}  \varepsilon_x\rangle \vdots \\  \varepsilon_y\rangle \cdots \\  \varepsilon_{\varphi=\frac{\pi}{4}}\rangle,  \varepsilon_{\varphi=\frac{3\pi}{4}}\rangle \\  \varepsilon_{L,R}\rangle \end{array} \right\} \quad (5)$ |
| (58) $\downarrow  S_{z-}\rangle$   |   |
| (60) $ S_{x\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [\pm  S_{z+}\rangle +  S_{z-}\rangle]$ |   |
| $ S_{y\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [ S_{z+}\rangle \pm i  S_{z-}\rangle]$      |   |
|  | (39)/(40)   |

Übliche Schreibweise:

$$\begin{aligned} |S_{z+}\rangle &= |\uparrow\rangle & \text{spin up} \\ |S_{z-}\rangle &= |\downarrow\rangle & \text{spin down} \end{aligned} \quad (84)$$

Basiswechsel: ( $U^\dagger U = \mathbb{1}$ )

$$|e'_j\rangle = |Ue_j\rangle, \quad j = 1, \dots, N \quad (85)$$

Sei  $A$  ein selbstadjungierter Operator mit

$$A|e_j\rangle = \lambda_j|e_j\rangle \quad (86)$$

Welcher Operator entspricht  $A$  in der Basis  $\{|e_j\rangle\}$ ?

$$\begin{aligned} (86) &\implies UA \underbrace{U^\dagger U}_{=\mathbb{1}} |e_j\rangle = U\lambda_j|e_j\rangle \\ &\implies UAU^\dagger |e'_j\rangle = \lambda_j|e'_j\rangle \\ &\implies A'|e'_j\rangle = \lambda_j|e'_j\rangle \end{aligned}$$

mit

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

Erfüllen zwei Operatoren  $A$  und  $A'$  die Gleichung (87), so heißen sie unitär äquivalent. I.d.Fall beschreiben sie die selbe Physik, sie haben insbesondere das selbe Spektrum  $\{\lambda_j\}$ .

Beispiel:  $US_xU^\dagger = S_z$ .

Matrixdarstellung von  $U$  bzgl.  $\{ |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle \}$ :

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

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

Basisunabhängig: Spur eines Operators  $A$ :

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

Beweis der Basisunabhängigkeit: Es gilt die Vollständigkeitsrelation:  $\sum_{k=1}^N |e'_k\rangle \langle e'_k| = 1$ .

$$\begin{aligned} \text{tr } A &= \sum_{j,k,l=1}^N \langle e_j | e'_k \rangle \langle e'_k | A | e'_l \rangle \langle e'_l | e_j \rangle \\ &= \sum_{j,k,l=1}^N \langle e'_k | A | e'_l \rangle \langle e'_l | e_j \rangle \langle e_j | e'_k \rangle \\ &= \sum_{k,l=1}^N \langle e'_k | A | e'_l \rangle \langle e'_l | e'_k \rangle \\ &= \sum_{k=1}^N \langle e'_k | A | e'_k \rangle \end{aligned}$$

Es ist also die Spur von  $A$  die Summe seiner Eigenwerte:

$$\text{tr } A = \sum_{j=1}^N \lambda_j. \quad (89)$$

Ebenso basisunabhängig:

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

### 1.3 Ort, Impuls, Energie

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

Ket für Elektron mit Impuls  $\vec{p}$ :

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

Eigenwertgleichung:

$$P_j |\vec{p}\rangle = p_j |\vec{p}\rangle, \quad (\vec{p} = (p_1, p_2, p_3)) \quad (92)$$

Idee:  $P_j e^{i \frac{\vec{p} \cdot \vec{x}}{\hbar}} = p_j e^{i \frac{\vec{p} \cdot \vec{x}}{\hbar}}$  ist erfüllt, mit der folgenden Definition:

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

$P_j$  ist ein Differentialoperator.  $P_j$  bildet von einem Funktionenraum in einen (evtl. anderen) Funktionenraum ab. Funktionenräume sind Vektorräume von Funktionen  $f : x \mapsto f(x)$ .

### (Standard-)Beispiele

- 1.)  $C[a, b]$  = Menge der auf  $[a, b]$  stetigen Funktionen  $f : x \in [a, b] \mapsto f(x)$   
 $C[\mathbb{R}^n]$  = Menge der auf dem  $\mathbb{R}^n$  stetigen Funktionen, allgemeiner:  
 $C[T]$  = Menge der auf  $T \subseteq \mathbb{R}^n$  stetigen Funktionen  
 Klar: Mit  $f, g$  ist auch  $\alpha f + \beta g$  mit  $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$  stetig  $\implies C[\dots]$  ist Vektorraum
- 2.)  $C^n[T]$  = Menge der  $n$ -mal stetig-differenzierbaren Funktionen  $f : x \in T \mapsto f(x)$   
 $C^\infty[T]$  = Menge der  $\infty$ -oft stetig diff'baren Funktionen ...
- 3.) Schwartz-Raum: umfasst Funktionen die selbst und deren Ableitung für  $|x| \rightarrow \infty$  schneller abfallen als jede Potenz

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

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

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

- 4.)  $\mathcal{L}^2[T]$  = Menge aller Funktionen  $f$ , für die  $\int_T |f(x)|^2 dx$  in  $\mathbb{R}$  existiert = Vektorraum der *quadratisch integrierbaren Funktionen*

Es gelten:

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

aber weder  $C[\mathbb{R}^n] \supset \mathcal{L}^2[\mathbb{R}^n]$  noch  $C[\mathbb{R}^n] \subset \mathcal{L}^2[\mathbb{R}^n]$ .

Skalarprodukt (=Innenprodukt):

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

sinnvoll für 1.) bis 3.)

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

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

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

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

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

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

5.) Für  $T \subseteq \mathbb{R}^n$ :

$$L^2[T] = \text{Menge aller Äquivalenzklassen bzgl. (96) in } \mathcal{L}^2[T] \quad (97)$$

(94) ist ein Skalarprodukt in  $\mathcal{L}^2[T]$ .

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

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

Es sei  $U$  ein unitärer Raum und  $(f_n) = (f_1, f_2, \dots)$  eine Folge in  $V$  (z.B.  $f_n(x) = \frac{1}{n} \sin(nx)$ ).  $(f_n)$  heißt *Cauchyfolge*, wenn es für  $\varepsilon > 0$  ein  $N \in \mathbb{N}$  gibt, so dass für alle  $m, n \geq N$  gilt:

$$\|f_m - f_n\| < \varepsilon.$$

Naiv:  $(f_n)$  konvergiert gegen ein  $f$ . Problem:  $f$  muss nicht unbedingt in  $U$  liegen!

Besitzt jede Cauchyfolge  $(f_n)$  einen Grenzwert  $f$  in  $V$ , so heißt  $V$  *vollständig*.

Beispiel mit Zahlenfolgen:

$$\underbrace{\left(1, \frac{14}{10}, \frac{141}{100}, \frac{1414}{1000}, \dots\right)}_{\subset \mathbb{Q}} \longrightarrow \sqrt{2} \notin \mathbb{Q}$$

$\mathbb{Q}$  ist also nicht vollständig,  $\mathbb{R}$  hingegen schon.

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

Ein *vollständiger separabler unitärer Vektorraum* heißt *Hilbertraum*

Quantenmechanische Zustände entsprechen immer Vektoren (=Kets) in einem Hilbertraum

Die drei wichtigsten Hilberträume:

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

$$l^2 = \{(a_n) : \sum_{n=0}^{\infty} |a_n|^2 < \infty\} \text{ mit } \langle (a_n) | (b_n) \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} a_n^* b_n \quad (98)$$

Es gilt  $\dim l^2 = \infty$

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

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

Basis in  $L^2[T] =$  vollständiges orthonormiertes Funktionensystem  $\{f_0(x), f_1(x), \dots\}$ , also

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

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

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n f_n(x), \quad a_n \in \mathbb{C} \quad (101)$$

Nun ist

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

und

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

Also:

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

$f \mapsto (a_n)$  ist also ein isometrischer (wegen (103)) Isomorphismus zwischen  $L^2[T]$  und  $l^2$ .

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

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

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



## Lineare Operatoren im Hilbertraum $\mathcal{H}$

Betrachte Operatoren

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

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

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

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

Physikalische Zustände  $\psi(x) \in L^2$  heißen *Wellenfunktionen*.

Erwartungswert einer Messung von  $P_j$ :

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

Impulsoperator:

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

Ortsoperator:

$$\vec{X} = \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \end{pmatrix}, \text{ wobei } X_j : \psi(x) \in \mathcal{D}(X_j) \subset L^2[T] \longmapsto x_j \psi(x) \quad ((108) + (109))$$

$X_j, P_j$  sind linear und es gelten die *Heisenbergschen Vertauschungsrelationen*:

$$[X_j, P_k] = i\hbar \delta_{jk}, \quad (110)$$

$$[X_j, X_k] = 0 = [P_j, P_k] \quad (111)$$

Nachweis:

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

$$\implies [X_j, P_k] = i\hbar\delta_{jk}.$$

Beschreibt man einen physikalischen Zustand durch eine Wellenfunktion  $\psi(x)$  mit  $\vec{P}, \vec{X}$  in (107), (108), so spricht man von der *Ortsdarstellung*. Für  $\langle\psi|\psi\rangle = 1$  ist der Erwartungswert der Ortsmessung

$$\begin{aligned}\langle\psi|\vec{X}|\psi\rangle &:= \begin{pmatrix} \langle\psi|X_1|\psi\rangle \\ \langle\psi|X_2|\psi\rangle \\ \langle\psi|X_3|\psi\rangle \end{pmatrix} \\ &= \int_T d^n x \psi^*(x) \vec{X} \psi(x) \\ &= \int_T d^n x |\psi(x)|^2 x \\ &= \text{„Schwerpunkt“ einer Dichteverteilung } |\psi(x)|^2\end{aligned}\tag{112}$$

Wahrscheinlichkeit, das  $e^-$  im Volumen  $V$  zu finden:

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

Der zu  $A$  adjungierte Operator  $A^\dagger$  ist vermöge

$$\langle A^\dagger f | g \rangle = \langle f | A g \rangle, \quad f \in \mathcal{D}(A^\dagger), g \in \mathcal{D}(A).\tag{114}$$

$A$  heißt hermitesch (oder symmetrisch), wenn

$$\langle A f | g \rangle = \langle f | A g \rangle, \quad f, g \in \mathcal{D}(A).\tag{115}$$

D.h.  $A = A^\dagger$  auf  $\mathcal{D}(A)$ . Gilt (115) und  $\mathcal{D}(A^\dagger) = \mathcal{D}(A)$ , so heißt  $A$  selbstadjungiert, also  $A = A^\dagger$ . Es kann passieren, dass (115) erfüllt ist, aber  $\mathcal{D}(A^\dagger) \supset \mathcal{D}(A)$  und  $A^\dagger \neq A$ , d.h. (115) ist verletzt für  $f \in \mathcal{D}(A), f \notin \mathcal{D}(A^\dagger)$ . Dann ist  $A$  hermitesch aber *nicht* selbstadjungiert.

Impulsoperator in  $L^2[\mathbb{R}]$ :

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

$\implies f$  hermitesch. Wegen  $\int_{-\infty}^{\infty} dx (Pf)^*(x)g(x) = \left[ \int_{-\infty}^{\infty} dx g^*(x)Pf(x) \right]$  ist  $\mathcal{D}(P) = \mathcal{D}(P^\dagger)$ .

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

$A$  heißt *beschränkt*, wenn es eine Zahl  $\kappa > 0$  gibt, so dass

$$\|A f\| \leq \kappa \|f\|, \quad f \in \mathcal{H}\tag{116}$$

Beispiele

- $U$  unitär  $\implies \|Uf\| = \|f\| \Rightarrow \kappa = \text{möglich}$ .
- $X$  und  $P$  sind in  $L^2[\mathbb{R}]$  unbeschränkt.

Das *Spektrum*  $\sigma$  eines Operators  $A$  besteht aus allen  $\lambda \in \mathbb{C}$  für die  $A - \lambda \mathbb{1}$  keine beschränkte Inverse besitzt. Für  $\lambda \notin \sigma$  ist die *Resolvente*

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

definiert und beschränkt.

Jeder Eigenwert gehört zu  $\sigma$ :

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

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

- 1.)  $\sigma = \sigma_p \cup \sigma_c$  wobei das Punktspektrum bzw. diskretes Spektrum  $\sigma_p$  die Menge der Eigenwerte bezeichnet und  $\sigma_c$  kontinuierliches Spektrum heißt.
- 2.)  $\sigma$  enthält nur reelle  $\lambda$ . Für  $\text{Im}\lambda \neq 0$  und  $\lambda \notin \sigma$  gilt:

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

Dabei ist die Norm  $\|A\|$  eines Operators  $A$  die kleinste Zahl  $\kappa \geq 0$  mit  $\|Af\| \leq \kappa\|f\|$

- 3.) Zu  $\lambda \in \sigma_c$  kann man beliebig genaue approximative Eigenvektoren finden:

$$\text{Zu (jedem) } \varepsilon > 0 \text{ gibt es ein } f_\varepsilon \in \mathcal{H} \text{ mit } \|(A - \lambda \mathbb{1})f_\varepsilon\| < \varepsilon \quad (118)$$

Beachte:

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

## Veranschaulichung

- 1.) Ortsoperator  $X$  in  $L^2[\mathbb{R}]$ : Es gilt stets

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

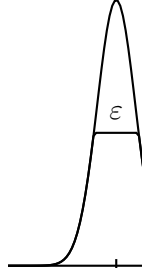
$$\implies \sigma_p = \emptyset.$$

Inverses von  $X - \lambda \mathbb{1}$ :

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

Das ist wohldefiniert für  $\lambda \notin \mathbb{R}$ . Für  $\lambda \in \mathbb{R}$  betrachte (siehe Aufgabe 8):

$$\psi_\varepsilon(x - \lambda) = (\pi\varepsilon^2)^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{(x-\lambda)^2}{2\varepsilon^2}} \in L^2[\mathbb{R}] \quad (\text{Wellenpakete}) \quad (119)$$



und

$$\|R - \lambda\psi_\varepsilon(x_\lambda)\| \longrightarrow \infty, \quad \varepsilon \longrightarrow 0, \quad \forall \lambda \in \mathbb{R}.$$

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

Approximative Eigenfunktionen von  $X$ :

$$“X\psi_\varepsilon(x - \lambda) \approx \lambda\psi_\varepsilon(x - \lambda)“,$$

denn

$$\|(X - \lambda\mathbf{1})\psi_\varepsilon(x - \lambda)\|^2 = (\pi\varepsilon^2)^{-\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} dx (x - \lambda)^2 e^{-\frac{(x-\lambda)^2}{\varepsilon}} = \frac{\varepsilon^2}{2} \longrightarrow 0, \quad \varepsilon \longrightarrow 0.$$

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

2.) Impulsoperator:  $P = \frac{\hbar}{2} \frac{d}{dx}$  in  $L^2[\mathbb{R}]$ . Betrachte

$$\psi_p(x) = e^{i\frac{p}{\hbar}x} :$$

(91), (93)  $\implies P\psi_p(x) = p\psi_p(x)$ , jedoch  $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_p^*(x)\psi_p(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} 1 = \infty$ , d.h.  $\psi_p(x) \notin L^2[\mathbb{R}]$ .

Approximative Eigenfunktionen zu  $p \in \mathbb{R}$ : Breite Wellenpakete:

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

Es gilt:

$$P\psi_{p,\varepsilon}(x) = p\psi_{p,\varepsilon}(x) + \frac{\hbar}{2} e^{i\frac{p}{\hbar}x} \left(\frac{\varepsilon^2}{\pi}\right)^{1/4} (-\varepsilon^2 x) e^{-\frac{\varepsilon^2 x^2}{2}} = p\psi_{p,\varepsilon}(x) + \mathcal{O}(\sqrt{\varepsilon}\varepsilon^2)$$

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

Ein Operator  $U$  heit unitr, wenn er folgende Eigenschaften erfllt:

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

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

3.)  $\langle Uf|Ug \rangle = \langle f|g \rangle \quad \forall f, g \in \mathcal{H}$  („Längen- und Winkeltreue“) (123)

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

*Beweis:*

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

d.h.  $\operatorname{Re} \langle f|g \rangle = \operatorname{Re} \langle Uf|Ug \rangle$ . Mit  $\|f + ig\|$  analog  $\implies \operatorname{Im} \langle f|g \rangle = \operatorname{Im} \langle Uf|Ug \rangle$   $\square$

Für einen unitären Operator gilt:

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

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

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

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

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

Ist  $V$  ein Hilbertraum  $\mathcal{H}$  mit Basis  $\{ |e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots \}$ , so gibt es eine Basis  $\{ \langle e_1 |, \langle e_2 |, \dots \}$  in  $\mathcal{H}^*$  mit  $\langle e_j | e_k \rangle = \delta_{jk}$  und  $\mathcal{H} \cong \mathcal{H}^*$  mit

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

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

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

mit einem  $\tilde{\varphi} \in L^2[\mathbb{R}]$ .

Ist  $V$  kein Hilbertraum, so gilt dies nicht:

*Beispiel:*  $V = \mathcal{S}[\mathbb{R}]$ . Betrachte

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

Es gilt  $\delta \in \mathcal{S}^*[\mathbb{R}]$ , da die Punktauswertung linear und stetig ist.

Symbolische Schreibweise wie in (126):

$$\delta[f] = f(0) =: \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x) f(x), \quad \delta(x) = \delta\text{-Funktion} = \delta\text{-Distribution}$$

Dualraum zu  $\mathcal{S}[\mathbb{R}]$ :

$$\begin{aligned}\mathcal{S}^*[\mathbb{R}] &= \text{Vektorraum der gemäßigten Distributionen} \\ &= \text{temperierte Distributionen} \\ &= \text{tempered distributions}\end{aligned}$$

(  $\mathcal{S}^*[\mathbb{R}], L^2[\mathbb{R}], \mathcal{S}[\mathbb{R}]$  ) ist ein Beispiel für ein Gelfandsches Raumtripel:

$$\begin{array}{ccc}\mathcal{S}^*[\mathbb{R}] & \supsetneq & L^2[\mathbb{R}] \supsetneq \mathcal{S}[\mathbb{R}] \\ \text{Mehr Bras} & & \text{weniger Kets}\end{array} \quad (127)$$

Vorteil: In  $\mathcal{S}^*[\mathbb{R}]$  können wir für  $A = A^\dagger$  jedem  $\lambda \in \sigma(A)$  eine Eigendistribution finden, z.B.  $\psi_p(x) = e^{\frac{ipx}{\hbar}} \notin L^2[\mathbb{R}]$ , aber mit der Zuordnung  $\psi_p^*(x) \leftrightarrow \langle p|$  gilt:

$$\langle p| P = \langle p| p, \quad (128)$$

außerdem ist für alle  $f \in \mathcal{S}[\mathbb{R}]$

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

wohldefiniert und (129) beschreibt eine stetige lineare Abbildung von  $\mathcal{S}[\mathbb{R}]$  auf  $\mathbb{C}$ .

D.h. ebene Wellen sind gemäßigte Distributionen.

Flexible Notation:

$$\langle \underbrace{f}_{\text{Bra} \in \mathcal{S}^*} | \underbrace{g}_{\text{Ket} \in \mathcal{S}} \rangle = \langle \underbrace{g}_{\in \mathcal{S}} | \underbrace{f}_{\in \mathcal{S}^*} \rangle^*$$

Achtung: Für  $f, g \in \mathcal{S}^*[\mathbb{R}]$  ist  $\langle f|g \rangle$  nicht immer definiert. Beispiel:  $\langle \psi_p | \psi_p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx 1 = \infty$ .

verallgemeinerte Eigenfunktionen (Eigenbras) zu  $X$  gesucht:

$$X \psi_{x_0}(x) = x_0 \psi_{x_0}(x) \quad \text{mit } x_0 \in \mathbb{R}. \quad (130)$$

Lösung:

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

Auch hier ist  $\langle \psi_{x_0} | \psi_{x_0} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x - x_0) \delta(x - x_0) = \infty$  nicht definiert!

Die verallgemeinerten Eigenfunktionen selbstadjungierter Operatoren  $A$  sind vollständig. Die Entwicklung nach Eigenvektoren  $|f\rangle = \sum_{\lambda \in \sigma} |\lambda\rangle \langle \lambda| f \rangle$  wobei  $A|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$  im endlichdimensionalen Fall liest sich nun (im  $\infty$ -dimensionalen Fall) wie folgt (für ohne entartete Eigenvektoren):

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

Ortsoperator:

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

verallgemeinerte Eigenvektoren:  $X\delta(x - x_0) = x_0\delta(x - x_0)$  bzw. symbolisch  $X|x_0\rangle = x_0|x_0\rangle$ .

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

entspricht

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

Impulsoperator:

$$PN e^{i\frac{px}{\hbar}} = p \underbrace{N e^{i\frac{px}{\hbar}}}_{\hat{=}|p\rangle}, \quad N = \text{Normierungskonstante}$$

Die Entwicklung nach Eigenvektoren  $|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp |p\rangle \langle p|\psi\rangle$  bedeutet

$$\psi(x) = \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dp e^{i\frac{px}{\hbar}} |N|^2}_{\text{inverse Fouriertrafo}} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx' e^{-i\frac{px'}{\hbar}} \psi(x')}_{\text{Fourier-Trafo}} \quad \text{für } |N|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar} \quad (135)$$

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

$$\langle p|x_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-i\frac{px_0}{\hbar}} \quad \text{„Ortseigenzustand in Impulsdarstellung“} \quad (136)$$

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

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

Konsistenzcheck (der Vollständigkeit):

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

in (137) wurde verwendet:

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

Normierung der Impulseigenzustände:

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

analog zu (138).

Projektion eines Zustandes  $|\psi\rangle$  auf Ortseigenzustand:

$$\langle x|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \delta(x-x') \psi(x') = \psi(x) = \text{Wellenfunktion in Ortsdarstellung} \tag{140}$$

Projektion auf Impulseigenzustand:

$$\begin{aligned}
\langle p|\psi\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-i\frac{px}{\hbar}} \psi(x) =: \tilde{\psi}(p) \\
&= \text{Impulsdarstellung} \\
&= \text{Fourier - Transformierte von } \psi(x)
\end{aligned} \tag{141}$$

Umkehrfunktion

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

Ortsoperator in Impulsdarstellung:

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

Nun ist

$$\begin{aligned}
\langle p|X|p'\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{e^{-i\frac{px}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} x \frac{e^{i\frac{p'x}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p'} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-i\frac{px}{\hbar}} e^{i\frac{p'x}{\hbar}}}_{2\pi\delta(\frac{p-p'}{\hbar})} \\
&= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p'} \delta(p-p')
\end{aligned} \tag{144}$$



Einsetzen in (143):

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

Impulsoperator in Impulsdarstellung:

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

Zusammenfassung:

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

## Energie

$$\begin{array}{ll}\text{klassische Mechanik:} & \text{Hamiltonfunktion } H(x_j, p_k) \\ \text{QM:} & H(X_j, P_k)\end{array}$$

Teilchen im Potenzial:

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

Eigenzustände  $|E\rangle$  zum Energieeigenwert  $E$

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

Energiezustände heißen auch *stationäre Zustände*. Die diskreten Eigenwerte  $E_n$  (= Elemente von  $\sigma_p$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$ ) von  $H$  („Energieniveaus“) entsprechen Bindungszuständen  $|E_n\rangle$ , da  $\langle E_n|E_n\rangle < \infty$ . Die uneigentlichen Eigenwerte (= Elemente von  $\sigma_c$ ) von  $H$  entsprechen Streuzuständen  $|E\rangle$ , da  $\langle E|E\rangle = \infty$ .

*Ortsdarstellung:*

(147) lautet in der Ortsdarstellung  $\langle \vec{x}|H|E\rangle = E \langle \vec{x}|E\rangle$ .

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

Es gilt

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

und

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

3D-Version von (137):

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

Einsetzen in (149):

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

Einsetzen in (148):

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

partielle Integration:

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

(152) heißt *zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung*. Ihre Lösungen  $\psi_E(\vec{x})$  sind Energie-Eigenfunktionen. Salopp:

$$H \psi_E(\vec{x}) = E \psi_E(\vec{x}), \quad H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{x}) = \text{Hamilton - Op. in Ortsdarstellung}\tag{153}$$

Impulsdarstellung:

$$\left[ \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(i\hbar \vec{\nabla}_p) \right] \tilde{\psi}(\vec{p}) = E \tilde{\psi}(\vec{p}) \quad \text{mit} \quad \vec{\nabla}_p = \begin{pmatrix} \partial/\partial p_x \\ \partial/\partial p_y \\ \partial/\partial p_z \end{pmatrix} \quad (154)$$

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

## 1.4 Tensorprodukt

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

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

dabei werden die  $|e_j\rangle \otimes |e'_k\rangle$  auch oft mit  $|e_j\rangle |e'_k\rangle$  oder  $|e_j e'_k\rangle$  bezeichnet.

Für  $\dim \mathcal{H} = N$ ,  $\dim \mathcal{H}' = N'$  ist  $\dim [\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}'] = N \cdot N'$ . Für

$$|\alpha\rangle = \sum_k \alpha_k |e_k\rangle \quad \text{und} \quad |\alpha'\rangle = \sum_l \alpha'_l |e'_l\rangle$$

ist

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

Nicht jedes Element von  $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}'$  lässt sich schreiben als  $|\alpha\rangle \otimes |\alpha'\rangle$ . Allgemein gibt es für  $|\lambda\rangle \in \mathcal{H} \otimes \mathcal{H}'$  Zahlen  $\alpha_{kl} \in \mathbb{C}$ , so dass

$$|\lambda\rangle = \sum_{kl} \alpha_{kl} |e_k\rangle \otimes |e'_l\rangle. \quad (157)$$

Bras:

$$\begin{aligned} (\langle \beta| \otimes \langle \beta'|)(|\alpha\rangle \otimes |\alpha'\rangle) &= \langle \beta|\alpha\rangle \langle \beta'|\alpha'\rangle \\ &= \left( \sum_k \beta_k^* \alpha_k \right) \left( \sum_l \beta'_l{}^* \alpha'_l \right), \quad \text{für } |\beta\rangle = \sum_l \beta_l |e_l\rangle \end{aligned} \quad (158)$$

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

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

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

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

Salopp schreibt man  $A$  (bzw.  $A'$ ) statt  $A \otimes \mathbb{1}$  (bzw.  $\mathbb{1} \otimes A'$ ).

Insbesondere gilt

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

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

*Anwendung:*  $\mathcal{H} = [|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle]$  beschreibt Spin-Freiheitsgrad (ist innerer Freiheitsgrad) und  $\mathcal{H}' = L^2[\mathbb{R}]$  beschreibt äußere Freiheitsgrade (z.B. Orts-Wellenfunktion). Beliebiger Zustand  $|\chi\rangle$  in  $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}'$  für  $\mathcal{H}' = [|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots]$ :

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

Pauli-Spinor = zwei-komponentige Wellenfunktion

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

Interpretation:  $\int_V d^3\vec{x} |\langle \vec{x} | \psi_{\uparrow} \rangle|^2 =$  Wahrscheinlichkeit im Volumen  $V$  ein Elektron mit  $S_z = \frac{\hbar}{2}$  zu finden.

## 1.5 Zeitentwicklung

*Klassische Mechanik:* Symmetrien  $\xrightarrow{\text{Noether-Thm}} \text{Erhaltungsgrößen.}$

z.B. Symmetrie unter Translationen  $\vec{x} \mapsto \vec{x} + \vec{a} \implies \text{Impuls } \vec{p} \text{ erhalten } (\frac{d\vec{p}}{dt} = 0).$

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

$$\mathcal{T}_{\vec{a}} = e^{\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \vec{p}}; \quad \mathcal{T}_{\vec{a}} \psi(\vec{x}) = \psi(\vec{x} + \vec{a}) \quad (\text{siehe A7c}) \quad (163)$$

Analogie zwischen klassischer Mechanik und QM:

Symmetrie bzgl.  $t \mapsto t + \Delta t \implies$  Hamiltonfunktion  $H$  ist zeitlich konstant:  $\frac{dH}{dt} = 0.$

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

mit dem Zeitentwicklungsoperator (= Translationsoerator in der Zeit)

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

Differenziell:

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

Für  $t_0 = 0$ :

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

(166) heißt *zeitabhängige Schrödinger-Gleichung*. Für  $\frac{dH}{dt} \neq 0$  sind (165) und (166) nicht mehr äquivalent. (166) stimmt auch für  $\frac{dH}{dt} \neq 0$ .

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

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

Zeitgeordnetes Produkt:

$$\begin{aligned}
TA(t_1)B(t_2) &= TB(t_2)A(t_1) = \theta(t_1 - t_2)A(t_1)B(t_2) + \theta(t_2 - t_1)B(t_2)A(t_1) \\
&= \begin{cases} A(t_1)B(t_2), & t_1 > t_2 \\ B(t_2)A(t_1), & t_1 < t_2 \end{cases}
\end{aligned} \tag{168}$$

Analog  $TA(t_1)B(t_2)C(t_3) = \theta(t_1 - t_2)\theta(t_2 - t_3)A(t_1)B(t_2)C(t_3) + \theta(\dots) \dots$ . Für  $t_1 = t_2$  ist  $TA(t_1)B(t_2)$  i.a. nur für  $A = B$  definiert.

Anwendung:

$$\int_{t_0}^{t_0+t} dt_1 \int_{t_0}^{t_0+t} dt_2 TH(t_1)H(t_2) = \int_{t_0}^{t_0+t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H(t_1)H(t_2) + \int_{t_1}^{t_0+t} dt_2 H(t_2)H(t_1) \tag{169}$$

$$\frac{d}{dt}(169) = \int_{t_0}^{t_0+t} dt_2 TH(t_0 + t)H(t_2) + \int_{t_0}^{t_0+t} dt_1 TH(t_1)H(t_0 + t) \tag{170}$$

Regel:

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

Daraus folgt:

$$\frac{d}{dt}(169) = H(t_0 + t) \cdot 2 \int_{t_0}^{t_0+t} dt_1 H(t_1) \tag{171}$$

Dabei ist die Zeitordnung trivial wegen  $t_0 + t \geq t_1$ .

## zeitgeordnete Exponentialreihe = Dyson-Reihe

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

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

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} T \exp \left[ \int_{t_0}^{t_0+t} A(t') dt' \right] &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left[ \int_{t_0}^{t_0+t} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_0+t} dt_n T A(t_0+t) A(t_2) \dots A(t_n) \right. \\ &\quad + \int_{t_0}^{t_0+t} dt_1 \int_{t_0}^{t_0+t} dt_3 \dots \int_{t_0}^{t_0+t} dt_n T A(t_1) A(t_0+t) \dots A(t_n) \\ &\quad + \dots \\ &\quad \left. + \int_{t_0}^{t_0+t} dt_1 \dots \int_{t_0}^{t_0+t} dt_{n-1} T A(t_1) \dots A(t_{n-1}) A(t_0+t) \right] \\ &= A(t_0+t) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} \int_{t_0}^{t_0+t} dt_1 \dots \int_{t_0}^{t_0+t} dt_{n-1} T A(t_1) \dots A(t_{n-1}) \end{aligned}$$

Mit  $n \rightarrow n+1$  findet man

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

Sehr praktisch für gekoppelte Differentialgleichung:

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

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

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

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

Im allgemeinen Fall ist

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

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

Bemerkung uzm Vorzeichen in (165) bzw. (166): Erfüllt  $\psi(\vec{x}, t)$  die Gleichung  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t) = H\psi(\vec{x}, t)$ , so erfüllt  $\psi^*(\vec{x}, t)$  die zeitgespiegelte Schrödinger-Gleichung:

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

Das Vorzeichen in (165) ist zunächst willkürlich. Zum relativen Vorzeichen zu (163): freies Teilchen:  $\psi_p(\vec{x}, t=0) = e^{\frac{i\vec{p}\vec{x}}{\hbar}} = \mathcal{T}_{\vec{x}} \cdot 1$ . Es gilt  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_p = \frac{p^2}{2m} \psi_p$ .

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

Das relative Vorzeichen ist so gewählt, dass Wellenfronten in  $\vec{p}$ -Richtung (und nicht in  $(-\vec{p})$ -Richtung ) laufen.

### Ein Standard-Lösungsweg der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \sum_n c_n(t) |E_n\rangle + \int_{\sigma_c} dE c(E, t) |E\rangle \quad \text{mit } H|E\rangle = E|E\rangle \\ H|\psi, t\rangle &= \sum_n c_n(t) E_n |E_n\rangle + \int dE c(E, t) E |E\rangle \end{aligned}$$

und

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

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

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

d.h.

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

Energie-Eigenzustände:  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |E, t\rangle = E |E, t\rangle$ :

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

$1 = \langle E, t | E, t \rangle = \langle E | E \rangle \rightsquigarrow$  stationäre Zustände.

*Schrödinger Bild:*

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi, t\rangle = H |\psi, t\rangle \implies |\psi, t\rangle = U(t, 0) |\psi, 0\rangle \quad (179)$$

mit  $U(t, 0) = T \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' H(t') \right]$ . Zeitentwicklung steckt in den Zuständen, nicht in den Operatoren, die jedoch eine „explizite“ von außen vorgegebene Zeitabhängigkeit haben können. (Bsp. Magnetfeld  $\vec{B}(t)$  im Labor  $\rightarrow H(t)$ )

*Heisenberg-Bild:*

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

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

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} A(t) &\stackrel{(193)}{=} \frac{i}{\hbar} H(t) A_H(t) + U^\dagger(t, 0) \left( \frac{d}{dt} A_S(t) \right) U(t, 0) - \frac{i}{\hbar} A_H(t) H(t) \\ &= -\frac{i}{\hbar} [H, A_H(t)] + \frac{\partial}{\partial t} A_H(t), \end{aligned} \quad (182)$$

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

Aus (182) folgt nach  $H_S(t) = H_H(t) = H(t)$ . (182) ist die Bewegungsgleichung im Heisenbergbild.

klassische Mechanik  $\frac{i}{\hbar} [, ] \rightarrow$  Poisson-Klammer

(182) für  $A_H = X_H$  und  $A_H = P_H$ ,  $H = \frac{P^2}{2m} + V(X_H)$

$$\begin{aligned} \dot{X}_H(t) &= \frac{i}{\hbar} [H, X(t)] \\ &= \frac{i}{\hbar} \left[ \frac{P^2}{2m}, X_H \right] \\ &\stackrel{A7b}{=} \frac{i}{\hbar m} (-i\hbar) P_H \\ &= \frac{i}{m} P_H, \end{aligned} \quad (183)$$

$$\begin{aligned} \dot{P}_H(t) &= \frac{i}{\hbar} [H, P_H] \\ &= \frac{i}{\hbar} [V(X_H), P_H] \\ &\stackrel{A7b}{=} -\frac{\partial V(X_H)}{\partial X_H} \end{aligned} \quad (184)$$



(183), (184) entsprechen den Lösungen der Hamilton'schen Bewegungsgleichungen.

## 2 Teilchen im Potenzial

### 2.1 $V = 0$ (freies Teilchen)

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

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

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

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

Impulsdarstellung:

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

Gauß'sches Wellenpaket

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

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

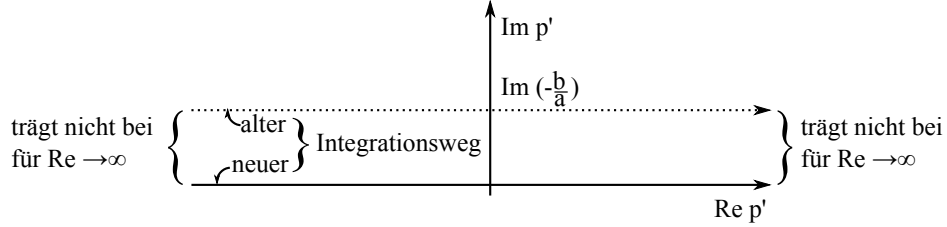
Ortsdarstellung:

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

mit

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

Variablentransformation:  $p' = p - \frac{b}{a}$ .



Integrand analytisch ohne Singularitäten im Gebiet zwischen altem und neuem Integrationsweg. Residuensatz  $\Rightarrow$

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

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

Mit

$$v = \frac{p_0}{m} \quad \text{und} \quad \Delta(t) = \frac{t\hbar}{2md^2} \quad (194)$$

ist

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

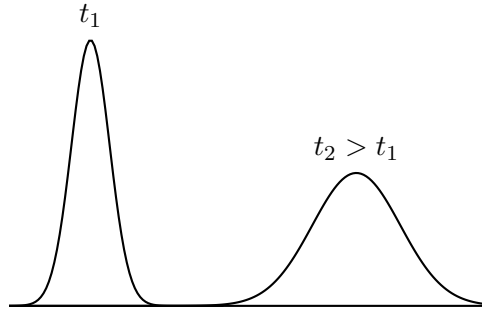
und

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

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

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

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



Zerfließen ist Folge der Impulsunschärfe in (189) analog zu einer Ladung Schrotkugeln.

Aus (197) finden wir

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

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

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

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

$$\begin{aligned} \langle P \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dp p |\tilde{\varphi}(p, t)|^2 \\ &\stackrel{(189)}{=} \left( \frac{2d^2}{\pi \hbar^2} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} dp p \exp \left[ -\frac{2(p - p_0)^2 d^2}{\hbar^2} \right] \\ &= \left( \frac{2d^2}{\pi \hbar^2} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} dp' (p' + p_0) \exp \left[ -\frac{2p'^2 d^2}{\hbar^2} \right] \\ &= p_0 \\ &= \text{unabhängig von } t \end{aligned} \quad (200)$$

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

(199), (201)  $\implies$

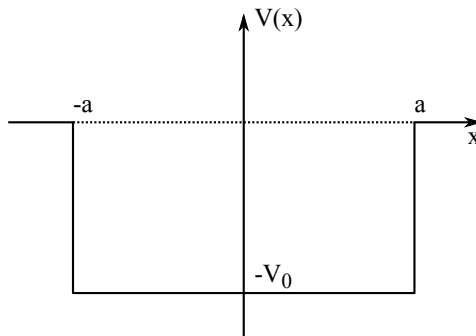
$$\Delta X \Delta P = \frac{\hbar}{2} \sqrt{1 + \Delta(t)^2} \quad (202)$$

$\implies$  minimale Unschärfe für  $t = 0$ .

## 2.2 Kastenpotential

Betrachte

$$V(x) = -V_0 \theta(a - |x|), \quad V_0 > 0 \quad (203)$$



Anwendung:

- abgeschirmte Störstellen in Halbleitern
- Kernphysik

Dimensionsloser Parameter:

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

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

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

$$\Rightarrow \begin{cases} \psi_n''(x) \text{ ist unstetig bei } |x| = a \text{ mit Sprung } \pm V_0 \\ \psi_n'(x) \text{ ist stetig mit Knick bei } |x| = a \\ \psi_n(x) \text{ ist stetig} \end{cases} \quad \text{Lösung von (205) für } |x| > a:$$

$E_n > 0$ :  $\psi_n(x) \sim \sin(qx), \cos(qx) \rightsquigarrow$  nicht normierbar  $\rightsquigarrow$  Streuzustände.

$$E_n < 0: \quad \psi_n(x) = \begin{cases} N_n e^{\kappa_n x}, & x < -a \\ N'_n e^{-\kappa_n x}, & x > a \end{cases} \quad (206) \quad \text{Paritätsoperator}$$

mit  $\kappa_n = \frac{\sqrt{2m(-E_n)}}{\hbar}$  und Normierungskonstante  $N_n, N'_n$   
 rator = Raumpiegelungsoperator:

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

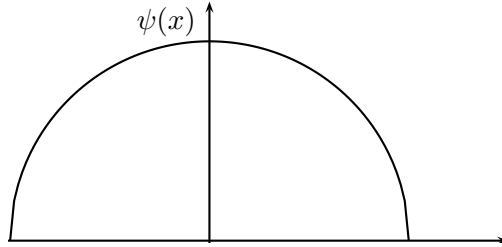
In unserem Fall:

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

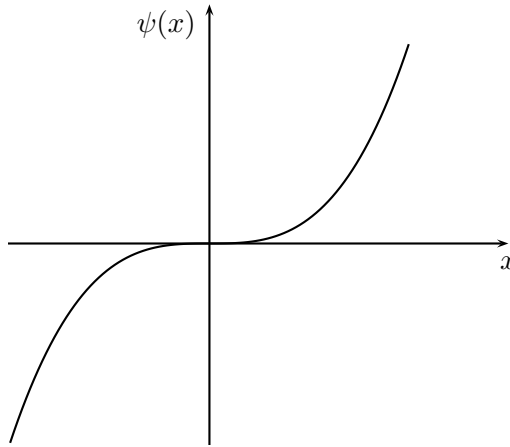
$\implies$  Es gibt eine Basis aus gemeinsamen Eigenfunktionen von  $H$  und  $\mathcal{P}$ .

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

gerade Funktionen (EW 1):  $\mathcal{P}\psi(x) = \psi(-x) = \psi(x)$ :



ungerade Funktionen (EW -1):  $\mathcal{P}\psi(x) = \psi(-x) = -\psi(x)$



gerade Lösungen:  $N_n = N'_n$  in (206).

oszillierend  $\psi_n(x) = C_n \cos(q_n x)$  für  $|x| \leq a$  mit

$$q_n = \frac{\sqrt{2m(E_n + V_0)}}{\hbar} \quad (210)$$

(206) und (210)  $\implies -V_0 < E < 0$

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

Stetigkeit: (206), (210)  $\implies$

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

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

$$\frac{-(212)}{(211)} = \kappa_n = q_n \tan(q_n a)$$

$$\implies \frac{\kappa_n}{q_n} = \tan(q_n a) \quad (213)$$

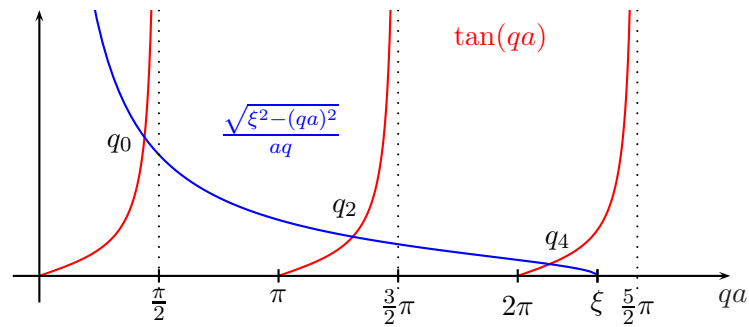
Wegen

$$\begin{aligned} \xi^2 &\stackrel{(204)}{=} \frac{a^2}{\hbar^2} 2mV_0 \\ &= \frac{a^2}{\hbar^2} 2m(V_0 + E - E) \\ &\stackrel{(206)}{=} a^2 [q_n^2 + \kappa_n^2] \end{aligned}$$

bedeutet (213)

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

(214) bestimmt  $q_n a$  und damit  $E$ .



Zahl der geraden Lösungen:

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

Energie-EW

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

Insbesondere  $E_0$  existiert immer und

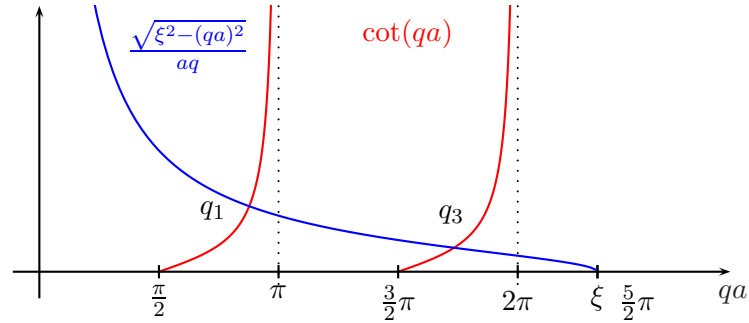
$$-V_0 < E_n < \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2}$$

ungerade Lösungen:  $N_n = -N'_n$  in (206) und

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

Stetigkeitsbedingungen liefern analog zu (211) bis (213):

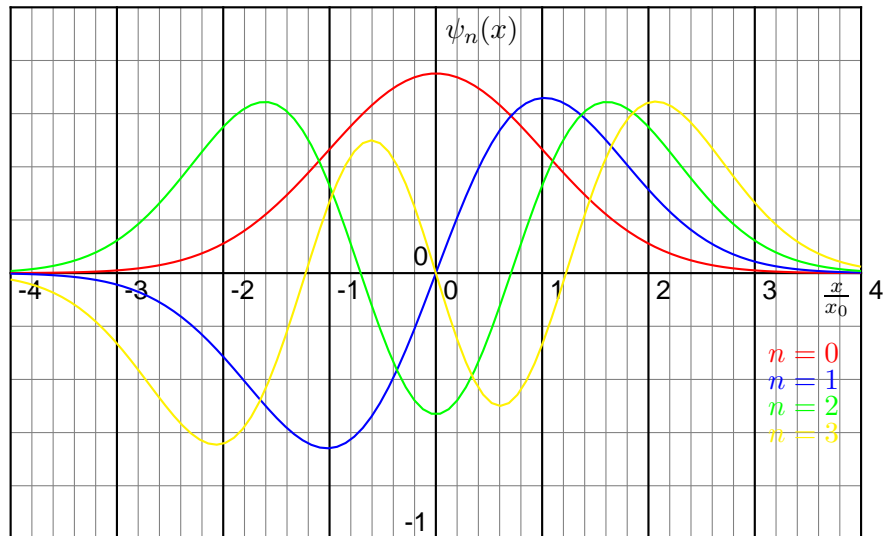
$$-\cot(q_n a) = \frac{\kappa_n}{q_n} = \frac{\sqrt{\xi^2 - (q_n a)^2}}{q_n a} \quad (218)$$



Ungerade Lösungen gibt es also nur für  $\xi \geq \frac{\pi}{2}$ , also

$$\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} > \frac{\pi^2}{4}$$

Lsg:



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

### 2.3 Harmonischer Oszillator

Betrachte

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

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

Algebraische Lösung (H. Born, N. Wiener):

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

$$\Rightarrow H = \underbrace{\hbar\omega}_{\text{char. Energie}} \left[ \frac{1}{2} \frac{P^2 x_0^2}{\hbar^2} + \frac{1}{2} \left( \frac{X}{x_0} \right)^2 \right] \quad (221)$$

Vernichtungsoperator (= Absteigeoperator), annihilation op:

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{X}{x_0} + i \frac{Px_0}{\hbar} \right) \quad (222)$$

Erzeugungsoperator (= Aufsteigeoperator), creation op

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{X}{x_0} - i \frac{Px_0}{\hbar} \right) \quad (223)$$

Es gilt für den Kommutator:

$$\begin{aligned} [a, a^\dagger] &= \frac{1}{2} \frac{i}{\hbar} \left( \left[ Px_0, \frac{X}{x_0} \right] - \left[ \frac{X}{x_0}, Px_0 \right] \right) \\ &\stackrel{(110)}{=} \frac{1}{2} \frac{i}{\hbar} (-i\hbar - i\hbar) = \mathbb{1} \end{aligned} \quad (224)$$

Besetzungszahl-Operator:

$$Na^\dagger a \quad (225)$$

(222) und (223) liefern:

$$\begin{aligned} N &= \frac{1}{2} \left( \frac{X}{x_0} - i \frac{Px_0}{\hbar} \right) \left( \frac{X}{x_0} + i \frac{Px_0}{\hbar} \right) \\ &= \frac{1}{2} \left( X^2 x_0^2 + \frac{P^2 x_0^2}{\hbar^2} + \frac{i}{\hbar} [x, P] \right) \\ &= \frac{H}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \\ \Rightarrow H &= \hbar\omega \left( N + \frac{1}{2} \right) \end{aligned} \quad (226)$$



Also: Eigenzustände von  $H$  sind Eigenzustände von  $N$  und umgekehrt.

$$N |n\rangle = n |n\rangle \quad \text{mit } n \in \mathbb{R} \text{ wegen } N = N^\dagger \quad (227)$$

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

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

$$\begin{aligned} [N, a^\dagger] &= [a^\dagger a, a^\dagger] \\ &= a^\dagger \underbrace{[a, a^\dagger]}_{=1} + \underbrace{[a^\dagger, a^\dagger]}_{=0} a \\ &= a^\dagger \end{aligned} \quad (229)$$

$$\begin{aligned} [N, a] &= [a^\dagger, N]^\dagger \\ &= \left(-a^\dagger\right)^\dagger \\ &= -a \end{aligned} \quad (230)$$

Betrachte  $a |n\rangle$ :

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

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

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

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

Achtung:  $|0\rangle \neq \underbrace{0}_{\text{Nullvektor}}$ .

Aus (231) folgt durch vollständige Induktion, dass  $a^k |n\rangle$  Eigenvektor zu  $N$  mit Eigenwert  $n-k$  ist, außer wenn  $k-n \in \mathbb{N}$ . Wegen (228) muss für Eigenwerte  $n-k \geq 0$  sein. Wäre  $n \notin \mathbb{N}_0$ , so könnten wir mit hinreichend großem  $k$  Gleichung (228) verletzen

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

*Konstruktion der Eigenkets:*

Zwei Möglichkeiten:

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

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

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

Normierung:

$$\begin{aligned}
 \|a^\dagger |n\rangle\|^2 &= \langle a^\dagger n | a^\dagger n \rangle \\
 &= \langle n | a a^\dagger | n \rangle \\
 &= \langle n | \underbrace{[a, a^\dagger]}_{=1} | n \rangle + \langle n | \underbrace{a^\dagger a}_{=N} | n \rangle \\
 &= 1 + n
 \end{aligned}$$

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

Im Fall 1 (nichtentarteter Grundzustand  $|0\rangle$ ) definieren wir rekursiv:

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

Weiter

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

Zusammenfassung von (234) und (236):

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

und

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

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

*Beweis:* Angenommen, es gibt außer  $|n\rangle$  in (235) einen weiteren Ket  $|n'\rangle$  mit  $N|n'\rangle = n|n'\rangle$  und  $\langle n|n'\rangle = 0$ , so ist  $n$  entartet. Wegen (231) ist  $a^n |n'\rangle$  EZ von  $N$  zu  $n = 0$ . Da  $n = 0$  nicht entartet ist, folgt:

$$\begin{aligned} a^n |n'\rangle &= e^{i\varphi} \sqrt{n!} |0\rangle & (239) \\ \Rightarrow \frac{1}{n!} a^{\dagger n} a^n |n'\rangle &= e^{i\varphi} \frac{1}{\sqrt{n!}} a^{\dagger n} |0\rangle \\ &\stackrel{(235)}{=} e^{i\varphi} |n\rangle \\ \Rightarrow \frac{1}{n!} \underbrace{\langle n' | a^{\dagger n} a^n | n' \rangle}_{\|a^n |n'\rangle\|^2} &= e^{i\varphi} \langle n' | n \rangle \\ &\stackrel{\text{Ann.}}{=} 0 \end{aligned}$$

$\Rightarrow a^n |n'\rangle = 0$ . Wid. zu (239)

□

Im Fall 2 haben wir Grundzustände

$$|0, \lambda\rangle, \quad \lambda = \text{Entartungsindex}$$

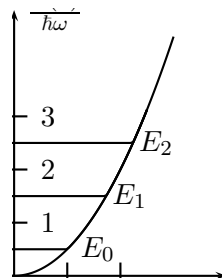
Analog findet man:

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

sind alle EZ zum Eigenwert  $n$  von  $N$ .

Wegen (226) sind die Energieeigenwerte

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



Streuzustände gibt es nicht!

$\mathcal{H} = L^2[\mathbb{R}]$ , Ortsdarstellung.

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

Also

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

$\Rightarrow$

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

(241) ist eine DGL 1. Ordnung. Standard-Lösungsweg:

Ansatz:

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

$\Rightarrow$

$$\underbrace{\left[ \frac{d}{dx} - f'(x) + \frac{x}{x_0^2} \right]}_{=0} e^{f(x)} \psi_0(x) = 0$$

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

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

Normierung:

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

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

$\Rightarrow$  Grundzustand-Wellenfunktionen:

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

Übrigen:  $n > 0$

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

Dimensionslose Variable

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

Damit gilt:

$$\begin{aligned}
\psi_n(x_0\xi) &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \frac{1}{\sqrt{2^n}} \left[ \xi - \frac{d}{d\xi} \right]^n \psi_0(x_0\xi) \\
&\stackrel{(242)}{=} (x_0\sqrt{\pi})^{-\frac{1}{2}} \frac{1}{\sqrt{n!}} \frac{1}{\sqrt{2^n}} \left[ \xi - \frac{d}{d\xi} \right]^n e^{-\frac{\xi^2}{2}} \\
&= (x_0\sqrt{\pi}n!2^n)^{-\frac{1}{2}} H_n(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}}
\end{aligned} \tag{243}$$

mit

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

Operator-Identität:

$$A_\xi := e^{-\frac{\xi^2}{2}} \left( \xi - \frac{d}{d\xi} \right) e^{\frac{\xi^2}{2}} = -\frac{d}{d\xi}, \tag{245}$$

denn:

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

(245)  $\implies$

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

Einsetzen von (245) in (244):

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

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

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

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

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

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

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

Mit (243)

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

Weitere Eigenschaftende:

Erzeugende Funktionen:

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

Hermiteischer DGL:

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

|                    |                    |   |
|--------------------|--------------------|---|
| klassische Physik: | niedrigste Energie | $E = 0$   |
| QM:                | ...                | $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$ „Nullpunktsenergie“ |

Ein Zustand mit  $E = 0$  würde  $\Delta X \Delta P \geq \frac{\hbar}{2}$  verletzen.

Inverse von (222)/(223):

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

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

Damit folgt:

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

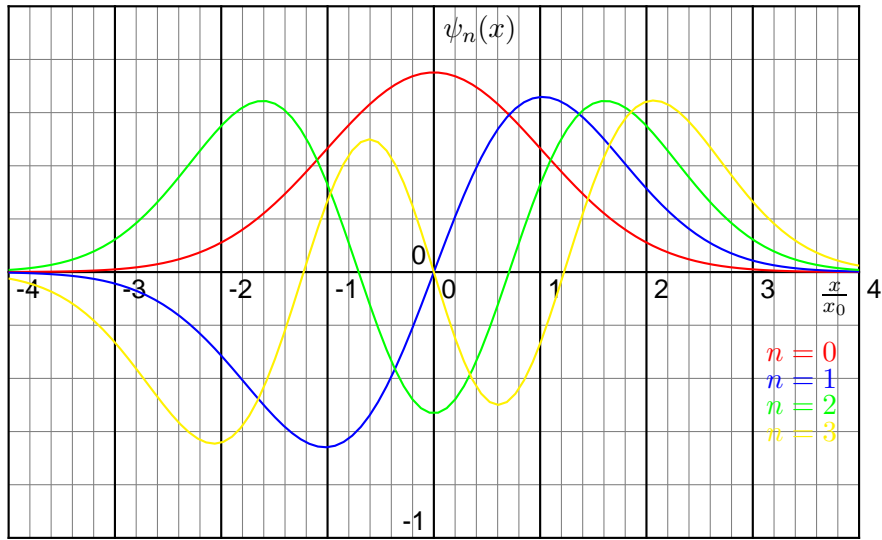
Ebenso  $\langle n | P | n \rangle \stackrel{(254)}{=} 0$

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

$$\begin{aligned}
 &= \frac{x_0^2}{2} [\langle n | n \rangle + 2 \langle n | N | n \rangle] \\
 &= \frac{x_0^2}{2} (2n + 1) \\
 (\Delta P)^2 &= \langle n | P^2 | n \rangle \\
 &\stackrel{(254)}{=} -\frac{\hbar^2}{2x_0^2} \langle n | (a^\dagger - a)^2 | n \rangle \\
 &= -\frac{\hbar^2}{2x_0^2} \langle n | a^\dagger a + aa^\dagger | n \rangle \\
 &= \frac{\hbar^2}{2x_0^2} (2n + 1)
 \end{aligned} \tag{256}$$

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

$\Rightarrow$  Grundzustand  $|0\rangle$  hat minimale Unschärfe



klassisch: Aufenthalt nur dort, wo  $E \geq V$  ist, also  $\left| \frac{x}{x_0} \right| \leq \sqrt{2n+2}$  für den  $n$ -ten Energiezustand  $E_n$ .

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

## Zeitentwicklung

$$\begin{aligned} \text{Schrödinger – Bild : } |n, t\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} |n\rangle \\ \text{Heisenberg – Bild : } a(t=0) &= a \end{aligned} \quad (258)$$

Aus (182) folgt

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} a &= \frac{i}{\hbar} [H, a] \\ &\stackrel{(226)}{=} i\omega \left[ N + \frac{1}{2}, a \right] \\ &= i\omega [N, a] \\ &\stackrel{(239)}{=} -i\omega a \end{aligned} \quad (259)$$

Außerdem

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

Also

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

wobei  $X = X(0)$  und  $P = P(0)$ .

Analog:

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

$\Rightarrow$  klassische Bewegungsgleichung des harmonischen Oszillators

Welche Zustände zeigen die Schwingungen des klassischen Oszillators?

Nicht die Energie-Eigenzustände:

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



jedoch

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

für sogenannte *kohärente Zustände*  $|\lambda\rangle$ .

### Nachtrag zum Thema Heisenberg-Bild:

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

(183), (189) implizieren für jeden Zustand  $\psi$ :

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

(263) heißt *Ehrenfest'sches Theorem*.

Damit  $\langle \psi | X | \psi \rangle$  die klassischen Bewegungsgleichung erfüllt, muss

$$\left\langle \psi \left| \frac{\partial V}{\partial x} \right| \psi \right\rangle = \frac{\partial}{\partial x} V(\langle \psi | X | \psi \rangle) \quad (264)$$

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

## 3 Drehung, Drehimpuls, Spin

### 3.1 Drehungen und ihre Erzeuger

passive Drehung in  $\mathbb{R}^3$  um Achse  $\vec{n}$  (mit  $\vec{n}^2 = 1$ ) mit Winkel  $\varphi$ :

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

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

Kurznotation:  $\vec{\varphi} = \varphi \vec{n}$  beschreibt die Drehung.

Suche Matrix  $R(\vec{\varphi}) \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$  mit

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

(265)  $\Rightarrow$

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

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

$\Rightarrow$

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

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

Spezialfall: Drehung um  $z$ -Achse:  $\vec{n} = (0, 0, 1)^\top$

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

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

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

- $\vec{n}$  ist Eigenvektor zum EW 1

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

- $\varphi$  kann über die Spur von  $R(\vec{\varphi})$  berechnet werden:

$$\text{tr } R(\vec{\varphi}) \stackrel{(267)}{=} \cos \varphi \underbrace{\text{tr } \mathbb{1}}_{=3} + (1 - \cos \varphi) \underbrace{\sum_k n_k^2}_{=1} = 1 + 2 \cos \varphi \quad (271)$$

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

### Definitionseigenschaften einer Lie-Gruppe

- 1.) Es gibt ein Einselement  $\mathbb{1}$ :

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

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

Die Lie-Gruppe der Drehung im  $\mathbb{R}^3$  heit  $SO(3)$ . Dabei steht „S“ fr „speziell“, d.h.  $\det R = 1$ , „O“ fr „orthogonal“ und 3 fr den  $\mathbb{R}^3$ .

Infinitesimale Drehung:  $\delta\varphi \ll 1$  in (267):

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

wobei

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

also

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

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

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

Die  $\omega^{(l)}$  heien *Generatoren* der  $SO(3)$ .

Aufbau einer endlichen Drehung aus infinitesimalen Drehungen:  $\delta\varphi = \frac{\varphi}{N}$ . Dann:

$$\begin{aligned} [R(\delta\varphi \vec{n})]^N &= \left[1 + i\frac{\varphi}{N} \vec{n} \cdot \vec{\omega}\right]^N \\ \implies R(\vec{\varphi}) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left[R\left(\frac{\varphi}{N} \vec{n}\right)\right]^N = e^{i\varphi \vec{n} \cdot \vec{\omega}} = e^{i\vec{\varphi} \cdot \vec{\omega}} \end{aligned} \quad (277)$$

das ist eleganter als (267).

Alternativ: Euler-Winkel:

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

Die Generatoren der  $SO(3)$  erfllen:

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

Beweis:

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

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

Also:  $\vec{q}\omega \in \mathfrak{so}(3) \implies e^{i\vec{q}\vec{\omega}} \in \mathrm{SO}(3)$ .

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

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

mit  $f_{jkl} \in \mathbb{C}$ .

Die Zahlen  $f_{jkl}$  heißen *Strukturkonstanten* der Lie-Algebra bzw. Lie-Gruppe  $\{e^{i\vec{q}\vec{\omega}}\}$  ist dann Lie-Gruppe.

Betrachte:  $\omega^{(j)} \longrightarrow \omega^{(j)'}$  mit

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

eine sogenannte Darstellung der Lie-Algebra.

Die Matrizen  $e^{i\vec{\varphi}\vec{\omega}'}$  bilden eine Darstellung der Lie-Gruppe: Aus  $e^{i\vec{\varphi}_1\vec{\omega}'} e^{i\vec{\varphi}_2\vec{\omega}'} = e^{i\vec{\varphi}_3\vec{\omega}'}$  folgt  $e^{i\vec{\varphi}_1\vec{\omega}'} e^{i\vec{\varphi}_2\vec{\omega}'} = e^{i\vec{\varphi}_3\vec{\omega}'}$

Darstellung der  $\mathfrak{so}(3)$  mit  $2 \times 2$  Matrizen:

$$\omega^{(j)} \longrightarrow \omega^{(j)'} = \frac{1}{2} \sigma_j \quad (281)$$

denn wegen (76) ist

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

Betrachte nun

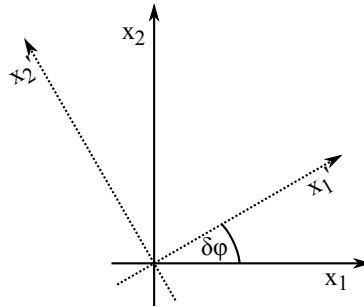
$$\text{SU}(2) := \{e^{i\vec{\varphi} \frac{\vec{\sigma}}{2}}\} = \{U \in \mathbb{C}^{2 \times 2} : U^\dagger U = \mathbb{1} \text{ und } \det U = 1\} \quad (282)$$

$e^{i\vec{\varphi} \frac{\vec{\sigma}}{2}}$  beschreibt eine Drehung der Spin-Einstellung  $|S\rangle = \alpha|\uparrow\rangle + \beta|\downarrow\rangle$

$$\begin{aligned} \vec{x} &\longrightarrow \vec{x}' = e^{i\vec{\varphi} \frac{\vec{\sigma}}{2}} \vec{x} \\ |S\rangle &\longrightarrow |S'\rangle \stackrel{(175)}{=} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{\varphi} \vec{S}} |S\rangle \text{ entspricht} \\ \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} &\longrightarrow \begin{pmatrix} \alpha' \\ \beta' \end{pmatrix} = e^{i\vec{\varphi} \frac{\vec{\sigma}}{2}} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (283)$$

Konsistenzcheck:  $\langle S'_1 | \vec{a}' \vec{S} | S'_2 \rangle = \langle S_1 | e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\varphi} \vec{S}} \vec{a}' \vec{S} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{\varphi} \vec{S}} | S_2 \rangle$

Aufgabe 6e)  $\langle S_1 | \vec{a} \vec{S} | S_2 \rangle$  ist unabhängig vom Koordinatensystem.



$$\vec{x} \longrightarrow \vec{x}' = R(\delta\varphi) \vec{x} \stackrel{(265)}{=} \vec{x} - \delta\vec{\varphi} \times \vec{x}$$

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

mit

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

Endliche Drehung

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

bedeutet:

$$L_j = \varepsilon_{jkl} X_k P_l \quad (286)$$

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

$$[L_j, L_k] = i\hbar\varepsilon_{jkl} L_l \quad (287)$$

(Aufgabe 18), so dass  $\frac{L_j}{\hbar}$  tatsächlich (279) erfüllt.

Gesamtdrehimpuls

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

wobei

$$[L_j, S_k] = 0, \quad (289)$$

$$[J_j, J_k] = i\varepsilon_{jkl} J_l \quad (290)$$

### 3.2 Eigenwerte des Drehimpulsoperator

$$\begin{aligned} [\vec{J}^2, J_k] &= \sum_{m=1}^3 [J_k [J_k, J_m] + [J_k, J_m] J_k] \\ &\stackrel{(250)}{=} i\hbar \sum_{k,l=1}^3 \underbrace{\varepsilon_{kml}}_{\text{antisym.}} \underbrace{(J_k J_l + J_l J_k)}_{\text{sym. bzgl. Austausch } k \text{ und } l} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (291)$$

$\rightsquigarrow$  Casimir-Operator

$\implies$  gemeinsame Eigenkets von  $\vec{J}^2$  und  $J_3$

$$\begin{aligned} \vec{J}^2 |\lambda m\rangle &= \lambda\hbar^2 |\lambda m\rangle \\ J_3 |\lambda m\rangle &= m\hbar |\lambda m\rangle \end{aligned} \quad (292)$$

Es gilt

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

Leiteroperatoren:  $J_{\pm} = J_1 \pm iJ_2$ , also

$$J_{\pm}^{\dagger} = J_{\mp} \quad (294)$$

Dann:

$$\text{a) } [J_3, J_{\pm}] = [J_3, J_1] \pm i[J_3, J_2] = (iJ_2 \pm J_1)\hbar = \pm J_{\pm}\hbar \quad (295)$$

$$\text{b) } [J_+, J_-] = 2J_3\hbar \quad (296)$$

$$\text{c) } \vec{J}^2 = J_+J_- + J_3^2 - J_3\hbar = J_-J_+ + J_3^2 + J_3\hbar \quad (297)$$

$$\text{d) } [\vec{J}^2, J_{\pm}] = 0 \quad (298)$$

Wegen (298) ist  $\vec{J}^2 J_{\pm} |\lambda m\rangle = J_{\pm} \vec{J}^2 |\lambda m\rangle = J_{\pm} \lambda \hbar |\lambda m\rangle$ .  $\implies J_{\pm} |\lambda m\rangle$  ist EZ zu  $\vec{J}^2$  mit EW  $\lambda \hbar^2$  oder  $J_{\pm} |\lambda m\rangle = 0$ .

$$\begin{aligned} J_3 J_{\pm} |\lambda m\rangle &\stackrel{(285)}{=} J_{\pm} \underbrace{J_3 |\lambda m\rangle}_{\hbar m |\lambda m\rangle} \pm J_{\pm} \hbar |\lambda m\rangle \\ &= (m \pm 1) \hbar J_{\pm} |\lambda m\rangle \end{aligned} \quad (299)$$

$\implies J_{\pm} |\lambda m\rangle$  ist EZ zu  $J_3$  mit EW  $(m \pm 1)\hbar$  oder  $J_{\pm} |\lambda m\rangle = 0$ .

$$0 \leq \|J_{\pm} |\lambda m\rangle\|^2 = \langle \lambda m | J_{\mp} J_{\pm} | \lambda m \rangle \quad (300)$$

$$\begin{aligned} &\stackrel{(297)}{=} \langle \lambda m | \vec{J}^2 - J_3^2 \mp J_3 \hbar | \lambda m \rangle \\ &= \lambda - m^2 \mp m \end{aligned} \quad (301)$$

$\implies \lambda \geq m^2 \pm m \implies \lambda \geq |m|(|m| + 1) \geq 0$  (302)  $\implies$  Es gibt für jedes  $\lambda$  ein maximales  $m$ :

$$j := m_{\max} \quad (303)$$

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

$$J_+ |\lambda j\rangle = 0 \quad (304)$$

$\implies$

$$0 = \|J_+ |\lambda j\rangle\|^2 \stackrel{(301)}{=} \lambda - j^2 - j$$

$\implies$

$$\lambda = j(j+1) \quad (305)$$

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

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

$m$  nimmt also die Werte

$$-j, -j+1, \dots, j-1, j \quad (307)$$

an.  $\implies$

$$\begin{aligned} 2j &\in \mathbb{N}_0, \text{ also} \\ j &= 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots \end{aligned} \quad (308)$$

Bessere Notation:

$$\begin{aligned} \vec{J}^2 |jm\rangle &= j(j+1)\hbar^2 |jm\rangle \\ J_3 |jm\rangle &= m\hbar |jm\rangle \end{aligned} \quad (309)$$

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

Eigenwerte des Bahndrehimpuls:

$$\vec{L} = \vec{X} \times \vec{P} \implies \text{Quantenzahlen } l, m_l$$

Spektrum gegenüber (308) weiter eingeschränkt.

$$a_j := \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \frac{X_j}{x_0} + i \frac{x_0 P_j}{\hbar} \right] \quad (310)$$

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

(dabei ist  $x_0$  beliebiger Parameter mit  $[x_0]$ =Länge) erfüllen (vgl (224))

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

( $\rightsquigarrow$  Auf- und Absteigeoperatoren) und

$$[a_+, a_-] = 0 \quad (313)$$

Weiter

$$\begin{aligned} L_3 &\stackrel{(386)}{=} X_1 P_2 - X_2 P_1 \\ &\stackrel{(310)}{=} \frac{\hbar}{2i} [(a_1 + a_1^\dagger)(a_2 - a_2^\dagger) - (a_2 + a_2^\dagger)(a_1 - a_1^\dagger)] \\ &= \frac{\hbar}{i} [a_1^\dagger a_2 - a_1 a_2^\dagger] \\ &\stackrel{(311)}{=} \hbar [a_-^\dagger a_- - a_+^\dagger a_+] \\ &= \hbar (N_- - N_+) \end{aligned} \quad (314)$$



mit Besetzungszahloperator  $N_+$  und  $N_-$ .

(235)  $\implies$  EW von  $N_{\pm}$  sind ganzzahlig

$\implies L_3$  hat nur ganzzahlige EW

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

$\implies$  Die Quantenzahl  $l$  in der EW-Gleichung (vgl. (309))

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

ist ebenfalls ganzzahlig.

Normierung:

$$(300) \implies J_- |jm\rangle \propto |j\ m-1\rangle \quad (317)$$

$$(301) \wedge (305) \implies \|J_- |jm\rangle\|^2 = j(j+1) - m(m-1)$$

Wähle

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

„Condor – Shortley – Phasenkonvention

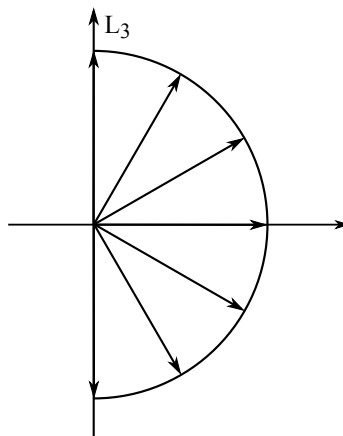
$$|j\ m+1\rangle := \frac{1}{\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}} J_+ |j\ m\rangle \quad (319)$$

Analog

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

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

Graphisch:



Ortsdarstellung: Polarkoordinaten  $r, \vartheta, \varphi$ :

$$\begin{aligned} [\vec{X}^2, \vec{L}] &= \sum_{j=1}^3 [X_j^2, \vec{L}] \\ &= \sum_{j=1}^3 \left\{ X_j [X_j, \vec{L}] + [X_j, \vec{L}] X_j \right\} \\ &\stackrel{(A18b)}{=} 0 \end{aligned} \quad (321)$$

Eigenfunktionen:

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

( $m$  steht für  $m_l$ )

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

In der Ortsdarstellung bedeutet (321):

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

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

$\Rightarrow$  Wir suchen nach Eigenfunktionen, die nicht von  $r$  abhängen:  $\langle \vec{r} | l m \rangle = Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$  (323)

$$\begin{aligned} \vec{L}^2 Y_{lm}(\vartheta, \varphi) &= \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \\ L_3 Y_{lm}(\vartheta, \varphi) &= \hbar m Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \end{aligned} \quad (324)$$

wobei  $L_j$  ein Differentialoperator bzgl.  $\vartheta$  und  $\varphi$  ist. Mit  $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$  ist auch  $f(r)Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$  mit beliebigen  $f(r)$  eine Lösung von (324).

$$\vec{\nabla} = \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\vartheta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \vec{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (325)$$

mit  $\vec{x} = r\vec{e}_r$ ,  $\vec{e}_r \times \vec{e}_\vartheta = \vec{e}_\varphi = \vec{e}_\varphi$  usw.

$$\begin{aligned} \vec{L} &= \frac{\hbar}{i} \vec{X} \times \vec{\nabla} \\ &= \frac{\hbar}{i} \left[ \vec{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \vec{e}_\vartheta \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \\ &= \frac{\hbar}{i} \left[ \begin{pmatrix} -\sin \varphi \\ \cos \varphi \\ 0 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \begin{pmatrix} -\cot \vartheta \cos \varphi \\ -\cot \vartheta \sin \varphi \\ 1 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \end{aligned} \quad (326)$$

$\Rightarrow$

$$\vec{L}^2 = -\hbar^2 \Delta_{\vartheta, \varphi} \quad (327)$$

wobei

$$\Delta_{\vartheta, \varphi} = \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (328)$$

Laplace-Operator in Kugelkoordinaten:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \Delta_{\vartheta, \varphi}. \quad (329)$$

(326)  $\Rightarrow$

$$L_3 = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

(324)  $\Rightarrow$

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \hbar m Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

$\Rightarrow$

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = e^{im\varphi} Y_{lm}(\vartheta, 0) \quad (330)$$

Aus (326) finden wir

$$L_{\pm} = L_1 \pm iL_2 = \hbar \exp \left\{ \pm i\varphi \left[ \pm \frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \right\} \quad (331)$$

Aus  $L_+ |l, l\rangle = 0$  folgt

$$\begin{aligned} 0 &= L_+ Y_{ll}(\vartheta, \varphi) \stackrel{(331), (330)}{=} \hbar \exp \left\{ i\varphi \left[ \frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \right\} Y_{ll}(\vartheta, \varphi) \\ &= \exp \left\{ i(l+1)\varphi \left( \frac{\partial}{\partial \vartheta} - l \cot \vartheta \right) \right\} Y_{ll}(\vartheta, 0) \end{aligned} \quad (332)$$

Lösungsweg wie (241)  $\rightarrow$  (242)  $\Rightarrow$

$$Y_{ll}(\vartheta, 0) = C_l (\sin \vartheta)^l \quad (333)$$

Normierung:

$$1 = \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi |Y_{lm}(\vartheta, \varphi)|^2 \quad (334)$$

(333)  $\Rightarrow$

$$|C_l|^2 = \frac{2l+1}{4\pi} \frac{1}{l!} \binom{2l}{l} \quad (335)$$

$$L_- Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \stackrel{(320)}{=} \sqrt{l(l+1) - m(m-1)} \hbar Y_{l, m-1}(\vartheta, \varphi) \quad (336)$$

Mit (330) und (331):

$$a_{lm} \exp \{i(n-1)\varphi\} Y_{l,m-1}(\vartheta, 0) = \exp \left\{ -i\varphi \left[ -\frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \right\} Y_{lm}(\vartheta, 0)$$

$$\Rightarrow$$

$$a_{lm} Y_{l,m-1}(\vartheta, 0) = \left[ -\frac{\partial}{\partial \vartheta} - m \cot \vartheta \right] Y_{lm}(\vartheta, 0)$$

Standardtrick:

$$\begin{aligned} a_{lm} Y_{l,m-1}(\vartheta, 0) &= \left[ -\frac{\partial}{\partial \vartheta} + m \cot \vartheta \right] (\sin \vartheta)^{-m} \sin^m Y_{lm}(\vartheta, 0) \\ &= -(\sin \vartheta)^{-m} \frac{\partial}{\partial \vartheta} (\sin \vartheta)^m Y_{lm}(\vartheta, 0), \end{aligned} \quad (337)$$

denn

$$\frac{\partial}{\partial \vartheta} (\sin \vartheta)^{-m} = -m (\sin \vartheta)^{-m-1} \cos \vartheta = -m (\sin \vartheta)^{-m} \cot \vartheta$$

also

$$\left[ \frac{\partial}{\partial \vartheta} + m \cot \vartheta \right] (\sin \vartheta)^{-m} = 0.$$

Mit  $t := \cot \vartheta$ ,  $\sin^2 \vartheta = 1 - t^2$  ist

$$\frac{\partial}{\partial \vartheta} = \frac{dt}{d\vartheta} \frac{d}{dt} = -\sin \vartheta \frac{d}{dt}$$

und (337) ist

$$\begin{aligned} a_{lm} Y_{l,m-1}(\vartheta, 0) &= (\sin \vartheta)^{-(m+1)} \frac{d}{dt} (\sin \vartheta)^m Y_{lm}(\vartheta, 0) \\ &= (1 - t^2)^{-\frac{n-1}{2}} \frac{d}{dt} (1 - t^2)^{\frac{n}{2}} Y_{lm}(\vartheta, 0) \end{aligned}$$

$\Rightarrow$  Rekursionsformel:

$$\underbrace{(1 - t^2)^{\frac{n-1}{2}} Y_{l,m-1}}_{f_{l,m-1}(t) = \frac{1}{a_{lm}} \frac{d}{dt}} = \frac{1}{a_{lm}} \frac{d}{dt} \underbrace{\left[ (1 - t^2)^{\frac{n}{2}} Y_{lm}(\vartheta, 0) \right]}_{f_{lm}(t)} \quad (338)$$

Anfangsbedingung  $m = l$  aus (333):

$$\begin{aligned} Y_{ll}(\vartheta, 0) &= C_l (1 - t^2)^{\frac{l}{2}} \\ \Rightarrow f_{ll}(t) &= (1 - t^2)^{\frac{l}{2}} Y_{ll}(\vartheta, 0) = C_l (1 - t^2)^l \end{aligned} \quad (339)$$

Lösung von (338)

$$f_{l,l-1}(t) = \frac{1}{a_{ll}} \frac{d}{dt} f_{ll}(t), \quad (340)$$

$$\begin{aligned} f_{l,l-2}(t) &\stackrel{(332)}{=} \frac{1}{a_{l,l-1}} \frac{d}{dt} f_{l,l-1}(t) \\ &\stackrel{(340)}{=} \frac{1}{a_{l,l-1}} \frac{1}{a_{ll}} \frac{d^2}{dt^2} f_{ll}(t), \\ f_{lm}(t) &= \frac{1}{a_{ll} \cdots a_{l,m+1}} \frac{d^{l-m}}{dt^{l-m}} f_{ll}(t) \end{aligned}$$

(338), (339)  $\implies$

$$Y_{lm}(\vartheta, 0) = \frac{C_l}{a_{ll} \cdots a_{l,m-1}} (1-t^2)^{-\frac{m}{2}} \frac{d^{l-m}}{dt^{l-m}} (1-t^2)^l$$

Die Lösung schreibt man üblicherweise als

$$Y_{lm}(\vartheta, 0) = C_{lm} P_l^m(t) \quad (341)$$

mit

$$C_{lm} = (-1)^m \left[ \frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{1/2} \quad (342)$$

und den *zugeordneten Legendre-Funktionen*

$$P_l^m(t) = (-1)^{l+m} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \frac{1}{2^l l!} (1-t^2)^{-\frac{n}{2}} \frac{d^{l-m}}{dt^{l-m}} (1-t^2)^l \quad (343)$$

Eigenschaften:

$$P_l^{-m}(t) = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(t) \quad (344)$$

also (via  $m \longrightarrow -m$  in (343)):

$$P_l^m(t) = \frac{1}{2^l l!} (1-t^2)^{\frac{n}{2}} \left( \frac{d}{dt} \right)^{l+m} (t^2-1)^l \quad (345)$$

Die

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = C_{lm} P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi} \quad (346)$$

heißen *Kugelflächenfunktionen*. Es gilt

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = (-1)^m Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi) \quad (347)$$

| Physik  | Chemie     |
|---|------------|
| $Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$  | s-Orbital  |
| $Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta e^{i\varphi}$                 | p-Orbitale |
| $Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta$                               |            |
| $Y_{1-1} = -Y_{11}^* = \sin \vartheta e^{-i\varphi}$                          |            |
| $Y_{22} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \vartheta e^{i\varphi}$              | d-Orbitale |
| $Y_{21} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \vartheta \cos \vartheta e^{i\varphi}$ |            |
| $Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \vartheta - 1)$                    |            |
| $Y_{2,-1} = -Y_{21}^*$  |            |
| $Y_{2,-2} = -Y_{22}^*$  |            |

Normierung:  $\langle l' m' | l m \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \implies$

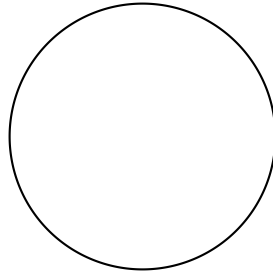
$$\int d\Omega Y_{l'm'}^*(\vartheta, \varphi) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (348)$$

Vollständigkeit:  $\mathbf{1} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l |l m\rangle \langle l m| \implies$

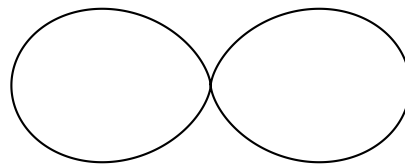
$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi) Y_{lm}(\vartheta', \varphi') = \delta(\Omega - \Omega') = \frac{\delta(\vartheta - \vartheta') \delta(\varphi - \varphi')}{\sin \vartheta} \quad (349)$$

$|Y_{lm}(\vartheta, \varphi)|^2 d\Omega$  ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Raumwinkelement  $d\Omega$  um  $(\vartheta, \varphi)$  für Elektron mit Drehimpuls  $-QZ(l, n)$

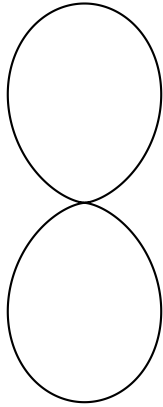
$l = 0, m = 0:$



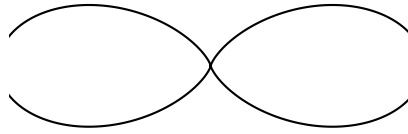
$l = 1, m = 1:$



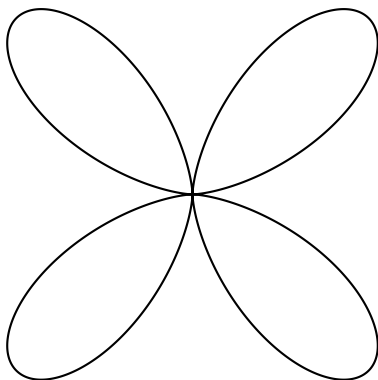
$l = 1, m = 0$ :



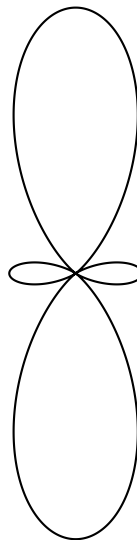
$l = 2, m = 2$ :



$l = 2, m = 1$ :



$l = 2, m = 0$ :



Parität:

$$\mathcal{P} : \psi(\vec{r}) \mapsto \psi(-\vec{r})$$

Für  $\psi(\vec{r}) = f(r)Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$  ist  $\psi(-\vec{r}) = f(r)Y_{lm}(\pi - \vartheta, \varphi + \pi)$

Aus (346) und (343):

$$Y_{lm}(\pi - \vartheta, \varphi + \pi) = (-1)^l Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (350)$$

$\implies$  Die Parität von  $Y_{lm}$  ist  $(-1)^l$ .

## 4 Wasserstoffatom

### 4.1 Zentralpotentiale

$$V(\vec{X}) = V(R) \quad (351)$$

mit  $R^2 = X_1^2 + X_2^2 + X_3^2$  und  $V(R) = V(r) = V(\sqrt{\vec{x}^2})$  in der Ortsdarstellung.

In beliebiger Darstellung:

$$V(R) = \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{x} |\vec{x}\rangle V(\sqrt{\vec{X}^2}) \langle \vec{x}|$$

Rotationsinvarianz:

$$e^{\frac{i}{\hbar} \vec{\varphi} \cdot \vec{J}} V(R) e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\varphi} \cdot \vec{J}} = V(R)$$

Infinitesimal:

$$\left[1 + \frac{i}{\hbar} \vec{\varphi} \cdot \vec{J}\right] V(R) \left[1 - \frac{i}{\hbar} \vec{\varphi} \cdot \vec{J}\right] = V(R) + \mathcal{O}(\varphi^2)$$

$\implies$

$$[\vec{J}, V(R)] = 0. \quad (352)$$

Auch

$$[J, \vec{P}^2] = 0, \quad (353)$$

also

$$[J, H] = 0 \quad (354)$$

Energieeigenkets:

$$|E j m\rangle \quad (355)$$

Ist  $V(R)$  zusätzlich auch von  $\vec{S}$  unabhängig (?), so ist  $[S, V(R)] = 0$ , also auch (wegen  $\vec{L} = \vec{J} - \vec{S}$ )

$$[\vec{L}, V(R)] = 0$$



So können wir die Energieeigenkets mit

$$|E l m_l s m_s\rangle \quad (356)$$

bezeichnen.

(354)  $\implies [H, J_{\pm}] = 0$ . Aus  $H |E j m\rangle = E |E j m\rangle$  folgt also

$$H J_{\pm} |E j m\rangle = J_{\pm} H |E j m\rangle = E J_{\pm} |E j, m\rangle$$

$\implies$

$$H |E j m \pm 1\rangle = E |E j m \pm 1\rangle$$

$\implies E$  hängt nicht von  $m$  ab.

Zunächst  $[\vec{S}, V(R)] = 0$

$$\begin{aligned} H &= \frac{P^2}{2m} + V(R), \\ |E l m_l s m_s\rangle &= |E l m_l\rangle \otimes |s m_s\rangle \end{aligned} \quad (357)$$

Spin-Entartung:  $E$  hängt nicht von  $m_s = \pm \frac{1}{2}$  ab.

$$H |E l m_l\rangle = E |E l m_l\rangle$$

mit  $\psi_{Elm_l}(\vec{r}) = \langle \vec{r} | E l m_l \rangle \implies$

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \right] \psi_{Elm_l}(\vec{r}) = E \psi_{Elm_l}(\vec{r}) \quad (358)$$

bzw. mit (327), (329):

$$P^2 = -\hbar^2 \Delta = P_r^2 + \frac{1}{r^2} \vec{L}^2 \quad (359)$$

wobei

$$P_r^2 = -\hbar^2 \left[ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right]. \quad (360)$$

Radialimpuls

$$P_r = \frac{\hbar}{i} \left( \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \quad (361)$$

erfüllt

$$\begin{aligned} P_r^\dagger &= P_r, \\ [P_r, R] &= \frac{\hbar}{i} \mathbb{1} \end{aligned} \quad (362)$$

(358) bedeutet also

$$\left[ \frac{1}{2m} P_r^2 + \frac{1}{2mr^2} \vec{L}^2 + V(r) \right] \psi_{Elm_l}(\vec{r}) = E \psi_{Elm_l}(\vec{r}) \quad (363)$$

Mit

$$\vec{L}^2 \psi_{Elm_l}(\vec{r}) = \hbar^2 l(l+1) \psi_{Elm_l}(\vec{r}) \quad (364)$$

folgt (siehe Text (324)):

$$\psi_{Elm_l}(\vec{r}) = f_{El}(r) Y_{lm_l}(\vartheta, \varphi) \quad (365)$$

und (363) wird zu

$$\left[ \frac{1}{2m} P_r^2 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] f_{El}(r) Y_{lm_l}(\vartheta, \varphi) = E f_{El}(r) Y_{lm_l}(\vartheta, \varphi)$$

Und mit (360):

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] f_{El}(r) = E f_{El}(r) \quad (366)$$

$\implies$  tatsächlich keine  $m_l$ -Abhängigkeit.

In (366) o.B.d.A.  $f_{El}(r)$  reell:

Trick:  $U_{El}(r) := r f_{El}(r)$ , dann

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial r^2} U_{El}(r) &= \frac{\partial}{\partial r} \left[ \underbrace{\left( \frac{\partial r}{\partial r} \right)}_{=1} f_{El}(r) + r \frac{\partial}{\partial r} f_{El}(r) \right] \\ &= 2 \frac{\partial}{\partial r} f_{El}(r) + r \frac{\partial^2}{\partial r^2} f_{El}(r) \\ &= r \left[ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right] f_{El}(r) \end{aligned}$$

und (366) wird zu

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] U_{El}(r) = E U_{El}(r). \quad (367)$$

Das entspricht 1-dim Schrödinger-Gleichung mit

$$V_{\text{Eff}}(r) = V(r) + \underbrace{\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}}_{\text{Zentrifugalpotenzial}} \quad (368)$$

Jedoch  $r \geq 0$ .  $d^3 \vec{r} = r^2 dr d\Omega$ .

Bindungszustände:

$$\begin{aligned} \infty &> \int_0^\infty r^2 dr f_{El}^2(r) = \int_0^\infty dr U_{El}^2(r) \\ \Rightarrow \\ |U_{El}(r)|\sqrt{r} &\longrightarrow 0 \text{ für } r \longrightarrow \infty \end{aligned} \quad (369)$$

Nun  $r \longrightarrow 0$ :

Zwei Fälle:

$$1.) \quad U(0) \neq 0 \Rightarrow f(r) \stackrel{r \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{r} \Rightarrow$$

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \right] f(r) Y_{lm_l}(\vartheta, \varphi) \stackrel{r \rightarrow 0}{\sim} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \delta^{(3)}(\vec{r}) + V(r) \frac{1}{r} \right] Y_{lm_l}(\vartheta, \varphi)$$

$\Rightarrow V(r)$  hat  $\delta^{(3)}(\vec{r})$ -singulären Anteil.

$$2.) \quad U_{El}(0) = 0 \Rightarrow V(r) \text{ hat keinen } \delta^{(3)}(\vec{r})\text{-singulären Anteil}$$

Für die Meisten Potenziale gilt

$$r^2 V(r) \longrightarrow 0 \text{ für } r \longrightarrow 0,$$

so dass  $V_{\text{eff}}(r)$  in (368) für  $r \longrightarrow 0$  vom Zentrifugalpotenzial dominiert ist, sofern  $l \neq 0$ .

$$r \longrightarrow 0 : \quad \frac{d^2 U_{El}}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} U_{El} = 0$$

reguläre Lösung:

$$U_{El}(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} r^{l+1} \text{ für } l \neq 0 \quad (370)$$

irreguläre Lösung:

$$U_{El}(r) \sim r^{-l}$$

im Widerspruch zu  $U_{El}(0) = 0$ .

## 4.2 Wasserstoffatom

Es gilt  $m_p = 1800 m_e$ .  $\rightsquigarrow$

$$V(r) = -\frac{\gamma}{r} \quad (371)$$

mit

$$\gamma = \underbrace{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}}_{\text{SI-Einheiten}} = \underbrace{hc\alpha}_{\text{in jedem Einheitensystem}} \quad (372)$$

$\alpha \approx \frac{1}{137}$  heißt Sommerfeld'sche Feinstrukturkonstante.

*Bindungszustände:*  $E < 0$ :

Wellenfunktion:

$$\begin{aligned}\psi_{Elm_l}(\vec{r}) &\stackrel{(365),(367)}{=} f_{El}(r)Y_{lm_l}(\vartheta, \varphi) \\ &= rU_{El}(r)Y_{lm}(\vartheta, \varphi)\end{aligned}\tag{373}$$

Die Radialgleichung in (367) wird mit

$$\begin{aligned}\rho &= \kappa r, \\ \kappa^2 &= \frac{2m|E|}{\hbar^2}, \quad \kappa > 0, \\ \rho_0 &= \frac{2m\gamma}{\hbar^2\kappa}\end{aligned}\tag{374}$$

zu

$$\left[ -\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{\rho_0}{\rho} - 1 \right] U_{El}(\rho) = 0\tag{375}$$

Asymptotik:  $U_{El}(\rho) \stackrel{\rho \rightarrow 0}{\sim} \rho^{l+1}$ , siehe (370).

Für  $\rho \rightarrow \infty$  wird (375) zu

$$\frac{d^2 U_{El}(\rho)}{d\rho^2} - U_{El}(\rho) = 0$$

$\Rightarrow$

$$U_{El}(\rho) \stackrel{\rho \rightarrow \infty}{\sim} e^{-\rho}\tag{376}$$

Ansatz:

$$U(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho} W(\rho)\tag{377}$$

Einsetzen in (315):

$$\rho W''(\rho) + 2(l+1-\rho)W(\rho) + [\rho_0 - 2(l+1)]W(\rho) = 0\tag{378}$$

Lösung mit Potenzreihenansatz:

$$W(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k\tag{379}$$

Ideal für Potenzreihenansatz:

$$\theta = \rho \frac{d}{d\rho},\tag{380}$$

denn  $\theta \rho^k = k \rho^k$  (gleiche Potenz)

$$\rho^2 \frac{d^2}{d\rho^2} = \theta(\theta - 1) = \theta^2 - \theta \quad (381)$$

(378) wird zu

$$[\theta(\theta - 1) + 2(l + 1 - \rho)\theta + (\rho_0 - 2(l + 1))\rho] W(\rho) = 0$$

Einsätzen von (349):

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k [k(k - 1) + 2(l + 1 - \rho)k + (\rho_0 - 2(l + 1))\rho] = 0 \quad (382)$$

Koeffizienten von  $\rho^{k+1}$ :

$$[(k + 1)k + 2(l + 1)(k + 1)] a_{k+1} + [-2k + \rho_0 - 2(l + 1)] a_k = 0 \text{ für } k \geq 0 \quad (383)$$

Der Koeffizient von  $\rho^0$  in (382) ist  $0 \implies a_0$  beliebig.

(383)  $\implies$

$$a_{k+1} = \frac{2(k + l + 1) - \rho_0}{(k + 1)(k + 2l + 2)} a_k \quad (384)$$

Noch mehr Asymptotik:

Entweder die Reihe bricht ab, oder (384) bedeutet

$$\frac{a_{k+1}}{a_k} \underset{k \rightarrow \infty}{\sim} \frac{2}{k}$$

also  $a_k \underset{k \rightarrow \infty}{\sim} \frac{2^k}{k!} \implies$

$$W \underset{\rho \rightarrow \infty}{\sim} e^{2\rho}$$

Widerspruch zu (376).

$\implies$  Die Reihe muss abbrechen!

(384)  $\implies$  Es gibt ein  $N \in \mathbb{N}_0$  mit

$$\rho_0 = 2(N + l + 1), \quad (385)$$

so dass in (384)  $a_{N+1} = 0$  und

$$W(\rho) = \sum_{k=0}^N a_k \rho^k. \quad (386)$$

Die Hauptquantenzahl  $n = N + l + 1$  erfüllt wegen  $N \geq 0, l \geq 0, N, l \in \mathbb{N}_0$ :

$$n \in \mathbb{N}. \quad (387)$$

Also wegen (385)

$$\rho_0 = 2n. \quad (388)$$

(374)  $\Rightarrow$

$$E = \frac{2m\gamma^2}{\hbar^2 \rho_0}$$

Mit (388) sind die Eigenwerte durch die *Balmerformel*

$$E_n = -\frac{m\gamma^2}{2\hbar n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (389)$$

gegeben.

(372)  $\Rightarrow$

$$\begin{aligned} \text{SI - System :} \quad E_n &= -\frac{me^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} \\ \text{jedes System :} \quad E_N &= -\frac{mc^2}{2} \frac{\alpha^2}{n^2} \end{aligned} \quad (390)$$

Statt  $|E l m_l\rangle$  schreibt man  $|n l m\rangle$ . Wegen (385), (387) ist

$$l \leq n - 1. \quad (391)$$

$l$  heit auch *Nebenquantenzahl* und  $m_l$  (was  $|m_l| \leq l$  erfllt) *magnetische QZ*.

Speziell frs Coulomb-Potenzial  $V(r) = -\frac{\gamma}{r}$ :  $E_n$  hngt nicht von  $l$  ab.

Ursache: Runge-Lenz-Vektor ist Erhaltungsgre.

Die DGL (378) lautet in der Variablen  $t = 2\rho$ :

$$t \frac{d^2 W}{dt^2} + [2l + 1 + 1 - t] \frac{dW}{dt} + [n + l - (2l + 1)] W = 0 \quad (392)$$

(392) heit *Laguerre'sche DGL*. Die Lsungen

$$W\left(\frac{t}{2}\right) = L_{n+l}^{2l+1}(t) \quad (393)$$

heien zugeordnete Laguerre-Polynome.

Es gilt:

$$L_r^s(t) = \left(-\frac{d}{dt}\right)^2 e^t \left(\frac{d}{dt}\right)^r e^{-t} e^r, \quad (394)$$

explizit:

$$\begin{aligned} L_1^1(t) &= -\frac{d}{dt} e^t [-e^{-t} t + e^{-t}] = 1 \\ L_2^1(t) &= \frac{1}{2} t^2 - 3t + 3 \\ L_3^3(t) &= -\frac{t^3}{6} + 3t^2 - 15t + 20 \end{aligned} \quad (395)$$

Die Radialfunktionen  $f_{El}(r)$  in (373) ist also mit (377) und (393):

$$f_{nl}(r) = f_{E_n l}(r) = N_{nl} (2\kappa r)^l e^{-\kappa r} L_{n+l}^{2l+1}(2\kappa r) \quad (396)$$

Normierungsfaktor:

$$N_{nl}^2 \frac{(n-l-1)!(2\kappa^3)}{2n[(n+l)!]^3} \quad (397)$$

$\kappa$  hängt von  $n$  ab:

$$\kappa = \frac{m\gamma}{\hbar n} = \frac{1}{an} \quad (398)$$

mit dem Bohr'schen Radius:

$$a = \frac{\hbar^2}{m\gamma} = \frac{\hbar^2}{mc\alpha} \approx 0,529 \cdot 10^{-10} \text{m} \quad (399)$$

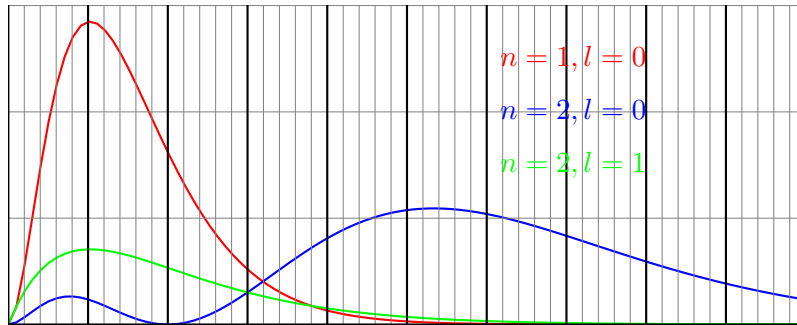
Nullstellen:

$$\begin{aligned} 0 : & \quad f_{10}(r) = 2a^{-3/2} e^{-r/a} \\ 1 : & \quad f_{20}(r) = 2(2a)^{-3/2} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-\frac{r}{2a}} \\ 2 : & \quad f_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}} (2a)^{-3/2} \frac{r}{a} e^{-\frac{r}{2a}} \end{aligned} \quad (400)$$

Anzahl der Knoten:  $N = n - l - 1$  („radiale QZ“).

Die Wahrscheinlichkeit, das Elektron zwischen  $r$  und  $r + dr$  anzufinden ist  $p(r) dr$  mit

$$p(r) = r^2 f_{nl}^2(r).$$



größeres  $n \implies$  größeres  $\langle R \rangle$

$$\begin{aligned} \langle r \rangle_{nl} &:= \langle n l, m | R | n l m \rangle \\ &= \int_0^\infty r^3 dr f_{nl}^2(r) \\ &= \frac{a}{2} [3n^2 - l(l+1)] \end{aligned} \quad (401)$$

## 5 Zeitunabhängige Störungstheorie

### 5.1 Nicht entartete Störungstheorie

$$H = H_0 + H_1 \quad (402)$$

Gelöst:

$$H_0 |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle \quad (403)$$

Gesucht:

$$H |n\rangle = E_n |n\rangle \quad (404)$$

$H_1$  sei klein gegen  $H_0$ , genauer:

$$\langle m^{(0)} | H_1 | n^{(0)} \rangle \ll |E_n^{(0)} - E_m^{(0)}|. \quad (405)$$

insbesondere, Nichtentartung von  $|N\rangle$ , d.h.  $E_m^{(0)} \neq E_n^{(0)}$  für  $n \neq m$  und  $|n\rangle$  ist Bindungszustand.

*Störungstheorie:* Lösen von (404) durch Entwickeln in

$$\frac{\langle m^{(0)} | H_1 | n^{(0)} \rangle}{|E_n^{(0)} - E_m^{(0)}|}$$

Zweckmäßig: reeller Parameter  $\lambda$  und

$$H = H_0 + \lambda H_1 \quad (406)$$

$\rightsquigarrow$  Organisation der Störungstheorie in Potenzen von  $\lambda$ .

Störungsreihe:

$$\begin{aligned} E_n &= E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \\ |n\rangle &= |n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |n^{(2)}\rangle + \dots \end{aligned} \quad (407)$$

$|n\rangle$  ist unnormiert: I.a.  $\langle n | n \rangle \neq 1$ .

(407) ist Potenzreihenansatz für (404)

$$(H_0 + \lambda H_1) \left( |n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \dots \right) = (E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + \dots) \left( |n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \dots \right) \quad (408)$$



Wir lösen (408) für alle  $\lambda$

$$\begin{aligned} \lambda^0 \quad & H_0 |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}, \text{ also} \\ \lambda^1 \quad & H_1 |n^{(0)}\rangle + H_0 |n^{(1)}\rangle = E_n^{(1)} |n^{(1)}\rangle + E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle \end{aligned} \quad (409)$$

$$\lambda^2 \quad H_1 |n^{(1)}\rangle + H_0 |n^{(2)}\rangle = E_n^{(2)} |n^{(2)}\rangle + E_n^{(1)} |n^{(1)}\rangle + E_n^{(0)} |n^{(2)}\rangle \quad (410)$$

Entwickeln nach ungestörten EZ:

$$|n^{(1)}\rangle = \sum_k |k^{(0)}\rangle \langle k^{(0)} | n^{(1)} \rangle, \text{ usw} \quad (411)$$

Zur Bestimmung der Entwicklungskoeffizienten  $\langle k^{(0)} | n^{(1)} \rangle$  und von  $E_n^{(1)}$  multiplizieren wir (409) mit  $|k^{(0)}\rangle$ :

$$\langle k^{(0)} | H_1 | n^{(0)} \rangle + \underbrace{\langle k^{(0)} | H_0 | n^{(1)} \rangle}_{E_k^{(0)} \langle k^{(0)} | n^{(0)} \rangle} = E_n^{(1)} \underbrace{\langle k^{(0)} | n^{(0)} \rangle}_{\delta_{kn}} + E_n^{(0)} \langle k^{(0)} | n^{(1)} \rangle \quad (412)$$

Für  $k = n$  liefert (412) die erste Korrektur zu Energie:

$$E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | H_1 | n^{(0)} \rangle \quad (413)$$

Für  $k \neq n$  folgt aus (412):

$$\langle k^{(0)} | n^{(1)} \rangle = \frac{\langle k^{(0)} | H_1 | n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \quad (414)$$

Jedoch  $\langle n^{(0)} | n^{(0)} \rangle$  ist unbestimmt!

Wir wählen

$$\langle n^{(0)} | n^{(1)} \rangle = 0 \quad (415)$$

Also mit (411):

$$|n^{(1)}\rangle = \sum_{k \neq n} |k^{(0)}\rangle \frac{\langle k^{(0)} | H_1 | n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \quad (416)$$

( $E_k^{(0)} \neq E_n^{(0)}$  für  $k \neq n$ ; für  $k \neq k'$  ist aber  $E_k^{(0)} = E_{k'}^{(0)}$  erlaubt, solange  $k, k' \neq n$ )

In höheren Ordnungen können wir auch

$$\langle n^{(0)} | n^{(k)} \rangle = 0, \quad k \geq 1 \quad (417)$$

fordern, denn zu jeder Lösung  $|n^{(k)}\rangle$  von (408) ist auch  $|n^{(k)}\rangle = |n^{(k)'}\rangle + \alpha |n^{(0)}\rangle$  Lösung von (408) zur Ordnung  $\lambda^k$ .

$$0 = \langle n^{(0)} | n^{(k)} \rangle = \langle n^{(0)} | n^{(k)'} \rangle + \alpha \langle n^{(0)} | n^{(0)} \rangle$$

$\Rightarrow$

$$\alpha = -\langle n^{(0)} | n^{(k)'} \rangle$$

Aus (410) finden wir dann:

$$\langle n^{(0)} | H_1 | n^{(1)} \rangle + \underbrace{\langle n^{(0)} | H_0 | n^{(2)} \rangle}_{E_n^{(0)} \underbrace{\langle n^{(0)} | n^{(2)} \rangle}_{=0}} = E_n^{(2)} \underbrace{\langle n^{(0)} | n^{(0)} \rangle}_{=1}$$

$\Rightarrow$

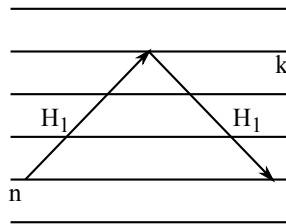
$$\begin{aligned} E_n^{(2)} &= \langle n^{(0)} | H_1 | n^{(1)} \rangle \\ &\stackrel{(416)}{=} \sum_{k \neq n} \frac{\langle n^{(0)} | H_1 | k^{(0)} \rangle \langle k^{(0)} | H_1 | n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \\ &= \sum_{k \neq n} \frac{|\langle k^{(0)} | H_1 | n^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \end{aligned} \quad (418)$$

Intepretation: Wahrscheinlichkeit, ein im Zustand  $|n^{(0)}\rangle$  prepariertes System nach Einschalten im Zustand  $|k^{(0)}\rangle \neq |n^{(0)}\rangle$  anzutreffen:

$$\begin{aligned} P_{n \rightarrow k^{(0)}} &= \frac{|\langle k^{(0)} | n \rangle|^2}{|\langle n | n \rangle|^2} \\ &= \frac{|\langle k^{(0)} | n \rangle|^2}{|1 + \mathcal{O}(\lambda^2)|^2} \\ &\stackrel{(416)}{=} \frac{|\langle k^{(0)} | \lambda H_1 | n^{(0)} \rangle|^2}{|E_n^{(0)} - E_k^{(0)}|^2} [1 + \mathcal{O}(\lambda^2)] \end{aligned} \quad (419)$$

$\langle k^{(0)} | \lambda H_1 | n^{(0)} \rangle$  nennt man auch *Übergangsamplitude* und  $P_{n \rightarrow k^{(0)}}$  *Übergangswahrscheinlichkeit*.

Zu  $E_n^{(2)}$  in (418) tragen Zustande mit beliebig hoher Energie bei.



Ist  $E_k > \langle n | H | n \rangle$ , der Zustand also klassisch unerreichbar, so spricht man von einem *virtuellen Effekt*.

Mit *Präzisionsmessungen* kann man Zustände  $|k^{(0)}\rangle$  erforschen, selbst wenn  $E_k^{(0)}$  fürs Experiment unerreichbar ist.

$\rightsquigarrow$  Wichtig für Teilchenphysik.

## 5.2 Entartete Störungstheorie

$E_n(0)$  sei  $N$ -fach entartet

$$H_0 |n^{(0)}\alpha\rangle = E_n^{(0)} |n^{(0)}\alpha\rangle \quad \text{mit } \alpha = 1, \dots, N \quad (420)$$

Entarteter  $N$ -dimensionaler Unterraum:

$$\mathcal{E} := \left[ \{ |n^{(0)}\alpha\rangle \} \right] \quad (421)$$

$$\langle n^{(0)}\alpha | n^{(0)}\beta \rangle = \delta_{\alpha\beta} \quad (422)$$

Jede Linearkombination

$$|n^{(0)}\gamma\rangle = \sum_{\alpha=1}^N |n^{(0)}\alpha\rangle c_{\alpha\gamma} \quad (423)$$

mit  $c_{\alpha\gamma} \in \mathbb{C}$  ist ebenfalls Eigenket von  $H_0$  zu  $E_n^{(0)}$ .

Wir wählen denselben Ansatz wie im nichtentarteten Fall in Gl. (404), (406)-(411).

Mit der Entartung  $|n\rangle \longrightarrow |n\gamma\rangle$  wir (409) zu:

$$(H_0 - E_n^{(0)}) |n^{(1)}\gamma\rangle = -(H_1 - E_n^{(1)}) |n^{(0)}\gamma\rangle$$

Linksmultiplikation mit  $|n^{(0)}\beta\rangle$  ergibt

$$0 = - \langle n^{(0)}\beta | H_1 - E_n^{(1)} | n^{(0)}\gamma \rangle \quad (424)$$

also ist (423):

$$\sum_{\alpha=1}^N c_{\alpha\beta} \langle n^{(0)}\beta | H_1 | n^{(0)}\alpha \rangle = E_n^{(1)} c_{\beta\gamma} \quad (425)$$

Matrixdarstellung:

$$h_{1\beta\alpha} = \langle n^{(0)}\beta | H_1 | n^{(0)}\alpha \rangle \quad (426)$$

(425)  $\implies$

$$\sum_{\alpha=1}^N h_{1\beta\alpha} c_{\alpha\gamma} = E_n^{(1)} c_{\beta\gamma} \quad (427)$$

Eigenwertproblem einer  $N \times N$  Matrix.  $\implies$

$$\det(h_1 - E_n^{(1)}) = 0 \quad (428)$$

(428) hat  $N$  Lösungen  $E_{n\gamma^{(1)}}$ , die nicht alle verschieden sein müssen. Die zugehörigen Eigenvektoren (siehe (427)) sind

$$\vec{c}^\gamma := \begin{pmatrix} c_{1\gamma} \\ c_{2\gamma} \\ \vdots \\ c_{N\gamma} \end{pmatrix}, \quad \gamma = 1, \dots, N \quad (429)$$

mit  $(\vec{c}^\gamma)^\dagger \vec{c}^{\gamma'} = \delta_{\gamma\gamma'}$ . Der Basiswechsel zwischen  $|n^{(0)}\alpha\rangle$  und  $|n^{(0)'}\gamma\rangle$  in (423) diagonalisiert wegen (427) also  $h_1$ , die Matrix  $C = (c_{\alpha\beta})$  ist unitär.

(427) bedeutet

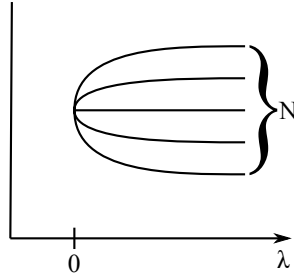
$$C^\dagger h_1 C = \text{diag}(E_{n_1}^{(1)}, \dots, E_{n_N}^{(2)}) \quad (430)$$

D.h. (423) diagonalisiert mit (427) die Störung  $H_1$  im Unterraum  $\mathcal{E}$ :

$$\langle n^{(0)'}\gamma | H_1 | n^{(0)'}\gamma' \rangle = E_{n\gamma}^{(1)} \delta_{\gamma\gamma'} \quad (431)$$

$\implies$  Bedingung (405) überlistet.

Wir beobachten, dass  $H_1$  die  $N$ -fache Entartung i.a. aufhebt (oder reduziert)



Im Fall  $E_{n\gamma}^{(1)}$  wird jedoch aus (428) bestimmt. (416) wird nun zu:

$$\begin{aligned} |n^{(1)}\gamma\rangle &= \sum_{|k^{(0)}\rangle \in \mathcal{E}} |k^{(0)}\rangle \frac{\langle k^{(0)} | H_1 | n^{(0)}\gamma \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} + \sum_{\substack{\gamma'=1 \\ \gamma' \neq \gamma}}^N |n^{(0)'}\gamma\rangle \langle n^{(0)'}\gamma' | n^{(0)'}\gamma \rangle \\ |n^{(1)'}\gamma\rangle &= \sum_{k \neq n} |k^{(0)}\rangle \frac{\langle k^{(0)} | H_1 | n^{(0)'}\gamma \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} + \sum_{\substack{\gamma'=1 \\ \gamma' \neq \gamma}} |n^{(0)'}\gamma\rangle \langle n^{(0)'}\gamma' | n^{(0)'}\gamma \rangle \end{aligned} \quad (432)$$

Neu: Komponenten  $\langle n^{(0)'} \gamma' | n^{(1)'} \gamma \rangle$ !

(410) entspricht im entarteten Fall:

$$H_1 |n^{(1)'} \gamma\rangle + H_0 |n^{(2)'} \gamma\rangle = E_{n\gamma}^{(2)} |n^{(1)'} \gamma\rangle + E_{n\gamma}^{(1)} |n^{(1)'} \gamma\rangle + E_n^{(0)} |n^{(2)'} \gamma\rangle \quad (433)$$

Multiplikation mit  $|n^{(0)'} \gamma'\rangle$

$$\begin{aligned} \langle n^{(0)'} \gamma' | H_1 | n^{(1)'} \gamma \rangle + E_n^{(0)} \langle n^{(0)'} \gamma' | n^{(2)'} \gamma \rangle &= E_{n\gamma}^{(2)} \delta_{\gamma\gamma'} + \\ &\quad \underbrace{E_{n\gamma}^{(1)} \langle n^{(0)'} \gamma' | n^{(1)'} \gamma \rangle}_{=0 \text{ für } x=x' \text{ wg. (415)}} + \\ &\quad E_n^{(0)} \langle n^{(0)'} \gamma' | n^{(2)'} \gamma \rangle \end{aligned} \quad (434)$$

Für  $\gamma = \gamma'$ :

$$\begin{aligned} E_{n\gamma}^{(1)} &\stackrel{(434)}{=} \langle n^{(0)} \gamma | H_1 | n^{(1)} \gamma \rangle \\ &\stackrel{(432)}{=} \sum_{k \neq n} \frac{|\langle k^{(0)} | H_1 | n^{(0)'} \gamma \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \end{aligned} \quad (435)$$

Der zweite (432) trägt nicht bei wegen

$$\langle n^{(0)'} \gamma | H_1 | n^{(0)'} \gamma' \rangle \stackrel{(431)}{=} \delta_{\gamma\gamma'} E_{n\gamma}^{(1)} = 0 \quad \text{für } \gamma = \gamma'.$$

Für  $\gamma \neq \gamma'$  liefert (434):

$$\begin{aligned} E_{n\gamma}^{(1)} \langle n^{(0)'} \gamma' | n^{(1)'} \gamma \rangle &= \langle n^{(0)'} \gamma' | H_1 | n^{(1)'} \gamma \rangle \\ &\stackrel{(432)}{=} \sum_{k \neq n} \frac{\langle n^{(0)'} \gamma' | H_1 | k^{(0)} \rangle \langle k^{(0)} | H_1 | n^{(0)'} \gamma \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \\ &\quad + \sum_{\gamma'' \neq \gamma} \underbrace{\langle n^{(0)'} \gamma' | H_1 | n^{(0)'} \gamma' \rangle}_{E_{n\gamma'}^{(1)} \delta_{\gamma'\gamma''}} \langle n^{(0)'} \gamma^{(1)} | n^{(1)'} \gamma \rangle \\ &= \sum_{k \neq n} \frac{\langle n^{(0)'} \gamma' | H_1 | k^{(0)} \rangle \langle k^{(0)} | H_1 | n^{(0)'} \gamma \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \\ &\quad + E_{n\gamma'}^{(1)} \langle n^{(0)'} \gamma' | n^{(1)'} \gamma \rangle \end{aligned} \quad (436)$$

Ist die Entartung aufgehoben, also  $E_{n\gamma}^{(1)} \neq E_{n\gamma'}^{(1)}$ , so liefert (436) uns die fehlenden Komponenten in (432).

$$\langle n^{(0)'} \gamma' | n^{(1)'} \gamma \rangle = \frac{1}{E_{n\gamma}^{(1)} - E_{n\gamma'}^{(1)}} \sum_{k \neq n} \frac{\langle n^{(0)'} \gamma' | H_1 | k^{(0)} \rangle \langle k^{(0)} | H_1 | n^{(0)'} \gamma \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \quad (437)$$

Für Zustände, die auch in erster Ordnung Störungstheorie entartet bleiben (d.h.  $E_{n\gamma}^{(1)} = E_{n\gamma'}^{(1)}$  für  $1 \leq \gamma, \gamma' \leq N' \leq N$ ) muss man nun im entarteten Unterraum den Operator

$$H_1 \sum_{k \neq n} \frac{|k^{(0)}\rangle \langle k^{(0)}|}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} H_1 \quad (438)$$

(siehe (436)) diagonalisieren.

Gilt  $E_{n\gamma}^{(2)} \neq E_{n\gamma'}^{(2)}$ , so liefert die Ordnung  $\lambda^3$  die Koeffizienten in (437).

Das Verfahren kann man zu beliebig hohen Ordnungen treiben.

### 5.3 Anwendung: Feinstruktur des Wasserstoffspektrums

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

$$[L_j, S_k] = 0 \quad (289)$$

Gemeinsame EZ von  $\vec{L}^2$ ,  $L_3$ ,  $\vec{S}$ ,  $S_3$ :

$$|l m_l s m_s\rangle \quad (439)$$

Auch:

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

$\Rightarrow$  Betrachte Basis aus gemeinsamen EZ von  $\vec{J}^2$ ,  $J_3$ ,  $\vec{L}^2$ ,  $\vec{S}^2$ :

$$|j m l s\rangle \quad (440)$$

Wegen  $J_3 = L_3 + S_3$  ist  $|l m_l s m_s\rangle$  EZ von  $J_3$  zum EW  $m = m_l + m_s$ :

$$J_3 |l m_l s m_s\rangle = (L_3 + S_3) |l m_l s m_s\rangle = (m_l + m_s) |l m_l s m_s\rangle \quad (441)$$

D.h.  $|j m l s\rangle$  in (440) ist Linearkombination aus  $|l m_l s m_s\rangle$  mit  $m = m_l + m_s$ .

$$|j m l s\rangle = \sum |l m_l s m_l\rangle \underbrace{\langle l m_l s m_s | j m l s \rangle}_{\text{Clebsch-Gordan-Koeff.}} \quad (442)$$

$$j = m_{\max} = \max_{\substack{|m_l| \leq l \\ |m_s| \leq s}} (m_l + m_s) \leq m_{l\max} + m_{s\max} = l + s \quad (443)$$

Betrachte  $L_3 = J_3 - S_3$  und  $m_s \rightarrow -m_s$

$$l = m_{l\max} \leq m_{j\max} - m_{s\max} \leq j + s \quad (444)$$

(443) und (444) (und die spezielle Betrachtung von  $l = 0$ )  $\Rightarrow$

$$|l - s| \leq j \leq l + s \quad (\text{Auswahlregel}) \quad (445)$$

d.h. CG-Koeffizienten, die (445) verletzen, sind gleich null.

Ausgehend von  $|j j l s\rangle = |l l s s\rangle$  berechnet man die CG-Koeffizienten in (442) mit Hilfe von  $J_- = L_- + S_-$ .

Wasserstoff:

$$H = H_0 + H_1$$

Relativistische Korrekturen:

$$H_1 = H_1 \vec{L} \cdot \vec{S} + H_{1\text{kin}} + H_{1\text{pot}} \quad (446)$$

$$H_1 \vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2m^2 c^2} \vec{S} \cdot \vec{L} \frac{\gamma}{R^3} \quad \text{heißt Spin - Bahn - Kopplung} \quad (447)$$

$$\vec{S} \cdot \vec{L} = \frac{1}{2} \left[ (\vec{L} + \vec{S})^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2 \right] = \frac{1}{2} \left[ \vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2 \right] \quad (448)$$

Die Eigenkets  $|n j m l s\rangle$  von  $H_0$  erfüllen

$$H_0 |n j m l s\rangle = E_n^{(0)} |n j m l s\rangle \quad (449)$$

mit

$$E_n^{(0)} \stackrel{(390)}{=} \frac{m c^2 \alpha^2}{2n^2}$$

Die Störung  $H_1 \vec{L} \cdot \vec{S}$  ist in der Basis  $\{|n j m l s\rangle\}$  im entarteten Hilbertraum bereits diagonal, denn

$$\begin{aligned} \langle n'_j m' l' s' | H_1 \vec{L} \cdot \vec{S} | n_j m l s \rangle &\stackrel{(448)}{=} \frac{\gamma}{4m^2 c^2} \left\langle n'_j m' l' s' \left| \frac{1}{R^3} (\vec{J} - \vec{L} - \vec{S}^2) \right| n_j m l s \right\rangle \\ &= \frac{\gamma}{4m^2 c^2} \left[ j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \delta_{jj'} \delta_{ll'} \delta_{mm'} \delta_{ss'} \\ &\quad \cdot \left\langle n_j m l s \left| \frac{1}{R^3} \right| n_j m l s \right\rangle \end{aligned} \quad (450)$$

Für  $l \geq 1$ :

$$E_n^{(1)} \vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{\gamma \hbar^2}{4m^2 c^2} \left[ j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl} \quad (451)$$

wobei

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl} = \int_0^\infty dr \frac{f_{nl}^2(r)}{r} \stackrel{(396)}{=} \frac{2}{a^3 n^3 l(l+1)(2l+1)} \quad (452)$$

Einsetzen in (451) liefert:

$$E_n^{(1)} \vec{L} \cdot \vec{S} = \underbrace{\frac{\gamma \hbar^2}{2m^2 c^2 n^3 a^3}}_{\stackrel{(389)}{=} \stackrel{(399)}{=} E_n^{(0)} \frac{\alpha^2}{n}} \begin{cases} -\frac{1}{(j+1)(2j+1)}, & l = j + \frac{1}{2} \\ \frac{1}{j(2j+1)}, & l = j - \frac{1}{2} \neq 0 \end{cases} \quad (453)$$

für  $l = 0$  ist  $j = s = \frac{1}{2}$ , also  $\underbrace{j(j+1) - l(l+1)}_{=\frac{3}{4}} - \frac{3}{4} = 0. \implies$

$$E_{n_{\vec{L} \cdot \vec{S}}}^{(1)} = 0 \quad \text{für } l = 0 \quad (454)$$

In (446) folgt  $H_{1\text{kin}}$  aus:

$$\begin{aligned} E &= \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2} \\ &= mc^2 + \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{8} p^4 m^3 c^2 + \dots \end{aligned} \quad (455)$$

$$\begin{aligned} H_{1\text{kin}} &= -\frac{1}{8} \frac{P^4}{m^3 c^2} \\ &= -\frac{1}{2mc^2} \left( \frac{pP2}{2m} \right)^2 \\ &= -\frac{1}{2mc^2} \left( H_0 + \frac{\gamma}{R} \right)^2 \end{aligned} \quad (456)$$

Wegen

$$\left[ H_{1\text{kin}}, \vec{J}^2 \right] = \left[ H_{1\text{kin}}, J_3 \right] = \left[ H_{1\text{kin}}, \vec{L}^2 \right] = \left[ H_{1\text{kin}}, \vec{J}^2 \right] = 0 \quad (457)$$

ist  $H_{1\text{kin}}$  in der Basis  $\{ |j m l s\rangle \}$  diagonal.  $\implies$

$$E_{n_{\text{kin}}}^{(1)} = \langle n_j m l s | H_{1\text{kin}} | n_j m l s \rangle.$$

Weiter

$$E_{n_{\text{kin}}}^{(1)} \stackrel{(456)}{=} -\frac{1}{2mc^2} \left\langle n_j m l s \left| H_0^2 + 2\gamma H_0 \frac{1}{R} + \gamma^2 \frac{1}{R^2} \right| n_j m l s \right\rangle \quad (458)$$

Wir benötigen

$$\begin{aligned} \left\langle n_j m l s \left| \frac{1}{R} \right| n_j m l s \right\rangle &= \frac{1}{an^2} \\ \left\langle n_j m l s \left| \frac{1}{R^2} \right| n_j m l s \right\rangle &= \frac{1}{a^2 n^3 (l + \frac{1}{2})} \end{aligned} \quad (459)$$

$\implies$

$$\begin{aligned} E_{n_{\text{kin}}}^{(1)} &= -\frac{1}{2mc^2} \left\{ E_n^{(0)2} + \frac{2\gamma}{an^2} E_n^{(0)} + \frac{\gamma^2}{a^2 n^2 (l + \frac{1}{2})} \right\} \\ &\stackrel{(389)}{=} \stackrel{(399)}{=} -E_n^{(0)} \left\{ -\frac{\alpha^2}{4n^2} + \frac{\alpha^2}{n^2} - \frac{\alpha^2}{n} \frac{1}{l + \frac{1}{2}} \right\} \\ &= -E_n^{(0)} \frac{\alpha^2}{n} \left\{ \frac{3}{4n} - \frac{1}{l + \frac{1}{2}} \right\} \end{aligned} \quad (460)$$

$$= -E_n^{(0)} \frac{\alpha^2}{n} \left[ \frac{3}{4n} + \begin{cases} -\frac{1}{j+1}, & l = j + \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{j}, & l = j - \frac{1}{2} \end{cases} \right] \quad (461)$$



Summe aus (461) und (453):

$$E_{n\vec{L}\cdot\vec{S}}^{(1)} + E_{n\text{kin}}^{(1)} = -E_n^{(0)} \frac{\alpha}{n} \left[ \frac{3}{4n} - \frac{1}{j + \frac{1}{2}} \right] \quad \text{für } l \geq 1 \quad (462)$$

Für  $l = 0$  folgt aus (460) und (454):

$$E_{n\vec{L}\cdot\vec{S}}^{(1)} + E_{n\text{kin}}^{(1)} = E_{n\text{kin}}^{(1)} = -E_n^{(1)} \frac{\alpha^2}{n} \left[ \frac{3}{4n} - 2 \right] \quad (463)$$

Letzter Term in (446):

Ortsdarstellung:

$$\begin{aligned} H_{1\text{pot}} &= \frac{\hbar^2}{8m^2c^2} \Delta V(r) \\ &= \frac{\pi\hbar^2\gamma}{2m^2c^2} \delta^{(3)}(\vec{x}) \end{aligned} \quad (464)$$

$$\begin{aligned} E_{n\text{pot}}^{(1)} &= \langle n_j \ m \ l \ s \mid H_{1\text{pot}} \mid n_j \ m \ l \ s \rangle \\ &= \frac{\pi\hbar^2\gamma}{2m^2c^2} |f_{nl}(0)|^2 \\ &= \frac{mc^2\alpha^4}{2n^3} \delta_{l0} \\ &= -E_n^{(0)} \left( -\frac{\alpha^2}{n} \right) \delta_{l0} \end{aligned} \quad (465)$$

Summe von (463) und (465):

$$E_{n\vec{L}\cdot\vec{S}}^{(1)} + E_{n\text{kin}}^{(1)} + E_{n\text{pot}}^{(1)} = \begin{cases} -E_n^{(0)} \frac{\alpha^2}{n} \left[ \frac{3}{4n} - 1 \right], & \text{für } l = 0, \\ -E_n^{(0)} \frac{\alpha^2}{n} \left[ \frac{3}{4n} - \frac{1}{j + \frac{1}{2}} \right], & \text{für } l \neq 0 \end{cases} \quad (466)$$

denn  $l = 0$  impliziert  $j = \frac{1}{2}$ .

Also gilt mit (465), (466) *unabhängig* von  $l$ :

$$\begin{aligned} E_n^{(1)} &= -E_{n\vec{L}\cdot\vec{S}}^{(0)} + E_{n\text{pot}}^{(1)} + E_{n\text{kin}}^{(1)} \\ &= -E_n^{(0)} \frac{\alpha^2}{n} \left[ \frac{3}{4n} - \frac{1}{j + \frac{1}{2}} \right] \end{aligned} \quad (467)$$

Energie-Niveaus:

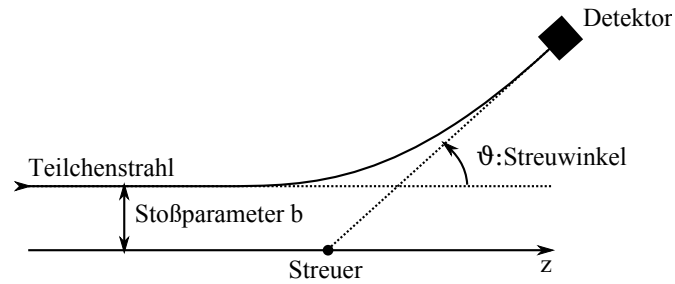
$$E_{n_j} = E_n^{(0)} + E_{n_j}^{(1)} = -\frac{mc^2}{2} \frac{\alpha^2}{n^2} \left[ 1 - \frac{\alpha^2}{n^2} \left( \frac{3}{4} - \frac{n}{j + \frac{1}{2}} \right) \right] \quad (468)$$

$\alpha \approx 5,4 \cdot 10^{-5} \Rightarrow$  Feinstruktur.

Relativistische Wellengleichung des Elektron: *Dirac-Gleichung*

Exakt lösen für das Wasserstoff-Atom, Quantenzahl  $j, l, s$  sind keine guten Quantenzahlen.

## 6 Streutheorie



Streuer: Ursprung aus dem Unbekannten, zu erforschendes Potenzial.

Einlaufender Teilchenstrahl: Stromdichte  $\vec{j}_{\text{ein}}(\vec{x})$ :

$$dN = \vec{j} d\vec{F} dt \quad (469)$$

Teilchen strömen in der Zeit  $dt$  durch das Flächenelement  $d\vec{F} (= \vec{n} dF)$ .

Für große  $r = |\vec{x}|$  verhalten sich die Teilchen fast wie freie Teilchen (gerade Trajektorien). Dann ist die Definition des differentiellen Wirkungsquerschnitts bzw. diff. Streuquerschnitt  $\frac{d\sigma}{d\Omega}$  sinnvoll:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{j_{\text{ein}}} \frac{dN}{d\Omega dt} \quad (470)$$

