Theoretische Physik D: Quantenmechanik I

Sommersemester 2009

Inhaltsverzeichnis

1 Grundbegriffe

Die klassische Physik beschreibt folgende Phänomene nicht korrekt . . .

a) . . . in der Physik makroskophischer 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 γ-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

$$E = h\nu = \hbar\omega, \ \hbar = \frac{h}{2\pi} \tag{1}$$

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

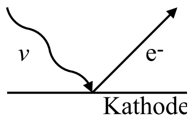


Abbildung 1: Photoeffekt

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 Phtononen.

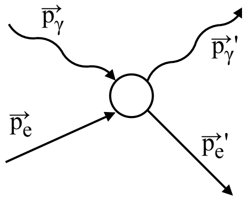


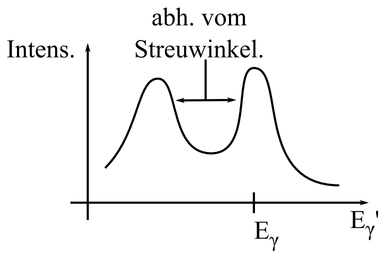
Abbildung 2: Comptoneffekt

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

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

$\vec{k}$: Wellenvektor

$$E_\gamma + E_e = E'_\gamma + E'_e$$
$$\vec{p}_e + \vec{p}_\gamma = \vec{p}'_e + \vec{p}'_\gamma$$



klassische Physik: e^- wird kontinuierlich beschleunigt, ΔE (aus Dopplereffekt) wächst mit Zeit.

1923: Broglie: Alle Teilchen haben Wellennatur

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

$\lambda \approx \frac{12{,}2}{\sqrt{E/\mathrm{eV}}}$Å (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:

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

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

$$H(p,q) = \text{const.} \qquad \underbrace{\oint p\,\mathrm{d}q}_{(*)} = nh,\ n = 1,2,3,\ldots$$

$(*)$ = Bahn im Phasenraum

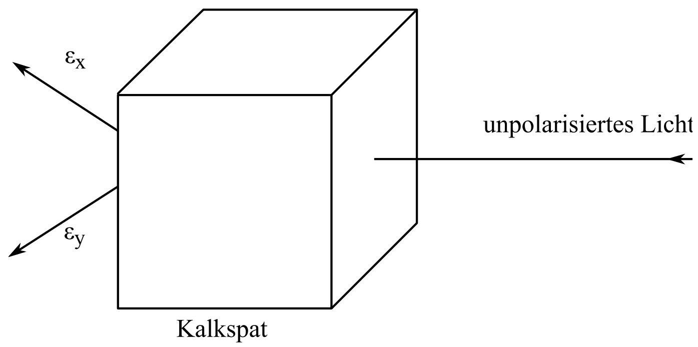
1.2 Zustände, Observable, Operatoren

klassisch.	QM
Welle Teilchen	} Zustand

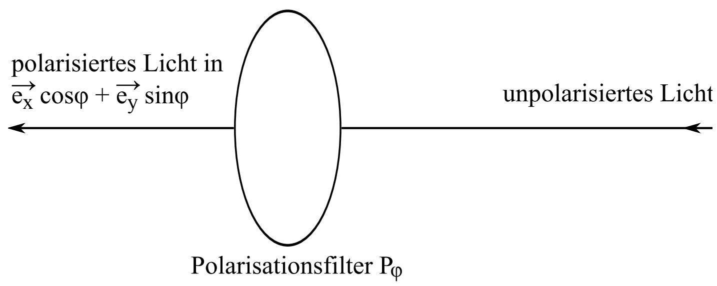
Photon mit Wellenzahlvektor $\vec{k}$ und Polarisation $\varepsilon \in \{\varepsilon_x, \varepsilon_y\}$:

$$\text{Zustand}: \left|\vec{k}, \epsilon\right\rangle, \quad \vec{p} = \hbar\vec{k},\ E = \hbar c|\vec{k}| \tag{3}$$

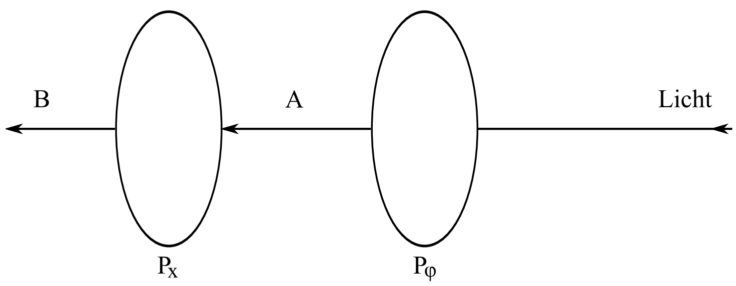
Nur Polarisation betrachet $\rightsquigarrow$ Doppelbrechender Kristall: Kalkspat



Polarisationsfilter P_φ:



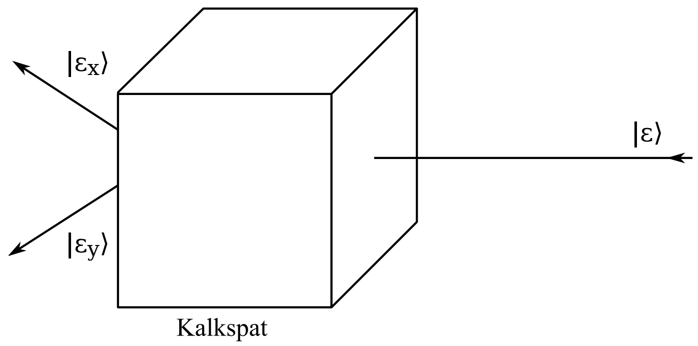
$P_x := P_{\varphi=0},\ P_y := P_{\varphi=\frac{\pi}{2}}$



Beobachtung: Intensität ist bei B gegenüber A um $\cos^2\varphi$ abgeschwächt. Das entspricht dem *klassischen Wellenbild*.
Teilchenbild: Könnte die Photonenenergie abgeschwächt sein? Nein: $E = h\omega$ ist gleichgeblieben.

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

Kalkspat:



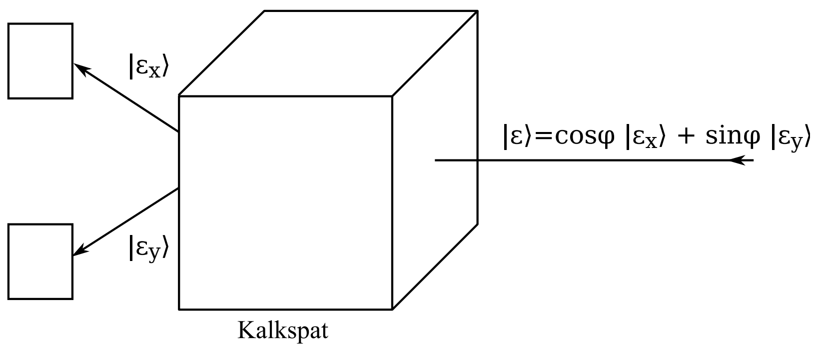
Komponenten-Zerlegung:

$$|\varepsilon\rangle = \alpha\,|\varepsilon_x\rangle + \beta\,|\varepsilon_y\rangle \tag{4}$$

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

$$\dim \mathcal{H} = 2. \tag{5}$$

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

$$P_x : |\varepsilon_\varphi\rangle = \cos\varphi\,|\varepsilon_x\rangle + \sin\varphi\,|\varepsilon_y\rangle \longmapsto \cos\varphi\,|\varepsilon_x\rangle \tag{6}$$

Man schreibt:

$$P_x\,|\varepsilon_\varphi\rangle = |P_x\varepsilon_\varphi\rangle = \cos\varphi\,|\varepsilon_x\rangle \tag{7}$$

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

$$P_\varphi : \left\{ \begin{array}{ll} P_\varphi\,|\varepsilon_x\rangle & = \cos\varphi\,|\varepsilon_\varphi\rangle \\ P_\varphi\,|\varepsilon_y\rangle & = \sin\varphi\,|\varepsilon_\varphi\rangle \end{array} \right\} \tag{8}$$

Es gilt:

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

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:

$$\langle\psi\,|\,\lambda_1\chi_1 + \lambda_2\chi_2\rangle = \lambda_1\,\langle\psi\,|\,\chi_1\rangle + \lambda_2\,\langle\psi\chi_2\rangle\,, \tag{11}$$

$$\langle\psi\,|\,\chi\rangle = \overline{\langle\chi\,|\,\psi\rangle}, \tag{12}$$

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

$\|\,|\psi\rangle\,\| := \sqrt{\langle\psi\rangle\,|\psi}$ 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

$$\langle e_i\,|\,e_j\rangle = \delta_{ij} \tag{14}$$

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

$$A\,|\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2\rangle = \lambda_1\,|A\psi_1\rangle + \lambda_2\,|A\psi_2\rangle \tag{15}$$

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

$$\langle\chi|A\psi\rangle = \langle A^\dagger\chi|\psi\rangle\,. \tag{16}$$

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

$$A = A^\dagger \tag{17}$$

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

$$A\,|\psi_\lambda\rangle = \lambda\,|\psi_\lambda\rangle \tag{18}$$

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

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

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 $\{\ |\,e_1\rangle, \dots\ |\,e_n\rangle\,\}$.

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

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

Eigenschaften dieser Objekte:

a) Dreiecksungleichung:

$$\|\,|\chi\rangle + |\psi\rangle\,\| \begin{cases} <, & |\chi\rangle\,, |\psi\rangle \text{ l.u.} \\ =, & |\chi\rangle\,, |\psi\rangle \text{ l.abh.} \end{cases}\Bigg\} \,\|\,|\chi\rangle + \|\,|\psi\rangle \tag{22}$$

b) Schwarzsche Ungleichung:

$$|\,\langle\psi|\chi\rangle\,| \leq \|\,|\psi\rangle\,\| \cdot \|\,|\chi\rangle\,\| \tag{23}$$

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 $\{\ |\,e_1\rangle, \dots,\ |\,e_n\rangle\,\}$

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

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

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

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 $l = (l_1, \ldots, l_n)^\dagger$ EV von a zum Eigenwert λ.

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

$$\begin{aligned}\Longrightarrow \langle e_j'|e_i'\rangle &= \langle Ue_j|Ue_i\rangle \\ &= \langle e_j|\underbrace{U^\dagger U}_{=\mathbb{1}}|e_i\rangle \\ &= \langle e_j|e_i\rangle = \delta_{ij}\end{aligned}$$

$\Longrightarrow \{\ |e_1'\rangle, \ldots, |e_n'\rangle\}$ ist ONB.

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

(i) Es gibt ONB aus Eigenkets $\{\ |e_1\rangle, \ldots, |e_n\rangle\}$ 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 $e^{(j)} = (e_1^{(j)}, \ldots, e_N^{(j)})^\dagger$ EV von a zum EW λ_j ist.

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

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

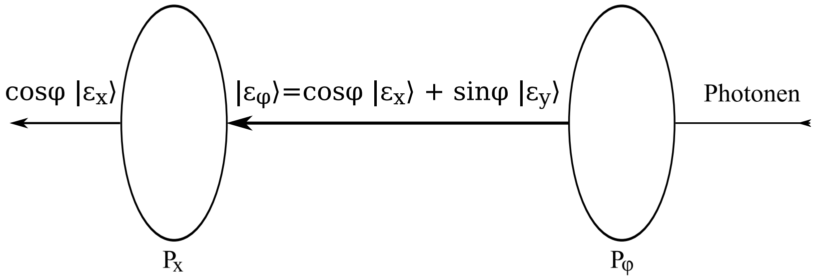
$$P_j^\dagger = P_j \Longleftarrow \Big[a\,|\psi\rangle\,\langle\chi|\Big]^\dagger = \alpha^*\,|\chi\rangle\,\langle\psi|\,,\ \alpha \in \mathbb{C} \tag{29}$$

Zuordnung:

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

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

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



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

$$W_x = \cos^2\varphi \overset{(17)}{=} |\,\langle\varepsilon_x|\varepsilon_y\rangle\,|^2 \overset{(21)}{=} \langle\varepsilon_\varphi|\varepsilon_x\rangle\,\langle\varepsilon_x|\varepsilon_\varphi\rangle = \langle\varepsilon_\varphi|P_y|\varepsilon_\varphi\rangle \tag{31}$$

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

Ersetzt man P_x durch P_y, so findet man

$$W_y = \sin^2\varphi = \langle\varepsilon|P_y|\varepsilon_\varphi\rangle\,, \tag{32}$$

also

$$W_x + W_y = 1, \quad P_x + P_y = \mathbb{1} \text{ und } P_xP_y = P_yP_x = 0. \tag{33}$$

(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 $|\psi\rangle$

$$W = \frac{\langle\psi|A|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \tag{34}$$

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

Kurzschreibweise:

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

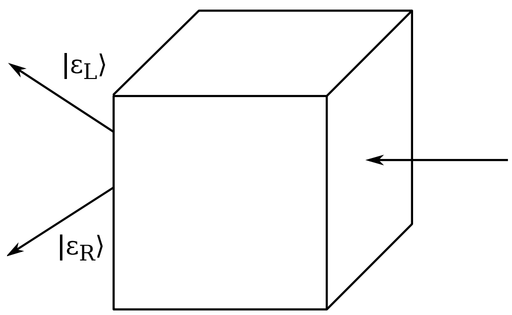
Im Fall der Polarisation P_x sind die möglichen Messwerte 0 (kein Ansprechen des Detektors) und 1 (Detektor spricht an).

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

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

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

Zirkular polarisierte Photonen



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

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

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

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

Operatoren:

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

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

Basiswechsel:

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

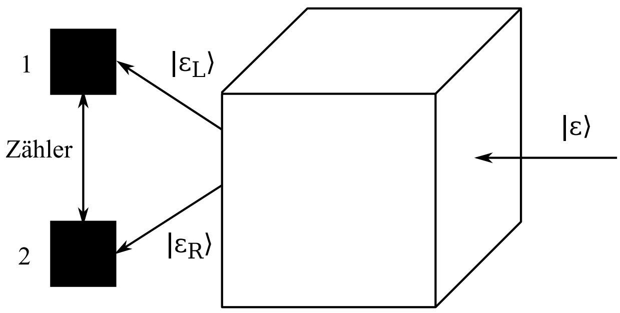
$\Longrightarrow$ Matrixdarstellung bzgl $\{\ |\ \varepsilon_x\rangle,\ |\ \varepsilon_y\rangle\ \}$ ist gegeben durch

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

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

$$\Longrightarrow p_r = p_l^* = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & i \\ -i & 1\end{pmatrix} \tag{45}$$

Messung der zirkluaren 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 $\{\ |\ \varepsilon_x\rangle,\ |\ \varepsilon_y\rangle\ \}$:

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

Ebenso

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

$\Longrightarrow$ 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 λ ergeben, so befindet sich das Objekt *nach* der Messung in einem Eigenzustand von A mit Eigenwert λ („spontane Zustandsreduktion")

Erwartungswerte selbstadjungierter Operatoren A sind reell:

$$\langle\psi|A|\psi\rangle^* = \langle\psi|A^\dagger|\psi\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle \tag{49}$$

Kommutator, Anti-kommutator:

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

$$\{A,B\} := AB + BA \tag{51}$$

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

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

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

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"

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

Herleitung der Unschärferelation durch schwarzsche Ungleichung (23):

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

Unschärfe:

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

Mit (55) folgt:

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

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

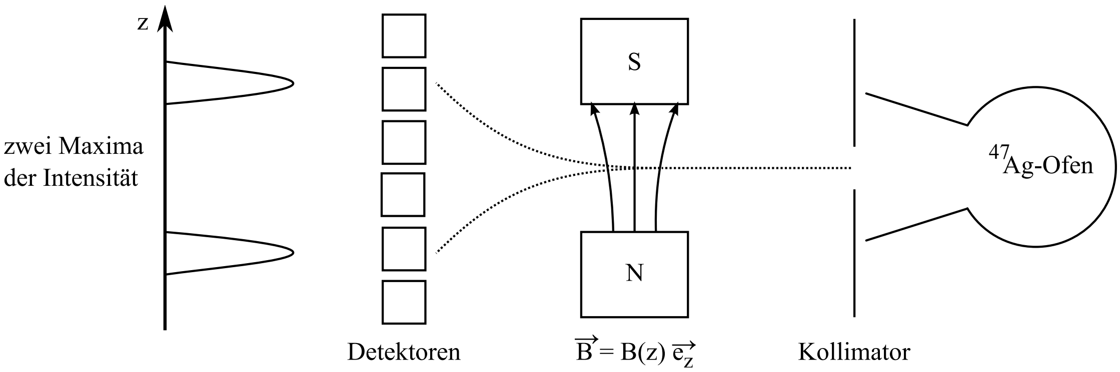
$$\begin{aligned} A\,|\alpha_i\beta_j\rangle &= \alpha_i\,|\alpha_i\beta_j\rangle \\ B\,|\alpha_i\beta_j\rangle &= \beta_j\,|\alpha_i\beta_j\rangle \end{aligned}$$

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

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

Stern-Gerlach-Versuch

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



klassisch:

$$\begin{aligned} V &= -\vec{\mu}\vec{B} && \text{(pot. Energie)} \\ \vec{F} &= -\nabla V && \text{(Kraft)} \\ F_z &= \mu_z \frac{\partial B}{\partial z} && \text{(Kraftkomponente in } z\text{-Richtung)} \end{aligned}$$

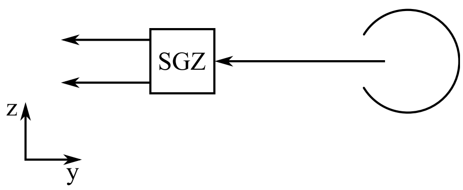
Atome können mit jedem Winkel nach oben oder unten abgelenkt werden.

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

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

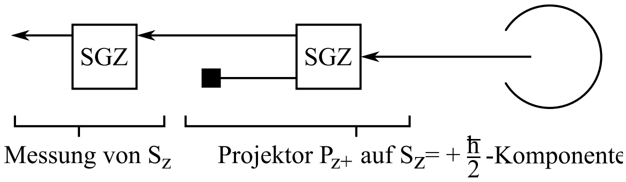
Silberatom ^{47}Ag: $\vec{\mu}$ aus dem 47. e^- (in 5s-Schale).

Schematisch:



Zwei SGZ hintereinander:

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



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

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

$$\langle S_{z-}|S_{z+}\rangle = 0$$

Spin-Operator:

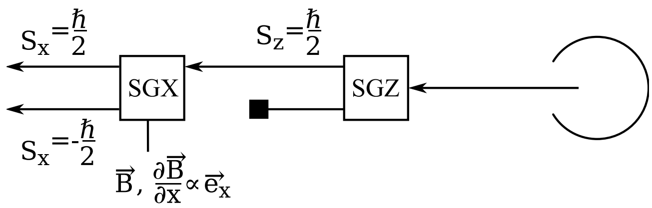
$$\begin{aligned} S_z\,|S_{z+}\rangle &= \frac{\hbar}{2}\,|S_{z+}\rangle \\ S_z\,|S_{z-}\rangle &= -\frac{\hbar}{2}\,|S_{z-}\rangle \end{aligned} \tag{58}$$

Erwartungswert und Unschärfe:

$$\langle S_z\rangle = \langle S_{z+}|S_z|S_{z+}\rangle = \frac{\hbar}{2} \tag{59}$$

$$(\Delta S_z)^2 = \langle S_{z+}|S_z^2 - \frac{\hbar^2}{4}|S_{z+}\rangle = 0$$

b)



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

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

Allgemein: $|\psi\rangle$ und $e^{i\varphi}\,|\psi\rangle$ beschreiben denselben physikalischen Zustand, denn für 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:

$$\begin{aligned} |S_{x^+}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\,|S_{z^+}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\,|S_{z^-}\rangle \\ |S_{x^-}\rangle &= -\frac{1}{\sqrt{2}}\,|S_{z^+}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\,|S_{z^-}\rangle \end{aligned} \tag{60}$$

Projektoren:

$$\begin{aligned} P_{x^\pm} &= |S_{x^\pm}\rangle\,\langle S_{x^\pm}| \\ &= \frac{1}{2}\,|S_{z^+}\rangle\,\langle S_{s^+}| \pm \frac{1}{2}\,|S_{z^+}\rangle\,\langle S_{z^-}| \pm \frac{1}{2}\,|S_{z^-}\rangle\,\langle S_{z^+}| + \frac{1}{2}\,|S_{z^-}\rangle\,\langle S_{z^-}| \end{aligned} \tag{61}$$

$$\Longrightarrow p_{x^\pm} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & \pm 1 \\ \pm 1 & 1 \end{pmatrix} \tag{62}$$

Spin-Operator:

$$S_x\,|S\rangle_{x^\pm} = \pm\frac{\hbar}{2}\,|S_{x^+}\rangle \tag{63}$$

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

$$\begin{aligned} |S_{z^+}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\,[|S_{x^+}\rangle - |S_{x^-}\rangle] \\ |S_{z^-}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\,[|S_{x^+}\rangle + |S_{x^-}\rangle] \end{aligned} \tag{64}$$

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}Ag-Atome mit $S_x = \frac{\hbar}{2}$ und $S_x = -\frac{\hbar}{2}$ beobachtet.

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

$$\Longrightarrow s_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{66}$$

(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:

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

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

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

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

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

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

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

Andererseits mit (67):

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

(68)-(70) bedeuten:

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

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

$$|S_{y^\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|S_{z^+}\rangle \pm \frac{i}{\sqrt{2}}|S_{z^-}\rangle \tag{71}$$

Inverse:

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

Matrixdarstellung:

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

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 ε_{jkl} das Levi-Civita-Symbol ist

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

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

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

Aus (77) folgt

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

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

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

(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

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

Damit ist

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

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

Übliche Schreibweise:

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

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

$$|e_j'\rangle = |Ue_j\rangle \,, \quad j = 1, \ldots, N \tag{85}$$

Sei A ein selbstadjungierter Operator mit

$$A\,|e_j\rangle = \lambda_j\,|e_j\rangle \tag{86}$$

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

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

mit

$$A' = UAU^\dagger \tag{87}$$

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. $\{\ |\uparrow\rangle,\ |\downarrow\rangle\ \}$:

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

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

Basisunabhänig: Spur eines Operators A:

$$\operatorname{tr} A := \sum_{j=1}^{N} \langle e_j|A|e_j\rangle \tag{88}$$

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

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

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

$$\operatorname{tr} A = \sum_{j=1}^{N} \lambda_j. \tag{89}$$

Ebenso basisunabhängig:

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

1.3 Ort, Impuls, Energie

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

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

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

Eigenwertgleichung:

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

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

$$P_j = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \tag{93}$$

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

(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 $\Longrightarrow C[\ldots]$ 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 ∞-oft stetig diff'baren Funktionen ...

3.) Schwartz-Raum: umfasst Funktionen die selbst und deren Ableitung für $|x| \to \infty$ schneller abfallen als jede Potenz

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

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

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

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

Es gelten:

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

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):

$$\langle f|g\rangle = \int_T f^*(x) g(x) \,\mathrm{d}x \tag{94}$$

sinnvoll für 1.) bis 3.)

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

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

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

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

$$\|f - g\|^2 = \int_T |f(x) - g(x)|^2 \, \mathrm{d}x = 0. \tag{96}$$

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

5.) Für $T \subseteq \mathbb{R}^n$:

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

(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 $(f_n) = (f_1, f_2, \ldots)$ 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 musst nicht unbedingt in U liegen!

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

Beispiel mit Zahlenfolgen:

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

$\mathbb{Q}$ 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:

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

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

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

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

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

Nun ist

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

und

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

Also:

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

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

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

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

$$\Longrightarrow \langle f|g\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} a_n^* b_n \tag{104}$$

Lineare Operatoren im Hilbertraum $\mathcal{H}$

Betrachte Operatoren

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

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

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

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:

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

Impulsoperator:

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

Ortsoperator:

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

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

$$[X_j, P_k] = i\hbar\delta_{jk}, \tag{110}$$

$$[X_j, X_k] = 0 = [P_j, P_k] \tag{111}$$

Nachweis:

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

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

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

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

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

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

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

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

A heißt hermitesch (oder symmetrisch), wenn

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

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

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

$\Longrightarrow$ f hermitesch. Wegen $\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x(Pf)^*(x)g(x) = \left[\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x g^*(x)Pf(x)\right]$ 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

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

Beispiele

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

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

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

definiert und beschränkt.

Jeder Eigenwert gehört zu σ:

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

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

1.) $\sigma = \sigma_p \cup \sigma_c$ wobei das Punktspektrum bzw. diskretes Spektrum σ_p die Menge der Eigenwerte bezeichnet und σ_c kontinuierliches Spektrum heißt.

2.) σ enthält nur relle λ. Für $\mathrm{Im}\lambda \neq 0$ und $\lambda \notin \sigma$ gilt:

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

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:

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

Beachte:

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \|A - \lambda\mathbb{1})f_\varepsilon\| = 0 \Longleftrightarrow \lim_{\varepsilon \to 0} \|R_\lambda f_\varepsilon\| = \infty$$

Veranschaulichung

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

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

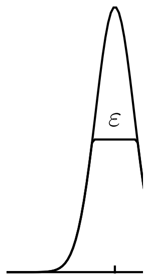
$\Longrightarrow \sigma_p = \emptyset$.

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

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

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

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



und

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

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

Approximative Eigenfunktionen von X:

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

denn

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

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) $\Longrightarrow P\psi_p(x) = p\psi_p(x)$, jedoch $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_p^*(x)\psi_p(x)\,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} 1 = \infty$, 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:

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

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

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

1.) $\mathcal{D}(U) = \mathcal{H}$ (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.) $\langle Uf|Ug\rangle = \langle f|g\rangle \;\; \forall f, g \in \mathcal{H}$ („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:

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

d.h. $\mathrm{Re}\,\langle f|g\rangle = \mathrm{Re}\,\langle Uf|Ug\rangle$. Mit $\|f+ig\|$ analog $\Longrightarrow \mathrm{Im}\,\langle f|g\rangle = \mathrm{Im}\,\langle Uf|Ug\rangle$ □

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:

$$\langle\varphi|\alpha f + \beta g\rangle = \alpha\,\langle\varphi|f\rangle + \beta\,\langle\varphi|g\rangle \tag{124}$$

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

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

$$\sum_j \alpha_j\,|e_j\rangle \longleftrightarrow \sum_j \alpha_j^*\,|e_j\rangle \tag{125}$$

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

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

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

Ist V kein Hilbertraum, so gilt dies nicht:

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

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

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

Symbolische Schreibweise wie in (126):

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

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

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

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

$$\underset{\text{Mehr Bras}}{\mathcal{S}^*[\mathbb{R}]} \supsetneqq L^2[\mathbb{R}] \supsetneqq \underset{\text{weniger Kets}}{\mathcal{S}[\mathbb{R}]} \tag{127}$$

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:

$$\langle p|\, P = \langle p|\, p, \tag{128}$$

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

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

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:

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

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

verallgemeinerte Eigenfunktionen (Eigenbras) zu X gesucht:

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

Lösung:

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

Auch hier ist $\langle \psi_{x_0}|\psi_{x_0}\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \delta(x - x_0)\delta(x - x_)= \infty$ 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 ∞-dimensinalen Fall) wie folgt (für ohne entartete Eigenvektoren):

$$|f\rangle = \sum_{\lambda\in\sigma_p} |\lambda\rangle \langle\lambda|f\rangle + \int_{\sigma_c} \mathrm{d}\lambda\, |\lambda\rangle \langle\lambda|f\rangle \tag{132}$$

Ortsoperator:

$$X\,|\psi\rangle = x\,|\psi\rangle \tag{133}$$

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

$$|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} \mathrm{d}x_0\ |x_0\rangle\,\langle x_0|\psi\rangle \tag{134}$$

entspricht

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

Impulsoperator:

$$PNe^{i\frac{px}{\hbar}} = p\underbrace{Ne^{i\frac{px}{\hbar}}}_{\widehat{=}|p\rangle},\quad N = \text{Normierungskonstante}$$

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

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

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

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

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

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

Konsistenzcheck (der Vollständigkeit):

$$\begin{aligned}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{i\frac{px}{\hbar}} &= \langle x|p\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x'\ \langle x|x'\rangle\,\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{i\frac{px'}{\hbar}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{i\frac{px}{\hbar}}\checkmark\end{aligned} \tag{137}$$

in (137) wurde verwendet:

$$\langle x|x'\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x''\,\delta(x-x')\delta(x'-x'') = \delta(x-x') \tag{138}$$

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:

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

Projektion auf Impulseigenzustand:

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

Umkehrfunktion

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

Ortsoperator in Impulsdarstellung:

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

Nun ist

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

Einsetzen in (143):

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

Impulsoperator in Impulsdarstellung:

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

Zusammenfassung:

	Ortsdarstellung	Impulsdarstellung
Ortsoperator X	$x\psi(x)$	$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p}\widetilde{\psi}(p)$
Impuloperator P	$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)$	$p\widetilde{\psi}(p)$

Energie

klassische Mechanik:	Hamiltonfunktion $H(x_j, p_k)$
QM:	$H(X_j, P_k)$

Teilchen im Potenzial:

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

Eigenzustände $|E\rangle$ zum Energieeigenwert E

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

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

Ortsdarstellung:

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

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

Es gilt

$$\langle \vec{x} \mid H \mid \vec{x}'\rangle = \left\langle \vec{x} \,\middle|\, \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(\vec{X}) \,\middle|\, \vec{x}' \right\rangle$$
$$= \left\langle \vec{x} \,\middle|\, \frac{\vec{P}^2}{2m} \,\middle|\, \vec{x}' \right\rangle + \underbrace{\left\langle \vec{x} \,\middle|\, V(\vec{X}) \,\middle|\, \vec{x}' \right\rangle}_{V(\vec{x})\ \underbrace{\langle \vec{x} \mid \vec{x} \rangle}_{\delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{x}')}}$$

und

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

3D-Version von (137):

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

Einsetzen in (149):

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

Einsetzen in (148):

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

partielle Integration:

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

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

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

Impulsdarstellung:

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

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

1.4 Tensorprodukt

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

$$\text{Tensorprodukt } \mathcal{H} \otimes \mathcal{H}' = \left[|e_j\rangle \otimes |e'_k\rangle\right] \tag{155}$$

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

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

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

$$|\lambda\rangle = \sum_{kl} \alpha_{kl} |e_k\rangle \otimes |e'_l\rangle\,. \tag{157}$$

Bras:

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

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

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

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

Insbesondere gilt

$$[A, A'] = 0, \tag{160}$$

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 $\mathcal{H}' = [|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \ldots]$:

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

Pauli-Spinor = zwei-komponentige Wellenfunktion

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

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

1.5 Zeitentwicklung

Klassische Mechanik: Symmetrien $\overset{\text{Noether-Thm}}{\Longrightarrow}$ Erhaltungsgrößen.

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

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

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

Analogie zwischen klassischer Mechanik und QM:

Symmetrie bzgl. $t \mapsto t + \Delta t \Longrightarrow$ Hamiltonfunktion H ist zeitlich konstant: $\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t} = 0$.

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

mit dem Zeitentwicklungsoperator (= Translationsoerator in der Zeit)

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

Differenziell:

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

Für $t_0 = 0$:

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

(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

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

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

Anwendung:

$$\int_{t_0}^{t_0+t} \mathrm{d}t_1 \int_{t_0}^{t_0+t} \mathrm{d}t_2\, TH(t_1)H(t_2) = \int_{t_0}^{t_0+t} \mathrm{d}t_1 \int_{t_0}^{t_1} \mathrm{d}t_2\, H(t_1)H(t_2) + \int_{t_1}^{t_0+t} \mathrm{d}t_2\, H(t_2)H(t_1) \tag{169}$$

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

Regel:

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

Daraus folgt:

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

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

zeitgeordnete Exponentialreihe = Dyson-Reihe

$$T \exp\left[\int_{t_0}^{t_0+t} A(t')\,\mathrm{d}t'\right] := 1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{R!} \int_{t_0}^{t_0+t} \mathrm{d}t_1 \ldots \int_{t_0}^{t_0+t} \mathrm{d}t_k\, T A(t_1)\ldots A(t_k) \tag{172}$$

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

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} T \exp\left[\int_{t_0}^{t_0+t} A(t')\,\mathrm{d}t\right] = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \Big[& \int_{t_0}^{t_0+t} \mathrm{d}t_2 \ldots \int_{t_0}^{t_0+t} \mathrm{d}t_n\, T A(t_0+t) A(t_2)\ldots A(t_n) \\
& + \int_{t_0}^{t_0+t} \mathrm{d}t_1 \int_{t_0}^{t_0+t} \mathrm{d}t_3 \ldots \int_{t_0}^{t_0+t} \mathrm{d}t_n\, T A(t_1) A(t_0+t)\ldots A(t_n) \\
& + \ldots \\
& + \int_{t_0}^{t_0+t} \mathrm{d}t_1 \ldots \int_{t_0}^{t_0+t} \mathrm{d}t_{n-1}\, T A(t_1)\ldots A(t_{n-1}) A(t_0+t) \Big] \\
= A(t_0+t) \sum_{n=1}^{\infty} & \frac{1}{(n-1)!} \int_{t_0}^{t_0+t} \mathrm{d}t_1 \ldots \int_{t_0}^{t_0+t} \mathrm{d}t_{n-1}\, T A(t_1)\ldots A(t_{n-1})
\end{aligned}$$

Mit $n \to n+1$ findet man

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

Sehr praktisch für gekoppelte Differntialgleichung:

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

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

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

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

Im allgemeinen Fall ist

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

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:

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

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

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

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:

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

und

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

hat für $\frac{dH}{dt} =$ die Lösung

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

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:

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

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

Heisenberg-Bild:

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

$$A_H(t) = U^\dagger(t,0)A_S(t)U(t,0) \tag{181}$$

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

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 $\frac{i}{\hbar}[,] \to$ Poisson-Klammer

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

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

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

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

2 Teilchen im Potenzial

2.1 $V = 0$ (freies Teilchen)

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

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

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

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

Impulsdarstellung:

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

Gauß'sches Wellenpaket

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

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

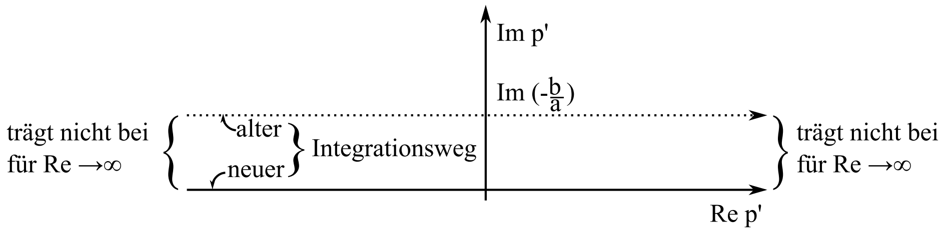
Ortsdarstellung:

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

mit

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

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



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

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

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

Mit

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

ist

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

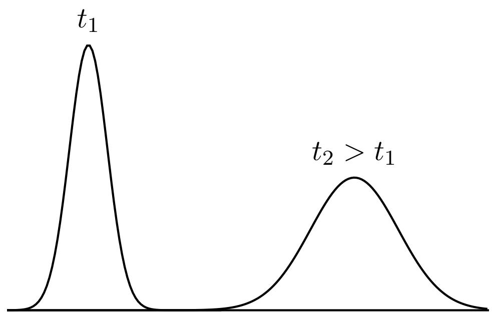
und

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

(199), (201) $\Longrightarrow$

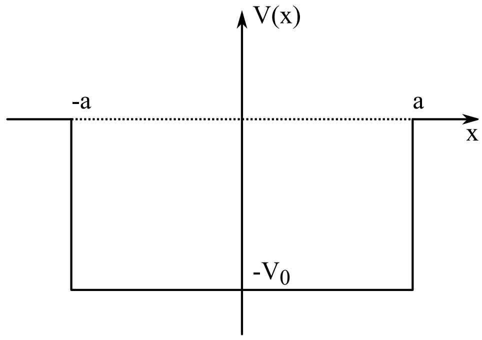
$$\Delta X \Delta P = \frac{\hbar}{2}\sqrt{1+\Delta(t)^2} \tag{202}$$

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

2.2 Kastenpotential

Betrachte

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



Anwendung:

- abgeschirmte Störstellen in Halbleitern
- Kernphysik

Dimensionsloser Parameter:

$$\xi = \frac{\sqrt{2mV_0}a}{\hbar} \tag{204}$$

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

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

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

Lösung von (205) für $|x| > a$:

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

$$E_n < 0: \quad \psi_n(x) = \left\{ \begin{matrix} N_n e^{\kappa_n x}, & x < -a \\ N_n' e^{-\kappa_n x}, & x > a \end{matrix} \right\} \tag{206}$$

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

Paritätsoperator = Raumspiegelungsoperator:

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

In unserem Fall:

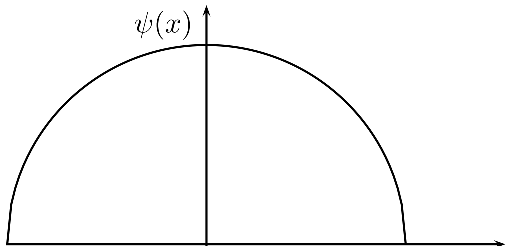
$$\begin{aligned} H\mathcal{P}\psi(x) &= H\psi(-x) \\ &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\psi(-x) \\ \mathcal{P}H\psi(x) &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{d(-x)^2} + V(-x)\right]\psi(-x) \\ &= H\psi(-x) \quad \text{wegen } V(-x) = V(x) \end{aligned}$$

$$\Longrightarrow [H, \mathcal{P}] = 0 \tag{208}$$

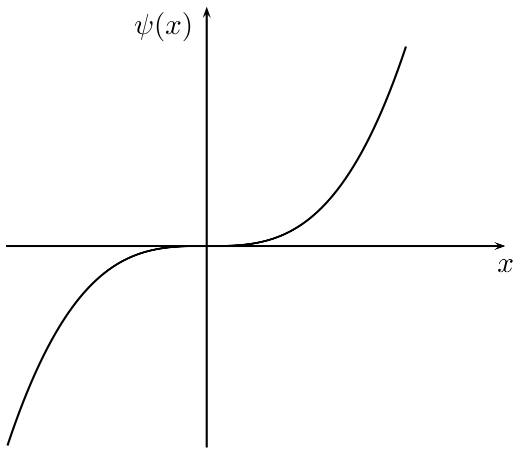
$\Longrightarrow$ Es gibt eine Basis aus gemeinsamen Eigenfunktionen von H und $\mathcal{P}$.

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

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

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

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

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) $\Longrightarrow$

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

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

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

$$\Longrightarrow \frac{\kappa_n}{q_n} = \tan(q_n a) \tag{213}$$

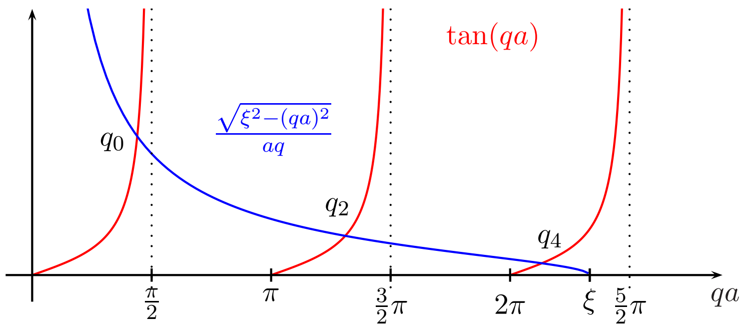
Wegen

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

bedeutet (213)

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

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



Zahl der geraden Lösungen:

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

Energie-EW

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

Insbesondere E_0 existiert immer und

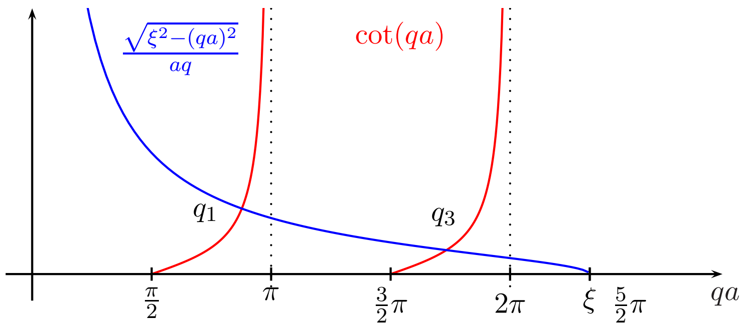
$$-V_0 < E_n < \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2}$$

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

$$\psi_n(x) = S_n \sin(q_n x) \tag{217}$$

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

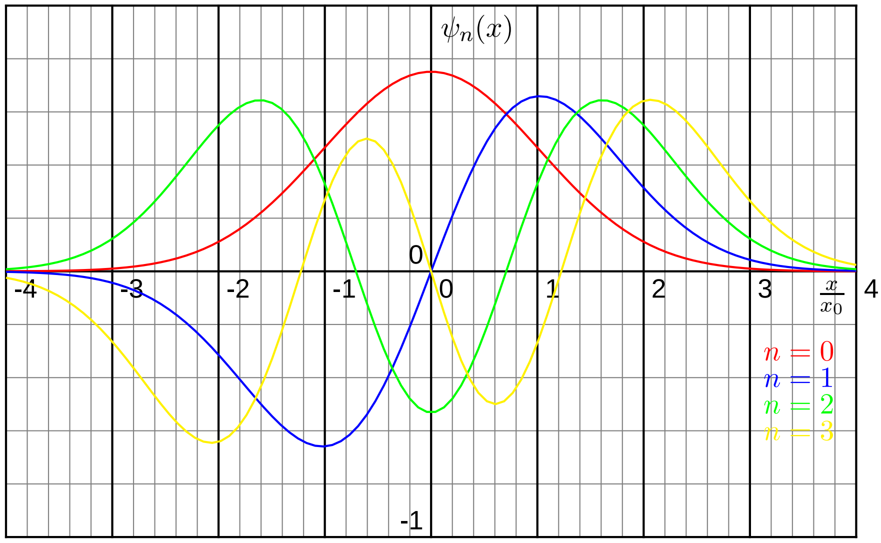
$$-\cot(q_n a) = \frac{\kappa_n}{q_n} = \frac{\sqrt{\xi^2 - (q_n a)^2}}{q_n a} \tag{218}$$



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

$$\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} > \frac{\pi^2}{4}$$

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

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

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

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

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \tag{220}$$

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

Vernichtungsoperator (= Absteigeoperator), annihilation op:

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

Erzeugungsoperator (= Aufsteigeoperator), creation op

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

Es gilt für den Kommuator:

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

Besetzungszahl-Operator:

$$Na^\dagger a \tag{225}$$

(222) und (223) liefern:

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

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

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

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

$$\begin{aligned} n &= n\langle n|n\rangle \\ &= \langle n \,|\, N \,|\, n\rangle \\ &= \left\langle n \,\middle|\, a^\dagger a \,\middle|\, n \right\rangle \\ &= \langle an \,|\, an\rangle \\ &= \||an\rangle\|^2 \\ &\geq 0 \end{aligned} \tag{228}$$

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

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

Betrachte $a|n\rangle$:

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

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

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

$$N|0\rangle = 0 \tag{232}$$

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

Aus (231) folgt durch vollsändige 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

$$\Longrightarrow n \in \mathbb{N}_0 \tag{233}$$

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.

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

Normierung:

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

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

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

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

Weiter

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

Zuammenfassung von (234) und (236):

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

und

$$a^n |n\rangle = \sqrt{n!}\,|0\rangle \tag{238}$$

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:

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

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

Im Fall 2 haben wir Grundzustände

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

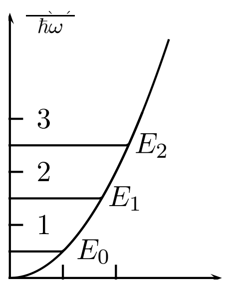
Analog findet man:

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

sind alle EZ zum Eigenwert n von N.

Wegen (226) sind die Energieeigenwerte

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



Streuzustände gibt es nicht!

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

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

Also

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

$\Longrightarrow$

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

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

Ansatz:

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

$\Longrightarrow$

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

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

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

Normierung:

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

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

$\Longrightarrow$ Grundzustand-Wellenfunktionen:

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

Übrigen: $n > 0$

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

Dimensionslose Variable

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

Damit gilt:

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

mit

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

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) $\Longrightarrow$

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

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 $\delta_{nm} = \langle n|m\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x ß, k\psi_n(x)^*\psi_m(x)$ folgen mit (243) die *Orthogonalitätsrelationen*

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

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

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

Mit (243)

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

Weitere Eigenschaftende:

Erzeugende Funktionen:

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

Hermitescher DGL:

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

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):

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

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

Damit folgt:

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

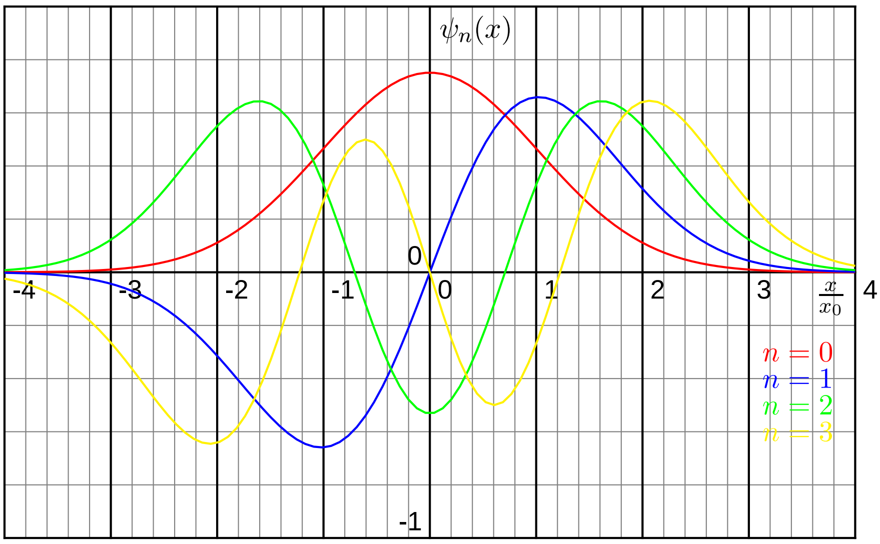
Ebenso $\langle n \,|\, P \,|\, n \rangle \overset{(254)}{=} 0$

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

$$\begin{aligned}
(\Delta P)^2 &= \langle n \,|\, P^2 \,|\, n \rangle \\
&\overset{(254)}{=} -\frac{\hbar^2}{2 x_0^2} \langle n | (a^\dagger - a)^2 | n \rangle \\
&= -\frac{\hbar^2}{2 x_0^2} \left\langle n \,\middle|\, a^\dagger a + a a^\dagger \,\middle|\, n \right\rangle \\
&= \frac{hbar^2}{2 x_0^2} (2n + 1)
\end{aligned} \tag{256}$$

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

$\Longrightarrow$ 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

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

Aus (182) folgt

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

Außerdem

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

Also

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

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

Analog:

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

$\Longrightarrow$ klassische Bewegungsgleichung des harmonischen Oszillators

Welche Zustände zeigen die Schwingungen des klassischen Oszillators?

Nicht die Energie-Eigenzustände:

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

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 ψ:

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

(263) heißt *Ehrenfest'sches Theorem.*

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

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

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 φ:

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

$$\vec{a_\varphi} = \cos\varphi \, \vec{a} + (1 - \cos\varphi)(\vec{a} \cdot \vec{n})\vec{n} - \sin\varphi(\vec{n} \times \vec{a}) \tag{265}$$

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

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

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

(265) $\Longrightarrow$

$$a_{\varphi k} = \cos\varphi a_k + (1-\cos\varphi)\left(\sum_{n=1}^{3} a_m n_m\right) n_k - \sin\varphi\left(\sum_{m,l=1}^{3}\varepsilon_{klm} n_l a_m\right)$$
$$\overset{(266)}{=} \sum_{m=1}^{3} [R(\vec{\varphi})]_{km}\, a_m$$

$\Longrightarrow$

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

$$R(\vec{\varphi}) = \begin{pmatrix} \cos\varphi + (1-\cos\varphi)n_1^2 & (1-\cos\varphi)n_1n_2 + \sin n_3 & (1-\cos\varphi)n_1n_3 - \sin\varphi n_2 \\ (1-\cos\varphi)n_1n_2 - \sin\varphi n_3 & \cos\varphi + (1-\cos\varphi)n_2^2 & (1-\cos\varphi)n_2n_3 + \sin\varphi n_1 \\ (1-\cos\varphi)n_1n_3 + \sin\varphi n_2 & (1-\cos\varphi)n_2n_3 - \sin n_1 & \cos\varphi + (1-\cos\varphi)n_3^2 \end{pmatrix} \tag{268}$$

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

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

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 φ und $\vec{n}$ aus $R(\varphi)$:

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

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

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

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

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.) $R(\overrightarrow{\varphi_1}) \cdot R(\overrightarrow{\varphi_2})$ ist Drehmatrix und in $R(\overrightarrow{\varphi_3}) = R(\overrightarrow{\varphi_1})R(\overrightarrow{\varphi_2})$ ist $\overrightarrow{\varphi_3}$ eine stetige Funktion von $\overrightarrow{\varphi_1}$ und $\overrightarrow{\varphi_2}$ (sogar analytisch)

3.) $R^{-1}(\overrightarrow{\varphi_1})$ ist Drehmatrix

4.) $\big(R(\overrightarrow{\varphi_1})R(\overrightarrow{\varphi_2})\big)R(\overrightarrow{\varphi_3}) = R(\overrightarrow{\varphi_1})\big(R(\overrightarrow{\varphi_2})R(\overrightarrow{\varphi_3})\big)$

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

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

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

wobei

$$i\omega^{(l)}_{km} = -\varepsilon_{klm} \tag{273}$$

also

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

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

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

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

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

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

das ist eleganter als (267).

Alternativ: Euler-Winkel:

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R(\alpha\vec{e_z})R(\beta\vec{e_y})R(\gamma\vec{e_z}) \tag{278}$$

Die Generatoren der SO(3) erfüllen:

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

Beweis:

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

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

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

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

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

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

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

eine sogenannte Darstellung der Lie-Algebra.

Die Matrizen $e^{i\vec{\varphi}\vec{\omega}'}$ bilden eine Darstellung der Lie-Gruppe: Aus $e^{i\vec{\varphi_1}\vec{\omega}}e^{i\vec{\varphi_2}\vec{\omega}} = e^{i\vec{\varphi_3}\vec{\omega}}$ folgt $e^{i\vec{\varphi_1}\vec{\omega}'}e^{i\vec{\varphi_2}\vec{\omega}'} = e^{i\vec{\varphi_3}\vec{\omega}'}$

Darstellung der so(3) mit 2×2 Matrizen:

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

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

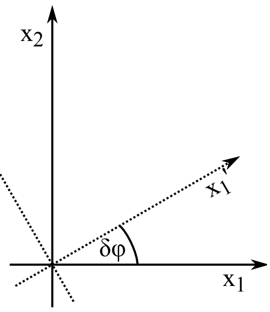
$$\mathrm{SU}(2) := \{e^{i\vec{\varphi}\frac{\vec{\sigma}}{2}}\} = \{U \in \mathbb{C}^{2\times 2} : U^\dagger U = \mathbb{1} \text{ und } \det U = 1\} \tag{282}$$

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

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

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

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



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

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

mit

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

Endliche Drehung

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

bedeutet:

$$L_j = \varepsilon_{jkl} X_k P_l \tag{286}$$

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

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

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

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}, \tag{288}$$

wobei

$$[L_j, S_k] = 0, \tag{289}$$
$$[J_j, J_k] = i\varepsilon_{jkl} J_l \tag{290}$$

3.2 Eigenwerte des Drehimpulsoperator

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

$\rightsquigarrow$ Casimir-Operator

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

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

Es gilt

$$\left\langle \lambda m \middle| \vec{J}^2 \middle| \lambda m \right\rangle \geq 0 \Longrightarrow \lambda \geq 0 \tag{293}$$

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

$$J_\pm^\dagger = J_\mp \tag{294}$$

Dann:

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

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

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned} 0 \leq \| J_p m |\lambda m\rangle \|^2 &= \langle \lambda m \,|\, J_\mp J_\pm \,|\, \lambda m\rangle \\ &\overset{(297)}{=} \langle \lambda m | \vec{J}^2 - J_3^2 \mp J_3\hbar | \lambda m\rangle \end{aligned} \tag{300}$$

$$= \lambda - m^2 \mp m \tag{301}$$

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

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

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

$$J_+ |\lambda j\rangle = 0 \tag{304}$$

$\Longrightarrow$

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

$\Longrightarrow$

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

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

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

m nimmt also die Werte

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

an. $\Longrightarrow$

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

Bessere Notation:

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

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

Eigenwerte des Bahndrehimpuls:

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

Spektrum gegenüber (308) weiter eingeschränkt.

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

$$\begin{aligned} a_+ &:= \frac{1}{\sqrt{2}}(a_1 + i a_2) \\ a_+^+ &:= \frac{1}{\sqrt{2}}(a_1^+ - i a_2^+) \\ a_- &:= \frac{1}{\sqrt{2}}(a_1 - i a_2) \\ a_-^+ &:= \frac{1}{\sqrt{2}}(a_1^+ + i a_2^+) \end{aligned} \tag{311}$$

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

$$[a_+, a_+^+] = [a_-, a_-^+] = \mathbb{1} \tag{312}$$

($\rightsquigarrow$ Auf- und Absteigeoperatoren) und

$$[a_+, a_-] = 0 \tag{313}$$

Weiter

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

mit Besetzungszahloperator N_+ und N_-.

(235) $\Longrightarrow$ EW von $N_\pm$ sind ganzzahlig

$\Longrightarrow$ L_3 hat nur ganzzahlige EW

$$m_l = -l, -l+1, \ldots, -1, 0, 1, \ldots l-1, l \tag{315}$$

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

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

ist ebenfalls ganzzahlig.

Normierung:

$$(300) \Longrightarrow J_- \left| jm \right\rangle \propto \left| j\, m-1 \right\rangle \tag{317}$$

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

Wähle

$$\left| j\, m-1 \right\rangle := \frac{1}{\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}} J_- \left| j\, m \right\rangle \tag{318}$$

„Condor – Shortley – Phasenkonvention

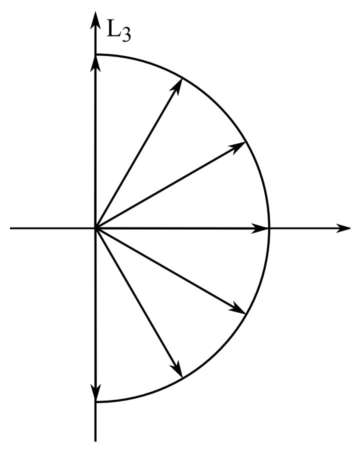
$$\left| j\, m+1 \right\rangle := \frac{1}{\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}} J_+ \left| j\, m \right\rangle \tag{319}$$

Analog

$$\left| l\, m_l - 1 \right\rangle := \frac{1}{\sqrt{l(l+1) - m_l(m_l-1)}} L_- \left| l\, m_l \right\rangle \tag{320}$$

mit $L_\pm = L_1 \pm i L_2$.

Graphisch:



Ortsdarstellung: Polarkoordinaten r, ϑ, φ:

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

Eigenfunktionen:

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

(m steht für m_l)

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

In der Ortsdarstellung bedeutet (321):

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

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

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

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

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

$$\vec{\nabla} = \vec{e_r}\frac{\partial}{\partial r} + \vec{e_\vartheta}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \vartheta} + \vec{e_\varphi}\frac{1}{r \sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial \varphi} \tag{325}$$

mit $\vec{x} = r\vec{e_r}$, $\vec{e_r} \times \vec{e_\vartheta} = \vec{e_\vartheta} = \vec{e_\varphi}$ usw.

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

$\Longrightarrow$

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

wobei

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

Laplace-Operator in Kugelkoordinaten:

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

(326) $\Longrightarrow$

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

(324) $\Longrightarrow$

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

$\Longrightarrow$

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

Aus (326) finden wir

$$L_\pm = L_1 \pm iL_2 = h\exp\left\{\pm i\varphi\left[\pm\frac{\partial}{\partial\vartheta} + i\cot\vartheta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]\right\} \tag{331}$$

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

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

Lösungsweg wie (241) $\longrightarrow$ (242) $\Longrightarrow$

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

Normierung:

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

(333) $\Longrightarrow$

$$|C_l|^2 = \frac{2l+1}{4\pi}\frac{1}{?^l}\binom{2l}{l}m \tag{335}$$

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

Mit (330) und (331):

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

$\Longrightarrow$

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

Standardtrick:

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

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

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

$\Longrightarrow$ Rekursionsformel:

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

Anfangsbedingung $m=l$ aus (333):

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

Lösung von (338)

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

$$f_{l,l-2}(t) \overset{(332)}{=} \frac{1}{a_{l,l-1}}\frac{d}{dt}f_{l,l-1}(t)$$

$$\overset{(340)}{=} \frac{1}{a_{l,l-1}}\frac{1}{a_l l}\frac{d^2}{dt^2}f_{ll}(t),$$

$$f_{lm}(t) = \frac{1}{a_{ll}\cdots a_{l,m+1}}\frac{d^{l-m}}{dt^{l-m}}f_{ll}(t)$$

(338), (339) $\Longrightarrow$

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

Die Lösung schreibt man üblicherweise als

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

mit

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

und den *zugeordneten Legendre-Funktionen*

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

Eigenschaften:

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

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

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

Die

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

heißen *Kugelflächenfunktionen*. Es gilt

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

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

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

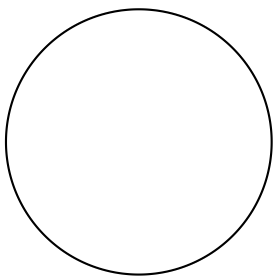
$$\int \mathrm{d}\Omega\, Y_{l'm'}^*(\vartheta,\varphi) Y_{lm}(\vartheta,\varphi) = \delta_{ll'}\delta_{mm'} \tag{348}$$

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

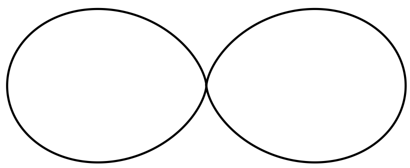
$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} Y_{lm}^*(\vartheta,\varphi) Y_{lm}(\vartheta',\varphi') = \delta(\Omega - \Omega') = \frac{\delta(\vartheta-\vartheta')\delta(\varphi-\varphi')}{\sin\vartheta} \tag{349}$$

$|Y_{lm}(\vartheta,\varphi)|^2\, \mathrm{d}\Omega$ ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Raumwinkelelement $\mathrm{d}\Omega$ um (ϑ,φ) für Elektron mit Drehimpuls $-QZ(l,n)$

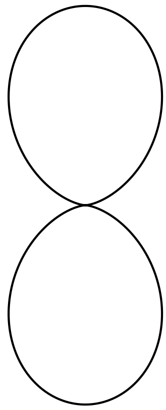
$l = 0$, $m = 0$:



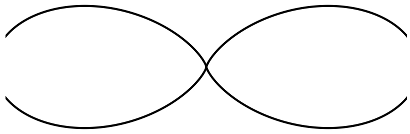
$l = 1$, $m = 1$:



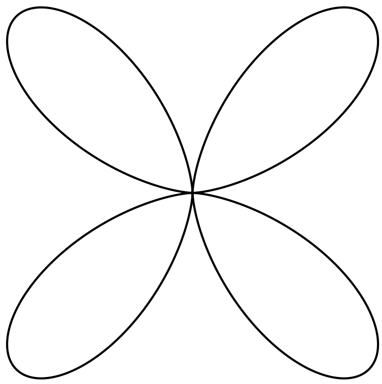
$l = 1$, $m = 0$:



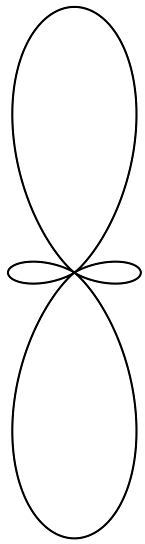
$l = 2$, $m = 2$:



$l = 2$, $m = 1$:



$l = 2$, $m = 0$:



Parität:

$$\mathcal{P} : \psi(\vec{r}) \longmapsto \psi(-\vec{r})$$

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):

$$Y_{lm}(\pi - \vartheta, \varphi + \pi) = (-1)^l Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \tag{350}$$

$\Longrightarrow$ Die Parität von Y_{lm} ist $(-1)^l$.

4 Wasserstoffatom

4.1 Zentralpotentiale

$$V(\vec{X}) = V(R) \tag{351}$$

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:

$$V(R) = \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\vec{x}\ |\vec{x}\rangle\, V\left(\sqrt{\vec{X}^2}\right) \langle\vec{x}|$$

Rotationsinvarianz:

$$e^{\frac{i}{\hbar}\vec{\varphi}\vec{J}} V(R) e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\varphi}\vec{J}} = V(R)$$

Infinitesimal:

$$\left[1 + \frac{i}{\hbar}\vec{\varphi}\vec{J}\right] V(R) \left[1 - \frac{i}{\hbar}\vec{\varphi}\right] = V(R) + \mathcal{O}(\varphi^2)$$

$\Longrightarrow$

$$\left[\vec{J}, V(R)\right] = 0. \tag{352}$$

Auch

$$\left[J, \vec{P}^2\right] = 0, \tag{353}$$

also

$$[J, H] = 0 \tag{354}$$

Energieeigenkets:

$$|E\, j\, m\rangle \tag{355}$$

Ist $V(R)$ zusätzlich auch von $\vec{S}$ unabhängig (?), so ist $[S, V(R)] = 0$, also auch (wegen $\vec{L} = \vec{J} - \vec{S}$)

$$\left[\vec{L}, V(R)\right] = 0$$

So können wir die Energieeigenkets mit

$$|E\, l\, m_l\, s\, m_s\rangle \tag{356}$$

bezeichnen.

(354) $\Longrightarrow$ $[H, J_\pm] = 0$. Aus $H\,|E\,j\,m\rangle = E\,|E\,j\,m\rangle$ folgt also

$$HJ_\pm\,|E\,j\,m\rangle = J_\pm H\,|E\,j\,m\rangle = EJ_\pm\,|E\,j\ ,m\rangle$$

$\Longrightarrow$

$$H\,|E\,j\,m\pm 1\rangle = E\,|E\,j\,m\pm 1\rangle$$

$\Longrightarrow$ E hängt nicht von m ab.

Zunächst $[\vec{S}, V(R)] = 0$

$$\begin{aligned} H &= \frac{P^2}{2m} + V(R), \\ |E\,l\,m_l\,s\,m_s\rangle &= |E\,l\,m_l\rangle \otimes |s\,m_s\rangle \end{aligned} \tag{357}$$

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 $\psi_{Elm_l}(\vec{r}) = \langle \vec{r}\,|\,E\,l\,m_l\rangle$ $\Longrightarrow$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r)\right]\psi_{Elm_l}(\vec{r}) = E\psi_{Elm_l}(\vec{r}) \tag{358}$$

bzw. mit (327), (329):

$$P^2 = -\hbar^2\Delta = P_r^2 + \frac{1}{r^2}\vec{L}^2 \tag{359}$$

wobei

$$P_r^2 = -\hbar^2\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right]. \tag{360}$$

Radialimpuls

$$P_r = \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right) \tag{361}$$

erfüllt

$$\begin{aligned} P_r^\dagger &= P_r, \\ [P_r, R] &= \frac{\hbar}{i}\mathbb{1} \end{aligned} \tag{362}$$

(358) bedeutet also

$$\left[\frac{1}{2m}P_r^2 + \frac{1}{2mr^2}\vec{L}^2 + V(r)\right]\psi_{Elm_l}(\vec{r}) = E\psi_{Elm_l}(\vec{r}) \tag{363}$$

Mit

$$\vec{L}^2\psi_{Elm_l}(\vec{r}) = \hbar^2 l(l+1)\psi_{Elm_l}(\vec{r}) \tag{364}$$

folgt (siehe Text (324)):

$$\psi_{Elm_l}(\vec{r}) = f_{El}(r)Y_{lm_l}(\vartheta,\varphi) \tag{365}$$

und (363) wird zu

$$\left[\frac{1}{2m}P_r^2 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r)\right] f_{El}(r)Y_{lm_l}(\vartheta,\varphi) = Ef_{El}(r)Y_{lm_l}(\vartheta,\varphi)$$

Und mit (360):

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r)\right] f_{El}(r) = Ef_{El}(r) \tag{366}$$

$\Longrightarrow$ tatsächlich keine m_l-Abhängigkeit.

In (366) o.B.d.A. $f_{El}(r)$ reell:

Trick: $U_{El}(r) := rf_{El}(r)$, dann

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2}{\partial r^2}U_{El}(r) &= \frac{\partial}{\partial r}\Big[\underbrace{\left(\frac{\partial r}{\partial r}\right)}_{=1} f_{El}(r) + r\frac{\partial}{\partial r}f_{El}(r)\Big] \\
&= 2\frac{\partial}{\partial r}f_{El}(r) + r\frac{\partial^2}{\partial r^2}f_{El}(r) \\
&= r\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right] f_{El}(r)
\end{aligned}$$

und (366) wird zu

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r)\right] U_{El}(r) = EU_{El}(r). \tag{367}$$

Das entspricht 1-dim Schrödinger-Gleichung mit

$$V_{\text{Eff}}(r) = V(r) + \underbrace{\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}}_{\text{Zentrifugalpotenzial}} \tag{368}$$

Jedoch $r \geq 0$. $\mathrm{d}^3\vec{r} = r^2\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\Omega$.

Bindungszustände:

$$\infty > \int_0^\infty r^2 \,\mathrm{d}r\, f_{El}^2(r) = \int_0^\infty \mathrm{d}r\, U_{El}^2(r)$$

$\Longrightarrow$

$$|U_{El}(r)|\sqrt{r} \longrightarrow 0 \text{ für } r \longrightarrow \infty \tag{369}$$

Nun $r \longrightarrow 0$:

Zwei Fälle:

1.) $U(0) \neq 0 \Longrightarrow f(r) \overset{r\to 0}{\sim} \frac{1}{r} \Longrightarrow$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r)\right] f(r) Y_{lm_l}(\vartheta,\varphi) \overset{r\to 0}{\sim} \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\delta^{(3)}(\vec{r}) + V(r)\frac{1}{r}\right] Y_{lm_l}(\vartheta,\varphi)$$

$\Longrightarrow V(r)$ hat $\delta^{(3)}(\vec{r})$-singulären Anteil.

2.) $U_{El}(0) = 0 \Longrightarrow V(r)$ hat keinen $\delta^{(3)}(\vec{r})$-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:

$$U_{El}(r) \overset{r\to\infty}{\sim} r^{l+1} \text{ für } l \neq 0 \tag{370}$$

irreguläre Lösung:

$$U_{El}(r) \sim r^{-l}$$

im Widerspruch zu $U_{El}(0) = 0$.

4.2 Wasserstoffatom

Es gilt $m_p = 1800 m_e$. $\rightsquigarrow$

$$V(r) = -\frac{\gamma}{r} \tag{371}$$

mit

$$\gamma = \underbrace{\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}}_{\substack{\text{SI}-\\ \text{Einheiten}}} = \underbrace{\hbar c\alpha}_{\substack{\text{in jedem}\\ \text{Einheitensystem}}} \tag{372}$$

$\alpha \approx \frac{1}{137}$ heißt Sommerfeld'sche Feinstrukturkonstante.

Bindungszustände: $E < 0$:

Welllenfunktion:

$$\begin{aligned} \psi_{Elm_l}(\vec{r}) &\overset{(365),(367)}{=} f_{El}(r) Y_{lm_l}(\vartheta, \varphi) \\ &= r U_{El}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \end{aligned} \tag{373}$$

Die Radialgleichung in (367) wird mit

$$\begin{aligned} \rho &= \kappa r, \\ \kappa^2 &= \frac{2m|E|}{\hbar^2}, \ \kappa > 0, \\ \rho_0 &= \frac{2m\gamma}{\hbar^2 \kappa} \end{aligned} \tag{374}$$

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: $U_{El}(rho) \overset{\rho \to 0}{\sim} \rho^{l+1}$, siehe (370).

Für $\rho \to \infty$ wird (375) zu

$$\frac{d^2 U_{El}(\rho)}{d\rho^2} - U_{El}(\rho) = 0$$

$\Longrightarrow$

$$U_{El}(\rho) \overset{\rho \to \infty}{\sim} e^{-\rho} \tag{376}$$

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)

$$\rho^2 \frac{d^2}{d\rho^2} = \theta(\theta - 1) = \theta^2 - \theta \tag{381}$$

(378) wird zu

$$[\theta(\theta - 1) + 2(l + 1 - \rho)\theta + (\rho_0 - 2(l + 1))\rho]\, W(\rho) = 0$$

Einsatzen von (349(:

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k \left[k(k-1) + 2(l + 1 - \rho)k + (\rho_0 - 2(l+1)\rho)\right] = 0 \tag{382}$$

Koeffizienten von ρ^{k+1}:

$$[(k+1)k + 2(l+1)(k+1)]\, a_{k+1} + [-2k + \rho_0 - 2(l+1)]\, a_k = 0 \text{ für } k \geq 0 \tag{383}$$

Der Koeffizient von ρ^0 in (382) ist $0 \Longrightarrow a_0$ beliebig.

(383) $\Longrightarrow$

$$a_{k+1} = \frac{2(k + l + 1) - \rho_0}{(k+1)(k + 2l + 2)} a_k \tag{384}$$

Noch mehr Asymptotik:

Entweder die Reihe bricht ab, oder (384) bedeutet

$$\frac{a_{k+1}}{a_K} \overset{k \to \infty}{\sim} \frac{2}{k}$$

also $a_k \overset{k\to\infty}{\sim} \frac{2^k}{k!}$. $\Longrightarrow$

$$W \overset{\rho\to\infty}{\sim} e^{2\rho}$$

Widerspruch zu (376).

$\Longrightarrow$ Die Reihe muss abbrechen!

(384) $\Longrightarrow$ Es gibt ein $N \in \mathbb{N}_0$ mit

$$\rho_0 = 2(N + l + 1), \tag{385}$$

so dass in (384) $a_{N+1} = 0$ und

$$W(\rho) = \sum_{k=0}^{N} a_k \rho^k. \tag{386}$$

Die Hauptquantenzahl $n = N + l + 1$ erfüllt wegen $N \geq 0, l \geq 0,\ N, l \in \mathbb{N}_0$:

$$n \in \mathbb{N}. \tag{387}$$

Also wegen (385)

$$\rho_0 = 2n. \tag{388}$$

(374) $\Longrightarrow$

$$E = \frac{2m\gamma^2}{\hbar^2 \rho_0}$$

Mit (388) sind die Eigenwerte durch die *Balmerformel*

$$E_n = -\frac{m\gamma^2}{2\hbar n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{389}$$

gegeben.

(372) $\Longrightarrow$

$$\begin{aligned} &\mathrm{SI-System:} & E_n &= -\frac{me^4}{2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2}\frac{1}{\hbar^2} \\ &\text{jedes System:} & E_N &= -\frac{mc^2}{2}\frac{\alpha^2}{n^2} \end{aligned} \tag{390}$$

Statt $|E\, l\, m_l\rangle$ schreibt man $|n\, l\, m\rangle$. Wegen (385), (387) ist

$$l \leq n - 1. \tag{391}$$

l heißt auch *Nebenquantenzahl* und m_l (was $|m_l| \leq l$ erfüllt) *magnetische QZ*.

Speziell fürs Coulomb-Potenzial $V(r) = -\frac{\gamma}{r}$: E_n hängt nicht von l ab.

Ursache: Runge-Lenz-Vektor ist Erhaltungsgröße.

Die DGL (378) lautet in der Variablen $t = 2\rho$:

$$t\frac{d^2W}{dt^2} + [2l + 1 + 1 - t]\frac{dW}{dt} + [n + l - (2l + 1)]\, W = 0 \tag{392}$$

(392) heißt *Laguerre'sche DGL*. Die Lösungen

$$W(\frac{t}{2}) = L_{n+l}^{2l+1}(t) \tag{393}$$

heißen zugeordnete Laguerre-Polynome.

Es gilt:

$$L_r^s(t) = \left(-\frac{d}{dt}\right)^2 e^t \left(\frac{d}{dt}\right)^r e^{-t}e^r, \tag{394}$$

explizit:

$$\begin{aligned} L_1^1(t) &= -\frac{d}{dt}e^t\left[-e^{-t}t + e^{-t}\right] = 1 \\ L_2^1(t) &= \frac{1}{2}t^2 - 3t + 3 \\ L_3^3(t) &= -\frac{t^3}{6} + 3t^2 - 15t + 20 \end{aligned} \tag{395}$$

Die Radialfunktionen $f_{El}(r)$ in (373) ist also mit (377) und (393):

$$f_{nl}(r) = f_{E_n l}(r) = N_{nl}(2\kappa r)^l e^{-\kappa r} L_{n+l}^{2l+1}(2\kappa r) \tag{396}$$

Normierungsfaktor:

$$N_{nl}^2 \frac{(n-l-1)!(2\kappa^3)}{2n\left[(n+l)!\right]^3} \tag{397}$$

κ hängt von n ab:

$$\kappa = \frac{m\gamma}{\hbar n} = \frac{1}{an} \tag{398}$$

mit dem Bohr'schen Radius:

$$a = \frac{\hbar^2}{m\gamma} = \frac{\hbar^2}{mc\alpha} \approx 0,529 \cdot 10^{-10}\mathrm{m} \tag{399}$$

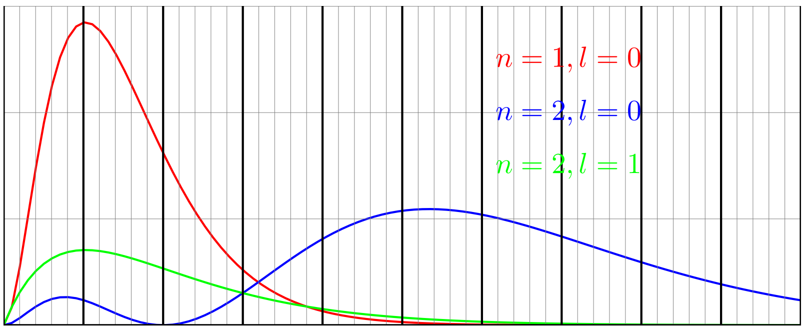
Nullstellen:

$$\begin{aligned} 0: \quad & f_{10}(r) = 2a^{-3/2}e^{-r/a} \\ 1: \quad & f_{20}(r) = 2(2a)^{-3/2}\left(1-\frac{r}{2a}\right)e^{-\frac{r}{2a}} \\ 2: \quad & f_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}}(2a)^{-3/2}\frac{r}{a}e^{-\frac{r}{2a}} \end{aligned} \tag{400}$$

Anzahl der Knoten: $N = n - l - 1$ („radiale QZ“).

Die Wahrscheinlichkeit, das Elektron zwischen r und $r + \mathrm{d}r$ anzufinden ist $p(r)\,\mathrm{d}r$ mit

$$p(r) = r^2 f_{nl}^2(r).$$



größeres $n \Longrightarrow$ größeres $\langle R\rangle$

$$\begin{aligned} \langle r\rangle_{nl} &:= \langle n\,l\;, m\,|\,R\,|\,n\,l\,m\rangle \\ &= \int_0^\infty r^3\,\mathrm{d}r\, f_{nl}^3(r) \\ &= \frac{a}{2}\left[3n^2 - l(l+1)\right] \end{aligned} \tag{401}$$

5 Zeitunabhängige Störungstheorie

5.1 Nicht entartete Störungstheorie

$$H = H_0 + H_1 \tag{402}$$

Gelöst:

$$H_0 \left| n^{(0)} \right\rangle = E_n^{(0)} \left| n^{(0)} \right\rangle \tag{403}$$

Gesucht:

$$H \left| n \right\rangle = E_n \left| n \right\rangle \tag{404}$$

H_1 sei klein gegen H_0, genauer:

$$\left\langle m^{(0)} \middle| H_1 \middle| n^{(0)} \right\rangle \ll |E_n^{(0)} - E_m^{(0)}. \tag{405}$$

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

$$\frac{\langle m^{(0)} \mid H_1 \mid n^{(0)} \rangle}{\left| E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right|}$$

Zweckmäßig: reeller Parameter λ und

$$H = H_0 + \lambda H_1 \tag{406}$$

$\rightsquigarrow$ Organisation der Störungstheorie in Potenzen von λ.

Störungsreihe:

$$\begin{aligned} E_n &= E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \\ |n\rangle &= |n^{(0)}\rangle + \lambda\, |n^{(1)}\rangle + \lambda^2\, |n^{(2)}\rangle + \dots \end{aligned} \tag{407}$$

$|n\rangle$ ist unnormiert: I.a. $\langle n|n\rangle \neq 1$.

(407) ist Potenzreihenansatz für (404)

$$(H_0 + \lambda H_1) \left(|n^{(0)}\rangle + \lambda\, |n^{(1)}\rangle + \dots \right) = (E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + \dots) \left(|n\rangle^{(0)} + \lambda\, |n^{(1)}\rangle + \dots \right) \tag{408}$$

Wir lösen (408) für alle λ

$$\lambda^0 \qquad H_0 |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}, \text{ also(403}$$

$$\lambda^1 \qquad H_1 |n^{(0)}\rangle + H_0 |n^{(1)}\rangle = E_n^{(1)} |n^{(1)}\rangle + E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle \tag{409}$$

$$\lambda^2 \qquad H_1 |n^{(1)}\rangle + H_0 |n^{(2)}\rangle = E_n^{(2)} |n^{(2)}\rangle + E_n^{(1)} |n^{(1)}\rangle + E_n^{(0)} |n^{(2)}\rangle \tag{410}$$

Entwickeln nach ungestörten EZ:

$$|n^{(1)}\rangle = \sum_k |k^{(0)}\rangle \left\langle k^{(0)} \middle| n^{(1)} \right\rangle, \text{ usw} \tag{411}$$

Zur Bestimmung der Entwicklungskoeffizienten $\langle k^{(0)} | n^{(1)} \rangle$ und von $E_n^{(1)}$ multiplizieren wir (409) mit $|k^{(0)}\rangle$:

$$\left\langle k^{(0)} \middle| H_1 \middle| n^{(0)} \right\rangle + \underbrace{k^{(0)}|H_0|n^{(1)}}_{E_k^{(0)}\langle k^{(0)} | n^{(0)} \rangle} = E_n^{(1)} \underbrace{\left\langle k^{(0)} \middle| n^{(0)} \right\rangle}_{\delta_{kn}} + E_n^{(0)} \left\langle k^{(0)} \middle| n^{(1)} \right\rangle \tag{412}$$

Für $k = n$ liefer (412) die erste Korrektur zu Energie:

$$E_n^{(1)} = \left\langle n^{(0)} \middle| H_1 \middle| n^{(0)} \right\rangle \tag{413}$$

Für $k \neq n$ folgt aus (412):

$$\left\langle k^{(0)} \middle| n^{(1)} \right\rangle = \frac{\langle k^{(0)} | H_1 | n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \tag{414}$$

Jedoch $\langle n^{(0)}|n^{(0)}\rangle$ ist unbestimmt!

Wir wählen

$$\left\langle n^{(0)} \middle| n^{(1)} \right\rangle = 0 \tag{415}$$

Also mit (411):

$$\left| n^{(1)} \right\rangle = \sum_{k \neq n} |k^{(0)}\rangle \frac{\langle k^{(0)} | H_1 | n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \tag{416}$$

($E_k^{(0)} \neq E_n^{(0)}$ 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

$$\left\langle n^{(0)} \middle| n^{(k)} \right\rangle = 0, \ k \geq 1 \tag{417}$$

fordern, denn zu jeder Lösung $|n^{(k)}\rangle$ von (408) ist auch $|n^{(k)}\rangle = |n^{(k)\prime}\rangle + \alpha |n^{(0)}\rangle$ Lösung von (408) zur Ordnung λ^k.

$$0 = \left\langle n^{(0)} \middle| n^{(k)} \right\rangle = \left\langle n^{(0)} \middle| n^{(k)\prime} \right\rangle + \alpha \left\langle n^{(0)} \middle| n^{(0)} \right\rangle$$

$\Longrightarrow$

$$\alpha = -\left\langle n^{(0)} \,\middle|\, n^{(k)\prime} \right\rangle$$

Aus (410) finden wir dann:

$$\left\langle n^{(0)} \,\middle|\, H_1 \,\middle|\, n^{(1)} \right\rangle + \underbrace{\left\langle n^{(0)} \,\middle|\, H_0 \,\middle|\, n^{(2)} \right\rangle}_{E_n^{(0)} \underbrace{\left\langle n^{(0)} \,\middle|\, n^{(2)} \right\rangle}_{=0}} = E_n^{(2)} \underbrace{\left\langle n^{(0)} \,\middle|\, n^{(0)} \right\rangle}_{=1}$$

$\Longrightarrow$

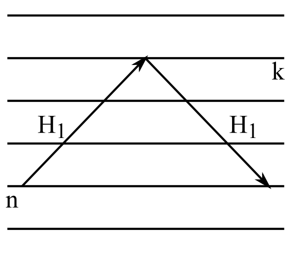
$$\begin{aligned} E_n^{(2)} &= \left\langle n^{(0)} \,\middle|\, H_1 \,\middle|\, n^{(1)} \right\rangle \\ &\overset{(416)}{=} \sum_{k \neq n} \frac{\left\langle n^{(0)} \,\middle|\, H_1 \,\middle|\, k^{(0)} \right\rangle \left\langle k^{(0)} \,\middle|\, H_1 \,\middle|\, n^{(0)} \right\rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \\ &= \sum_{k \neq n} \frac{\left| \left\langle k^{(0)} \,\middle|\, H_1 \,\middle|\, n^{(0)} \right\rangle \right|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \end{aligned} \tag{418}$$

Intepretation: Wähscheinlichkeit, ein im Zustand $|n(0)\rangle$ präpariertes System nach Einschalten im Zustand $|k^{(0)}\rangle \neq |n^{(0)}\rangle$ anzutreffen:

$$\begin{aligned} P_{n \to k^{(0)}} &= \frac{\left| \left\langle k^{(0)} \,\middle|\, n \right\rangle \right|^2}{\left| \left\langle n \,\middle|\, n \right\rangle \right|^2} \\ &= \frac{\left| \left\langle k^{(0)} \,\middle|\, n \right\rangle \right|^2}{\left| 1 + \mathcal{O}(\lambda^2) \right|^2} \\ &\overset{(416)}{=} \frac{\left| \left\langle k^{(0)} \,\middle|\, \lambda H_1 \,\middle|\, n^{(0)} \right\rangle \right|^2}{\left| E_n^{(0)} - E_k^{(0)} \right|^2} \left[1 + \mathcal{O}(\lambda^2) \right] \end{aligned} \tag{419}$$

$\left\langle k^{(0)} \,\middle|\, \lambda H_1 \,\middle|\, n^{(0)} \right\rangle$ nennt man auch *Übergangsamplitude* und $P_{n \to k^{(0)}}$ *Übergangswahrscheinlichkeit*.

Zu $E_n^{(2)}$ in (418) tragen Zustände 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

$$H_0 \, |n^{(0)}\alpha\rangle = E_n^{(0)} \, |n^{(0)}\alpha \quad \text{mit } \alpha = 1, \ldots, N\rangle \tag{420}$$

Entarteter N-dimensionaler Unterraum:

$$\mathcal{E} := \left[\{ \ | \, n^{(0)}\alpha\rangle \, \} \right] \tag{421}$$

$$\left\langle n^{(0)}\alpha \,\middle|\, n^{(0)}\beta \right\rangle = \delta_{\alpha\beta} \tag{422}$$

Jede Linearkombination

$$|n^{(0)}\gamma\rangle = \sum_{\alpha=1}^{N} |n^{(0)}\alpha\rangle \, c_{\alpha\gamma} \tag{423}$$

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

$$0 = -\left\langle n^{(0)}\beta \,\middle|\, H_1 - E_n^{(1)} \,\middle|\, n^{(0)}\gamma \right\rangle \tag{424}$$

also ist (423):

$$\sum_{\alpha=1}^{N} c_{\alpha\beta} \, \langle n^{(0)}\beta | H_1 | n^{(0)}\alpha\rangle = E_n^{(1)} c_{\beta\gamma} \tag{425}$$

Matrixdarstellung:

$$h_{1\beta\alpha} = \left\langle n^{(0)}\beta \,\middle|\, H_1 \,\middle|\, n^{(0)}\alpha \right\rangle \tag{426}$$

(425) $\Longrightarrow$

$$\sum_{\alpha=1}^{N} h_{1\beta\alpha} C_{\alpha_\gamma} = E_n^{(1)} c_{\beta\gamma} \tag{427}$$

Eigenwertproblem einer $N \times N$ Matrix. $\Longrightarrow$

$$\det\left(h_1 - E_n^{(1)}\right) = 0 \tag{428}$$

(428) hat N Lösungen $E_{n\gamma^{(1)}}$, die nicht alle verschieden sein müssen. Die zugehörigen Eigenvektoren (siehe (427)) sind

$$\vec{c}^{\,\gamma} := \begin{pmatrix} c_{1\gamma} \\ c_{2\gamma} \\ \vdots \\ c_{N\gamma} \end{pmatrix}, \quad \gamma = 1, \ldots, N \tag{429}$$

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

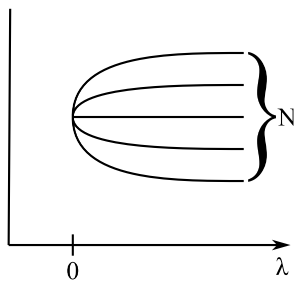
$$C^\dagger h_1 C = \operatorname{diag}\left(E_{n_1}^{(1)}, \ldots, E_{n_N}^{(2)}\right) \tag{430}$$

D.h. (423) diagonalisiert mit (427) die Störung H_1 im Unterraum $\mathcal{E}$:

$$\left\langle n^{(0)'}\gamma \,\middle|\, H_1 \,\middle|\, n^{(0)'}\gamma' \right\rangle = E_{n\gamma}^{(1)} \delta_{\gamma\gamma'} \tag{431}$$

$\Longrightarrow$ 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:

$$\begin{aligned} |n^{(1)}\gamma\rangle &= \sum_{|k^{(0)}\rangle \in \mathcal{E}} |k^{(0)}\rangle \frac{\langle k^{(0)} \,|\, H_1 \,|\, n^{(0)}\gamma\rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} + \sum_{\substack{\gamma'=1 \\ \gamma'\neq\gamma}}^{N} |n^{(0)'}\gamma\rangle \left\langle n^{(0)'}\gamma' \,\middle|\, n^{(0)'}\gamma' \right\rangle \\ |n^{(1)'}\gamma\rangle &= \sum_{k\neq n} |k^{(0)}\rangle \frac{\left\langle k^{(0)} \,\middle|\, H_1 \,\middle|\, n^{(0)'}\gamma \right\rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} + \sum_{\substack{\gamma'=1 \\ \gamma'\neq\gamma}} |n^{(0)'}\gamma\rangle \left\langle n^{(0)'}\gamma' \,\middle|\, n^{(0)'}\gamma' \right\rangle \end{aligned} \tag{432}$$

Neu: Komponenten $\left\langle n^{(0)\prime}\gamma^\prime \middle| n^{(1)\prime}\gamma\right\rangle$!

(410) entspricht im entarteten Fall:

$$H_1 \left|n^{(1)\prime}\gamma\right\rangle + H_0 \left|n^{(2)\prime}\gamma\right\rangle = E^{(2)}_{n\gamma} \left|n^{(1)\prime}\gamma\right\rangle + E^{(1)}_{n\gamma} \left|n^{(1)\prime}\gamma\right\rangle + E^{(0)}_n \left|n^{(2)\prime}\gamma\right\rangle \tag{433}$$

Multiplikation mit $\left|n^{(0)\prime}\gamma^\prime\right\rangle$

$$\begin{aligned}\left\langle n^{(0)\prime}\gamma^\prime \middle| H_1 \middle| n^{(1)\prime}\gamma\right\rangle + E^{(0)}_n \left\langle n^{(0)\prime}\gamma^\prime \middle| n^{(2)}\gamma\right\rangle = \; & E^{(2)}_{n\gamma}\delta_{\gamma\gamma^\prime} + \\ & \underbrace{E^{(1)}_{n\gamma} \left\langle n^{(0)\prime}\gamma^\prime \middle| n^{(1)\prime}\gamma\right\rangle}_{=0 \text{ für } x=x^\prime \text{ wg. (415)}} + \\ & E^{(0)}_n \left\langle n^{(0)\prime}\gamma^\prime \middle| n^{(2)\prime}\gamma\right\rangle\end{aligned} \tag{434}$$

Für $\gamma = \gamma^\prime$:

$$\begin{aligned}E^{(1)}_{n\gamma} &\overset{(434)}{=} \left\langle n^{(0)}\gamma \middle| H_1 \middle| n^{(1)}\gamma\right\rangle \\ &\overset{(432)}{=} \sum_{k\neq n} \frac{\left|\left\langle k^{(0)} \middle| H_1 \middle| n^{(0)\prime}\gamma\right\rangle\right|^2}{E^{(0)}_n - E^{(0)}_k}\end{aligned} \tag{435}$$

Der zweite (432) trägt nicht bei wegen

$$\left\langle n^{(0)\prime}\gamma \middle| H_1 \middle| n^{(0)\prime}\gamma^\prime\right\rangle \overset{(431)}{=} \delta_{\gamma\gamma^\prime} E^{(1)}_{n\gamma} = 0 \quad \text{für } \gamma = \gamma^\prime.$$

Für $\gamma \neq \gamma^\prime$ liefert (434):

$$\begin{aligned}E^{(1)}_{n\gamma} \left\langle n^{(0)\prime}\gamma^\prime \middle| n^{(1)\prime}\gamma\right\rangle &= \left\langle n^{(0)\prime}\gamma^\prime \middle| H_1 \middle| n^{(1)\prime}\gamma\right\rangle \\ &\overset{(432)}{=} \sum_{k\neq n} \frac{\left\langle n^{(0)\prime}\gamma^\prime \middle| H_1 \middle| k^{(0)}\right\rangle \left\langle k^{(0)} \middle| H_1 \middle| n^{(0)\prime}\gamma\right\rangle}{E^{(0)}_n - E^{(0)}_k} \\ &\qquad + \sum_{\gamma^{\prime\prime}\neq\gamma} \underbrace{\left\langle n^{(0)\prime}\gamma^\prime \middle| H_1 \middle| n^{(0)}\gamma^\prime\right\rangle}_{E^{(1)}_{n\gamma^\prime}\delta_{\gamma^\prime\gamma^{\prime\prime}}} \left\langle n^{(0)}\gamma^{(1)} \middle| n^{(1)\prime}\gamma\right\rangle \\ &= \sum_{k\neq n} \frac{\left\langle n^{(0)}\gamma^\prime \middle| H_1 \middle| k^{(0)}\right\rangle \left\langle k^{(0)} \middle| H_1 \middle| n^{(0)\prime}\gamma\right\rangle}{E^{(0)}_n - E^{(0)}_k} \\ &\qquad + E^{(1)}_{n\gamma^\prime} \left\langle n^{(0)\prime}\gamma^\prime \middle| n^{(1)\prime}\gamma\right\rangle\end{aligned} \tag{436}$$

Ist die Entartung aufgehoben, also $E^{(1)}_{n\gamma} \neq E^{(1)}_{n\gamma^\prime}$, so liefert (436) uns die fehlenden Komponenten in (432).

$$\left\langle n^{(0)\prime}\gamma^\prime \middle| n^{(1)\prime}\gamma\right\rangle = \frac{1}{E^{(1)}_{n\gamma} - E^{(1)}_{n\gamma^\prime}} \sum_{k\neq n} \frac{\left\langle n^{(0)\prime}\gamma^\prime \middle| H_1 \middle| k^{(0)}\right\rangle \left\langle k^{(0)} \middle| H_1 \middle| n^{(0)\prime}\gamma\right\rangle}{E^{(0)}_n - E^{(0)}_k} \tag{437}$$

Für Zustände, die auch inerster 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

$$H_1 \sum_{k \neq n} \frac{\left|k^{(0)}\right\rangle \left\langle k^{(0)}\right|}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} H_1 \tag{438}$$

(siehe (436)) diagonalisieren.

Gilt $E_{n\gamma}^{(2)} \neq E_{n\gamma}^{(2)}$, so liefert die Ordnung λ^3 die Koeffizienten in (437).

Das Verfahren kann man zu beliebig hohen Ordnungen treiben.

5.3 Anwendung: Feinstruktur des Wasserstoffspektrums

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \tag{288}$$

$$[L_j, S_k] = 0 \tag{289}$$

Gemeinsame EZ von $\vec{L}^2,\ L_3,\ \vec{S},\ S_3$:

$$|l\, m_l\, s\, m_s\rangle \tag{439}$$

Auch:

$$\left[\vec{J}^2, \vec{L}^2\right] = \left[\vec{J}^2, \vec{S}^2\right] = 0$$

$\Longrightarrow$ Betrachte Basis aus gemeinsamen EZ von $\vec{J}^2,\ J_3,\ \vec{L}^2,\ \vec{S}^2$:

$$|j\, m\, l\, s\rangle \tag{440}$$

Wegen $J_3 = L_3 + S_3$ ist $|l\, m_l\, s\, m_s\rangle$ EZ von J_3 zum EW $m = m_l + m_s$:

$$J_3 |l\, m_l\, s\, m_s\rangle = (L_3 + S_3) |l\, m_l\, s\, m_s\rangle = (m_l + m_s) |l\, m_l\, s\, m_s\rangle \tag{441}$$

D.h. $|j\, m\, l\, s\rangle$ in (440) ist LInearkombination aus $|l\, m_l\, s\, m_s\rangle$ mit $m = m_l + m_s$.

$$|j\, m\, l\, s\rangle = \sum |l\, m_l\, s\, m_l\rangle \underbrace{\langle l\, m_l\, s\, m_s \,|\, j\, m\, l\, s\rangle}_{\text{Clebsch-Gordan-Koeff.}} \tag{442}$$

$$j = m_{\max} = \max_{\substack{|m_l| \leq l \\ |m_s| \leq s}} (m_l + m_s) \leq m_{l\max} + m_{s\max} = l + s \tag{443}$$

Betrachte $L_3 = J_s - S_3$ und $m_s \to -m_s$

$$l = m_{l\max} \leq m_{j_{\max}} - m_{s\max} \leq j + s \tag{444}$$

(443) und (444) (und die spezielle Betrachtung von $l = 0$) $\Longrightarrow$

$$|l - s| \leq j \leq l + s \quad \text{(Auswahlregel)} \tag{445}$$

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-Koeffzienten in (442) mit Hilfe von $J_- = L_- + S_-$.

Wasserstoff:

$$H = H_0 + H_1$$

Relativistische Korrekturen:

$$H_1 = H_{1\vec{L}\cdot\vec{S}} + H_{1\text{kin}} + H_{1\text{pot}} \tag{446}$$

$$H_{1\vec{L}\cdot\vec{S}} = \frac{1}{2m^2c^2}\vec{S}\cdot\vec{L}\frac{\gamma}{R^3} \quad \text{heißt Spin} - \text{Bahn} - \text{Kopplung} \tag{447}$$

$$\vec{S}\cdot\vec{L} = \frac{1}{2}\left[\left(\vec{L}+\vec{S}\right) - \vec{L}^2 - \vec{S}^2\right] = \frac{1}{2}\left[\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2\right] \tag{448}$$

Die Eigenkets $|n\, j\, m\, l\, s\rangle$ von H_0 erfüllen

$$H_0\, |n_j\, m\, l\, s\rangle = E_n^{(0)}\, |n_j\, m\, l\, s\rangle \tag{449}$$

mit

$$E_n^{(0)} \overset{(390)}{=} \frac{mc^2\alpha^2}{2n^2}$$

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

$$\begin{aligned}\langle n_j'\, m'\, l'\, s' \,|\, H_{1\vec{L}\cdot\vec{S}} \,|\, n_j\, m\, l\, s\rangle &\overset{(448)}{=} \frac{\gamma}{4m^2c^2}\left\langle n_j'\, m'\, l'\, s' \left| \frac{1}{R^3}\left(\vec{J} - \vec{L} - \vec{S}^2\right) \right| n_j\, m\, l\, s\right\rangle \\ &= \frac{\gamma}{4m^2c^2}\left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}\right]\delta_{jj'}\delta_{ll'}\delta_{mm'}\delta_{ss'} \\ &\qquad \cdot \left\langle n_j\, m\, l\, s \left| \frac{1}{R^3} \right| n_j\, m\, l\, s\right\rangle\end{aligned} \tag{450}$$

Frr $l \geq 1$:

$$E_{n\,\vec{L}\cdot\vec{S}}^{(1)} = \frac{\gamma\hbar^2}{4m^2c^2}\left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}\right]\left\langle \frac{1}{r}^3 \right\rangle_{nl} \tag{451}$$

wobei

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl} = \int_0^\infty \mathrm{d}r\, \frac{f_{nl}^2(r)}{r} \overset{(396)}{=} \frac{2}{a^3n^3l(l+1)(2l+1)} \tag{452}$$

Einsetzen in (451) liefert:

$$E_{n\,\vec{L}\cdot\vec{S}}^{(1)} = \underbrace{\frac{\gamma\hbar^2}{2m^2c^2n^3a^3}}_{\overset{(389),(399)}{=} -E_n^{(0)}\frac{\alpha^2}{n}} \begin{cases} -\frac{1}{(j+1)(2j+1)}, & l = j + \frac{1}{2} \\ \frac{1}{j(2j+1)}, & l = j - \frac{1}{2} \neq 0 \end{cases} \tag{453}$$

für $l = 0$ ist $j = s = \frac{1}{2}$, also $\underbrace{j(j+1) - l(l+1)}_{=\frac{3}{4}} - \frac{3}{4} = 0.$ $\Longrightarrow$

$$E_{n\,\vec{L}\cdot\vec{S}}^{(1)} = 0 \quad \text{für } l = 0 \tag{454}$$

In (446) folgt $H_{1\text{kin}}$ aus:

$$\begin{aligned} E &= \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2} \\ &= mc^2 + \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{8}p^4 m^3 c^2 + \dots \end{aligned} \tag{455}$$

$$\begin{aligned} H_{1\text{kin}} &= -\frac{1}{8}\frac{P^4}{m^3c^2} \\ &= -\frac{1}{2mc^2}\left(\frac{pP2}{2m}\right)^2 \\ &= -\frac{1}{2mc^2}\left(H_0 + \frac{\gamma}{R}\right)^2 \end{aligned} \tag{456}$$

Wegen

$$\left[H_{1\text{kin}}, \vec{J}^2\right] = [H_{1\text{kin}}, J_3] = \left[H_{1\text{kin}}, \vec{L}^2\right] = \left[H_{1\text{kin}}, \vec{J}^2\right] = 0 \tag{457}$$

ist $H_{1\text{kin}}$ in der Basis $\{\,|j\,m\,l\,s\rangle\,\}$ diagonal. $\Longrightarrow$

$$E_{n\text{kin}}^{(1)} = \langle n_j\ m\,l\,s\,|\,H_{1\text{kin}}\,|\,n_j\ m\,l\,s\rangle\,.$$

Weiter

$$E_{n\text{kin}}^{(1)} \overset{(456)}{=} -\frac{1}{2mc^2}\left\langle n_j\ m\,l\,s\,\middle|\,H_0^2 + 2\gamma H_0\frac{1}{R} + \gamma^2\frac{1}{R^2}\,\middle|\,n_j\ m\,l\,s\right\rangle \tag{458}$$

Wir benötigen

$$\begin{aligned} \left\langle n_j\ m\,l\,s\,\middle|\,\frac{1}{R}\,\middle|\,n_j\ m\,l\,s\right\rangle &= \frac{1}{an^2} \\ \left\langle n_j\ m\,l\,s\,\middle|\,\frac{1}{R^2}\,\middle|\,n_j\ m\,l\,s\right\rangle &= \frac{1}{a^2n^3(l+\frac{1}{2})} \end{aligned} \tag{459}$$

$\Longrightarrow$

$$\begin{aligned} E_{n\text{kin}}^{(1)} &= -\frac{1}{2mc^2}\left\{E_n^{(0)^2} + \frac{2\gamma}{an^2}E_n^{(0)} + \frac{\gamma^2}{a^2n^2(l+\frac{1}{2})}\right\} \\ &\overset{(389),(399)}{=} -E_n^{(0)}\left\{-\frac{\alpha^2}{4n^2} + \frac{\alpha^2}{n^2} - \frac{\alpha^2}{n}\frac{1}{l+\frac{1}{2}}\right\} \\ &= -E_n^{(0)}\frac{\alpha^2}{n}\left\{\frac{3}{4n} - \frac{1}{l+\frac{1}{2}}\right\} \end{aligned} \tag{460}$$

$$= -E_n^{(0)}\frac{\alpha^2}{n}\left[\frac{3}{4n} + \begin{cases} -\frac{1}{j+1}, & l = j+\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{j}, & l = j-\frac{1}{2} \end{cases}\right] \tag{461}$$

Summe aus (461) und (453):

$$E_{n\vec{L}\cdot\vec{S}}^{(1)} + E_{n\text{kin}}^{(1)} = -E_n^{(0)}\frac{\alpha}{n}\left[\frac{3}{4n} - \frac{1}{j+\frac{1}{2}}\right] \quad \text{für } l \geq 1 \tag{462}$$

Für $l = 0$ folgt aus (460) und (454):

$$E_{n\vec{L}\cdot\vec{S}}^{(1)} + E_{n\text{kin}}^{(1)} = E_{n\text{kin}}^{(1)} = -E_n^{(1)}\frac{\alpha^2}{n}\left[\frac{3}{4n} - 2\right] \tag{463}$$

Letzter Term in (446):

Ortsdarstellung:

$$\begin{aligned} H_{1\text{pot}} &= \frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\Delta V(r) \\ &= \frac{\pi\hbar^2\gamma}{2m^2c^2}\delta^{(3)}(\vec{x}) \end{aligned} \tag{464}$$

$$\begin{aligned} E_{n\text{pot}}^{(1)} &= \left\langle n_j\ m\, l\, s \,\middle|\, H_{1\text{pot}} \,\middle|\, n_j\ m\, l\, s\right\rangle \\ &= \frac{\pi\hbar^2\gamma}{2m^2c^2}|f_{nl}(0)|^2 \\ &= \frac{mc^2\alpha^4}{2n^3}\delta_{l0} \\ &= -E_n^{(0)}\left(-\frac{\alpha^2}{n}\right)\delta_{l0} \end{aligned} \tag{465}$$

Summe von (463) und (465):

$$E_{n\vec{L}\cdot\vec{S}}^{(1)} + E_{n\text{kin}}^{(1)} + E_{n\text{pot}}^{(1)} = \begin{cases} -E_n^{(0)}\frac{\alpha^2}{n}\left[\frac{3}{4n} - 1\right], & \text{für } l = 0, \\ -E_n^{(0)}\frac{\alpha^2}{n}\left[\frac{3}{4n} - \frac{1}{j+\frac{1}{2}}\right], & \text{für } l \neq 0 \end{cases} \tag{466}$$

denn $l = 0$ impliziert $j = \frac{1}{2}$.

Also gilt mit (465), (466) *unabhängig* von l:

$$\begin{aligned} E_n^{(1)} &= -E_{n\vec{L}\cdot\vec{S}}^{(0)} + E_{n\text{pot}}^{(1)} + E_{n\text{kin}}^{(1)} \\ &= -E_n^{(0)}\frac{\alpha^2}{n}\left[\frac{3}{4n} - \frac{1}{j+\frac{1}{2}}\right] \end{aligned} \tag{467}$$

Energie-Niveaus:

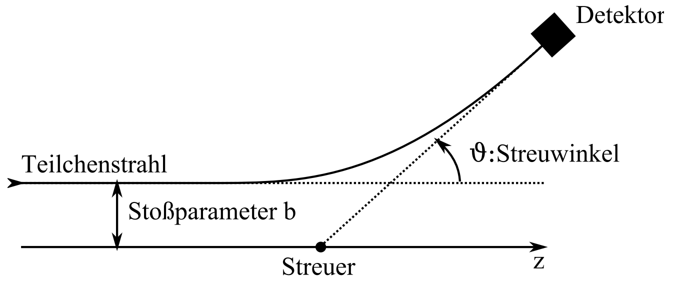
$$E_{n_j} = E_n^{(0)} + E_{n_j}^{(1)} = -\frac{mc^2}{2}\frac{\alpha^2}{n^2}\left[1 - \frac{\alpha^2}{n^2}\left(\frac{3}{4} - \frac{n}{j+\frac{1}{2}}\right)\right] \tag{468}$$

$\alpha \approx 5,4 \cdot 10^{-5} \Longrightarrow$ Feinstruktur.

Relativistische Wellengleichung des Elektron: *Dirac-Gleichung*

Exakt lösen für das Wasserstoff-Atom, Quantenahl j, l, s sind keine guten Quantenzahlen.

6 Streutheorie



Streuer: Ursprung aus dem Ubekannten, zu erforschendes Potenzial.

Einlaufender Teilchenstrahl: Stromdichte $\overrightarrow{j_{\text{ein}}}(\vec{x})$:

$$dN = \vec{j}\, d\vec{F}\, \mathrm{d}t \tag{469}$$

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 differenziellen Wirkungsquerschnitts bzw. diff. Streuquerschnitt $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ sinnvoll:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{j_{\text{ein}}} \frac{dN}{d\Omega dt} \tag{470}$$