

Theoretische Physik III

613348

19. Oktober 2024

Inhaltsverzeichnis

1	Grundgleichungen der Quantenmechanik	4
2	Orts- und Impulsdarstellung	4
3	Integration	6
3.1	Gauß-Integrale	6
3.2	Fourier-Transformation	7
4	Kommutator	7
5	Eindimensionale Modellsysteme	8
5.1	Unendlich hoher Potentialtopf	9
5.2	Potentialstufe	11
5.3	Potentialbarriere/Tunneleffekt	14
5.4	Endlich hoher Potentialtopf	15
5.5	Harmonischer Oszillator	19
5.5.1	Kohärente Zustände	23
5.6	Delta-Potential	24
5.7	Teilchen auf einem Ring	27
5.8	Wellenpaket	28
6	Variationsverfahren	29
7	Quantenmechanischer Messprozess	30
8	Drehimpulsalgebra	33
9	Matrizenmechanik	34
10	Dreidimensionale Probleme	35
10.1	Wasserstoffatom	35
10.2	3d harmonischer Oszillator	39
11	Bewegung im elektromagnetischen Feld und Spin	40
11.1	Normaler Zeeman-Effekt	40
11.2	Pauli-Gleichung	41
11.2.1	Spinpräzession im konstanten Magnetfeld	41
11.2.2	Magnetresonanz	41
12	Addition von Drehimpulsen	42
12.1	Anwendung Clebsch-Gordan-Tabelle	42

13 Struktur der Quantenmechanik	44
13.1 Dirac-Notation	44
13.2 Zeitentwicklung in der Quantenmechanik	45
13.3 Bilder	46
14 Dichtematrix	47
15 Drehungen und Translationen	47
16 Anhang	48
17 Stichwortverzeichnis	49

Motivation Quantenmechanik

Mit klassischen Theorien können Effekte, wie die Hohlraumstrahlung, der Photoeffekt, der Compton-Effekt oder die Welleneigenschaften von Materie Teilchen nicht erklärt werden.

- **Spezifische Wärmekapazität Festkörper**

Aus der kl. Physik lässt sich das Dulong-Petit-Gesetz herleiten

$$c = \frac{1}{n} \frac{\partial U}{\partial T} = 3R$$

Die gemessenen Abweichungen bei niedrigen Temperaturen können kl. nicht erklärt werden.

- **Hohlraumstrahler**

Der Hohlraumkasten wird z.B. durch ein Wärmebad auf eine Temperatur gebracht. Teilchenschwingungen erzeugen ein em. Feld im Innern, das in ein thermodyn. GGW übergeht.

Die experimentell beobachtete spektrale Energiedichte wird nur dann vollständig erklärt, wenn angenommen wird, dass die Energie einer Mode nur diskrete Werte annehmen kann.

$$E_{n,\nu} = n \cdot h\nu$$

- **Äußerer Photoeffekt**

Kl. wird erwartet, dass die Amplitude des eingestrahnten Lichts die Energie des Elektrons beeinflusst, sowie eine Verzögerung zwischen Einstrahlung und Einsetzen des Stroms. Beides wird nicht beobachtet.

Erklärt wird der Effekt unter der Annahme, dass em. Strahlung aus Photonen bestehen, die sich wie Teilchen verhalten,

$$E = h\nu = \hbar\omega, \quad \vec{p} = h\vec{\lambda} = \hbar\vec{k}$$

und dass jeweils nur ein Photon mit einem Elektron wechselwirkt. Dann gilt

$$E = \hbar\omega - E_0$$

mit der Bindungsenergie der Elektronen E_0 .

- **Compton-Streuung**

Betrachtet man Röntgen-Strahlung, die auf eine Goldfolie trifft, so erwartet man kl., dass das Licht als Kugelwelle gleicher Frequenz einläuft, die Atome zum Schwingen bringt und diese wiederum em. Strahlung derselben Frequenz abgeben.

Beobachtet wird jedoch, dass die auslaufende Strahlung eine niedrigere Frequenz besitzt und zudem noch vom Raumwinkel abhängt. Wie schon beim Photoeffekt, erklärt die Teilchennatur von Licht den Effekt und es gilt

$$\nu(\theta) = \frac{\nu_0}{1 + \frac{h\nu_0}{m_e c^2} \sin^2(\theta/2)}, \quad \lambda(\theta) = \lambda_0 + \frac{2h}{m_e c} \sin^2(\theta/2)$$

- **Doppelspalt**

Kl. wird erwartet, dass Teilchen, die auf einen Doppelspalt geschossen werden zwei Streifen auf dem Schirm erzeugen. Jedoch wird, wie bei einlaufenden Wellen, ein Interferenzmuster beobachtet. Zudem baut sich ein Interferenzmuster auch dann auf, wenn man mit einzelnen Teilchen schießt.

1 Grundgleichungen der Quantenmechanik

Formeln für Wahrscheinlichkeitsdichte, Normierung der Wahrscheinlichkeitsdichte, Mittelwert, Varianz und Standardabweichung.

$$w(x, t) = \psi^*(x, t) \cdot \psi(x, t) = |\psi(x, t)|^2 \quad (1)$$

$$1 \stackrel{!}{=} \int_a^b dx \, w(x, t) = \int_a^b dx \, |\psi(x, t)|^2 \quad (2)$$

$$\langle \hat{O} \rangle_\psi = \langle \psi, \hat{O} \psi \rangle = \int dx \, \psi^* \hat{O} \psi \quad (3)$$

$$\text{Var}(O) \equiv (\Delta O)^2 \equiv \langle (\hat{O} - \langle \hat{O} \rangle)^2 \rangle = \langle \hat{O}^2 \rangle - \langle \hat{O} \rangle^2 \quad (4)$$

$$\sigma \equiv \Delta O = \sqrt{\langle \hat{O}^2 \rangle - \langle \hat{O} \rangle^2} \quad (5)$$

wobei a, b bei der Normierung die Grenzen des Systems sind.

Die Integrale können natürlich auch über infinitesimale Volumenstücke also d^3x summieren.

Die Zeitentwicklung der Wellenfunktion wird über die **Schrödinger-Gleichung** beschrieben

$$i\hbar \partial_t \psi(\vec{x}, t) = \hat{H} \psi(\vec{x}, t) = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{x}) \right) \psi(\vec{x}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{x}) \right) \psi(\vec{x}, t) \quad (6)$$

Für stationäre Systeme, also Systeme mit zeitunabhängigem Potentiale $V(x)$, gilt die **zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung** und der Ansatz für die Wellenfunktion

$$\hat{H} u_E = E u_E \quad (7)$$

$$\psi(x, t) = u(x) \cdot e^{-i \frac{E}{\hbar} t} \quad (8)$$

mit der Eigenfunktionen zum Energieeigenwert E : u_E .

2 Orts- und Impulsdarstellung

Die Wellenfunktion im Orts- und Impulsraum sind über die Fourier-Transformation [17](#) verbunden. So können die folgenden Gln. hergeleitet werden, die ein schnelles Ausrechnen von z.B. Impulserwartungswert über die Ortswellenfunktion ermöglicht.

$$\langle \vec{p} \rangle = \int d^3x \, \psi^*(\vec{x}, t) \cdot \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_x \psi(\vec{x}, t) \quad (9)$$

$$\langle \vec{x} \rangle = \int d^3p \, \tilde{\psi}^*(\vec{p}, t) \cdot i\hbar \vec{\nabla}_p \tilde{\psi}(\vec{p}, t) \quad (10)$$

Orts- und Impulsdarstellung erhält man durch die folgenden Ersetzungen der Operatoren

$$\hat{x} \rightarrow x, \quad \hat{p} \rightarrow -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad (11)$$

$$\hat{x} \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial p}, \quad \hat{p} \rightarrow p \quad (12)$$

Wird vor allem in [6](#) angewendet, um $\psi(x, t)$ oder $\psi(p, t)$ zu finden.

Um die Schrödinger-Gleichung kann aber auch die Gleichung mit e^{-ikx} bzw. e^{ikx} multipliziert werden und von $-\infty$ bis $+\infty$ über x bzw. p integriert werden. Es wird also die Fourier-Transformation in allen Termen erzeugt. Bsp: ÜB6 A1a)

Beispiel

ges: Stationäre Schrödinger-Gl. im Impulsraum mit $V(x) = -f \frac{\sin(bx)}{b}$ (Einfache Ersetzung)

$$\hat{H}u = -\frac{\hat{p}^2}{2m}u - f \frac{\sin(b\hat{x})}{b}u = Eu$$

$$\xrightarrow{\hat{p} \rightarrow p, \hat{x} \rightarrow i\hbar \frac{d}{dp}} \frac{p^2}{2m}u(p) - \frac{f}{b} \sin\left(b \cdot i\hbar \frac{d}{dp}\right)u(p) = Eu(p)$$

ges: Schrödinger-Gl. im Impulsraum für periodisches Potential (Fourier-Transformation)

$$\hat{H}u(x) = Eu(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}u''(x) - \frac{\lambda\hbar^2}{2m} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x-na)u(x) = Eu(x)$$

$$\Leftrightarrow u''(x) + \lambda \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x-na)u(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2}u(x) \equiv \kappa^2 u(x)$$

Multipliziere mit e^{-ikx} und integriere über x von $-\infty$ bis ∞

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} dx u''(x) + \lambda \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x-na)u(x) = \kappa^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx u(x)$$

Das erste Integral muss über partielle Integration gelöst werden, die anderen sind einfacher

$$\Rightarrow -k^2 \sqrt{2\pi} \tilde{u}(k) + \lambda \sum_{n=-\infty}^{\infty} u(na) e^{-ikna} = \kappa^2 \sqrt{2\pi} \tilde{u}(k)$$

3 Integration

- **Symmetrische Funktion**

Integriert man eine um einen Punkt asymmetrische Funktion in einem symmetrischen Intervall um diesen Punkt, so ist das Integral Null.

$$\int_{-a}^{+a} x^3 dx = 0$$

- **Feynman-Technik**

Differenzierung nach einer Konstanten einfügen, nach der nicht integriert wird, um den Integranden zu vereinfachen.

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-a \cdot x^2} dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{da} (-e^{-a \cdot x^2}) dx = -\frac{d}{da} \sqrt{\frac{\pi}{a}} = \frac{\sqrt{\pi}}{2 \cdot a^{3/2}}$$

- **Anpassung Integrationsgrenzen** bei symmetrischen Funktionen

$$\phi = \begin{cases} B e^{\kappa x} & x \leq 0 \\ B e^{-\kappa x} & x \geq 0 \end{cases} \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \phi dx = 2 \int_0^{\infty} B e^{-\kappa x} dx$$

3.1 Gauß-Integrale

- **Zurückführen in bekannte Form**

Typischerweise in die Form 13.

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-a \cdot x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (13)$$

$$\int_0^{\infty} x e^{-x^2} dx = \frac{1}{2} \quad (14)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-a \cdot x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2 \cdot a^{3/2}} \quad (15)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-a x^2 + b x} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \cdot e^{\frac{b^2}{4a}} \quad (16)$$

Das erste Integral kann mittels Polarkoordinaten gelöst werden, das Zweite über $u = x^2$ Substitution. Das Vorletzte mittels Feynman-Technik

- **Quadratische Ergänzung**

Bei Integralen, die x^2 und x im Exponenten tragen, kann eine 1 ergänzt werden, s.d. die binomische Formel anwendbar ist und der Inhalt substituiert werden kann

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{4}(y^2 + 2by)} dy &\stackrel{1}{=} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{4}(y^2 + 2by + b^2 - b^2)} dy = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{4}(y+b)^2 + \frac{1}{4}b^2} dy \\ &\stackrel{z=y+b}{=} e^{\frac{b^2}{4}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{4}z^2} dz \stackrel{13}{=} e^{\frac{b^2}{4}} \cdot 2\sqrt{\pi} \end{aligned}$$

3.2 Fourier-Transformation

Die Fourier-Transformation und dessen Inverse der Dimension n ist

$$\mathcal{F}\{f(\vec{x})\}(\vec{k}) \equiv \tilde{f}(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^n} \int_{\mathbb{R}^n} f(\vec{x}) \cdot e^{-i\vec{k}\vec{x}} d^n x \quad (17)$$

$$\mathcal{F}^{-1}\{\tilde{f}(\vec{k})\}(\vec{x}) \equiv f(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^n} \int_{\mathbb{R}^n} \tilde{f}(\vec{k}) \cdot e^{i\vec{k}\vec{x}} d^n k \quad (18)$$

wobei für den eindimensionalen Fall k und x keine Vektoren sind.

4 Kommutator

Der Definition des Kommutators, sowie wichtige Kommutatorsätze sind

$$[\hat{A}, \hat{B}] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (19)$$

$$[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}] \quad (20)$$

$$[\hat{A} + \hat{B}, \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{B}, \hat{C}] \quad (21)$$

$$[\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}] \quad (22)$$

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} \quad (23)$$

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} \quad (24)$$

$$[\hat{A}^m, \hat{B}] = (m+1)\hat{A}^m[\hat{A}, \hat{B}] \quad \text{falls } [[\hat{A}, \hat{B}], \hat{A}] = 0 \quad (25)$$

$$(26)$$

Die Kommutatorregeln für $[\hat{A} + \hat{B}, \hat{C}]$ und $[\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}]$ werden sehr anschaulich, wenn man sich vorstellt, dass wie beim Skalarprodukt ausmultipliziert wird

Die Kommutatorregeln für $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}]$ und $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}]$ werden sehr anschaulich, wenn man sich vorstellt, dass der linke Operator der Seite mit den beiden Operatoren, für den ersten Term nach links herausgezogen und der rechte für den zweiten Term nach rechts herausgezogen wird.

Die ersten drei Eigenschaften können direkt durch Kommutatorexpansion gezeigt werden. Die nächsten erfordern das Einsetzen einer Null. Die Letzte wird über vollständige Induktion gezeigt, wobei in einem Schritt ausgenutzt wird, dass $[\hat{A}, \hat{B}]$ und \hat{A} einfach vertauscht werden können.

Wichtige physikalische Kommutatoren sind

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0 \quad (27)$$

$$[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 \quad (28)$$

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad (29)$$

$$\left[x, \frac{d}{dx}\right] = -1 \quad (30)$$

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k \quad (31)$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_i] = 0 \quad (32)$$

5 Eindimensionale Modellsysteme

Der Ablauf zum Lösen der eindimensionalen Modellsysteme ist in den meisten Fällen

1. Lösen der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung

Um eindimensionale Modellsysteme zu lösen, stelle zunächst den Hamilton-Operator auf und löse die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung. Im Fall von einer stückweisen Potentialfunktion, für jeden Bereich separat.

2. Ansatz vereinfachen

Überprüfe, ob der Ansatz für den ortsabhängigen Teil der WF $u(x)$ vereinfacht werden kann. D.h. für Streuzustände das Herausnehmen von Exponentialtermen, die eine nicht zum System passende Welle beschreiben (z.B. eine von rechts einlaufende Welle, während ein von links einlaufendes Teilchen betrachtet wird). Für Bindungszustände hingegen sind das die Exponentialterme, die eine Normierung unmöglich machen, im Unendlichen also divergieren.

3. Stetigkeitsbedingungen

Stelle die Stetigkeitsbedingung für $u(x)$ und $u'(x)$ die Potentialgrenzen auf. Sei $x = a$ eine solche Grenze, muss gelten

$$u(a_-) \stackrel{!}{=} u(a_+) \quad (33)$$

$$u'(a_-) \stackrel{!}{=} u'(a_+) \quad (34)$$

4. Normierbarkeit

Liegt ein gebundener Zustand vor, so muss dieser normierbar sein.

$$\int_{-\infty}^{\infty} |u(x)|^2 dx \stackrel{!}{=} 1 \quad (35)$$

5. Gleichungssysteme lösen

Lösen von Stetigkeitsbedingungen und ggf. Anwendung der Normierbarkeit liefern Ausdrücke für die gesuchten Konstanten im Ansatz $u(x)$ und erlaubte Energien.

Knotensatz

Ordnet man die gebundenen Zustände in aufsteigender Reihenfolge, so hat die n -te Eigenfunktion (Zählung beginnt bei 0) n Knoten (Nullstellen).

Ist das Potential invariant unter Paritätstransformation

$$V(x) = V(-x) \quad (36)$$

sind die Eigenfunktionen der gebundenen Zustände Eigenfunktionen des Paritätsoperators \hat{P} .

5.1 Unendlich hoher Potentialtopf

Betrachte das Potential

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq a \\ \infty, & \text{sonst} \end{cases}$$

Die Energien sind

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2 \quad (37)$$

und die Eigenzustände

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi n}{a} x\right) \quad (38)$$

Es gibt also unendlich viele diskrete Bindungszustände, die nicht in das Potential eindringen.

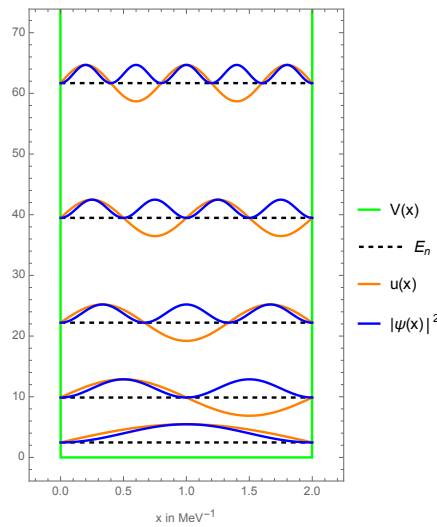


Abbildung 1: Eigenzustände und Wahrscheinlichkeitsdichten des Teilchens im unendlich hohen Kasten

Herleitung

Innerhalb des Topfes (wo $V = 0$ herrscht) folgt für die zeitunabh. S.-Gl.

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dx^2} &= Eu \\ \Leftrightarrow \frac{d^2 u}{dx^2} + \underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{=: \kappa^2} u &= 0 \end{aligned}$$

Die Lösung dieser DGL die des (kl.) harmonischen Oszillators

$$u(x) = A \sin(\kappa x) + B \cos(\kappa x)$$

Aufgrund des unendlich hohen Potentials, kann sich das Teilchen nicht außerhalb des Topfes aufhalten und es folgen die RB

$$u(0) = u(a) = 0$$

Einsetzen in die zuvor gefundene Lösung ergibt

$$\begin{aligned} u(0) = B &\stackrel{!}{=} 0 & \Rightarrow B = 0 \\ u(a) = A \sin(\kappa a) &\stackrel{!}{=} 0 & \Rightarrow \kappa = \frac{n\pi}{a} \end{aligned}$$

Die Wellenfunktion ist demnach soweit

$$u(x) = A \sin(\kappa_n x)$$

mit der entscheidenden Quantisierung

$$\kappa_n = \frac{n\pi}{a}$$

Energien

Aus der Definition von κ folgt der Ausdruck für die Energie

$$\begin{aligned} \kappa^2 &= \frac{2mE}{\hbar^2} \\ \Leftrightarrow E \equiv E_n &= \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} \stackrel{\kappa_n}{=} \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2 \end{aligned}$$

Wellenfunktionen

Für die Zustände muss lediglich die Normierungskonstante A bestimmt werden

$$\begin{aligned} 1 &\stackrel{!}{=} \int_0^a |u(x)|^2 dx = |A|^2 \int_0^a \sin^2(\kappa x) dx = \dots = |A|^2 \frac{a}{2} \\ \Rightarrow A &= \sqrt{\frac{2}{a}} \end{aligned}$$

Woraus die Eigenzustände

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(\kappa_n x)$$

5.2 Potentialstufe

Betrachte ein von links auf das Potential

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ V_0, & x \geq 0 \end{cases}$$

einlaufende Welle.

Es ergeben sich die Reflexions- und Transmissionswahrscheinlichkeiten

$$w_{T,E < V_0} = \frac{|j_{T,E < V_0}|}{|j_0|} = 0 \quad (39)$$

$$w_{R,E < V_0} = \frac{|j_{R,E < V_0}|}{|j_0|} = 0 \quad (40)$$

$$w_{T,E > V_0} = \frac{|j_{T,E > V_0}|}{|j_0|} = \frac{q}{k} |T|^2 = \frac{q}{k} \frac{2k^2}{(k+q)^2} \quad (41)$$

$$w_{R,E > V_0} = \frac{|j_{R,E > V_0}|}{|j_0|} = |R|^2 = \left(\frac{k-q}{k+q} \right)^2 \quad (42)$$

mit $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, $q = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$ und $\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$.

Im Gegensatz zur klassischen Physik, können einige Teilchen der Welle mit $E > V_0$ reflektiert werden und dringen für den Fall $E < V_0$ ein Stück in die Potentialstufe ein (transmittieren jedoch nicht).

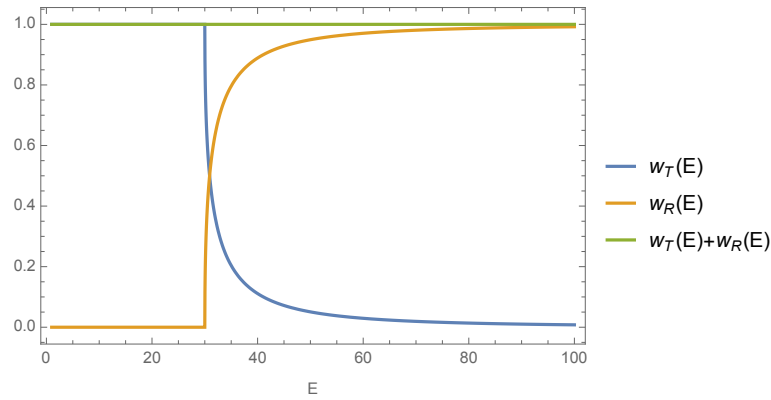


Abbildung 2: Transmissions- und Reflexionswahrscheinlichkeit der Potentialstufe mit $V_0 = 30$ in Abhängigkeit der Energie E

Fall $E > V_0$

Für den Bereich I, also $x < 0$ ergibt sich aus der zeitunabh. S.-Gl.

$$u'' + \underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{=k^2} u = 0$$

$$\Rightarrow u(x) = A_I e^{ikx} + B_I e^{-ikx}$$

Für den Bereich II, also $x > 0$ analog

$$u'' + \underbrace{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}_{=q^2} u = 0$$

$$\Rightarrow u(x) = A_{II} e^{-iqx} + B_{II} e^{iqx}$$

Diese Lösungen werden nun der Tatsache angepasst, dass ein von links einlaufendes Teilchen betrachtet wird. Da für $x > 0$ keine von rechts einlaufende Welle entstehen kann, wird $A_{II} = 0$. Setze weiter willkürlich $A_I = 1$ und benenne die verbleibenden Konstanten gemäß $B_I \equiv R, B_{II} \equiv T$ um, da sie mit der Reflexions- und Transmissionswahrscheinlichkeit zusammenhängen.

$$u(x) = \begin{cases} e^{ikx} + R e^{-ikx}, & x < 0 \\ T e^{iqx}, & x \geq 0 \end{cases}$$

Die Stetigkeitsbedingungen $u(0_-) \stackrel{!}{=} u(0_+)$ und $u'(0_-) \stackrel{!}{=} u'(0_+)$ liefern

$$1 + R \stackrel{!}{=} T$$

$$ik(1 - R) \stackrel{!}{=} iqT$$

Umstellen der 2. Gl. nach T und Gleichsetzen ergibt R und folglich über die 1. Gl. auch T :

$$R = \frac{k - q}{k + q}$$

$$\Rightarrow T = 1 + R = \frac{2k}{k + q}$$

Reflexions- bzw. Transmissionswahrscheinlichkeit berechnen sich aus dem Verhältnis von reflektierter bzw. transmittierter Wahrscheinlichkeitsstromdichten j_R, j_T zur einlaufenden W.stromdichte j_0 .

Die einlaufende Stromdichte wird aus dem Teil von $u(x)$ berechnet, der eine einlaufende ebene Welle beschreibt, also e^{ikx} . Analoges gilt für reflektierte und transmittierte Stromdichte. Eingesetzt wird dann in

$$j = \frac{\hbar}{2mi} \left(u^* \frac{d}{dx} u - u \frac{d}{dx} u^* \right)$$

$$w_R = \frac{|j_R|}{|j_0|} = \frac{\frac{\hbar k}{m} |R|^2}{\frac{\hbar k}{m}} = |R|^2 = \left(\frac{k-q}{k+q} \right)^2$$

$$w_T = \frac{|j_T|}{|j_0|} = \frac{\frac{\hbar k}{m} |T|^2}{\frac{\hbar q}{m}} = \frac{q}{k} |T|^2 = \frac{q}{k} \frac{2k^2}{(k+q)^2}$$

Fall $E < V_0$

Die Wellenfunktion in Bereich $x < 0$ ergibt sich analog zum ersten Fall. Für Bereich $x > 0$ wird die Funktion jedoch reell

$$0 = u'' + \underbrace{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}_{=: \tilde{\kappa}^2} u$$

$$\tilde{\kappa} = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} = \frac{\sqrt{-2m(V_0 - E)}}{\hbar} = i \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \equiv i\kappa$$

$$\Rightarrow u(x) = A_{\text{II}} e^{-\kappa x} + B_{\text{II}} e^{\kappa x}$$

Da $x > 0$ ein gebundener Zustand ist, muss dieser Normierbar sein, womit $B_{\text{II}} = 0$ sein muss. Wie vorhin wird umbenannt: $A_{\text{II}} \equiv T$. Es ergibt sich schließlich die Funktion

$$u(x) = \begin{cases} e^{ikx} + R e^{-ikx}, & x < 0 \\ T e^{-\kappa x}, & x \geq 0 \end{cases}$$

Die Stetigkeitsbedingungen liefern

$$1 + R \stackrel{!}{=} T$$

$$ik(1 - R) \stackrel{!}{=} -\kappa T$$

exakt wie im 1. Fall ergeben sich R und T

$$R = \frac{k - i\kappa}{k + i\kappa}$$

$$T = \frac{2k}{k + i\kappa}$$

Reflexions- bzw. Transmissionswahrscheinlichkeit sind dann

$$w_R = \frac{|j_R|}{|j_0|} = |R|^2 = \frac{k - i\kappa}{k + i\kappa} \cdot \frac{k + i\kappa}{k - i\kappa} = 1$$

$$w_T = \frac{|j_T|}{|j_0|} = \frac{0}{|j_0|} = 0$$

5.3 Potentialbarriere/Tunneleffekt

Betrachte eine von links auf das Potential

$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| > a \\ V_0, & |x| \leq a \end{cases}$$

einlaufende Welle mit $E < V_0$.

Es ergeben sich die Reflexions- und Transmissionswahrscheinlichkeiten

$$w_{R,E < V_0} = \frac{|j_{R,E < V_0}|}{|j_0|} = |R|^2 = \frac{(\kappa^2 + k^2) \sinh^2(2\kappa a)}{(\kappa^2 + k^2) \sinh^2(2\kappa a) + 4\kappa^2 k^2} \quad (43)$$

$$w_{T,E < V_0} = \frac{|j_{T,E < V_0}|}{|j_0|} = |T|^2 = \frac{(\kappa^2 + k^2)}{(\kappa^2 + k^2) \sinh^2(2\kappa a) + 4\kappa^2 k^2} \quad (44)$$

Für $\kappa a \gg 1$ gilt für $|T|^2$ die folgende Näherung, woraus der Ansatz für die Transmissionswahrscheinlichkeit für einen Potentialberg (= mehrere Potentialbarrieren hintereinander) folgt

$$|T|^2 \approx \frac{(4\kappa k)^2}{(\kappa^2 + k^2)^2} e^{-4\kappa a} \quad (45)$$

$$\Rightarrow |T|^2 = \Pi_i |T(a_i)|^2 \propto e^{-\sum_i 2\kappa_i \Delta x} = e^{-\sum_i \frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(V(x_i) - E)} \Delta x} = e^{-\frac{2}{\hbar} \int \sqrt{2m(V(x) - E)} dx} \quad (46)$$

mit der Breite einer Potentialbarriere $\Delta x = 2a$ (da von $-a$ bis a).

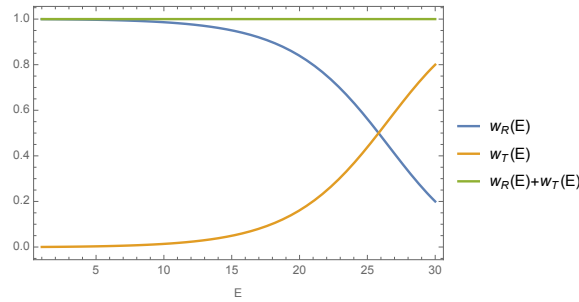


Abbildung 3: Reflexions- und Transmissionswahrscheinlichkeit für $a = 0,5$, $V_0 = 30$, $m = 0,5$

Herleitung

Analog zur Potentialstufe ergeben sich die Lösungen für die einzelnen Bereiche, inklusive Umbenennungen, willkürlichem 1 Setzen und Ignorieren der unphysikalischen Lösung

$$u(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Re^{-ikx}, & x < -a \\ Ae^{-\kappa x} + Be^{\kappa x}, & -a \leq x \leq a \\ Te^{ikx}, & x > a \end{cases}$$

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

Aus den Stetigkeitsbedingungen $u(\pm a_-) \stackrel{!}{=} u(\pm a_+)$ und $u'(\pm a_-) \stackrel{!}{=} u'(\pm a_+)$ ergeben sich nach einer Reihe von Umformungen die Reflexions- und Transmissionskoeffizienten R, T und daraus Reflexions- und Transmissionswahrscheinlichkeiten $|R|^2, |T|^2$.

5.4 Endlich hoher Potentialtopf

Betrachte den Potentialtopf

$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| > a, \quad \text{Bereiche I, III} \\ -V_0, & |x| < a, \quad \text{Bereich II} \end{cases}$$

Abhängig von der Teilchenmasse m , Topfhöhe V_0 und Topfbreite $2a$ ergibt sich, im Vergleich zum unendlich hohen Potentialtopf, nur eine begrenzte Anzahl von gebundenen Zuständen, die grafisch gefunden werden müssen.

Für die Streuzustände ($E > 0$, von links einlaufende Welle) ergibt sich die Trans- und Refl.wahrsch.

$$|T|^2 = \frac{4q^2 k^2}{(k^2 - q^2)^2 \sin(2qa) + 4q^2 k^2} \quad (47)$$

$$|R|^2 = 1 - |T|^2 \quad (48)$$

Für den Fall $2qa = n\pi$ ist die Reflexion Null und die gesamte Welle transmittiert.

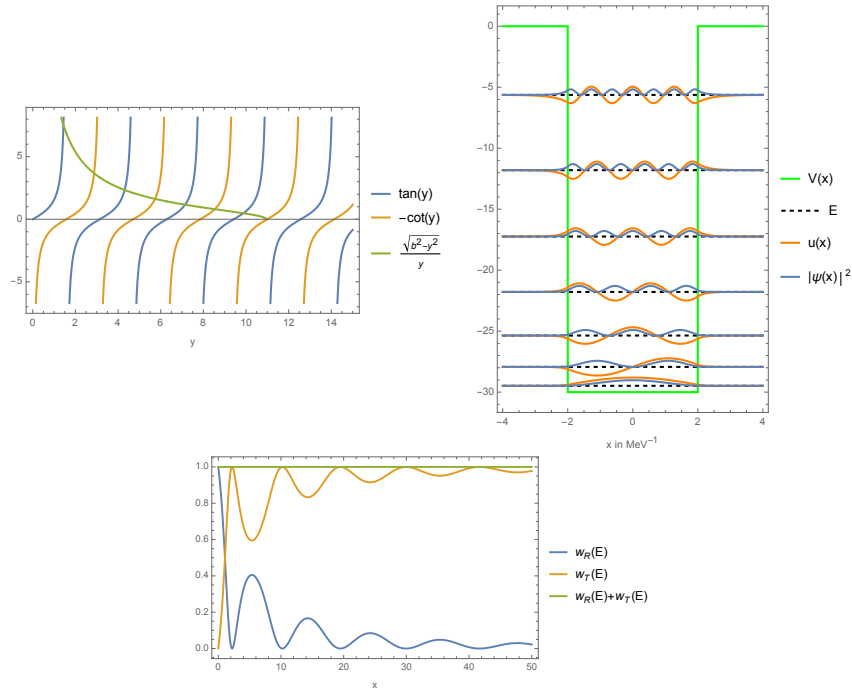


Abbildung 4: links: Grafische Bestimmung der erlaubten Lösungen im endlich hohen Potentialtopf; rechts: Zugehörige Energien, symmetrische und asymmetrische Wellenfunktionen und Aufenthaltswahrscheinlichkeiten; unten: Reflexions- und Transmissionswahrsch. der Streuzustände, abhängig von der Energie

Gebundene Zustände $E < 0$

Für die Bereiche I und III ergeben sich die Lösungen der stationären S.-Gl.

$$\begin{aligned}
 & -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} u = Eu \\
 \Leftrightarrow & u'' + \underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{=: \kappa^2} u = 0 \\
 \Rightarrow & u_I(x) = A_I e^{\kappa x} + B_I e^{-\kappa x} \\
 \Rightarrow & u_{III}(x) = A_{III} e^{\kappa x} + B_{III} e^{-\kappa x}
 \end{aligned}$$

Für den Bereich II folgt

$$\begin{aligned}
 & -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} u - V_0 u = Eu \\
 u'' + \underbrace{\frac{2m(V_0 + E)}{\hbar^2}}_{=: q^2} u &= 0 \\
 \Rightarrow u_{II}(x) &= A_{II} \sin(qx) + B_{II} \cos(qx)
 \end{aligned}$$

Aus der Normierbarkeit $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} u(x) \stackrel{!}{=} 0$ folgt, dass im Bereich I, also für $x < -a$, $B_I = 0$ und im Bereich III, also für $x > a$, $A_{III} = 0$ werden muss.

Die Wellenfunktion ist somit

$$u(x) = \begin{cases} A_I e^{\kappa x}, & \text{I} \\ A_{II} \sin(qx) + B_{II} \cos(qx), & \text{II} \\ B_{III} e^{-\kappa x}, & \text{III} \end{cases}$$

Es müssen die Stetigkeitsbedingungen $u(\pm a-) \stackrel{!}{=} u(\pm a+)$ und $u'(\pm a-) \stackrel{!}{=} u'(\pm a+)$ gelten, wobei " + " bzw. " - " hinter dem a den rechten bzw. linken Bereich des Punkts meint.

$$\begin{aligned}
 A_I e^{\kappa(-a)} &\stackrel{!}{=} -A_{II} \sin(qa) + B_{II} \cos(qa) \\
 \kappa A_I e^{\kappa(-a)} &\stackrel{!}{=} q(A_{II} \cos(qa) + B_{II} \sin(qa)) \\
 B_{III} e^{-\kappa a} &\stackrel{!}{=} A_{II} \sin(qa) + B_{II} \cos(qa) \\
 -\kappa B_{III} e^{-\kappa a} &\stackrel{!}{=} q(A_{II} \cos(qa) - B_{II} \sin(qa))
 \end{aligned}$$

Teilen der 2. durch die 1. und 4. durch die 3. ergibt jeweils κ und kann daher gleichgesetzt werden. Anschließend wird mit beiden Nennern multipliziert.

$$\begin{aligned}
\kappa &= q \frac{A_{II} \cos(qa) + B_{II} \sin(qa)}{B_{II} \cos(qa) - A_{II} \sin(qa)} \stackrel{!}{=} -q \frac{A_{II} \cos(qa) - B_{II} \sin(qa)}{A_{II} \sin(qa) + B_{II} \cos(qa)} \\
&\Leftrightarrow (A_{II} \cos + B_{II} \sin)(A_{II} \sin + B_{II} \cos) \stackrel{!}{=} (-A_{II} \cos + B_{II} \sin)(-A_{II} \sin + B_{II} \cos) \\
\cancel{A_{II}^2 \sin \cos} + A_{II} B_{II} \cos^2 + A_{II} B_{II} \sin^2 + \cancel{B_{II}^2 \sin \cos} &\stackrel{!}{=} \cancel{A_{II}^2 \sin \cos} - A_{II} B_{II} \cos^2 - A_{II} B_{II} \sin^2 + \cancel{B_{II}^2 \sin \cos} \\
A_{II} B_{II} &\stackrel{!}{=} -A_{II} B_{II} \quad \Rightarrow \begin{cases} A_{II} = 0, & \text{symmetrische Lösung} \\ B_{II} = 0, & \text{asymmetrische Lösung} \end{cases}
\end{aligned}$$

Konstruiere daher eine symmetrische und eine antisymmetrische Wellenfunktion

$$u_s(x) = \begin{cases} A_I e^{\kappa x}, & \text{I} \\ B_{II} \cos(qx), & \text{II} \\ B_{III} e^{-\kappa x}, & \text{III} \end{cases}, \quad u_a(x) = \begin{cases} A_I e^{\kappa x}, & \text{I} \\ A_{II} \sin(qx), & \text{II} \\ B_{III} e^{-\kappa x}, & \text{III} \end{cases}$$

Symmetrische Lösungen

Wende erneut die Stetigkeitsbedingung an und teile sie anschließend durcheinander.

$$\begin{aligned}
A_I e^{\kappa(-a)} &\stackrel{!}{=} B_{II} \cos(qa) \\
\kappa A_I e^{\kappa(-a)} &\stackrel{!}{=} -q B_{II} \sin(qa) \\
&\Rightarrow \kappa = -q \tan(qa)
\end{aligned}$$

Definiere die Substitutionen $y = qa$ und $b^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} a^2$.

Mit Hilfe dieser Substitutionen kann man κ und $\tan(qa)$ in Abhängigkeit von y darstellen.

$$\frac{\sqrt{b^2 - y^2}}{y} = \tan y$$

Die Schnittpunkte $y_{1,2,3,\dots}$ sind dann die erlaubten Lösungen.

Energien

Einsetzen der $y_{1,2,3,\dots}$ in die Gl. $y = qa = \frac{\sqrt{2m(V_0+E)}}{\hbar} a$ und umstellen nach E liefert dann die erlaubten Energien.

Zustände

Umstellen der ersten Stetigkeitsbedingung in diesem Abschnitt ermöglicht es, die Konstante A_I durch $B_{II} e^{\kappa a} \cos(qa)$ auszudrücken, sowohl für Abschnitt I als auch III. Die Wellenfunktion ist demnach.

$$u_s(x) = \begin{cases} B_{II} e^{\kappa a} \cos(qa) \cdot e^{\kappa x}, & \text{I} \\ B_{II} \cos(qa), & \text{II} \\ B_{II} e^{\kappa a} \cos(qa) \cdot e^{-\kappa x}, & \text{III} \end{cases}$$

Einsetzen der eben gefundenen Energien $E_{1,2,3,\dots}$ in q und κ in $u(x)$ und anschließendes normieren

$$\int_{-\infty}^{\infty} |u(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{-a} |u_I(x)|^2 dx + \int_{-a}^a |u_{II}(x)|^2 dx + \int_a^{\infty} |u_{III}(x)|^2 dx \stackrel{!}{=} 1$$

liefert dann die Konstante

$$B_{\text{II}} = \frac{1}{\sqrt{\frac{\cos^2(qa)}{\kappa} + a + \frac{\sin(qa)}{2a}}}$$

und die Wellenfunktionen können geplottet werden.

Asymmetrische Lösungen

Analoges Vorgehen liefert die Gl. für das grafische Lösen

$$\begin{aligned} \kappa &= -q \cot(qa) \\ \Rightarrow \frac{\sqrt{b^2 - y^2}}{y} &= -\cot y \end{aligned}$$

und die Wellenfunktion

$$u_{as}(x) = \begin{cases} -A_{\text{II}} e^{\kappa a} \cdot e^{\kappa x} \\ A_{\text{II}} \sin(qx) \\ A_{\text{II}} e^{\kappa a} \cdot e^{-\kappa x} \end{cases}$$

mit der Konstante

$$A_{\text{II}} = \frac{1}{\sqrt{\frac{\sin^2(qa)}{\kappa} + a - \frac{\sin(2qa)}{2q}}}$$

Streuzustände $E > 0$

Das Lösen der einzelnen Bereiche liefert dieselben Funktionen wie beim Tunneleffekt, lediglich Bereich II $-a \leq x \leq a$ muss etwas angepasst werden ($V_0 \rightarrow -V_0$):

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \rightarrow \frac{\sqrt{2m(-V_0 - E)}}{\hbar} = i \frac{\sqrt{2m(V_0 + E)}}{\hbar} \equiv iq$$

ACHTUNG: Das ist nicht dasselbe q wie bei der Potentialstufe.

Dieses $\kappa = iq$ wird nun einfach in die Transmissionswahrscheinlichkeit eingesetzt.

$$|T|^2 = \frac{4q^2 k^2}{(k^2 - q^2)^2 \sin(2qa) + 4q^2 k^2}$$

Für $2qa = n\pi$ mit $n \in \mathbb{N}$ wird der Sinus im Nenner Null und die Transmissionswahrscheinlichkeit $|T|^2$ somit 1.

5.5 Harmonischer Oszillator

Betrachte das Potential

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \equiv \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

Die zugehörigen Energien und Zustände sind

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (49)$$

$$u_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n! \cdot 2^n \cdot \pi^{1/4}}} \cdot H_n(x) \cdot e^{-x^2/2} \quad (50)$$

mit den Hermite-Polynomen $H_n(x) = e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2/2}$.

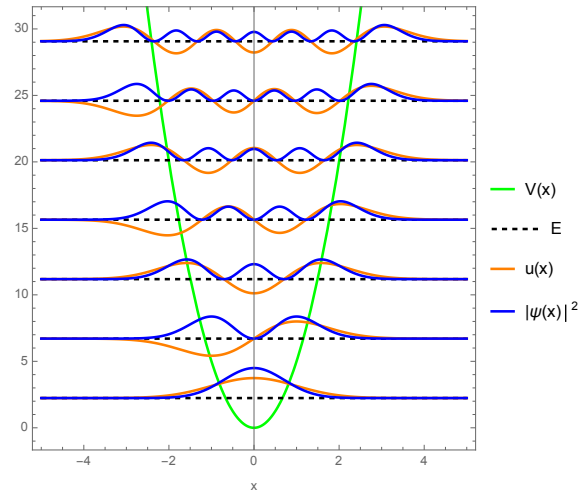


Abbildung 5: Energien, Eigenzustände und Wahrscheinlichkeitsdichten des harmonischen Oszillators

Die in der algebraischen Herleitung (siehe gleich ausführlich) auftretenden Operatoren sind wie folgt definiert und haben die Wirkung

$$\hat{a} := \frac{1}{\sqrt{2}} \left(x + \frac{d}{dx} \right) \quad (51)$$

$$\hat{a}^\dagger := \frac{1}{\sqrt{2}} \left(x - \frac{d}{dx} \right) \quad (52)$$

$$\hat{a}u_n = \sqrt{n} \cdot u_{n-1} \quad (53)$$

$$\hat{a}^\dagger u_n = \sqrt{n+1} \cdot u_{n+1} \quad (54)$$

Weiter gilt

$$\hat{N}u_n = nu_n \quad (55)$$

mit dem **Anzahloperator** $\hat{N} := \hat{a}^\dagger \hat{a}$.

Algebraische Herleitung

Vorbereitung

Definiere zunächst die Operatoren

$$\hat{a} := \frac{1}{\sqrt{2}} \left(x + \frac{d}{dx} \right), \quad \hat{a}^\dagger := \frac{1}{\sqrt{2}} \left(x - \frac{d}{dx} \right)$$

und berechne $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ (WICHTIG: die Terme entstehen, also würd eine Testfunktion von der Seite wirken, die danach wieder weggelassen wird $\hat{a}^\dagger \hat{a} \psi$). Rechne Operator für Op. aus: $\hat{a}^\dagger \hat{a} \psi = \hat{a}^\dagger (\hat{a} \psi)$.

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger \hat{a} \psi &\stackrel{\hat{a}}{=} \frac{1}{2} \hat{a}^\dagger \left(x \psi + \frac{d\psi}{dx} \right) = \frac{1}{2} \left(x - \frac{d}{dx} \right) \left(x \psi + \frac{d\psi}{dx} \right) = \frac{1}{2} \left(x^2 \psi + x \frac{d\psi}{dx} - \frac{d(x\psi)}{dx} - \frac{d^2 \psi}{dx^2} \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(x^2 + \cancel{x \frac{d\psi}{dx}} - \psi - \cancel{x \frac{d\psi}{dx}} - \frac{d^2 \psi}{dx^2} \right) = \frac{1}{2} \left(x^2 - 1 - \frac{d^2}{dx^2} \right) \psi \\ \Rightarrow \hat{a}^\dagger \hat{a} &= \frac{1}{2} \left(-\frac{d^2}{dx^2} + x^2 - 1 \right) \end{aligned}$$

Der Hamilton-Operator lässt in natürlichen Einheiten ($x = y \cdot l$, $l = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$, siehe analytische Herleitung) über diese Operatoren darstellen.

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \stackrel{\text{NE}}{\Rightarrow} -\frac{d^2}{dx^2} + x^2 = 2\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1$$

Im folgenden werden die Kommutatorrelationen

$$\left[x, \frac{d}{dx} \right] = -1, \quad [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$$

genutzt, die einfach mit den Kommutatoridentitäten für Plus und Mal bewiesen werden können. Betrachte nun den Kommutator zwischen Hamilton-Operator und \hat{a} bzw. \hat{a}^\dagger .

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{a}] &\stackrel{\hat{H}}{=} [2\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1, \hat{a}] = (2\hat{a}^\dagger \hat{a} + \mathcal{I})\hat{a} - \hat{a}(2\hat{a}^\dagger \hat{a} + \mathcal{I}) = 2[\hat{a}^\dagger \hat{a}, \hat{a}] = \\ &= 2(\underbrace{\hat{a}^\dagger [\hat{a}, \hat{a}]}_{=0} + \underbrace{[\hat{a}^\dagger, \hat{a}]\hat{a}}_{=-1}) = -2\hat{a} \\ [\hat{H}, \hat{a}^\dagger] &= [2\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1, \hat{a}^\dagger] \stackrel{\text{analog}}{=} 2[\hat{a}^\dagger \hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 2(\hat{a}^\dagger [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] + [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger]\hat{a}) = 2\hat{a}^\dagger \end{aligned}$$

Wirkung von \hat{a} und \hat{a}^\dagger

Es gelte die stationäre Schrödinger-Gleichung, auf die mit \hat{a} bzw. \hat{a}^\dagger von links gewirkt wird. Anschließend wird die Reihenfolge von Hamilton-Operator und \hat{a} bzw. \hat{a}^\dagger mit den zuvor gefundenen Kommutatoren vertauscht.

$$\begin{aligned} \hat{H}u &= \varepsilon' u \\ \stackrel{\hat{a}}{\Rightarrow} \hat{a}\hat{H}u &= \varepsilon' \hat{a}u \\ \stackrel{[\hat{H}, \hat{a}]}{\Leftrightarrow} (\hat{H}\hat{a} + 2\hat{a})u &= \varepsilon' \hat{a}u \\ \Leftrightarrow \hat{H}\hat{a}u &= (\varepsilon' - 2)\hat{a}u \end{aligned}$$

Analog für \hat{a}^\dagger

$$\Rightarrow \hat{H}\hat{a}^\dagger u = (\varepsilon' + 2)\hat{a}^\dagger u$$

Dies zeigt die Wirkung der Operatoren: \hat{a} erniedrigt den Eigenwert um 2 Einheiten, \hat{a}^\dagger erhöht ihn um 2.

Eine weitere wichtige Eigenschaft, die vorbereitet werden muss, ist, dass $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ und somit auch \hat{H} positiv semidefinit ist, womit all ihre Eigenwerte ≥ 0 sind.

$$\langle \phi, \hat{a}^\dagger \hat{a} \phi \rangle = \langle \hat{a} \phi, \hat{a} \phi \rangle = \|\hat{a} \phi\|^2 \geq 0$$

Grundzustand

Setzt man in die zeitunabh. S.-Gl. den Operator $\hat{H} = 2\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1$ ein, folgt aufgrund der positiven Semidefinitheit von \hat{H} eine Bedingung für die Energie und somit die Grundzustandsenergie ε_0

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} u = \frac{1}{2} \underbrace{(\varepsilon - 1)}_{\geq 0} u$$

$$\Rightarrow \varepsilon \geq 1$$

$$\Rightarrow \varepsilon_0 = 1$$

Betrachtet man die Wirkung von \hat{a} auf den Grundzustand u_0 (gehört zur Energie ε_0), folgt

$$\begin{aligned} \hat{H}\hat{a}u_0 &= (\varepsilon_0 - 2)u_0 = -1\hat{a}u_0 \\ \Rightarrow \hat{a}u_0 &= 0 \end{aligned}$$

Da \hat{H} keine negativen Eigenwerte besitzen darf, muss der Zustand also Null sein.
Einsetzen von \hat{a} und Lösen der einfachen DGL ergibt den Grundzustand.

$$\begin{aligned} \Rightarrow \hat{a}u_0 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(x + \frac{d}{dx} \right) u_0 = 0 \\ \Leftrightarrow \frac{1}{u_0} \frac{du_0}{dx} &= -x \\ \stackrel{f}{\Rightarrow} u_0(x) &= c \cdot e^{-\frac{1}{2}x^2} \stackrel{\text{Normierung}}{=} \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-\frac{1}{2}x^2} \end{aligned}$$

Zustand

Betrachte das schrittweise Erhöhen des Grundzustands.

$$\begin{aligned} \hat{H}(\hat{a}^\dagger)^n u_0 &= (\varepsilon_0 + 2n)(\hat{a}^\dagger)^n u_0 \\ \Leftrightarrow \hat{a}^\dagger \hat{a}(\hat{a}^\dagger)^n u_0 &= n(\hat{a}^\dagger)^n u_0 \end{aligned}$$

u_n ist augenscheinlich proportional zu $(\hat{a}^\dagger)^n u_0$. u_{n+1} und u_{n-1} ergibt sich wie zuvor durch Anwenden von \hat{a}^\dagger und \hat{a} von links. Die Ansätze sind (mit c , \tilde{c} , $\tilde{\tilde{c}}$ Proportionalitätskonstanten)

$$\begin{aligned} u_{n-1} &= c \cdot \hat{a} u_n \\ u_{n+1} &= \tilde{c} \cdot \hat{a}^\dagger u_n \\ u_n &= \tilde{\tilde{c}} \cdot (\hat{a}^\dagger)^n u_0 \end{aligned}$$

Im Folgenden sollen diese Proportionalitätskonstanten bestimmt werden, um vor allem einen Ausdruck für den Zustand u_n zu finden.

Schreibe dazu die Normierungsbedingung für u_{n-1} auf.

Im letzten Schritt der ersten Zeile wird vorausgesetzt, dass u_n normiert ist.

$$\begin{aligned}\langle u_{n-1}, u_{n-1} \rangle &\stackrel{u_{n-1}}{=} |c|^2 \langle \hat{a} u_n, \hat{a} u_n \rangle = |c|^2 \langle u_n, \hat{a}^\dagger \hat{a} u_n \rangle = |c|^2 \cdot n \langle u_n, u_n \rangle = |c|^2 \cdot n \stackrel{!}{=} 1 \\ \Leftrightarrow c &= \frac{1}{\sqrt{n}} \\ \Rightarrow u_{n-1} &= \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{a} u_n\end{aligned}$$

Analog folgt mit für u_{n+1}

$$\begin{aligned}\langle u_{n+1}, u_{n+1} \rangle &= |\tilde{c}|^2 \langle \hat{a}^\dagger u_n, \hat{a}^\dagger u_n \rangle = |\tilde{c}|^2 \langle u_n, \hat{a} \hat{a}^\dagger u_n \rangle = |\tilde{c}|^2 \langle u_n, (\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1) u_n \rangle = \\ &= |\tilde{c}|^2 \cdot (n+1) \langle u_n, u_n \rangle = |\tilde{c}|^2 \cdot (n+1) \stackrel{!}{=} 1 \quad \tilde{c} \\ \Rightarrow \tilde{c} &= \frac{1}{\sqrt{n+1}} \\ \Rightarrow u_{n+1} &= \frac{1}{\sqrt{n+1}} \hat{a}^\dagger u_n\end{aligned}$$

Aus Letzterem folgt dann für der Koeffizient für u_n (die n -te Erhöhung des Grundzustands u_0)

$$\begin{aligned}u_n &= \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n u_0 = \frac{1}{2^n \sqrt{n!}} \left(x + \frac{d}{dx} \right)^n \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-x^2/2} = \\ &\stackrel{!}{=} \frac{1}{2^n \sqrt{n!}} e^{-x^2/2} e^{x^2/2} \left(x + \frac{d}{dx} \right)^n \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-x^2/2} = \\ &= \frac{1}{2^n \sqrt{n!}} H_n(x) e^{-x^2/2}\end{aligned}$$

Energie

Die Energien gewinnt man durch das wiederholte Anwenden von \hat{a}^\dagger auf die stationäre Schrödinger-Gl. für den Grundzustand.

$$\begin{aligned}\hat{H} u_0 &= \underbrace{\varepsilon_0}_{=1} u_0 \\ \Rightarrow \hat{H} \hat{a}^\dagger u_0 &= (1+2)_0 u_0 \\ \stackrel{(\hat{a}^\dagger)^n}{\Rightarrow} \hat{H} (\hat{a}^\dagger)^n u_0 &= (1+2n) u_0 \\ &\equiv \hat{H} u_n = (1+2n) u_n \\ &\Rightarrow \varepsilon_n = 1 + 2n \\ \stackrel{\text{SI}}{\Leftrightarrow} E_n &= \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right)\end{aligned}$$

5.5.1 Kohärente Zustände

Zustand, dessen Orts- und Impulsmittelwerte der klassischen Bewegungsgl. des harmonischen Oszillators folgen.

$$\phi_\lambda(x, t=0) = e^{-\frac{i}{2}x_0 p_0} e^{-\frac{1}{2}\tilde{\epsilon}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}} u_n(x) \quad (56)$$

$$\phi_\lambda(x, t) = e^{-i\frac{\omega}{2}t} \phi_{\lambda(t)}(x) \quad (57)$$

$$= e^{-\frac{i}{2}x_0 p_0} e^{-\frac{1}{2}\tilde{\epsilon}} e^{-i\frac{\omega}{2}t} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\lambda e^{-i\frac{\omega}{2}t})^n}{\sqrt{n!}} u_n(x) \quad (58)$$

mit $\lambda = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_0 + ip_0)$ und $\lambda(t) = \lambda e^{-i\frac{\omega}{2}t}$.

Hergeleitet werden sie aus dem Grundzustand des qm HO, der mit $e^{ix_0\hat{p}}$ und $e^{ip_0\hat{x}}$ von links multipliziert "ausgelenkt" wird: $e^{ip_0\hat{x}} e^{ix_0\hat{p}} u_0 = \dots = \phi_\lambda$

Sie haben die Eigenschaften

$$\begin{aligned} \langle \hat{x} \rangle &= x_0 \cos(\omega t) + p_0 \sin(\omega t) \\ \langle \hat{p} \rangle &= p_0 \cos(\omega t) - x_0 \sin(\omega t) \\ (\Delta x)^2 &= \frac{1}{2} \\ (\Delta p)^2 &= \frac{1}{2} \end{aligned}$$

Das Wellenpaket zerfließt somit nicht, da die Varianzen zeitlich konstant sind.

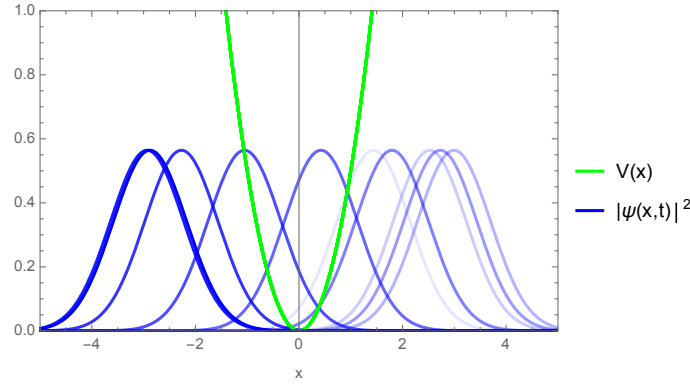


Abbildung 6: Zeitentwicklung des kohärenten Zustands im quantenmechanischen harmonischen Oszillator; je heller der Zustand, desto früher in der Zeit liegt er

5.6 Delta-Potential

Betrachte das Potential

$$V(x) = -V_0\delta(x) \quad (59)$$

Es existiert ein einziger Bindungszustand mit Energie und Zustand

$$E = -\frac{mV_0^2}{2\hbar^2} \quad (60)$$

$$u(x) = \sqrt{k} \cdot \begin{cases} e^{kx}, & x < 0 \\ e^{-kx}, & x > 0 \end{cases} \quad (61)$$

mit $k = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$.

Für die Streuzustände ($E > 0$) gelten die Reflexions- und Transmissionswahrscheinlichkeit

$$w_R(E) = |R|^2 = \frac{1}{1 + \frac{2\hbar^2 E}{mV_0^2}} \quad (62)$$

$$w_T(E) = |T|^2 = \frac{1}{1 + \frac{mV_0^2}{2\hbar^2 E}} \quad (63)$$

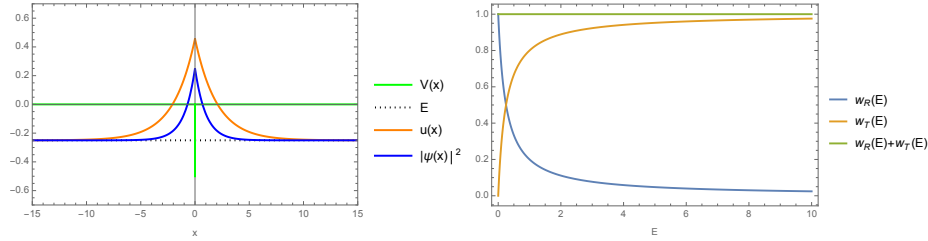


Abbildung 7: links: Bindungszustand; rechts: Reflexions- und Transmissionswahrscheinlichkeit für ein von links einlaufendes Teilchen

Herleitung

In diesem Potential gibt es die Besonderheit, dass die erste Ableitung nicht stetig ist, sondern einen Sprung aufweist. Einen Ausdruck dafür erhält man, indem man die zeitunabh. S.-Gl. in einem kleinen ε -Bereich mit $\varepsilon \rightarrow 0$ integriert wird.

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m} u''(x) - V_0 \delta(x) \cdot u(x) = E u(x) \\ \Leftrightarrow & \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} u''(x) dx + \frac{2mV_0}{\hbar^2} \underbrace{\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} u(x) \delta(x) dx}_{=u(0)} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \underbrace{\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} u(x) dx}_{=0} \\ & \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} u'(0_+) - u'(0_-) = -\frac{2mV_0}{\hbar^2} u(0) \end{aligned}$$

wobei im zweiten Schritt das Integral auf der rechten Seite wegen der Integration über einen nahezu unausgedehnten Raumbereich weggelassen wird.

Bindungszustand ($E < 0$)

Für die Bereiche I ($x < 0$) und II ($x > 0$) ist das Potential Null und es ergeben sich die folgenden Lösungen.

$$u(x) = \begin{cases} A_I e^{kx} + B_I e^{-kx}, & x < 0 \\ A_{II} e^{kx} + B_{II} e^{-kx}, & x > 0 \end{cases}$$

mit $k = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$.

Die Normierbarkeitsbedingung vereinfacht den Ansatz zu

$$u(x) = \begin{cases} A_I e^{kx}, & x < 0 \\ B_{II} e^{-kx}, & x > 0 \end{cases} \Rightarrow u'(x) = \begin{cases} k A_I e^{kx}, & x < 0 \\ -k B_{II} e^{-kx}, & x > 0 \end{cases}$$

Nutze die Stetigkeitsbedingungen $u_I(0) \stackrel{!}{=} u_{II}(0)$ und $u'_{II}(0) - u'_I(0) = -\frac{2mV_0}{\hbar^2}u(0)$:

$$\begin{aligned} A_I &= B_{II} \\ -k B_{II} - k A_I &= \frac{2mV_0}{\hbar^2} A_I \\ \Rightarrow k &= -\frac{mV_0}{\hbar^2} \end{aligned}$$

Energie

Setze die Definition von k mit dem Ausdruck aus der Stetigkeitsbedingung gleich und leite daraus die Energie ab.

$$\begin{aligned} k &= -\frac{mV_0}{\hbar^2} = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \\ \Leftrightarrow E &= -\frac{mV_0^2}{2\hbar^2} \end{aligned}$$

Zustände

Normiere $u(x)$ und verwende die zuvor gefundene Bedingung $A_I = B_{II}$.

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} |u(x)|^2 dx &= |B_{II}|^2 \int_{-\infty}^0 e^{2kx} dx + |B_{II}|^2 \int_0^{\infty} e^{-2kx} dx = |B_{II}|^2 \left(-\int_0^{-\infty} e^{2kx} dx + \int_0^{\infty} e^{-2kx} dx \right) \\ &= 2|B_{II}|^2 \int_0^{\infty} e^{-2kx} dx = -\frac{2|B_{II}|^2}{2k} e^{-2kx} \Big|_0^{\infty} = \frac{|B_{II}|^2}{k} \stackrel{!}{=} 1 \\ \Leftrightarrow B_{II} &= \sqrt{k} \end{aligned}$$

Somit ergeben sich die Zustände und Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte

$$\begin{aligned} u(x) &= \sqrt{k} \cdot \begin{cases} e^{kx}, & x < 0 \\ e^{-kx}, & x > 0 \end{cases} \\ |\psi(x)|^2 &= k \cdot \begin{cases} e^{2kx}, & x < 0 \\ e^{-2kx}, & x > 0 \end{cases} \end{aligned}$$

Streuzustände ($E > 0$)

Für ein von links einlaufendes Teilchen ergibt sich analog zu Potentialstufe/Tunneleffekt der Ansatz

$$u(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Re^{-ikx}, & x < 0 \\ Te^{ikx}, & x > 0 \end{cases} \Rightarrow u'(x) = \begin{cases} ik(e^{ikx} - Re^{-ikx}), & x < 0 \\ ikTe^{ikx}, & x > 0 \end{cases}$$

mit $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$.

Nutze die Stetigkeitsbedingungen $u_{\text{I}}(0) \stackrel{!}{=} u_{\text{II}}(0)$ und $u'_{\text{II}}(0) - u'_1(0) = -\frac{2mV_0}{\hbar^2}u(0)$:

$$1 + R \stackrel{!}{=} T$$
$$ikT - ik(1 - R) \stackrel{!}{=} -\frac{2mV_0}{\hbar^2}(1 + R)$$

Stelle die 2. Bedingung nach T um und setze sie dann mit der 1. gleich

$$T \stackrel{!}{=} -\frac{2mV_0}{ik\hbar^2}(1 + R) + 1 - R$$
$$\Rightarrow 1 + R = 2i \underbrace{\frac{mV_0}{k\hbar^2}}_{=: \beta} (1 + R) + 1 - R$$
$$\Leftrightarrow R(2 - 2i\beta) = 2i\beta$$
$$\Leftrightarrow R = \frac{i\beta}{1 - i\beta}$$
$$\Rightarrow |R|^2 = \frac{\beta^2}{1 + \beta^2} = \frac{1}{\frac{1}{\beta^2} + 1} = \frac{1}{1 + \frac{\hbar^4 k^2}{m^2 V_0^2}} = \frac{1}{1 + \frac{2\hbar^2 E}{mV_0^2}}$$

Setze R in die 1. Bedingung ein, um T zu erhalten

$$T = 1 + R = 1 + \frac{i\beta}{1 - i\beta} = \frac{1}{1 - i\beta}$$
$$\Rightarrow |T|^2 = \frac{1}{1 + \beta^2} = \frac{1}{1 + \frac{mV_0^2}{2\hbar^2 E}}$$

5.7 Teilchen auf einem Ring

Betrachte das Potential $V = 0$ für einen Kreis, d.h. der Raumbereich, auf dem sich das Teilchen befindet, schließt sich.

Energien und Zustände sind

$$E_{\kappa} = \frac{\hbar^2}{2mr^2} \kappa^2 \quad (64)$$

$$u(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\kappa\theta} \quad \text{oder} \quad u(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i\kappa\theta} \quad (65)$$

mit $\kappa = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Beide Zustände sind mögliche Lösungen der DGL.

Die Energien sind somit bis auf den Grundzustand $\kappa = 0$ zweifach entartet.

Herleitung

Löse das Problem in Polarkoordinaten. Da der Radius konstant bleibt, hängt die Wellenfunktion lediglich vom Winkel φ ab. Setze demnach den Laplace-Operator in Polarkoordinaten in die stationäre Schrödinger-Gl. ein (wobei der Term mit der r -Ableitung offenkundig null wird).

$$\begin{aligned} \frac{\hat{p}^2}{2m} u(\varphi) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta u(\varphi) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} u(\varphi) = E u(\varphi) \\ &\Leftrightarrow u''(\varphi) + \underbrace{\frac{2mr^2 E}{\hbar^2}}_{=:\kappa^2} u(\varphi) = 0 \end{aligned}$$

Eine Lösung dieser DGL ist (man kann auch den Term mit negativem Exponenten nehmen)

$$u(\varphi) = A e^{i\kappa\varphi}$$

Zustände

Nutze die Stetigkeitsbedingung $u(\varphi) \stackrel{!}{=} u(\varphi + 2\pi)$, d.h. dass sich der Ring schließen muss

$$\begin{aligned} A e^{i\kappa\varphi} &\stackrel{!}{=} A e^{i\kappa(\varphi+2\pi)} = A e^{i\kappa\varphi} e^{i\kappa 2\pi} \\ &\Leftrightarrow 1 = e^{i\kappa 2\pi} = \cos(\kappa \cdot 2\pi) + i \sin(\kappa \cdot 2\pi) \\ &\Rightarrow \kappa = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \end{aligned}$$

Normieren ergibt

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} d\varphi |u(\varphi)|^2 &= |A|^2 \int_0^{2\pi} d\varphi = |A|^2 \cdot 2\pi \stackrel{!}{=} 1 \\ \Rightarrow u(\varphi) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\kappa\varphi} \end{aligned}$$

Energie

$$\kappa^2 = \frac{2mr^2 E}{\hbar^2} \quad \Leftrightarrow E = E_{\kappa} = \frac{\hbar^2}{2mr^2} \kappa^2$$

5.8 Wellenpaket

Das Wellenpaket ist eine normierbare Funktion, die aus ebenen Wellen konstruiert wird. Im allgemeinen Fall (mit einer unbestimmten Verteilung $f(\vec{k})$) gilt

$$\psi(\vec{x}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int f(\vec{k}) \cdot e^{-i[\omega(\vec{k})t - \vec{x}\vec{k}]} d^n k \quad (66)$$

Die Zeitentwicklung eines solchen Wellenpakets ist

$$\psi(\vec{x}, t) = \int K(\vec{x} - \vec{y}, t) \cdot \phi(\vec{y}) d^n k \quad (67)$$

wobei dessen Bestandteile der Zeitentwicklungskern und die Anfangsbedingung sind

$$K(\vec{x} - \vec{y}, t) := \frac{1}{(2\pi)^n} \int e^{-i\beta\vec{k}^2 t} e^{i\vec{k}(\vec{x}-\vec{y})} d^n k \quad (68)$$

$$\phi(\vec{y}) := \psi(\vec{y}, t=0) \quad (69)$$

mit $\beta = \frac{\hbar}{2m}$ im Zeitentwicklungskern K .

Beispiel

geg: $\psi(x, 0) = A e^{-\frac{x^2}{2a^2} + ik_0 x}$ mit $A = \frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{a}}$, $K(x - y, t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} e^{\frac{im}{2\hbar t} (x-y)^2}$

Dieses Beispiel beschreibt das Zerfließen eines Gauß-Pakets.

$$\Rightarrow |\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma(t)} e^{-\frac{1}{2\sigma^2(t)} (x - \frac{\hbar k_0}{m} t)^2}$$

mit $\sigma(t) = \frac{a}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + (\frac{\hbar t}{ma^2})^2}$.

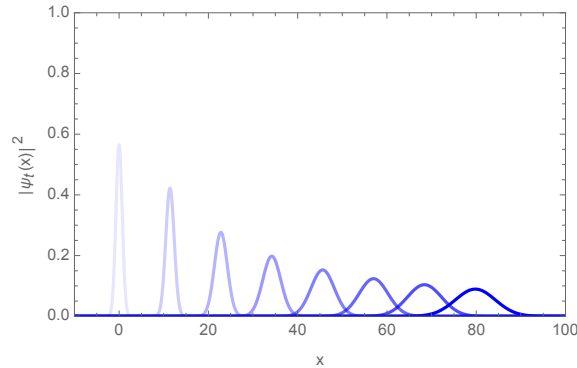


Abbildung 8: Aufenthaltswahrscheinlichkeit zu mehreren Zeitpunkten; Die linke Kurve zeigt das Paket zu $t = 0$.

6 Variationsverfahren

Mit dem Verfahren kann eine obere Schranke $E[u_a]$ zur Grundzustandsenergie E_0 gewonnen werden.

$$E[u_a, a] = \frac{\langle u_a, \hat{H}u_a \rangle}{\langle u_a, u_a \rangle} \geq E_0 \quad (70)$$

Dafür muss eine quadratintegrale Funktion u_a mit dem Parameter a geraten werden. Anschließend wird das $a \equiv a_{\min}$ gefunden, das das $E[u_a, a]$ minimiert.

$$\frac{dE[u_a, a]}{da} \stackrel{!}{=} 0 \quad \Rightarrow E_{\min} = E[u_a, a_{\min}] \quad (71)$$

Beispiel

$$\text{geg: } V(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0 \\ mgx, & x \geq 0 \end{cases} \text{ und } u_a(x) = x(x-a)$$

$$\hat{H}u_a = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} x(x-a) + mgx^2(x-a) = -\frac{\hbar^2}{m} + mgx^3 - mgx^2$$

$$\begin{aligned} \bullet \langle u_a, \hat{H}u_a \rangle &= \int_0^a (x^2 - xa) \cdot \left(-\frac{\hbar^2}{m} + mgx^3 - mgax^2 \right) dx \\ &= \int_0^a \left(-\frac{\hbar^2}{m} x^2 + mgx^5 - mgax^4 + \frac{\hbar^2 a}{m} x - mgax^4 + mga^2 x^3 \right) dx \\ &= -\frac{\hbar^2}{3m} a^3 + \frac{mg}{6} a^6 - \frac{mga}{5} a^5 + \frac{\hbar^2 a}{2m} a^2 - \frac{mga}{5} a^5 + \frac{mga^2}{4} a^4 = \frac{a^3}{6} \left(\frac{\hbar^2}{m} + \frac{mg}{10} a^3 \right) \end{aligned}$$

$$\bullet \langle u_a, u_a \rangle = \int_0^a (x^2 - xa)^2 dx = \int_0^a (x^4 - 2ax^3 + a^2x^2) dx = \frac{a^5}{5} - \frac{2a}{4} a^4 + \frac{a^2}{3} a^3 = \frac{a^5}{30}$$

$$\Rightarrow E[u_a, a] = \frac{\langle u_a, \hat{H}u_a \rangle}{\langle u_a, u_a \rangle} = \frac{\frac{a^3}{6} \left(\frac{\hbar^2}{m} + \frac{mg}{10} a^3 \right)}{\frac{a^5}{30}} = \frac{5\hbar^2}{m} \frac{1}{a^2} + \frac{mg}{2} a$$

$$\Rightarrow \frac{dE[u_a, a]}{da} = -\frac{10\hbar^2}{m} \frac{1}{a^3} + \frac{mg}{2} \stackrel{!}{=} 0 \quad \Rightarrow a_{\min} = \sqrt[3]{\frac{20\hbar^2}{m^2g}}$$

$$E[u_a, a_{\min}] = \frac{5\hbar^2}{m} \frac{1}{\sqrt[3]{\frac{20\hbar^2}{m^2g}}^2} + \frac{mg}{2} \sqrt[3]{\frac{20\hbar^2}{m^2g}} = \dots = \frac{3}{4} \sqrt[3]{20mg^2\hbar^2}$$

Beweis

Sei $\{u_n\}$ ein vollständiges Fkt.system von Eigenfunktionen von \hat{H} und u eine beliebige Funktion.

$$\langle u, \hat{H}u \rangle = \left\langle \sum_n c_n u_n, \sum_m c_m \underbrace{\hat{H}u_m}_{E_m u_m} \right\rangle = \sum_{n,m} c_n^* c_m E_m \underbrace{\langle u_n, u_m \rangle}_{\delta_{nm}} = \sum_n c_n^* c_n E_n \geq E_0 \sum_n |c_n|^2$$

$$\langle u, u \rangle = \left\langle \sum_n c_n u_n, \sum_m c_m u_m \right\rangle = \sum_{n,m} c_n^* c_m \delta_{n,m} = \sum_n |c_n|^2$$

$$\Rightarrow \frac{\langle u, \hat{H}u \rangle}{\langle u, u \rangle} \geq \frac{E_0 \sum_n |c_n|^2}{\sum_n |c_n|^2} = E_0$$

7 Quantenmechanischer Messprozess

Möchte man herausfinden, mit welcher Wahrscheinlichkeit an einem System ψ ein Eigenwert a_n der Observable \hat{A} gemessen werden kann, so muss der Zustand des Systems ψ in den Eigenfunktionen des Operators ϕ_n entwickelt werden (sofern diese ein vollständiges System $\{\phi_n\}$ bilden, was sie i.d.R. tun).

$$\psi = \sum_n \langle \phi_n, \psi \rangle \phi_n \quad (72)$$

mit $\hat{A}\phi_n = a_n\phi_n$.

Im Fall ohne Entartung ist die **Wahrscheinlichkeit den zu ϕ_n gehörigen Eigenwert a_n zu messen**

$$P_\psi(a_n) = |\langle \phi_n, \psi \rangle|^2 \quad (73)$$

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi = \sum_n a_n P_\psi(a_n) = \sum_n a_n |\langle \phi_n, \psi \rangle|^2 \quad (74)$$

Diese Formel kann man herleiten, indem man in $\langle \psi, \hat{A}\psi \rangle$ den entwickelten Zustand ψ einsetzt, die Eigenwertgl. $\hat{A}\phi_n = a_n\phi_n$ anwendet und dann einfach ausmultipliziert.

Für den entarteten Fall gilt

$$P_\psi(a_{n,i}) = \sum_i |\langle \phi_{n,i}, \psi \rangle|^2 \quad (75)$$

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi = \sum_n a_n \sum_i P_\psi(a_{n,i}) = \sum_n a_n \sum_i |\langle \phi_{n,i}, \psi \rangle|^2 \quad (76)$$

Der Kollaps der Wellenfunktion beschreibt das Phänomen, dass das System nach der Messung in den Zustand ϕ_n übergeht. Misst man also unmittelbar nach einer Messung erneut, kommt zu 100% derselbe Messwert heraus.

Beispiel

geg: $u(r) = f(r) (1 + \sin \theta \cos \varphi + \cos \theta)$

ges: $\langle \hat{L}^2 \rangle, \langle \hat{L}_3 \rangle, P(\vec{L}^2 = 0), P(\vec{L}^2 = 2\hbar^2), P(\vec{L}^2 = 6\hbar^2), P(L_3 = 0), P(L_3 = \pm\hbar), P(L_3 = \pm 2\hbar)$

Lös: Formuliere $u(r)$ in den Eigenfunktionen der zu messenden Observablen, also den Kugelflächenfunktionen Y_{lm} . Hier geht das durch "scharfes Hinsehen" bzw. Ausschreiben der Funktionen und Ersetzen der Terme in $u(r)$.

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{1,-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\varphi}, \quad Y_{1,1} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\varphi}$$

$$\begin{aligned}
1 &= \sqrt{4\pi} Y_{00} \\
\cos \theta &= \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{10} \\
\sin \theta \cos \varphi &= \sqrt{\frac{2\pi}{3}} (Y_{1,-1} - Y_{1,1}) \\
\Rightarrow u(r) &= f(r) \left(\sqrt{4\pi} Y_{00} + \sqrt{\frac{2\pi}{3}} (Y_{1,-1} - Y_{1,1}) + \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{10} \right) \\
1 &\stackrel{!}{=} \langle u, u \rangle = \int_0^\infty dr \, r^2 |f(r)|^2 \int_0^\pi \int_0^{2\pi} (\dots)^* (\dots) \sin \theta d\theta d\varphi =
\end{aligned}$$

Nutze die Orthonormalität der Kugelflächenfunktionen $\int \int Y_{l'm'} Y_{lm} \sin \theta \, d\theta d\varphi = \delta_{l'l'} \delta_{m'm'}$

$$\begin{aligned}
&= \int_0^\infty dr \, r^2 |f(r)|^2 \left(4\pi + \frac{2\pi}{3} + \frac{2\pi}{3} + \frac{4\pi}{3} \right) = \int_0^\infty dr \, r^2 |f(r)|^2 \cdot 4\pi \frac{5}{3} \\
&\Leftrightarrow \frac{3}{20\pi} = \int_0^\infty dr \, r^2 |f(r)|^2
\end{aligned}$$

Berechne nun die Erwartungswerte

$$\begin{aligned}
\langle \hat{\vec{L}}^2 \rangle &= \langle u, \hat{\vec{L}}^2 u \rangle \\
&= \int_0^\infty dr \, r^2 |f(r)|^2 \int_0^\pi \int_0^{2\pi} (\dots)^* \hat{\vec{L}}^2 \left(\sqrt{4\pi} Y_{00} + \sqrt{\frac{2\pi}{3}} (Y_{1,-1} - Y_{1,1}) + \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{10} \right) \sin \theta d\theta d\varphi \\
&= \frac{3}{20\pi} \cdot \left(4\pi \cdot \hbar^2 \cdot 0(0+1) + \frac{2\pi}{3} \cdot \hbar^2 \cdot 1(1+1) + \frac{2\pi}{3} \cdot \hbar^2 \cdot 1(1+1) + \frac{4\pi}{3} \cdot \hbar^2 \cdot 1(1+1) \right) = \frac{4}{5} \hbar^2 \\
\langle \hat{L}_3 \rangle &= \frac{3}{20\pi} \int \int (\dots)^* \hat{L}_3 \left(\sqrt{4\pi} Y_{00} + \sqrt{\frac{2\pi}{3}} (Y_{1,-1} - Y_{1,1}) + \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{10} \right) \sin \theta d\theta d\varphi \\
&= \frac{3}{20\pi} \left(4\pi \hbar \cdot 0 + \frac{2\pi}{3} \hbar (-1) + \frac{2\pi}{3} \hbar \cdot 1 + \frac{4\pi}{3} \hbar \cdot 0 \right) = 0
\end{aligned}$$

Die Wahrscheinlichkeiten ergeben sich zu

$$\begin{aligned}
P(\vec{L}^2 = 0) &= |\langle f(r) Y_{00}, u \rangle|^2 = \frac{3}{5} \\
P(\vec{L}^2 = 2\hbar^2) &= |\langle f(r) \cdot Y_{1,-1}, u \rangle|^2 + |\langle f(r) \cdot Y_{10}, u \rangle|^2 + |\langle f(r) \cdot Y_{11}, u \rangle|^2 = \frac{2}{5} \\
P(\vec{L}^2 = 6\hbar^2) &= 0 \\
P(L_3 = 0) &= |\langle f(r) \cdot Y_{00}, u \rangle|^2 + |\langle f(r) \cdot Y_{10}, u \rangle|^2 = \frac{3}{5} + \frac{1}{5} = \frac{4}{5} \\
P(L_3 = \pm \hbar) &= |\langle f(r) \cdot Y_{1,-1}, u \rangle|^2 + |\langle f(r) \cdot Y_{11}, u \rangle|^2 = \frac{1}{5} \\
P(L_3 = \pm 2\hbar) &= 0
\end{aligned}$$

”Herleitung”

Die Funktion $u(x)$ soll durch eine Linearkombination des Funktionensystems $\{\varphi_i\}$ genähert werden.

$$u(x) \approx \sum_i \alpha_i \varphi_i$$

Den bestmöglichen Koeffizienten α_i findet man über das kleinst mögliche Normquadrat

$$\begin{aligned} \Delta &= \left\| u - \sum_i \alpha_i \varphi_i(x) \right\|^2 = \left\langle u - \sum_i \alpha_i \varphi_i(x), u - \sum_i \alpha_i \varphi_i(x) \right\rangle = \\ &= \langle u, u \rangle - \sum_i \alpha_i^* \underbrace{\langle \varphi_i, u \rangle}_{=: c_i} - \sum_i \alpha_i \underbrace{\langle u, \varphi_i \rangle}_{=: c_i^*} + \sum_i \alpha_i \alpha_i^* = \\ &= \dots = \langle u, u \rangle + \sum_i |\alpha_i - c_i|^2 - \sum_i |c_i|^2 \end{aligned}$$

Somit ist der bestmögliche Koeffizient $\alpha_i = c_i$, denn er minimiert Δ . Da Δ eine Norm ist, muss sie ≥ 0 sein. Ein Funktionensystem ist **vollständig**, wenn für alle u Δ beliebig klein wird. Es gilt dann die Gleichheit.

$$\langle u, u \rangle \geq \sum_i |c_i|^2 \quad \xrightarrow{\Delta=0} \quad \langle u, u \rangle = \sum_i |c_i|^2$$

Setze nun das gefundene α_i in den Ansatz ein. Für ein vollständiges System $\{\varphi\}$ gilt die Gleichheit:

$$\begin{aligned} u(x) &= \oint_i c_i \varphi_i(x) = \oint_i \langle \varphi_i, u \rangle \varphi_i(x) = \oint_i \left(\int \varphi_i^*(y) u(y) dy \right) \varphi_i(x) = \\ &= \int u(y) \left(\oint_i \varphi_i^*(y) \varphi_i(x) \right) dy \\ &\Rightarrow \oint_i \varphi_i^*(y) \varphi_i(x) \stackrel{!}{=} \delta(x - y) \end{aligned}$$

.....
Sei $\psi(\vec{x}, t)$ eine beliebige WF und $u_n(x)$ ein vollständiges System von Eigenfunktionen.
Für den Fall von diskreten Energien ohne Entartung gilt $\langle u_n, u_m \rangle = \delta_{nm}$. Aus der Entwicklung der WF $\psi(\vec{x}, t) = \sum_n \langle u_n, \psi \rangle u_n$ folgt

$$1 \stackrel{!}{=} \langle \psi, \psi \rangle = \left\langle \sum_n \langle u_n, \psi \rangle u_n, \sum_m \langle u_m, \psi \rangle u_m \right\rangle = \sum_{n,m} \langle u_n, \psi \rangle^* \langle u_m, \psi \rangle \langle u_n, u_m \rangle = \sum_n |\langle u_n, \psi \rangle|^2 \equiv \sum_n P_\psi(E_n)$$

Interpretation: $P_\psi(E_n) = |\langle u_n, \psi \rangle|^2$ ist die Wahrscheinlichkeit beim Messen eines Systems im Zustand ψ den zu u_n gehörigen Eigenwert zu messen.

8 Drehimpulsalgebra

Für Operatoren \hat{M}_i , die die Kommutatorrelation

$$[\hat{M}_i, \hat{M}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{M}_k = i\hbar \sum_{k=0}^3 \varepsilon_{ijk} \hat{M}_k \quad (77)$$

erfüllen, gelten alle folgenden Eigenschaften. Insbesondere sind dies die Bahndrehimpulsoperatoren \hat{L}_i , $\hat{S}_i^{(1)}$ und $\hat{S}_i^{1/2}$ bestehend aus den Pauli-Matrizen σ_i .

Es gelten die Eigenwert-Gleichungen

$$\hat{M}^2 \varphi_{km} = \hbar^2 k(k+1) \varphi_{km} \quad (78)$$

$$\hat{M}_3 \varphi_{km} = \hbar m \varphi_{km} \quad (79)$$

wobei für k und m gilt

$$k = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots \quad (80)$$

$$m = -k, -k+1, \dots, k-1, k \quad (81)$$

Weitere nützliche Eigenschaften folgen aus der Definition der **Leiteroperatoren** $\hat{M}_{\pm} = \hat{M}_1 \pm \hat{M}_2$

$$[\hat{M}^2, \hat{M}_3] = 0$$

$$[\hat{M}_3, \hat{M}_{\pm}] = \pm \hbar \hat{M}_{\pm}$$

$$\hat{M}_+ \hat{M}_- = \hat{M}^2 - \hat{M}_3^2 + \hbar \hat{M}_3$$

$$\hat{M}_- \hat{M}_+ = \hat{M}^2 - \hat{M}_3^2 - \hbar \hat{M}_3$$

$$\hat{M}_+ \varphi_{km} = \hbar \sqrt{(k+m+1)(k-m)} \varphi_{k,m+1}$$

$$\hat{M}_- \varphi_{km} = \hbar \sqrt{(k-m+1)(k+m)} \varphi_{k,m-1}$$

Die **Eigenfunktionen** von \hat{L}^2 und \hat{L}_3 sind die **Kugelflächenfunktionen**

$$Y_{lm}(\varphi, \theta) = (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l+m)!}{4\pi(l-m)!}} P_l^{-m}(\cos \theta) \cdot e^{im\varphi} \quad (82)$$

$$\hat{L}^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm} \quad (83)$$

$$\hat{L}_3 Y_{lm} = \hbar m Y_{lm} \quad (84)$$

wobei für l und m gilt

$$l = 0, 1, 2, \dots \quad (85)$$

$$m = -l, (-l+1), \dots, (l-1), l \quad (86)$$

9 Matrizenmechanik

Für einen Operator \hat{A} sind die Matrixelemente in der Energiedarstellung definiert als

$$\hat{A}_{ik} = \langle u_i, \hat{A}u_k \rangle \quad (87)$$

$$A = \begin{pmatrix} \langle u_0, \hat{A}u_0 \rangle & \langle u_0, \hat{A}u_1 \rangle & \langle u_0, \hat{A}u_2 \rangle & \cdots \\ \langle u_1, \hat{A}u_0 \rangle & \langle u_1, \hat{A}u_1 \rangle & \langle u_1, \hat{A}u_2 \rangle & \cdots \\ \langle u_2, \hat{A}u_0 \rangle & \langle u_2, \hat{A}u_1 \rangle & \langle u_2, \hat{A}u_2 \rangle & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (88)$$

wobei u_i, u_k Energieeigenzustände sind.

Begriffe, die im Zusammenhang mit Matrizen fallen sind **hermitesch**, **antisymmetrisch** und **unitär**

$$A^\dagger \equiv (A^*)^T = A$$

$$A^T = -A$$

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

Beispiel

ges: \hat{S}_3, \hat{S}_- in der Basis $\{|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle, |\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle, |\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle, |\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle\}$

Lös: Verwende die Eigenwertgleichungen der darzustellenden Operatoren.

$$\begin{aligned} \hat{S}_3 |k, m\rangle &= \hbar m |k, m\rangle \\ \Rightarrow \langle \vec{e}_1, \hat{S}_3 \vec{e}_1 \rangle &= \left\langle \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \left| \hat{S}_3 \right| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle = \hbar \frac{3}{2} \cdot \left\langle \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle = \hbar \frac{3}{2} \\ \Rightarrow \langle \vec{e}_1, \hat{S}_3 \vec{e}_2 \rangle &= \left\langle \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \left| \hat{S}_3 \right| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \frac{1}{2} \cdot \left\langle \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = 0 \\ &\dots = \dots \\ \Rightarrow S_3 &= \hbar \begin{pmatrix} 3/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3/2 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{S}_- |k, m\rangle &= \hbar \sqrt{(k-m+1)(k+m)} |k, m-1\rangle \\ \Rightarrow \langle \vec{e}_1, \hat{S}_- \vec{e}_1 \rangle &= \left\langle \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \left| \hat{S}_- \right| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle = \hbar \sqrt{3} \cdot \left\langle \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = 0 \\ \Rightarrow \langle \vec{e}_2, \hat{S}_- \vec{e}_1 \rangle &= \left\langle \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \left| \hat{S}_- \right| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle = \hbar \sqrt{3} \cdot \left\langle \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \sqrt{3} \\ &\dots = \dots \\ \Rightarrow S_- &= \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

10 Dreidimensionale Probleme

10.1 Wasserstoffatom

Betrachte das Coulomb-Potential

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$$

Es ergeben sich die Energien und Zustände

$$E_n = -\frac{1}{2} m_e c^2 \alpha^2 \frac{Z^2}{n^2} \quad (89)$$

$$u_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) \cdot Y_{lm}(\theta, \varphi) = c_{nl} e^{-\kappa r} (\kappa r)^l L_{n-l-1}^{2l+1}(2\kappa r) \cdot Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (90)$$

mit $\kappa = \frac{-2mE}{\hbar^2}$.

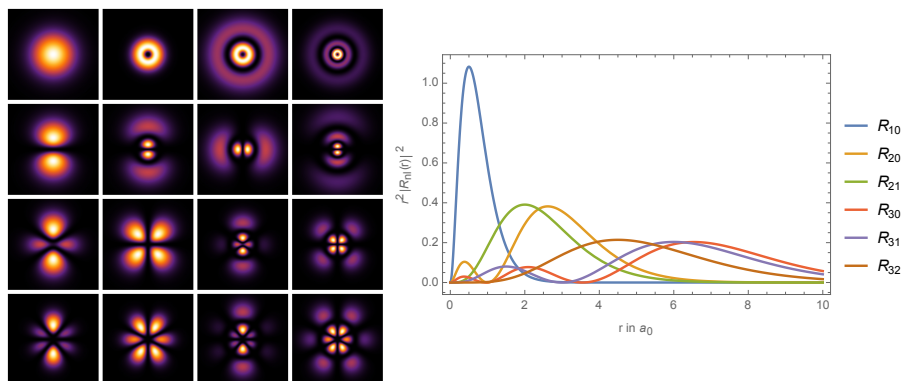


Abbildung 9: links: Querschnitte von Wasserstofforbitalen (zeilenweise s-, p-, d- und f-Orbitale); rechts: radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeit $R_{nl}(r)$

Tabelle 1: Übersicht Radial- und Kugelflächenfunktionen

n	l	$R_{nl}(r)$	l	m	$Y_{lm}(\theta, \varphi)$
1	0	$2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\frac{Z}{a_0} r}$	0	0	$\sqrt{\frac{1}{4\pi}}$
2	0	$2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left(1 - \frac{Z}{2a_0} r \right) e^{-\frac{Z}{2a_0} r}$	1	0	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$
	1	$\frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2a_0} \right)^{3/2} \frac{Z}{a_0} r \cdot e^{-\frac{Z}{2a_0} r}$		± 1	$\mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$
3	0	$2 \left(\frac{Z}{3a_0} \right)^{3/2} \left[1 - \frac{2Z}{3a_0} r + \frac{2}{27} \left(\frac{Z}{a_0} r \right)^2 \right] e^{-\frac{Z}{3a_0} r}$	2	0	$\sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$
	1	$\frac{4}{3} \sqrt{2} \left(\frac{Z}{3a_0} \right)^{3/2} \cdot \frac{Z}{3a_0} r \cdot \left(1 - \frac{Z}{6a_0} r \right) \cdot e^{-\frac{Z}{3a_0} r}$		± 1	$\pm \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi}$
	2	$\frac{2\sqrt{2}}{3\sqrt{5}} \cdot \left(\frac{Z}{3a_0} \right)^{3/2} \cdot \left(\frac{Z}{3a_0} r \right)^2 \cdot e^{-\frac{Z}{3a_0} r}$		± 2	$\pm \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi}$

Herleitung

Da das Coulomb-Potential ein Zentralpotential ist, kann der Ansatz $u = R_l(r) \cdot Y_{lm}(\theta, \varphi)$ gemacht werden und es reicht aus, die Radialgl. zu lösen, um R zu finden, da die Kugelflächenfunktionen bereits bekannt sind.

$$\chi''(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \chi(r) + \frac{2m}{\hbar^2} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \chi(r) + \frac{2m}{\hbar^2} E \chi(r) = 0$$

Vereinfache die DGL mittels Substitution $r = \frac{\rho}{\kappa}$.

Aus der Substitution folgt für die Ableitung $\frac{\partial}{\partial r} = \frac{\partial \rho}{\partial r} \frac{\partial}{\partial \rho} = \kappa \frac{\partial}{\partial \rho} \Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial r^2} = \kappa^2 \frac{\partial^2}{\partial \rho^2}$.

$$\begin{aligned} \Rightarrow \kappa^2 \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} \chi(\rho) - \frac{l(l+1)\kappa^2}{\rho^2} \chi(\rho) + \frac{2m}{\hbar^2} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\kappa}{\rho} \chi(\rho) + \frac{2mE}{\hbar^2} \chi(\rho) &= 0 \\ \Leftrightarrow \chi'' - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \chi + \frac{2m}{\hbar^2} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\kappa\rho} \chi + \frac{2mE}{\hbar^2} \frac{1}{\kappa^2} \chi &= 0 \end{aligned}$$

Wähle das $\kappa^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{2m|E|}{\hbar^2}$.

Fasse weiter Potentialterms zu einer Konstante zusammen, indem zunächst die Feinstrukturkonstante $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon\hbar}$ erkannt wird.

$$\frac{2m}{\hbar^2} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\kappa\rho} \stackrel{\kappa}{=} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\hbar}{\sqrt{2m|E|}} \frac{1}{\rho} = Z\alpha \sqrt{\frac{(2m)^{\frac{1}{2}}}{2m|E|}} \frac{1}{\rho} \equiv \frac{\rho_0}{\rho}$$

mit $\rho = \alpha \sqrt{\frac{2m}{|E|}} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} \sqrt{\frac{2m}{|E|}}$.

$$\chi'' - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \chi + \frac{\rho_0}{\rho} \chi - \chi = 0$$

Mache den Ansatz $\chi(\rho) = g(\rho)e^{-\rho}\rho^{l+1}$ (wird motiviert durch die Betrachtung der Radialgl. für Zentralpotentiale im Allgemeinen). Berechne die zweite Ableitung des Ansatzes.

$$\begin{aligned} \chi'(\rho) &= g'(\rho)e^{-\rho}\rho^{l+1} - g(\rho)e^{-\rho}\rho^{l+1} + g(\rho)e^{-\rho}(l+1)\rho^l \\ \chi''(\rho) &= [g''(\rho)e^{-\rho}\rho^{l+1} - g'(\rho)e^{-\rho}\rho^{l+1} + g'(\rho)e^{-\rho}(l+1)\rho^l] + \\ &\quad + [-g'(\rho)e^{-\rho}\rho^{l+1} + g(\rho)e^{-\rho}\rho^{l+1} - g(\rho)e^{-\rho}(l+1)\rho^l] + \\ &\quad + [g'(\rho)e^{-\rho}(l+1)\rho^l - g(\rho)e^{-\rho}(l+1)\rho^l + g(\rho)e^{-\rho}l(l+1)\rho^{l-1}] \\ &= g''(\rho)e^{-\rho}\rho^{l+1} - 2g'(\rho)e^{-\rho}\rho^{l+1} + 2(l+1)g'(\rho)e^{-\rho}\rho^l - 2(l+1)g(\rho)e^{-\rho}\rho^l \\ &\quad + g(\rho)e^{-\rho}\rho^{l+1} + g(\rho)e^{-\rho}\frac{l(l+1)}{\rho}\rho^l \end{aligned}$$

Einsetzen in die DGL ergibt eine "neue" DGL bzgl. $g(\rho)$

$$\begin{aligned}
& (...) - \frac{l(l+1)}{\rho^2} g(\rho) e^{-\rho} \rho^{l+1} + \frac{\rho_0}{\rho} g(\rho) e^{-\rho} \rho^{l+1} - g(\rho) e^{-\rho} \rho^{l+1} = 0 \\
& (...) - \frac{l(l+1)}{\rho} g(\rho) e^{-\rho} \rho^l + \rho_0 g(\rho) e^{-\rho} \rho^l - g(\rho) e^{-\rho} \rho^l = 0 \\
& \Leftrightarrow g''(\rho) e^{-\rho} \rho^{l+1} - 2g'(\rho) e^{-\rho} \rho^{l+1} + 2(l+1)g'(\rho) e^{-\rho} \rho^l - 2(l+1)g(\rho) e^{-\rho} \rho^l + \rho_0 g(\rho) e^{-\rho} \rho^l = 0 \\
& \Leftrightarrow g''(\rho) e^{-\rho} \rho^{l+1} + 2g'(\rho) e^{-\rho} \rho^l [(l+1) - \rho] + g(\rho) e^{-\rho} \rho^l [\rho_0 - 2(l+1)] = 0 \\
& \quad \quad \quad \stackrel{:e^{-\rho} \rho^l}{\Leftrightarrow} g''(\rho) \rho + 2g'(\rho) [l+1 - \rho] + g(\rho) [\rho_0 - 2(l+1)] = 0
\end{aligned}$$

Mache für $g(\rho)$ den Potenzreihenansatz und berechne dessen Ableitungen

$$\begin{aligned}
g(\rho) &= \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k \\
g'(\rho) &= \sum_{k=0}^{\infty} a_k k \rho^{k-1} \\
g''(\rho) &= \sum_{k=0}^{\infty} a_k k(k-1) \rho^{k-2}
\end{aligned}$$

Setze dies in die DGL ein und sammel die Terme bzgl. ρ^k und ρ^{k-1}

$$\begin{aligned}
& \rho \sum_{k=0}^{\infty} a_k k(k-1) \rho^{k-2} + 2(l+1-\rho) \sum_{k=0}^{\infty} a_k k \rho^{k-1} + [\rho_0 - 2(l+1)] \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k = 0 \\
& \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^{k-1} [k(k-1) + 2(l+1)k] + \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k [\rho_0 - 2(l+1) - 2k] = 0 \\
& \Rightarrow \sum_{k=-1}^{\infty} a_{k+1} \rho^k [(k+1)k + 2(l+1)(k+1)] + \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k [\rho_0 - 2(l+1+k)] = 0 \\
& \Rightarrow \sum_{k=0}^{\infty} a_{k+1} \rho^k [(k+1)k + 2(l+1)(k+1)] + 0 + \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k [\rho_0 - 2(l+1+k)] = 0 \\
& \Leftrightarrow \sum_{k=0}^{\infty} \rho_k \left\{ a_{k+1} (k+1)k + 2(l+1)(k+1) + a_k [\rho_0 - 2(l+1+k)] \right\} = 0 \\
& \Rightarrow a_{k+1} [(k+1)k + 2(l+1)(k+1)] + a_k [\rho_0 - 2(l+1+k)] \stackrel{!}{=} 0
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \Leftrightarrow a_{k+1} = \frac{2(l+1+k) - \rho_0}{(k+1)k + 2(l+1)(k+1)} a_k \\
& \Rightarrow \frac{a_{k+1}}{a_k} \propto \frac{2}{k}
\end{aligned}$$

Die Potenzreihe der Exponentialfunktion hat mit $\frac{b_{k+1}}{b_k} \propto \frac{1}{k}$ ein ähnliches Verhalten, womit $g(\rho)$ wie $\exp(\rho)$ für $\rho \rightarrow \infty$ divergieren würde. Da dies mit der Bedingung der Normierbarkeit unverträglich ist, muss die Potenzreihe von $g(\rho)$ für ein bestimmtes $k \equiv n_r$ abbrechen, d.h. der Zähler von a_{n_r+1} wird Null.

$$2(l+1+n_r) - \rho_0 \stackrel{!}{=} 0$$

$$\Leftrightarrow \rho_0 = 2(l+1+n_r) \stackrel{n:=k+1+n_r}{=} 2n$$

Energie

Die Energie ergibt sich über den Zusammenhang mit ρ_0

$$\rho_0 = Z\alpha\sqrt{\frac{2m}{|E|}} = 2n$$

$$\stackrel{()^2}{\Leftrightarrow} Z^2\alpha^2\frac{2m}{|E|} = 4n^2$$

$$\stackrel{|E|=-E}{\Leftrightarrow} E_n = -\frac{Z^2\alpha^2m}{2n^2}$$

Zustand

Die Rekursion der Potenzreihe von $g(\rho)$ wird durch die Laguerre-Polynome gelöst und es ergibt sich

$$R_n l(r) = c_{nl} e^{-\rho} \rho^l L_{n-l-1}^{l+1}(2\rho)$$

$$\Rightarrow u_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_n l(r) \cdot Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

$$= c_{nl} e^{-\rho} \rho^l L_{n-l-1}^{l+1}(2\rho) \cdot (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l+m)!}{4\pi(l-m)!}} P_l^{-m}(\cos\theta) \cdot e^{im\varphi}$$

10.2 3d harmonischer Oszillator

Betrachte das Potential

$$V(x, y, z) = \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2 + z^2) \quad (91)$$

Die Energien und Zustände sind

$$E_n = \hbar\omega \left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2} \right) \equiv \hbar\omega \left(n + \frac{3}{2} \right) \quad (92)$$

$$u_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z) = u_{n_x}(x) u_{n_y}(y) u_{n_z}(z) \quad (93)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{n_x! n_y! n_z! \cdot 2^n \cdot \pi^{3/4}}} \cdot H_{n_x}(x) H_{n_y}(y) H_{n_z}(z) \cdot e^{-(x^2 + y^2 + z^2)/2} \quad (94)$$

Jede Energie ist $\frac{(n+1)(n+2)}{2}$ -fach entartet.

Herleitung

Das zu lösende Eigenwertproblem ist

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) u + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2 + z^2)u &= Eu \\ \Leftrightarrow - \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) u + \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}(x^2 + y^2 + z^2)u &= \frac{2m}{\hbar^2} Eu \end{aligned}$$

Führe die folgende Substitution ein, um die DGL zu vereinfachen: $x = l\tilde{x} \Leftrightarrow \tilde{x} = \frac{x}{l}$ mit $l = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ und somit für die Ableitung $\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial \tilde{x}}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \tilde{x}} = \frac{1}{l} \frac{\partial}{\partial \tilde{x}} \Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{1}{l^2} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2}$.

Passe nach Einsetzen der Substitution sofort die Notation auf $\tilde{x} \rightarrow x$ an, um Schreibarbeit zu sparen.

$$\begin{aligned} \frac{1}{l^2} - \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) u + \underbrace{\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2} l^2}_{=1/l^4} (x^2 + y^2 + z^2)u &= \frac{2m}{\hbar^2} Eu \\ \Leftrightarrow - \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) u + (x^2 + y^2 + z^2)u &= \frac{2E}{\hbar\omega} u \equiv \varepsilon u \end{aligned}$$

Erkenne die drei separaten Hamilton-Operatoren des 1d harmonischen Oszillators und mache daher den Ansatz $u(x, y, z) = u_x(x) \cdot u_y(y) \cdot u_z(z)$.

$$\begin{aligned} (\hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z) u_x u_y u_z &= E u_x u_y u_z \\ u_y u_z \hat{H}_x u_x + u_x u_z \hat{H}_y u_y + u_x u_y \hat{H}_z u_z &= E u_x u_y u_z \\ u_y u_z \hbar\omega \left(n_x + \frac{1}{2} \right) u_x + u_x u_z \hbar\omega \left(n_y + \frac{1}{2} \right) u_y + u_x u_y \hbar\omega \left(n_z + \frac{1}{2} \right) u_z &= E u_x u_y u_z \\ \Leftrightarrow \hbar\omega \left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2} \right) &\equiv \hbar\omega \left(n + \frac{3}{2} \right) = E \end{aligned}$$

Der Zustand ist einfach das Produkt der 3 1d HO Eigenfunktionen, wobei darauf geachtet werden muss, für $n = n_{x,y,z}$ einzusetzen.

11 Bewegung im elektromagnetischen Feld und Spin

Die Bewegung eines Atoms im elektromagnetischen Feld wird durch Anpassen der Schrödinger-Gl. mittels minimaler Substitution $\hat{p} \rightarrow \hat{p} - q\vec{A}$ und Einsetzen des elektrischen Potentials $V = q\varphi$ beschrieben

$$i\hbar\partial_t\psi = \frac{1}{2m} \left(-\hbar^2\Delta + i\hbar q\vec{\nabla}\vec{A} + 2i\hbar q\vec{A}\vec{\nabla} + q^2\vec{A}^2 \right) \psi + q\varphi\psi \quad (95)$$

11.1 Normaler Zeeman-Effekt

Beim normalen Zeeman-Effekt befindet sich ein spinfreies Atom in einem schwachen, homogenen B-Feld. Schrödinger-Gl. und Energien sind dann

$$i\hbar\partial_t\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + \omega_L\hat{L}_3\psi - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r}\psi \quad (96)$$

$$E_{n,m} = E_n + \hbar\omega_L m \quad (97)$$

Herleitung

Für das homogene B-Feld kann das Vektorpotential $\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{B}\times\vec{x}$ verwendet werden. Die Komponenten von \vec{B} sind dabei Konstanten.

Berechne die Komponenten der Schrödinger-Gl. einzeln

- $\vec{\nabla}\vec{A} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \\ \partial_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_y z - B_z y \\ B_z x - B_x z \\ B_x y - B_y x \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (0 + 0 + 0) = 0$
- $\vec{A}\vec{\nabla} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} B_y z - B_z y \\ B_z x - B_x z \\ B_x y - B_y x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \\ \partial_z \end{pmatrix} = \frac{1}{2} [B_x(y\partial_z - z\partial_y) + B_y(z\partial_x - x\partial_z) + B_z(x\partial_y - y\partial_x)] = \frac{1}{2} \frac{i}{\hbar} \vec{B}\hat{L}$
- $\vec{A}^2 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} B_y z - B_z y \\ B_z x - B_x z \\ B_x y - B_y x \end{pmatrix}^2 = \dots = \frac{1}{4} [(\vec{B}^2\vec{x}^2) - (\vec{B}\vec{x})^2]$

Einsetzen in die Schrödinger-Gl. für die Bewegung im em. Feld unter Vernachlässigung des \vec{A}^2 Terms, ergibt

$$i\hbar\partial_t\psi = \frac{1}{2m} \left(-\hbar^2\Delta + 0 - q\vec{B}\hat{L} + 0 \right) \psi + q\varphi\psi$$

$$i\hbar\partial_t\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi - \frac{q}{2m}\vec{B}\hat{L}\psi + q\varphi\psi$$

Dabei kann $\hat{m} = \frac{q}{2m}\hat{L}$ als magnetisches Moment interpretiert werden.

Betrachtet man nun ein Elektron in einem B-Feld, das in z-Richtung zeigt, folgt

$$i\hbar\partial_t\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + \frac{e}{2m}B_0\hat{L}_3\psi - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r}\psi$$

wobei der Vorfaktor von \hat{L}_3 zur Larmor-Frequenz $\omega_L = \frac{eB_0}{2m}$ zusammengefasst wird.

Die möglichen Energien $E_{n,m}$ ergeben sich aus den bekannten Eigenwerten des \hat{L}_3 - und Wasserstoff-Hamilton-Operators. Ansatz ist daher $\psi = R_{nl}Y_{lm}$.

11.2 Pauli-Gleichung

Die Pauli-Gleichung beschreibt die Bewegung eines Elektrons im elektromagnetischen Feld unter Berücksichtigung seines Spins. Im Vgl. zur einfachen Bewegung im em. Feld besteht die Wellenfunktion zusätzlich zur Orts- noch aus einer Spin-Wellenfunktion. Da der Spin eines Elektrons wie der Bahndrehimpuls ein magnetisches Moment $\vec{m}_S = -g\mu_B \frac{\hat{S}}{\hbar}$ erzeugt, kommt ein Energieterm analog des Bahndrehimpulsterms hinzu.

$$i\hbar\partial_t \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} + e\vec{A} \right)^2 \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix} - e\varphi \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix} + g \frac{e\hbar}{4m_e} \vec{B} \vec{\sigma} \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix} \quad (98)$$

mit den Pauli-Matrizen $\vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{pmatrix} = \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right]^T$

11.2.1 Spinpräzession im konstanten Magnetfeld

Beschreibt man ein ortsfestes Elektron im Magnetfeld $\vec{B} = B_0 e_z$, so reduziert sich die Pauli-Gl. auf

$$i\hbar\partial_t \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix} = g \frac{e\hbar}{4m_e} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix} \quad (99)$$

Da ortsfest, wird $\hat{p} - q\vec{A}$ Null und da ausschließlich ein B-Feld herrscht, ist φ ebenso Null.

Die Untersuchung der Erwartungswerte von $\hat{S}_{1,2,3}$ zeigt, dass der Spin mit der Zyklotronfrequenz

$$\omega_C = 2\omega_L = \frac{eB_0}{m_e} \quad (100)$$

11.2.2 Magnetresonanz

Beschreibt man ein ortsfestes Elektron im wechselnden Magnetfeld $\vec{B} = B_0 \vec{e}_z + \tilde{B} \cdot (\cos(\tilde{\omega}t), \sin(\tilde{\omega}t), 0)^T$, so ergibt sich die Pauli-Gleichung zu

$$i\hbar\partial_t \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix} = g \frac{e\hbar}{4m_e} \begin{pmatrix} B_0 & \tilde{B} \cdot e^{-i\tilde{\omega}t} \\ \tilde{B} \cdot e^{i\tilde{\omega}t} & -B_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix} \quad (101)$$

Entkoppeln der Gleichungen und Nutzen der Anfangsbedingung $\psi_-(t=0) = 0$ ergibt die oszillierende Wahrscheinlichkeit für ein Teilchen mit $m_s = -1/2$

$$|\psi_-(t)|^2 = \left(\frac{ge}{4m_e} \right)^2 \frac{\tilde{B}^2}{\Omega^2} \sin^2(\Omega t) \quad (102)$$

wobei die Oszillationsfrequenz Ω die Rabi-Frequenz ist.

Für geeignete Wahl der Frequenz des wechselnden Magnetfelds $\tilde{\omega}$ oszilliert die Wahrscheinlichkeit bis 100% hoch.

12 Addition von Drehimpulsen

Darstellung des Zustands $|j_1, m_1, j_2, m_2\rangle \equiv |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle$ in der Basis $|j_1, j_2, j, m\rangle_j \equiv |j, m\rangle$.

Die erlaubten j -Werte (Quantenzahl des Gesamtdrehimpuls \hat{J}) und m -Werte (Quantenzahl der Gesamtdrehimpuls-Projektion \hat{J}_3) sind

$$j = |j_1 - j_2|, |j_1 - j_2 + 1|, \dots, |j_1 + j_2| \quad (103)$$

$$m = -j, -j + 1, \dots, j - 1, j \quad (104)$$

Der Basiswechsel zwischen $|j, m\rangle$ und $|j_1, m_1, j_2, m_2\rangle$ wird über die Clebsch-Gordan-Koeffizienten $c_{j_1, m_1, j_2, m_2}^{j, m}$ beschrieben und kann leicht aus der folgenden Grafik abgelesen werden.

$$|j, m\rangle = \sum_{m_1, m_2} \underbrace{\langle j_1, m_1, j_2, m_2 | j, m \rangle}_{=: c_{j_1, m_1, j_2, m_2}^{j, m}} |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle \quad (105)$$

12.1 Anwendung Clebsch-Gordan-Tabelle

Tabelle 2: Anleitung Drehimpulsaddition mittels Clebsch-Gordan-Tabelle

$ j_1, m_1\rangle \otimes j_2, m_2\rangle \rightarrow j, m\rangle$ Seien j_1, m_1, j_2, m_2 bekannt.	$ j, m\rangle \rightarrow j_1, m_1\rangle \otimes j_2, m_2\rangle$ Seien j, m, j_1, j_2 bekannt.
<ol style="list-style-type: none"> 1. Betrachte die Tabelle mit $j_1 \times j_2$ 2. Finde die passende m_1, m_2 Zeile in den weißen Feldern <u>links</u> der grauen Felder 3. Gehe der Zeile entlang ins graue Feld <u>rechts daneben</u> und notiere den Koeffizienten mit Wurzel (falls Minus: Minus vor Wurzel) 4. Gehe nach <u>oben</u> ins weiße Feld und notiere $j, m\rangle$ 5. Falls weitere Koeffizienten <u>rechts</u> neben dem von gerade eben liegen, wiederhole Schritt 3 und 4 und addiere die Ergebnisse. 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Betrachte die Tabelle mit $j_1 \times j_2$ 2. Finde die passende j, m Spalte in den weißen Feldern <u>oberhalb</u> der grauen Felder 3. Gehe entlang der Spalte ins graue Feld <u>darunter</u> und notiere den Koeffizienten mit Wurzel (falls Minus: Minus vor Wurzel) 4. Gehe nach <u>links</u> ins weiße Feld und notiere $j_1, \mathbf{m}_1\rangle \otimes j_2, \mathbf{m}_2\rangle$ 5. Falls weitere Koeffizienten <u>unter</u> dem von gerade eben liegen, wiederhole Schritt 3 und 4 und addiere die Ergebnisse.
$ 1, 0\rangle \otimes \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, 0\rangle_j = \sqrt{\frac{1}{2}} \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \otimes \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{1}{2}} \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \otimes \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$

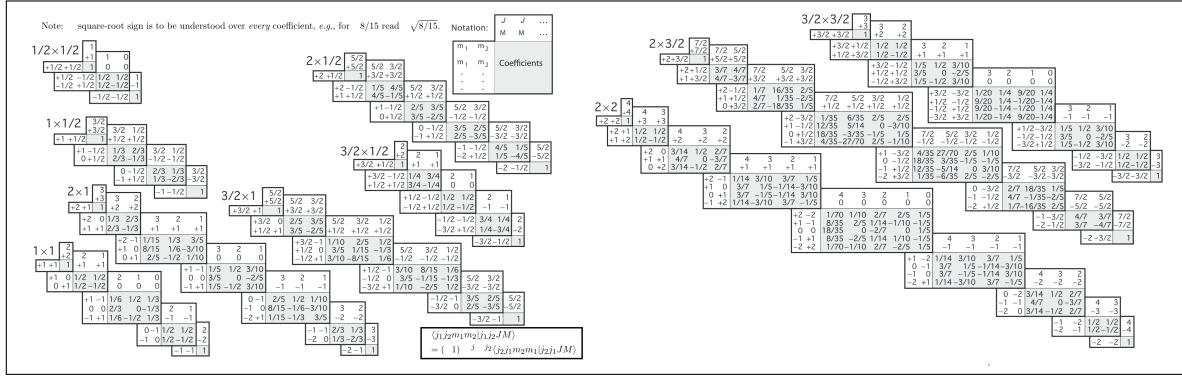


Abbildung 10: Clebsch-Gordan-Koeffizienten

Herleitung

Die Zustände werden konstruiert, indem vom Zustand mit höchstem $m = j$ begonnen wird $|j, j\rangle$, da für ihn die Darstellung in beiden Basen eindeutig ist. Dann wird mit dem Leiteroperator \hat{J}_- in der jeweiligen Basis auf ihn gewirkt und die Ergebnisse gleichgesetzt. **Alt.: beginnend bei $|j, -j\rangle$ mit \hat{J}_+** Am Beispiel der Kopplung von $j_1 = \frac{1}{2}$, $j_2 = \frac{1}{2}$ zu $j = 1$:

Gesamtdrehimpulsbasis $ j_1, j_2, j, m\rangle_j \equiv j, m\rangle$	Produktbasis $ j_1, m_1\rangle \otimes j_2, m_2\rangle$
$ 1, 1\rangle = \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \otimes \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	
$\hat{J}_- 1, 1\rangle = \sqrt{(1-1+1)(1+1)} 1, 0\rangle$ $= \sqrt{2} 1, 0\rangle$	$\hat{J}_- \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \otimes \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle =$ $= (\hat{J}_- \otimes 1 + 1 \otimes \hat{J}_-) \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \otimes \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle =$ $= \hat{J}_- \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \otimes \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \otimes \hat{J}_- \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle =$ $= \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \otimes \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \otimes \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$
$\Leftrightarrow 1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \otimes \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \otimes \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \right)$	
$\hat{J}_- 1, 0\rangle = \sqrt{(1-0+1)(1+0)} 1, -1\rangle$ $= \sqrt{2} 1, -1\rangle$	$\hat{J}_- \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \otimes \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \otimes \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \right) =$ $= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{J}_- \otimes 1 + 1 \otimes \hat{J}_-) (...) = ... =$ $= \frac{2}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \otimes \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \right)$
$\Leftrightarrow 1, -1\rangle = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \otimes \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	

13 Struktur der Quantenmechanik

Abgesehen von Orts- und Impusldarstellung gibt es einen mathematisch allgemeinere Struktur. Die Wellenfunktionen sind nämlich abstrakte Zustände des Zustandsraums.

Dieser Zustandsraum muss ein **Hilbert-Raum** sein, ein solcher Raum ist

- **linear**

Da auch Superpositionen von Lösungen Lösungen der Schrödinge-Gleichung sind, fordert man einen linearen Raum.

- **unitär**

Da in der Quantenmechanik das Skalarprodukt von Bedeutung ist und das Skalarprodukt eine Norm definieren kann, muss der Raum eine Norm besitzen, d.h. normiert sein. Ein normierter Vektorraum über dem Körper der komplexen Zahlen ist dann unitär.

- **vollständig**

Da Zustände als Folgen ψ_n dargestellt werden können und deren Grenzwerte im Grenzwfall $n \rightarrow \infty$ auch im Raum liegen sollen, muss der Raum vollständig sein. Vollständig heißt dabei, dass jede Cauchy-Folge ihren Grenzwert im Raum hat.

- **separabel**

Damit eine Basis (= vollständiges Funktionensystem) existiert, in der jede Funktion in dem Zustandsraum dargestellt werden kann, muss der Raum separabel sein.

13.1 Dirac-Notation

Die Notation der Eigenwert-Gl. in Dirac-Notation ist

$$\hat{A} |a_i\rangle = a_i |a_i\rangle \quad (106)$$

Bilden die diskreten (kontinuierlichen) Eigenzustände ein vollständiges System, so kann die Vollständigkeitsrelation geschrieben werden als

$$\mathbb{1} = \sum_i |a_i\rangle \langle a_i| \quad (107)$$

$$\mathbb{1} = \int da |a\rangle \langle a| \quad (108)$$

Die Schrödinger-Gleichung in Dirac-Notation ist

$$i\hbar \partial_t |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle \quad (109)$$

13.2 Zeitentwicklung in der Quantenmechanik

Die Zeitentwicklung wird durch den unitären Zeitentwicklungsoperator $U(t, t_0)$ beschrieben

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad (110)$$

Die Lösung des Zeitentwicklungsoperators erhält man, in dem man die Schrödinger-Gl. integriert. Dabei gibt es zwei Fälle, den Fall des zeitunabhängigen und des zeitabhängigen Hamilton-Operators

Fall 1) Zeitunabhängiger Hamilton-Operator \hat{H}

Die Schrödinger-Gl. mit $|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$ wird gelöst durch

$$U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} \quad (111)$$

Fall 2) Zeitabhängiger Hamilton-Operator $\hat{H}(t)$

Die Schrödinger-Gl. mit $|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$ wird gelöst durch die Dyson-Reihe, die auch mit dem Zeitordnungsoperator \hat{T} ausgedrückt werden kann.

$$U(t, t_0) = \mathbb{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{H}(t_1) \cdot \dots \cdot \hat{H}(t_n) \quad (112)$$

$$= \hat{T} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}(t')\right) \quad (113)$$

Herleitung

In diesem Fall muss die Schrödinger-Gl. auf beiden Seiten über die Zeit integriert werden. t_1 spielt dabei die Rolle von t' , ist also nur eine Umschreibung, weil t eine Integrationsgrenze ist.

$$\int_{t_0}^t dt_1 \partial_{t_1} U(t_1, t_0) = U(t, t_0) - \underbrace{U(t_0, t_0)}_{\mathbb{1}} = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \hat{H}(t_1) U(t_1, t_0)$$

$$\Leftrightarrow U(t, t_0) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \hat{H}(t_1) U(t_1, t_0)$$

Setzt man für $U(t_1, t_0)$ im Integral die Formel für $U(t, t_0)$ mit $t \rightarrow t_1$ ein (und $t_1 \rightarrow t_2$ wegen der Integrationsgrenze), ergibt sich

$$\begin{aligned} \Rightarrow U(t, t_0) &= \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \hat{H}(t_1) \left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \hat{H}(t_2) U(t_2, t_0) \right) = \\ &= \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \hat{H}(t_1) - \mathbb{1} - \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \hat{H}(t_1) \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \hat{H}(t_2) U(t_2, t_0) \end{aligned}$$

n -faches Wiederholen führt auf die Dyson-Reihe.

13.3 Bilder

Die Bilder sind Formalismen, die aus einem bekannten Anfangszustand $|\psi(t_0)\rangle$ die Information des Systems (z.B. Erwartungswert, Aufenthaltswahrscheinlichkeit) zu einem späteren Zeitpunkt t entwickeln.

- **Schrödinger-Bild**

Im Schrödinger-Bild entwickelt man den Anfangszustand $|\psi(t_0)\rangle$ mit dem Zeitentwicklungsoperator (Dyson-Reihe), während der Operator unverändert bleibt.

$$\hat{A}_S = \hat{A} \quad (114)$$

$$|\psi_S(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad (115)$$

$$\Rightarrow \langle \hat{A} \rangle = \langle \psi_S(t) | \hat{A}_S | \psi_S(t) \rangle = \langle \psi(t_0) | U^\dagger(t, t_0) \hat{A} U(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle$$

- **Heisenberg-Bild**

Im Heisenberg-Bild verwendet man einen zeitabhängigen Operator und lässt den Zustand unverändert.

$$|\psi_H(t)\rangle = |\psi(t_0)\rangle \quad (116)$$

$$\hat{A}_H = U^\dagger(t, t_0) \hat{A} U(t, t_0) \quad (117)$$

$$\Rightarrow \langle \hat{A} \rangle = \langle \psi_H(t) | \hat{A}_H | \psi_H(t) \rangle = \langle \psi(t_0) | U^\dagger(t, t_0) \hat{A} U(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle$$

Der Operator im Heisenberg-Bild \hat{A}_H kann auch gefunden werden, indem die Heisenberg-Gleichung gelöst wird. Sie entspricht der Schrödinger-Gleichung im Heisenberg-Bild.

$$\frac{d}{dt} \hat{A}_H = \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}_H, \hat{H}_H] + (\partial_t \hat{A})_H \quad (118)$$

- **Wechselwirkungsbild / Dirac-Bild**

Im Dirac-Bild teilt man den Hamilton-Operator in einen ungestörten und einen störenden Operator auf $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$. Man entwickelt den Anfangszustand $|\psi(t_0)\rangle$ mit dem Zeitentwicklungsoperator, der den Stör-Hamilton-Operator \hat{H}' trägt, und transformiert den Operator mit dem Zeitentwicklungsoperator, der den ungestörten Hamilton-Operator \hat{H}_0 trägt.

$$|\psi_I(t)\rangle = U'(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}'(t-t_0)} |\psi(t_0)\rangle \quad (119)$$

$$\hat{A}_I(t) = U_0^\dagger(t, t_0) \hat{A} U_0(t, t_0) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0(t-t_0)} \hat{A} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0(t-t_0)} \quad (120)$$

$$\Rightarrow \langle \hat{A} \rangle = \langle \psi_I(t) | \hat{A}_I | \psi_I(t) \rangle = \langle \psi(t_0) | U^\dagger(t, t_0) \hat{A} U(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle$$

Der Operator im Dirac-Bild $\hat{A}_I(t)$ kann auch gefunden werden, indem die angepasste Heisenberg-Gleichung ($\hat{A}_H \rightarrow \hat{A}_I$, $\hat{H}_H \rightarrow \hat{H}_0$) gelöst wird. Sie entspricht der Schrödinger-Gleichung im Dirac-Bild.

$$\frac{d}{dt} \hat{A}_I = \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}_I, \hat{H}_0] + (\partial_t \hat{A})_I \quad (121)$$

14 Dichtematrix

Die Dichtematrix beschreibt die quantenmechanische gepaart mit der statistischen Unsicherheit eines Ensembles. Aus ihr lassen sich Erwartungswert und Wahrscheinlichkeiten für reine und, entscheidend, gemischten Zuständen bestimmen.

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi = \text{Spur}(\hat{\rho} \hat{A}) \quad (122)$$

$$P_\psi(i) = |\langle i | \psi \rangle|^2 = \langle i | \hat{\rho} | i \rangle \quad (123)$$

$$1 = \text{Spur}(\hat{\rho}) \quad (124)$$

wobei die letzte Gl. für alle Dichtematrizen gilt.

Bei gegebener Dichtematrix, kann man an ihrem Quadrat ablesen, um welchen Zustand es sich handelt

$$\hat{\rho}^2 \begin{cases} = \hat{\rho}, & \text{reiner Zustand} \\ \neq \hat{\rho}, & \text{gemischter Zustand} \end{cases} \quad (125)$$

- **Reine Zustände**

Ein Ensemble, das sich in einem reinen Zustand befindet, besteht aus identisch präparierten Systemen.

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle \langle \psi| \quad (126)$$

- **Gemischte Zustände**

Ein Ensemble, das sich in einem gemischten Zustand befindet, besteht aus verschiedenen Systemen $|\psi_i\rangle$, die mit der Wahrscheinlichkeit $P(\psi_i)$ auftreten.

$$\hat{\rho} = \sum_i P(\psi_i) |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \quad (127)$$

15 Drehungen und Translationen

Um dieselbe Wellenfunktion aus einem anderen Bezugssystem zu beschreiben, muss sie entsprechend translatiert und rotiert werden.

Translation und Rotation im Ortsraum, sowie Rotation im Spinraum werden beschrieben durch

$$|\psi'\rangle = e^{\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \hat{\vec{p}}} |\psi\rangle \approx \left(1 + \frac{i}{\hbar} \cdot \delta \vec{a} \cdot \hat{\vec{p}} \right) |\psi\rangle \quad (128)$$

$$|\psi'\rangle = e^{\frac{i}{\hbar} \vec{\alpha} \cdot \hat{\vec{L}}} |\psi\rangle \approx \left(1 + \frac{i}{\hbar} \cdot \delta \vec{\alpha} \cdot \hat{\vec{L}} \right) |\psi\rangle \quad (129)$$

$$|\chi'\rangle = e^{\frac{i}{\hbar} \vec{\alpha} \cdot \hat{\vec{S}}} |\chi\rangle \approx \left(1 + \frac{i}{\hbar} \cdot \delta \vec{\alpha} \cdot \hat{\vec{S}} \right) |\chi\rangle \quad (130)$$

wobei die Näherung für infinitesimale Transformationen, also kleine Drehwinkel $\delta \alpha$ bzw. Translationen $\delta \vec{a}$ gilt. \vec{n} ist die Dreh- bzw. Translationsachse.

Je nach Typ der Spinwellenfunktion muss ein anderer Spin-Operator gewählt werden. So wird ein Spinor (Spin-1/2-Teilchen) durch $\hat{S}^{(1/2)}$ transformiert, ein Vektor (Spin-1-Teilchen) jedoch durch $\hat{S}^{(1)}$, usw.

16 Anhang

Differentialgleichungen

$$u''(x) + \kappa^2 u = 0 \quad \Rightarrow u(x) = Ae^{i\kappa x} + Be^{-i\kappa x}$$

Rechnen mit \pm

Betrachte beiden Fälle zunächst separat. Halte für den oberen Fall das untere Zeichen zu und rechne ganz normal. Analog für den unteren. Führe dann beide Rechnungen zusammen, indem die Vorzeichen wieder übereinander geschrieben werden.

$$-(\pm a) = \begin{cases} -(+a) = -a \\ -(-a) = +a \end{cases} = \mp a$$

Levi-Civita-Symbol

$$\varepsilon_{123} = \begin{cases} 1, & \text{zyklische Permutation (123), (231), (312)} \\ -1, & \text{antizyklische Permutation (321), (213), (132)} \\ 0, & \text{doppelte Indizes } i=j \vee j=k \vee k=i \end{cases} \quad (131)$$

Die Vertauschungsregeln der Indizes sind

- **Vertauschen zweier Indizes**

Vertauscht man zwei beliebige Indizes, so wird mit -1 multipliziert, z.B.

$$\varepsilon_{ijk} = -\varepsilon_{jik} \quad (132)$$

- **Zyklische Permutationen**

Bei einer zyklischen Vertauschung, d.h. einer Bewegung der Indizes nach rechts, bleibt das Symbol unverändert

$$\varepsilon_{ijk} = \varepsilon_{kij} = \varepsilon_{jki} \quad (133)$$

Die i-te Komponente des Kreuzprodukts (z.B. ÜB12 A2) kann ausgedrückt werden über

$$(\vec{a} \times \vec{b})_i = \sum_{j,k=1}^3 \varepsilon_{ijk} a_j b_k \quad (134)$$

Das Produkt zweier Levi-Civita-Symbole lässt sich durch Kronecker-Deltas ausdrücken

$$\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{imn} = \delta_{jm} \delta_{kn} - \delta_{jn} \delta_{km} \quad (135)$$

Matrixmultiplikation & Geometrische Reihe

$$c_{ij} = \sum_k a_{ik} b_{kj}$$
$$\sum_{k=0}^{\infty} q^k = \frac{1}{1-q}$$

17 Stichwortverzeichnis

Begriff	Erklärung
P-Transformation	<p>Raumspiegelung am Ursprung</p> $\hat{P}\vec{x} = -\vec{x}, \quad (\hat{P}f)(\vec{x}) = f(-\vec{x})$
adjungierter Operator	<p>Der adjungierte Operator \hat{O}^\dagger des Operators \hat{O} ist definiert über das Skalarprodukt</p> $\langle \hat{O}^\dagger \phi, \psi \rangle = \langle \phi, \hat{O} \psi \rangle$
anomaler Zeeman-Effekt	Beschreibt die Aufspaltung von Spektrallinien eines Atoms in einem externen Magnetfeld durch die Kopplung von Bahndrehimpuls und Elektronenspin.
Anzahloperator	<p>Operator, der über seine Eigenwert-Gleichung</p> $\hat{N}u_n = nu_n$ <p>die Anregungen n des harm. Osz. zählt. Er ist über den Erzeugungs- und Vernichtungsoperator \hat{a}^\dagger, \hat{a} definiert</p> $\hat{N} := \hat{a}^\dagger \hat{a}$
Auswahlregeln	Bestimmen, welche Übergänge zwischen den Energieniveaus eines Atoms durch Emission oder Absorption eines Photons möglich sind
Avogadro-Konstante	Teilchenzahl in einem Mol, $N_A = 6,022 \cdot 10^{23}$.
Beta-Funktion	$B(x, y) = \int_0^1 dt \, t^{x-1} (1-t)^{y-1} = \frac{\Gamma(x)\Gamma(y)}{\Gamma(x+y)}$ <p>Taucht in der Herleitung der EF von \hat{L}^2, \hat{L}_3 auf</p>
Bohr-Radius	<p>Abstand zwischen Kern und Elektronenbahn des Grundzustands im Bohr-Modell</p> $a_0 \approx 0,5 \text{ \AA} = 0,5 \cdot 10^{-10} \text{ m}$

Bohr'sches Atommodell	<p>Atommodell, das postuliert, dass</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Elektronen nur diskrete (stationäre) Energieniveaus annehmen können, die keine Energie abstrahlen $E_n = -\frac{Rhc}{n^2}$ 2. Emission/Absorption von Strahlung durch einen Wechsel der Energieniveaus geschieht $h\nu = E_n - E_m$ 3. Stationäre Zustände durch kl. Gesetze beschrieben werden können (Zentrifugal-, Coulomb-Kraft \Rightarrow Bahnradius)
Boltzmann-Faktor	<p>Wahrscheinlichkeit, dass ein Teilchen eines statistischen System im thermodyn. GGW bei Temperatur T die Energie E trägt. Er taucht bei Plancks Behandlung der Schwarzkörperstrahlung auf, um die mittlere Energie einer Mode zu beschreiben.</p> $\exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right)$
Boltzmann-Konstante	Beschreibt die Beziehung zwischen Energie und Temperatur statistischer Systeme, $k_B = 1,38 \cdot 10^{-23} \frac{\text{J}}{\text{K}}$.
Bra-Vektor	Element $\langle \varphi $ des zum Hilbert-Raum gehörenden Dualraums
Cauchy-Folge	<p>Folge ψ_n, für die für alle $\varepsilon > 0$ ein Index N gefunden werden kann, s.d. der Abstand zwischen zwei nach dem N liegenden Folgengliedern kleiner als ε ist</p> $\forall \varepsilon > 0 \exists N \text{ s.d. } \forall n_1, n_2 > N : \ \psi_{n_1} - \psi_{n_2}\ < \varepsilon$
Clebsch-Gordan-Koeffizienten	Entwicklungskoeffizienten, die den Basiswechsel zwischen Produktbasis $ j_1, m_1, j_2, m_2\rangle$ und Eigenbasis $ j, m\rangle$ beschreiben
Compton-Streuung	Streuung eines Photons an einem Teilchen, wodurch Ersteres seine Frequenz verringert, also Teilcheneigenschaften zeigt.

Compton-Wellenlänge	<p>Faktor λ_c, der bei der Änderung der Wellenlänge $\Delta\lambda$ des streuenden Photons auftaucht, die daher wellenlängenunabhängig ist.</p> $\Delta\lambda = \lambda(\theta) - \lambda_0 = 2\frac{h}{m_e c} \sin^2(\theta/2) \equiv 2\lambda_c \sin^2(\theta/2)$
Darstellung einer Gruppe	<p>Abbildung D, die die Gruppenelementen $g \in G$ auf $D(g)$ (Matrizen) abbildet, s.d.</p> $D(g_1) \cdot D(g_2) = D(g_1 \cdot g_2)$ <p>für zwei Gruppenelemente g_1, g_2 gilt.</p>
dicht(e Menge)	<p>Eine Menge M ist dicht in einem Raum, wenn für jedes Element des Raums ein beliebig nahes Element aus der Menge M existiert. Ist für die Separabilität des Hilbert-Raums Voraussetzung.</p> <p>Bsp: \mathbb{Q} ist dicht in \mathbb{R}. Für jede Umgebung um die irrationale Zahl $\pi \in \mathbb{R}$, kann eine rationale Zahl $\epsilon \in \mathbb{Q}$ gefunden werden, die in der Umgebung liegt, z.B. $3,14 \in [\pi - 0,1, \pi + 0,1]$.</p>
Dichtematrix	<p>Matrix (bzw. Operator), die den Zustand eines Ensembles von physikalischen Systemen beschreibt. Aus ihr lässt sich der Erwartungswert einer Messung bzgl. einer Observablen an diesem Ensemble bestimmen. Für reine bzw. gemischte Zustände hat sie die Form</p> $\hat{\rho} = \psi\rangle\langle\psi $ $\hat{\rho} = \sum_i P(\psi_i) \psi_i\rangle\langle\psi_i $
Dichteoperator	siehe Dichtematrix oder statistischer Operator
Dirac-Bild	<p>Im Dirac-Bild wird der Hamilton-Operator in einen zeitunabhängigen, weitgehend bekannten "ungestörten" Operator und einen zeitabhängigen Wechselwirkungsoperator aufgeteilt $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$. Die zeitliche Dynamik des ungestörten Systems \hat{H}_0 steckt dann in den Operatoren \hat{A}_I, die der Wechselwirkung \hat{H}' in den Zuständen $\psi\rangle_I$.</p>
Dirac-Notation	Notation für die abstrakten Zustände des Hilbert-Raums durch Bra- und Ket-Vektoren.

Dispersionsrelation	<p>Zusammenhang zwischen Kreisfrequenz ω und Wellenzahl k</p> $\omega = ck$ <p>Taucht zur Beschreibung der em. Strahlung bei der Hohlraumstrahlung auf.</p>
Drehimpulsaddition	Prozedur, bei der der Zustand $ j_1, m_1, j_2, m_2\rangle$ in den Eigenzuständen $ j, m, j_1, j_2\rangle$ entwickelt wird
Drehimpulskopplung	siehe Drehimpulsaddition
Dreiecksungleichung	<p>Bedingung für den Gesamtdrehimpuls bei der Addition zweier Drehimpulse</p> $j_1 + j_2 \geq j \geq j_1 - j_2 $
Dualraum	Der Dualraum V^* eines Vektorraums V ist die Menge aller Funktionale von V nach K . Ein Funktional ist eine lineare Abbildung, das die Elemente des Vektorraums auf eine Zahl abbildet. In der Quantenmechanik sind die Funktionale die Bras, die die Elemente des Vektorsraums, die Kets, auf eine komplexe Zahl abbilden.
Dulong-Petit	<p>Beschreibt (näherungsweise) die molare Wärmekapazität von Festkörpern</p> $c = \frac{1}{n} \frac{\partial U}{\partial T} = 3R$ <p>(= Wärmemenge, um 1 Mol eines Stoffes um 1°C zu erwärmen)</p>
dyadischen Produktes	<p>Produkt von Vektoren, dessen Ergebnis eine Matrix ist.</p> $\begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_m \end{pmatrix} \cdot (y_1, \dots, y_n) = \begin{pmatrix} x_1 y_1 & \dots & x_1 y_n \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_m y_1 & \dots & x_m y_n \end{pmatrix}$ <p>Taucht in der Formulierung der Vollständigkeitsrelation in Dirac-Notation auf.</p>
Dyson-Reihe	Formale Lösung für den Zeitentwicklungsoperator $U(t, t_0)$

Ehrenfest-Theorem	<p>Besagt, dass die zeitliche Änderung des Erwartungswerts eines Operators mit dem Kommutator des Operators mit dem Hamilton-Operator zusammenhängt.</p> $\frac{d}{dt} \langle \hat{O} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{O}, \hat{H}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{O}}{\partial t} \right\rangle$ $m \frac{d^2}{dt^2} \langle \hat{x}_i \rangle = \langle \vec{F}_i(\vec{x}) \rangle$ <p>Für bestimmte Umstände folgt, dass die kl. Bewegungsgleichungen für die zeitliche Entwicklung von $\langle \hat{x} \rangle$ und $\langle \hat{p} \rangle$ gelten.</p>
Eichtransformation	Transformation einer Größe (z.B. magn. Vektorpotential, elektr. Potential, Wellenfunktion, etc.) s.d. die physikalische Messung (E-, B-Feld, $ \psi ^2$) unverändert bleibt
eigentliche Drehung	<p>Drehung, für dessen Drehmatrix R gilt</p> $\det(R) = 1$
Energieeigenzustände	<p>Zustände u, die die folgenden Gleichungen erfüllen</p> $\psi(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \cdot u_E(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N)$ $\hat{H} u_E(\dots) = E u_E(\dots)$
Ensemble	Gesamtheit identisch präparierter Systeme, die die statistische Verteilung der möglichen Ergebnisse einer physikalischen Observablen in einem Quantensystem veranschaulicht.
Ensemblemittelwert	Mittelwert einer Ensemblemessung. Entspricht dem Erwartungswert, der wiederum <u>kein</u> mögliches Ergebnis sein muss.
Entartung	Fall, in dem mehrere Zustände eines Systems denselben <u>Energieeigenwert</u> haben

Erzeugendefunktion	<p>Potenzreihe, die eine Folge a_n oder eine Sequenz von Funktionen $a_n(x)$ kodieren kann</p> $F(s, x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_n(x)}{n!} s^n$ <p>s.d. die einzelnen Folgeglieder oder Funktionen dann leicht durch Ableiten der Erzeugendenfunktion erzeugt werden:</p> $\left. \frac{d^n}{ds^n} F(s, x) \right _{s=0} = a_n(x)$ <p>Taucht bei den kohärenten Zuständen für die Hermite-Polynome auf:</p> $F(s, x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(x)}{n!} s^n = e^{-s^2+2sx}$ $\Rightarrow \frac{d^n}{dx^n} e^{-s^2+2sx} = H_n(x)$
Erzeugungsoperator	<p>Operator \hat{a}^\dagger, der (insbesondere beim 1d harm. Osz.) eine Anregung erzeugt, d.h. die folgende Wirkung hat</p> $\hat{a}^\dagger u_n = \sqrt{n+1} u_{n+1}$
Feldemission	Effekt, bei dem durch Anlegen einer äußeren elektrischen Spannung Elektronen aus Metall gelöst werden können. Dabei verformt das äußere Feld die Potentialstufe, weshalb die Elektronen heraustunneln können.
gemischte Zustände	Zustände, die eine statistische Mischung von reinen Zuständen darstellt.
Gesetz von Rayleigh-Jeans	Beschreibt die spektrale Energiedichte eines Hohlraumstrahlers bei niedrigen Frequenzen, führt aber bei hohen Frequenzen zur UV-Katastrophe, die eine unendlich hohe Energiedichte vorhersagt.
Glauber-Zustände	<p>Gauß'sches Wellenpaket, das im qm. harm. Osz. hin und her läuft ohne Orts- und Impulsschärfe zu verlieren. Erwartungswert von Impuls und Ortes folgen dabei den kl. Bewegungsgleichungen.</p> $\phi_\lambda = e^{-\frac{i}{2} x_0 p_0} e^{-\frac{1}{2} \varepsilon} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}} u_n$

gleichzeitig diagonalisiert	<p>Zwei Operatoren \hat{A}, \hat{B} sind gleichzeitig diagonalisiert, wenn Eigenfunktionen gefunden werden können, die Eigenfunktionen beider Operatoren sind. Dies ist der Fall, wenn beide Operatoren selbstadjungiert sind und</p> $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ <p>In der Basis der Eigenfunktionen, werden die Operatoren diagonal.</p>
Heisenberg'sche Unschärferelation	<p>Besagt, dass es unmöglich ist, Ort und Impuls eines Teilchens gleichzeitig mit beliebiger Genauigkeit zu messen.</p> $(\Delta x_i)(\Delta p_i) \geq \frac{\hbar}{2}$
Hermite-Polynome	<p>Lösungen der DGL (beim qm. HO)</p> $h''(x) - 2xh'(x) + (\varepsilon + 1)h(x) = 0$ $H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$
hermitesche Operatoren	<p>Operatoren \hat{O}, die identisch zu ihrem adjungierten Operator \hat{O}^\dagger sind. Sie erfüllen</p> $\langle \phi, \hat{A} \psi \rangle = \langle \phi, \hat{A}^\dagger \psi \rangle = \langle \hat{A} \phi, \psi \rangle = \langle \psi, \hat{A} \phi \rangle^*$
Hilbert-Raum	<p>Zustandsraum der Quantenmechanik mit den Eigenschaften</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. linearer Vektorraum über den komplexen Zahlen (damit auch Linearkombinationen Lösungen sind) 2. unitär (da Skalarprodukt existieren muss) 3. vollständig (damit Grenzwert einer Folge (z.B. eines Zustands) im Raum liegt) 4. separabel (damit eine Basis existiert, die jede Fkt. im Zustandsraum darstellen kann)
Hohlraumstrahlung	<p>Elektromagnetische Strahlung, die sich bei einem idealen schwarzen Körper im thermodyn. GGW einstellt und nur von der Temperatur des Körpers abhängt.</p>
interaction-picture	<p>siehe Dirac-Bild</p>

Ionisierungsenergie	Energie, die benötigt wird, um ein Elektron aus einem Atom/Molekül zu entfernen, z.B. für den Grundzustand des Wasserstoffs $E = 13,6\text{eV}$
kanonische Vertauschungsrelation	Kommutatorregeln für Orts- und Impulsoperator ähnlich der Poisson-Kallerm $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$ $[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0$
Ket's	Element $ \psi\rangle$ des Hilbert-Raums
kohärente Zustände	siehe Glauber-Zustände. (Das "kohärent" kommt lediglich von der Anwendung dieser Zustände zur Beschreibung von Laserlicht)
Kollaps der Wellenfunktion	Phänomen, dass die Messung an einem in einer Superposition befindlichen quantenmechanischen System es in einen einzigen Zustand der Superposition kollabiert
Kommutator	$[\hat{O}_1, \hat{O}_2] := \hat{O}_1\hat{O}_2 - \hat{O}_2\hat{O}_1$
kontinuierliches Spektrum	Spektrum aus Energien, die alle Werte Annehmen können
Korrespondenzprinzip	Zuordnung der Operatoren $i\hbar\partial_t$ und \hat{p} zu Energie und Impuls
Korrespondenzprinzips, Bohrsches	Besagt, dass die Vorhersagen der Quantenmechanik im Grenzfall großer Quantenzahlen mit den Vorhersagen der klassischen Physik übereinstimmen müssen.
Kugelbesselfunktionen	Lösungen der Radialgl. für den Fall $V(r) = 0$, die von der Quantenzahl l abhängen
Kugelflächenfunktionen	Eigenfunktionen von \hat{L}^2 und \hat{L}_3 , die die Vollständigkeitsrelation und Orthonormalität erfüllen
Larmor-Frequenz	Frequenz, mit der der Bahndrehimpuls um die Achse des B-Felds präzediert. Größe in der magnetischen Energie beim normalen Zeeman-Effekt, genauer: Der energetische Abstand der aufgespalteten Zustände ist $\hbar\omega_L$. $\omega_L = \frac{eB}{2m_e}$
Legendre-Polynome	Polynome, die auf dem Intervall $[-1, 1]$ ein orthogonales Funktionensystem bilden. Sie tauchen in der Herleitung der Kugelflächenfunktionen, den Eigenfunktionen von \hat{L}^2, \hat{L}_z auf.

Leiteroperatoren	<p>Operatoren \hat{M}_+ und \hat{M}_-, die das m im Eigenwert von ϕ_{km} um 1 erhöhen (erniedrigen).</p> $\hat{M}_{\pm} := \hat{M}_1 \pm i\hat{M}_2$
Lie-Algebra	<p>Algebra der Generatoren von Drehmatrizen mit dem Kommutator als Abbildung</p> $[L_i, L_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}L_k$
Lie-Gruppe	Gruppe, deren dargestellten Gruppenelemente $D(g)$ differenzierbar von n reellen Parametern abhängen
linearer Operator	$\hat{O}(\alpha\psi_1 + \beta\psi_2) = \alpha\hat{O}(\psi_1) + \beta\hat{O}(\psi_2)$
Materiewellen	<p>Beschreibt das wellenartige Verhalten von Materie. Postulat von de Broglie, jedoch von ihm nicht interpretiert.</p> <p>Interpretiert ist die MW $\psi(\vec{x}, t)$, dessen Betragsquadrat die zugehörige Wahrscheinlichkeitsdichte bildet.</p>
minimale Substitution	<p>Substitution in der kl. Mechanik, um die Wechselwirkung eines geladenen Teilchens mit einem B-Feld zu beschreiben.</p> $\vec{p} \rightarrow \vec{p} - q\vec{A}$ <p>Die zusätzliche Berücksichtigung des skalaren Potentials φ erfordert den Term $q\varphi$. Der Hamilton-Operator ist dann</p> $\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{\vec{p}} - q\vec{A})^2 + q\varphi$
normierter Raum	Vektorraum, auf dem eine Norm definiert ist $(V, \ \cdot\)$
Observablen	Physikalische Größe, der ein hermitescher Operator zugeordnet wird. Die Eigenwerte des Operators sind dann die möglichen Messwerte.
Orbitale	Räumliche Wellenfunktionen, die die stationären Zustände eines Elektrons im Atomkern-Potential beschreiben. Orbitale mit der Quantenzahl $l = 0, 1, 2, \dots$ werden als s-, p-, d-, f-, ... Orbitale klassifiziert. Orbitale eines Typs haben meist sehr ähnliche Formen.
Paritätstransformationen	siehe P-Transformation

Pauli-Gleichung	<p>Schrödinger-Gleichung für ein Elektron im elektromagnetischen Feld unter Berücksichtigung des Spins des Elektrons</p> $i\hbar\partial_t\begin{pmatrix}\psi_+ \\ \psi_-\end{pmatrix} = \frac{1}{2m_e}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} + e\vec{A}\right)^2\begin{pmatrix}\psi_+ \\ \psi_-\end{pmatrix} - e\varphi\begin{pmatrix}\psi_+ \\ \psi_-\end{pmatrix} + g\frac{e\hbar}{4m_e}\vec{B}\vec{\sigma}\begin{pmatrix}\psi_+ \\ \psi_-\end{pmatrix}$
Pauli-Matrizen	<p>Unitäre, spurfreie 2x2 Matrizen, die durch Multiplikation von $\frac{\hbar}{2}$ zu den Spin-Operatoren eines Spin-1/2-Teilchens $\hat{S}_i^{(1/2)}$ werden, die die Algebra $[M_i, M_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}M_k$ erfüllen.</p> $\sigma_1 = \begin{pmatrix}0 & 1 \\ 1 & 0\end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix}0 & -i \\ i & 0\end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix}1 & 0 \\ 0 & -1\end{pmatrix}$
Photonen	Feldquanten mit Teilchencharakter, die das elektromagnetische Feld ausmachen
Planck'sches Wirkungsquantum	<p>Konstante, die den Zusammenhang zwischen Energie und Frequenz eines Photons beschreibt.</p> $E = h\nu, \quad h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$
Positronium	Bindungszustand aus Elektron und Positron. Im Grundzustand ($l = 0$) ergibt sich je nach Kopplung der Spins Para- oder Orthopositronium, die unterschiedliche physikalische Eigenschaften besitzen.
Rabi-Frequenz	Frequenz Ω , mit der die Besetzungswahrscheinlichkeiten der Zustände in einem Zwei-Niveau-System oszilliert. Sie hängt von der Anregungsfrequenz $\tilde{\omega}$ ab. Beispiel Magnetresonanz: System oszilliert zwischen $m_s = \frac{1}{2}$ und $m_s = -\frac{1}{2}$.
radiale Quantenzahl	Quantenzahl n_r , die in der Lösung des Wasserstoffatoms auftaucht und u.A. zur Hauptquantenzahl n zusammengefasst wird. An ihr kann abgelesen werden, wie viele Knoten die Radialwellenfunktion hat.
Raumspiegelung	Spiegelung von Koordinaten an einem Punkt/einer Ebene
Rutherford-Modell	Atommodell, nach dem die positive Ladung im Mittelpunkt des Atoms konzentriert ist und die Elektronen den Kern planetenähnlich umgeben
Saturn-Modell	Atommodell, nach dem die positive Ladung im Mittelpunkt des Atoms konzentriert ist und die Elektronen in Ringen darum lokalisiert sind

Schiebeoperatoren	siehe Leiteroperatoren
selbstadjungiert(er Operator)	hermitescher Operator, dessen Eigenfunktionen ein vollständiges System bilden
separabel(er Raum)	Raum, für den eine abzählbare Menge M von Elementen existiert, die im Raum dicht ist
Sommerfeldkonstante	<p>Maß für die Stärke der em. Wechselwirkung</p> $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} \approx \frac{1}{137}$ <p>Wird in der Herleitung der Bindungszustände des Wasserstoffatoms im Coulomb-Term zu ρ zusammengefasst; ist ein Faktor in der finalen Energie E_n.</p>
Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante	siehe Sommerfeldkonstante
Sommerfeldsche Polynommethode	Methode in der Lösung der Radialgl. für die Bindungszustände des Coulomb-Potentials. Dabei wird ein Potenzreihenansatz gestartet und gezeigt, dass dieser auf ein Polynom reduzieren muss.
Spektrum eines Operators	Alle möglichen Eigenwerte eines Operators. Es kann dabei diskret oder kontinuierliche (z.B. \hat{x}, \hat{p}) sein.
sphärischen Besselfunktionen	siehe Kugelbesselfunktionen
Spin-Bahn-Kopplung	Wechselwirkung des magn. Moments des Spins und des magn. Moments des Bahndrehimpuls
Spinor	Elemente eines komplexen Vektorraums, die unter den Darstellungen der speziellen unitären Gruppe $SU(2)$ transformieren. Beispiel: die zweikomponentige Wellenfunktion eines Spin-1/2-Teilchens.
Spur eines Operators	<p>Summe der Hauptdiagonalelemente der Matrixdarstellung eines Operators \hat{O}</p> $\text{Spur}(\hat{O}) := \oint_j \langle j \hat{O} j \rangle$ <p>Taucht bei der Berechnung des Erwartungswerts einer Observablen aus einer Dichtematrix auf.</p>
stationäre Schrödinger-Gleichung	<p>Beschreibt das Verhalten eines qm. Systems in einem zeitunabhängigen Potential</p> $\hat{H}u(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) = Eu(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N)$
stationäre Zustände	Synonym für Energieeigenzustände, da für sie $\partial_t \vec{j} = 0$ gilt
statistischer Operator	siehe Dichteoperator oder Dichtematrix

Stefan-Boltzmann-Gesetz	<p>Die abgestrahlte Leistung eines schwarzen Körpers wird beschrieben über</p> $P = \sigma T^4$
Stefan-Boltzmann-Konstante	<p>Proportionalitätskonstante im Stefan-Boltzmann-Gesetz</p> $5,670 \cdot 10^{-8} \frac{W}{m^2 K^4}$
Tunneleffekt	<p>Effekt, dass ein Quantenteilchen, dessen Energie kleiner als die einer Potentialbarriere ist ($E < V_0$) sie dennoch zu einer gewissen Wahrscheinlichkeit passieren kann</p>
Ultraviolett-Katastrophe	<p>Abweichung des Rayleigh-Jeans-Gesetzes (spektrale Energiedichte $u(\nu, T)d\nu$) vom Experiment für hohe Frequenzen.</p>
unitärer Raum	<p>Normierter Raum über den komplexen Zahlen</p>
Varianz	<p>Maß für die Streuung um den Erwartungswert</p> $(\Delta y)^2 = \langle (y - \langle y \rangle)^2 \rangle = \langle y^2 \rangle - \langle y \rangle^2$
Vernichtungsoperator	<p>Operator \hat{a}, der (insbesondere beim 1d harm. Osz.) eine Anregung vernichtet, d.h. die folgende Wirkung hat</p> $\hat{a}u_n = \sqrt{n}u_{n-1}$
verträglicher Observablen	<p>Observablen sind verträglich, wenn die ihnen zugeordneten Operatoren kommutieren. D.h. dass Eigenfunktionen gefunden werden können, die Eigenfunktionen zu allen Operatoren sind.</p>
vollständig(er Zustandsraum)	<p>Raum, in dem die Grenzelemente aller Cauchy-Folgen des Raums ebenfalls im Raum liegen</p>
vollständiges Funktionensystem	<p>Menge von Funktionen $\{\varphi_i\} = \{\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \dots\}$, deren Linearkombination jede Funktion f im betrachteten Funktionsraum (z.B. L^2 inkl. RB) beschreiben kann.</p> $f(x) = \sum_i c_i \varphi_i(x) = \sum_i \langle \varphi_i, f \rangle \varphi_i(x)$
vollständiges System	<p>siehe vollständiges Funktionensystem</p>

Vollständigkeitsrelation	<p>Beziehung, die ein vollständiges Funktionensystem $\{\varphi_i\}$ erfüllt.</p> $\sum_i \varphi_i(x) \varphi_i^*(y) = \delta(x - y)$ <p>\int : Integral für kontinuierliches, Summe für diskretes Spektrum</p>
Wahrscheinlichkeitsstromdichte	<p>Bezogen auf ein Volumen (eine Fläche) beschreibt sie, wie viel Wahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit und pro Fläche (Länge) aus dem Volumen (der Fläche) fließt. Im Fall einer Länge (1d) ist sie lediglich die Einheit 1 durch Zeiteinheit.</p> $\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*)$ <p>Sie hängt über die Kontinuitätsgleichung mit der Änderung der Wahrscheinlichkeitsdichte zusammen</p> $\frac{\partial}{\partial t} w(\vec{x}, t) + \vec{\nabla} \vec{j}(\vec{x}, t) = 0$
Wechselwirkungsbild	siehe Dirac-Bild
Welle-Teilchen-Dualismus	Tatsache, dass Licht sowohl Welle als auch Teilchencharakter besitzt, z.B. Compton-Effekt und Doppelspalt.
Wien'sches Verschiebungsgesetz	Gesetz, das das Verhalten der spektralen Energiedichte eines schwarzen Strahlers für große ν gut beschreibt
zeitgeordnetes Produkt	<p>Integrand der symmetrisierten Dyson-Reihe für einen zeitabhängigen Hamilton-Operator</p> $U(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n \frac{1}{n!} \int_{t_0}^t dt_1 \dots \int_{t_0}^t dt_n T(\hat{H}_1 \dots \hat{H}_n)$
Zeitordnung	Reihenfolge der Hamilton-Operatoren in der symmetrisierten Dyson-Reihe. Dabei stehen Hamilton-Operatoren späterer Zeit links von denen früherer Zeiten.

zugeordnete Legendre-Polynome	<p>Erweiterung der Legendre-Polynome $P_l^{(m)(x)}$ durch m-fache Ableitung nach x.</p> $P_l^m(x) = (-1)^m (1-x^2)^{m/2} \cdot \frac{d^m}{dx^m} P_l(x)$ <p>Sie sind Teil der Kugelflächenfunktionen Y_{lm}, den Eigenfunktionen von \hat{L}^2, \hat{L}_z.</p>
Zyklotronfrequenz	<p>Kreisfrequenz ω_C, mit der ein geladenes Teilchen in einem homogenen Magnetfeld auf einer kreisförmigen Bahn um die Feldlinien rotiert</p> $\omega_C = \frac{qB}{m} = 2\omega_L$ <p>Quantenmechanik: Frequenz, mit der der Spin um die Magnetfeldachse präzediert, wobei $\omega_C = 2\omega_L$.</p>