

Theoretische Physik II -
Quantenmechanik

Skript zur Vorlesung

von Prof. Dr. Schöll

erweitert um zahlreiche Kapitel zur
fortgeschrittenen Quantenmechanik

Verfasser:
Franz- Josef Schmitt

Struktur der Quantenmechanik

Formalismus

Zustand des Systems:

Wird beschrieben durch den Zustandsvektor $|\Psi\rangle \in H$, der im Hilbertraum lebt.

Für die Basis gilt: $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$

Mit den Projektoren $|n\rangle\langle n|$ **und** $\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$ (jeder Zustand ist in der Basis entwickelbar)

Der Ortsraum

Ist ein unendlich dimensionaler Hilbertraum

Ortsdarstellung: $\Psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \Psi \rangle$

Ortsbasis: $\langle \vec{r} | \vec{r}' \rangle = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad \int d^3r |\vec{r}\rangle\langle \vec{r}| = 1$

Der Impulsraum

Ebenso sind die Frequenzen der Zustände darstellbar. Dies geschieht im Impulsraum:

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

Mit der Impulsbasis: $\langle \vec{p} | \vec{p}' \rangle = \delta(\vec{p} - \vec{p}') \quad \int d^3p |\vec{p}\rangle\langle \vec{p}| = 1$

Der Übergang wird durch eine Fouriertrafo geleistet:

$$\text{wegen } \langle \vec{p} | \vec{p}' \rangle = \delta(\vec{p} - \vec{p}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3r e^{i\vec{r}(\vec{p}-\vec{p}')} \text{ bzw: } \delta(x) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)}} \int dp e^{ipx}$$

Dabei ist auch die Fouriertransformierte der Deltafunktion bedeutsam:

$$1 = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ipx} \delta(x)$$

Dabei ist es unerheblich, wie genau der Rauminhalt des Delta-peaks normiert ist. Dies ist Konventionssache.
Gemäß der gewöhnlichen Konvention

$$f(0) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx f(x) \delta(x)$$

würde man schreiben:

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ipx} \delta(x)$$

Somit gilt:

$$\Psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \Psi \rangle = \int d^3p |\vec{p}\rangle\langle \vec{p} | \Psi \rangle = \int d^3p \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \Psi \rangle = \int d^3p \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle \tilde{\Psi}(\vec{p})$$

Dies ist aber gerade die Fourier- Transformation, weshalb folgt:

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

Wahrscheinlichkeitsinterpretation

$\langle n | \Psi \rangle \in \mathbb{C}$ ist die Wahrscheinlichkeitsamplitude, den Meßwert n im Zustand $|\Psi\rangle$ zu treffen

$|\langle n | \Psi \rangle|^2$ ist die Wahrscheinlichkeit, den Meßwert n zu finden

$|\langle \vec{r} | \Psi \rangle|^2$ ist WSK- Dichte (als Funktion von \vec{r}), Teilchen am Ort \vec{r} zu finden

Von der Observablen zum Operator:

$\hat{F} : H \rightarrow H$ ist hermitescher Operator, das Bild einer Observablen im Hilbertraum, selbst Element des Hilbertraums
 $\hat{F} = \hat{F}^+$

Merke: Urbilder der hermiteschen Operatoren sind die Observablen ! Observablen werden auf Operatoren abgebildet !

Operatoren können durch Matrixelemente dargestellt werden:

$$\hat{F} = \sum_{n,n'} |n\rangle \langle n| \hat{F} |n'\rangle \langle n'|$$

Oder in der Spektraldarstellung durch ihre Eigenwerte:

$$\hat{F} = \sum_n |n\rangle F_n \langle n|$$

Dabei kennzeichnen F_n die Eigenwerte des Operators \hat{F} .

Beispiel: $\hat{H} = \sum_n |n\rangle E_n \langle n|$

Für den Erwartungswert eines Operators gilt:

$$\langle \hat{F} \rangle = \langle \Psi | \hat{F} | \Psi \rangle \quad (\text{Erwartungswert im Zustand } |\Psi\rangle)$$

Der orthogonale Projektor lautet:

$$P_n = |n\rangle \langle n|$$
$$P^2 = P = P^+$$

Damit gilt:

$$|\langle n | \Psi \rangle|^2 = \langle \Psi | n \rangle \langle n | \Psi \rangle = \langle \Psi | P_n | \Psi \rangle$$

Die Wahrscheinlichkeit, den Messwert n im Zustand $|\Psi\rangle$ zu treffen ist gleich dem Erwartungswert des orthogonalen Projektors auf diesen Messwert im Zustand $|\Psi\rangle$.

Man kann sagen: Projektoren sind in der Hinsicht Observablen, dass sie die Wahrscheinlichkeit eines Messwertes repräsentieren. Als relative Wahrscheinlichkeit für beliebig viele Messungen ist diese Wahrscheinlichkeit prinzipiell messbar und damit ist die Wahrscheinlichkeit eines Messwerts selbst ein Messwert und der Projektor, der Operator, dessen Eigenwerte diese Wahrscheinlichkeit darstellen, eine Observable !

Quantisierung

Quantisierung ist das Aufstellen von Vertauschungsrelationen, wodurch die Algebra der Observablen festgelegt wird.

Heisenberg: kanonische Vertauschungsrelationen:

$$[\hat{p}_i, \hat{x}_k] = \frac{\hbar}{i} \mathbf{d}_{ik} 1$$

Nichtvertauschbarkeit bedeutet quantenmechanische Unschärfe

$$[\hat{F}, \hat{G}] = \hat{A} \Leftrightarrow \sqrt{\langle (\Delta \hat{F})^2 \rangle} \sqrt{\langle (\Delta \hat{G})^2 \rangle} \geq \frac{|\langle \hat{A} \rangle|}{2}$$

Beispiel:

$$[\hat{p}_i, \hat{x}_k] = \frac{\hbar}{i} \mathbf{d}_{ik} \mathbf{1} \Leftrightarrow \sqrt{\langle (\Delta \hat{p}_i)^2 \rangle} \sqrt{\langle (\Delta \hat{x}_k)^2 \rangle} \geq \frac{\hbar}{2} \mathbf{d}_{ik}$$

Maximalmessung

Bedeutet die gleichzeitige Messung eines vollständigen Satzes vertauschbarer Observablen. In diesem Fall existiert ein gemeinsames System von Eigenvektoren zu diesen Observablen.

Dynamik

Ehrenfest'sches Theorem (klassische Mechanik):

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{r} \rangle = \frac{1}{m} \langle \hat{p} \rangle$$

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle = -\langle \nabla V(\vec{r}) \rangle$$

Erwartungswerte sind invariant unter unitären Transformationen: $U^\dagger = U^{-1}$

→ aus dieser Tatsache folgt die Äquivalenz zwischen Schrödinger- und Heisenbergbild

Schrödingerbild

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle_S = \hat{H}_S |\Psi\rangle_S$$

Hier sind die Operatoren zeitunabhängig und damit auch die Eigenvektoren. Die Zustände jedoch unterliegen einer zeitlichen Entwicklung, die durch die Schrödingergleichung beschrieben wird.

Die Operatoren wohnen dem Messwert inne. Sie entsprechen dem Messmechanismus, der im Schrödingerbild zeitlich konstant gehalten wird. Die Zustände entsprechen der Außenwelt die gemessen wird.

Im Heisenbergbild nimmt man folglich an, dass sich im Messgerät etwas ändert und die Außenwelt konstant bleibt! (Diese Aussage sollte nicht zu ernst genommen werden!)

Heisenbergbild

Hier unterliegen die Operatoren einer zeitlichen Entwicklung. Dabei gilt für einen zeitabhängigen Heisenbergoperator als Entwicklungszustand eines stationären Schrödingeroperators:

$$\hat{F}_H(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \hat{F}_S e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}$$

mit

$$e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} = U^\dagger(t, 0)$$

$$e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} = U(t, 0)$$

Diese Form des Zeitentwicklungsoperators erfüllt die Schrödingergleichung:

$$H |\Psi_S\rangle = H (U |\Psi\rangle_{t=0}) = i\hbar \partial_t (U |\Psi\rangle_{t=0}) = i\hbar (\partial_t U) |\Psi\rangle_{t=0} = i\hbar |\Psi_S\rangle$$

Die Zustände im Heisenbergbild selbst jedoch sind zeitunabhängig:

$$|\Psi\rangle_H = U^\dagger |\Psi_S\rangle = U^\dagger U |\Psi\rangle_{t=0} = |\Psi\rangle_{t=0} = |\Psi\rangle$$

Für die Zeitentwicklung eines beliebigen Operators gilt außerdem:

$$\frac{d}{dt} \hat{F}_H(t) = \frac{i}{\hbar} [H, \hat{F}_H]$$

Wechselwirkungsbild

$$\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}^1$$

$$\hat{F}_W(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \hat{F}_S e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t}$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle_W = \hat{H}_W^1 |\Psi\rangle_W$$

$$\frac{d}{dt} \hat{F}_W(t) = \frac{i}{\hbar} [H^0, \hat{F}_W]$$

Man kann sagen: Ein Bild entspricht einer mehr oder weniger willkürlichen Zerlegung des Hamiltonoperators. Man teilt die Dynamik auf eine Dynamik der Innenwelt (Operator) und der Außenwelt (Zustand) der Messung auf.

Die Störung des ungestörten Hamiltonian bestimmt die Dynamik der Zustände. Der ungestörte Hamiltonian dagegen bestimmt die Dynamik der Operatoren. Die Dynamik der Zustände wird durch die Differenz zwischen H und H₀ bestimmt, also durch den Störoperator. Die Innenweltdynamik entspricht also dem ungestörten Hamiltonian.

$$\frac{d}{dt} \hat{F}_W(t) = \frac{i}{\hbar} [H^0, \hat{F}_W]$$

Das ungestörte Messgerät entspricht einer Zeitentwicklung INNERHALB des Messgerätes. Die Zustände sind ohne Störung zeitlich konstant. Die Störung dagegen wirkt als Zeitentwicklung auf die Zustände, unterliegt aber keiner zeitlichen Dynamik INNERHALB des Messgerätes, ist als Observable selbst also zeitlich konstant. Sie wirkt nur zeitabhängig auf die Zustände, die sich dadurch, genau dadurch zeitlich verändern:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle_W = \hat{H}_W^1 |\Psi\rangle_W$$

Das heißt, wenn die Störung verschwindet, so geht das Wechselwirkungsbild ins Heisenbergbild über !

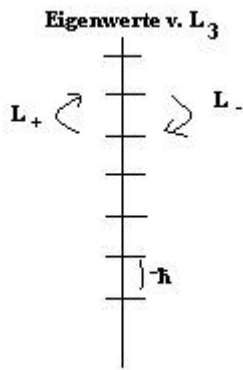
Drehimpuls und kugelsymmetrische Potenziale

Ein Potenzial sei kugelsymmetrisch: V(r), dann gilt:

- H ist rotationsinvariant, da sich die potenzielle Energie nicht ändert
- Drehimpulserhaltung
- $[H, L^2] = [H, L_3] = 0$

Darstellungsfreie Berechnung der Drehimpulseigenwerte:

$$L_{\pm} = L_1 \pm iL_2 \quad \text{Leiteroperatoren (nicht hermitesch)}$$



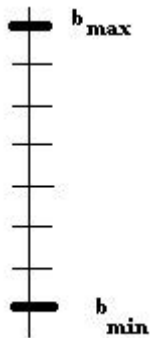
Aus der Leitereigenschaft und der Beschränktheit des Spektrums

$$\langle L^2 \rangle \geq \langle L_3 \rangle \geq 0 \quad \text{wegen } L = L^+$$

$$a \geq b^2 \geq 0 \quad \text{Eigenwerte von } L^2 \text{ und } L_3$$

und wegen der Eindeutigkeit des Grundzustands:

$$L_- |b_{\min}\rangle = L_+ |b_{\max}\rangle = 0$$



$$L_+ L_- |b_{\min}\rangle = L_- L_+ |b_{\max}\rangle = 0$$

folgt mit Hilfe von $L_+ L_- = L^2 - L_3^2 - \hbar L_3$

$$L_- L_+ = L^2 - L_3^2 + \hbar L_3$$

dass:

$$L^2 |lm\rangle = \hbar^2 l(l+1) |lm\rangle$$

$$L_3 |lm\rangle = \hbar m |lm\rangle$$

mit $l = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$

$m = -l, -l+1, \dots, l-1, +l$

Zusammenfassung

Bei kugelsymmetrischen Potenzialen existieren vertauschbare Observablen:

H, L^2 und L_3 ,

dabei vertauschen auch L_1 und L_2 jeweils mit H und L^2 , nicht jedoch untereinander !

$$[L_j, L_k] = i\hbar \epsilon_{jkl} L_l \Leftrightarrow \vec{L} \times \vec{L} = i\hbar \vec{L}$$

Also existieren gemeinsame Eigenzustände zu H, L^2 und L_3

Quantisierung

$L_{\pm} = L_1 \pm iL_2$ als Leiteroperatoren

$$L_{\pm}|lm\rangle \sim |l, m \pm 1\rangle$$

$$L^2|lm\rangle = \hbar^2 l(l+1)|lm\rangle$$

Daraus folgt:

$$L_3|lm\rangle = \hbar m|lm\rangle$$

mit $l = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$

$m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$

→ Weitere Einschränkung:

$$\text{Bahndrehimpuls } \vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

Somit müssen die Eigenwerte:

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots$$

$$m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$$

Grund: Konsistenz mit den Eigenwerten des Orts- und Impulsoperators.

Prinzipiell, aus der obigen Ableitung kann jedoch l nur auf halbzahlige Werte eingeschränkt werden

→ Drehimpulse sind prinzipiell Vielfache von $1/2$!

→ Bahndrehimpulse dagegen sind ganzzahlig. Dies ist notwendig wegen der 360° - Symmetrie !

In Kugelkoordinaten:

$$\Psi_{lm}(r, \mathbf{J}, \mathbf{j}) = e^{imj} f_{lm}(r, \mathbf{J})$$

$$m = -l, \dots, l$$

Eindeutigkeit:

$$e^{imj} = e^{im(j+2p)}$$

$$\Rightarrow m \in \mathbb{Z}$$

⇒ Für Bahndrehimpulse sind nur GANZZAHLIGE l -WERTE zulässig.

Mit diesen Angaben (mit Hilfe der Algebra alleine) können nun die Eigenzustände konstruiert werden.

Also das gesuchte gemeinsame Eigenzustandssystem für H , L^2 und L_3

Eigenwertproblem in Wiederholung / ähnlicher Zugang:

Die gemeinsamen normierten Eigenvektoren $|a, m\rangle$ von \hat{L}^2 und \hat{L}_3 gehorchen den Eigenwertgleichungen

$$\hat{L}^2|a, m\rangle = a\hbar^2|a, m\rangle$$

$$\hat{L}_3|a, m\rangle = m\hbar|a, m\rangle$$

Da \hat{L} hermitesch ist, gilt:

$$a\hbar^2 = \langle a, m|\hat{L}^2|a, m\rangle = \sum_{i=1}^3 \langle a, m|\hat{L}_i + \hat{L}_i|a, m\rangle$$

$$\langle a, m|\hat{L}_i + \hat{L}_i|a, m\rangle = \langle \Phi|\Phi\rangle \geq 0$$

$$a\hbar^2 = \langle a, m|\hat{L}^2|a, m\rangle = \sum_{i=1}^3 \langle a, m|\hat{L}_i + \hat{L}_i|a, m\rangle \geq \langle a, m|\hat{L}_3^2|a, m\rangle \geq 0$$

$$\langle a, m|\hat{L}_3^2|a, m\rangle = m^2\hbar^2$$

$$\rightarrow a\hbar^2 \geq m^2\hbar^2 \geq 0$$

Setze

$$|a, m\rangle = |u\rangle$$

Betrachte:

$$\hat{L}_3 \hat{L}_\pm |u\rangle = \hat{L}_\pm \hat{L}_3 |u\rangle \pm \hbar \hat{L}_\pm |u\rangle$$

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

$$\hat{L}_3 \hat{L}_\pm |u\rangle = \hat{L}_\pm |u\rangle (m \pm 1) \hbar$$

$$\hat{L}_3 |\hat{L}_\pm u\rangle = (m \pm 1) \hbar |\hat{L}_\pm u\rangle$$

Also:

\hat{L}_\pm sind die Auf- und Absteigeoperatoren im Spektrum von L_z

Satz:

$$\hat{L}_3 \left| (\hat{L}_\pm)^q u \right\rangle = (m \pm q) \hbar \left| (\hat{L}_\pm)^q u \right\rangle$$

$$q = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Was machen die \hat{L}_\pm im Spektrum von L^2 ?

$$\hat{L}^2 \hat{L}_\pm |u\rangle = \hat{L}_\pm \hat{L}^2 |u\rangle$$

$$\hat{L}_\pm \hat{L}^2 |u\rangle = \hat{L}_\pm a \hbar^2 |u\rangle$$

$$\hat{L}^2 |\hat{L}_\pm u\rangle = a \hbar^2 |\hat{L}_\pm u\rangle$$

Satz:

$$\hat{L}^2 \left| (\hat{L}_\pm)^q u \right\rangle = a \hbar^2 \left| (\hat{L}_\pm)^q u \right\rangle$$

$$a \hbar^2 \geq m^2 \hbar^2 \geq 0$$

$$\Rightarrow a \geq m^2 \geq 0$$

$$\Rightarrow \sqrt{a} \geq m \geq -\sqrt{a}$$

Das Spektrum von \hat{L}_3 ist nach oben und nach unten beschränkt:

$$a \hbar^2 = \langle a, m | \hat{L}^2 | a, m \rangle = \sum_{i=1}^3 \langle a, m | \hat{L}_i + \hat{L}_i | a, m \rangle$$

$$\langle a, m | \hat{L}_i + \hat{L}_i | a, m \rangle = \langle \Phi | \Phi \rangle \geq 0$$

$$a \hbar^2 = \langle a, m | \hat{L}^2 | a, m \rangle = \sum_{i=1}^3 \langle a, m | \hat{L}_i + \hat{L}_i | a, m \rangle \geq \langle a, m | \hat{L}_3^2 | a, m \rangle \geq 0$$

$$\langle a, m | \hat{L}_3^2 | a, m \rangle = m^2 \hbar^2$$

$$\rightarrow \sqrt{a} \geq m \geq -\sqrt{a}$$

Also existiert ein größter Eigenwert $m_{\max} = m_0 + n_{\max} \hbar$ und ein kleinster Eigenwert $m_{\min} = m_0 - k_{\max} \hbar$ mit

$$\hat{L}_+ |a, m_{\max}\rangle = \hat{L}_- |a, m_{\min}\rangle = 0$$

Daraus folgt:

$$0 = \hat{L}_- \hat{L}_+ |a, m_{\max}\rangle = (\hat{L}^2 - \hat{L}_3^2 - \hbar \hat{L}_3) |a, m_{\max}\rangle = (a - m_{\max}^2 - \hbar m_{\max}) \hbar^2 |a, m_{\max}\rangle$$

$$0 = \hat{L}_+ \hat{L}_- |a, m_{\min}\rangle = (\hat{L}^2 - \hat{L}_3^2 + \hbar \hat{L}_3) |a, m_{\min}\rangle = (a - m_{\min}^2 + \hbar m_{\min}) \hbar^2 |a, m_{\min}\rangle$$

Also:

$$a = m_{\max}^2 + \hbar m_{\max} = m_{\min}^2 - \hbar m_{\min}$$

Andererseits existiert ein $n \in N_0$ mit $|a, m_{\max}\rangle = (\hat{L}_+)^n |a, m_{\min}\rangle$

$$\text{Also: } m_{\max} \hbar = m_{\min} \hbar + n \hbar$$

Setzt man dies in $a \hbar^2 = \hbar^2 m_{\max}^2 + \hbar^2 m_{\max} = \hbar^2 m_{\min}^2 - \hbar^2 m_{\min}$ ein, so folgt:

$$\hbar^2 m_{\min}^2 + 2n \hbar^2 m_{\min} + n^2 \hbar^2 + \hbar(\hbar m_{\min} + n \hbar) = \hbar^2 m_{\min}^2 - \hbar^2 m_{\min}$$

$$2n \hbar^2 m_{\min} + n^2 \hbar^2 + \hbar(\hbar m_{\min} + n \hbar) = 0$$

$$\Rightarrow m_{\min} \hbar = -\frac{n(n+1)\hbar^2}{2(n+1)\hbar} = -\frac{n}{2} \hbar =: -l \hbar$$

mit

$$l := \frac{n}{2}, n \text{ ganzzahlig}$$

Somit:

$$a \hbar^2 = \hbar^2 m_{\min} (m_{\min} - \hbar) = (-l)(-l-1) \hbar^2$$

$$a = l(l+1)$$

$$m_{\max} \hbar = m_{\min} \hbar + 2l \hbar = l \hbar$$

$$m_{\min} \hbar = -l \hbar$$

Mögliche Eigenwerte von \hat{L}^2 : $a \hbar^2 = l(l+1) \hbar^2$

$$n \in N$$

$$\Rightarrow l = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$$

Mögliche Eigenwerte von \hat{L}_3 für festes l :

$$m \hbar$$

mit

$$m = -l, -l+1, -l+2, \dots, l-2, l-1, l$$

$m=-l \rightarrow$ gehört zu b_{\min}

$m=+l \rightarrow$ gehört zu b_{\max}

Es können keine weiteren Eigenwerte von \hat{L}_3 zwischen diesen Werten liegen, weil man sonst durch wiederholte

Anwendung von \hat{L}_+ bzw. \hat{L}_- die Schranken $|m| \leq l$ verletzen könnte.

Zu jedem l gibt es $2l+1$ Werte von m :

Dies entspricht der $2l+1$ -fachen Richtungsentartung von \hat{L}^2

Das bedeutet: es existieren zu jedem l $2l+1$ Zustände mit gleicher Energie !

Denn: entartete Zustände haben gleiche Energieeigenwerte !

Tabelle:

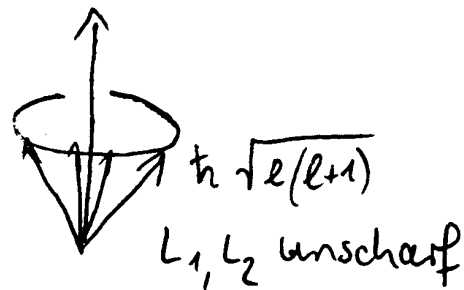
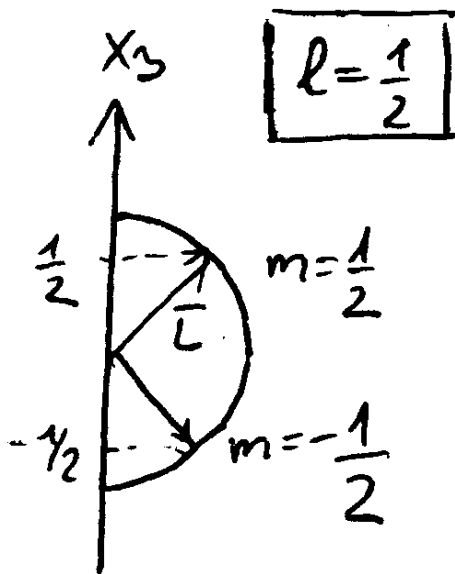
Quantenzahlen	Eigenwert von \hat{L}	Richtungsquantenzahl m
1	$\hbar\sqrt{l(l+1)}$	m
0	0	0
$\frac{1}{2}$	$\hbar\sqrt{\frac{3}{4}}$	$-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$
1	$\hbar\sqrt{2}$	-1, 0, 1
$\frac{3}{2}$	$\hbar\sqrt{\frac{15}{4}}$	$-\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$

$$\hat{L}^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle$$

$$\hat{L}_3 |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle$$

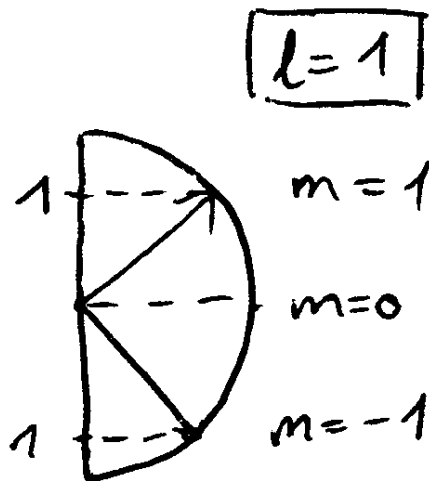
Diracsches Vektormodell:

Darstellung der Richtungsquantisierung:



m=1/2 -> Der Drehimpuls steht parallel zur x3- Achse

m=-1/2 -> der Drehimpuls steht antiparallel zur x3- Achse



Zur Übung ist zu zeigen:

$$\langle l, m | \hat{L}_i | l, m \rangle = 0 \text{ für } i=1,2$$

$$\langle l, m | (\hat{L}_i - \langle \hat{L}_i \rangle)^2 | l, m \rangle = 0 \text{ soll berechnet werden}$$

Nebenbemerkung: Die Drehimpulsquantisierung ist eine Folge der Nichtvertauschbarkeit der einzelnen Komponenten des Drehimpulses !

Grundsätzlich gilt: Unschärfe / Nichtvertauschbarkeit bedingt die Quantisierung und umgekehrt. Die beiden Effekte hängen über den Formalismus zusammen !

Ortsdarstellung des Bahndrehimpulses

$$\langle \vec{r} | \hat{p} | l, m \rangle = \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi_{lm}(\vec{r})$$

$$\langle \vec{r} | \vec{r} | l, m \rangle = \vec{r} \Psi_{lm}(\vec{r})$$

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}$$

ergibt:

$$\langle \vec{r} | \hat{L}_3 | l, m \rangle = \frac{\hbar}{i} (\hat{x}_1 \partial_2 - \hat{x}_2 \partial_1) \Psi_{lm}(\vec{r}) = \hbar m \Psi_{lm}(\vec{r})$$

In Kugelkoordinaten:

$$x_1 = r \sin \theta \cos \phi$$

$$x_2 = r \sin \theta \sin \phi$$

$$x_3 = r \cos \theta$$

$$x_1 \partial_2 - x_2 \partial_1 = \frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$\Rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \Psi_{lm}(r, \theta, \phi) = \hbar m \Psi_{lm}(r, \theta, \phi) \text{ Eigenwertgleichung für } \hat{L}_3.$$

Lösung

$$\Psi_{lm}(r, \theta, \phi) = e^{im\phi} f_{lm}(r, \theta)$$

$$m = -l, \dots, l$$

Eindeutigkeit:

$$e^{im\mathbf{j}} = e^{im(\mathbf{j}+2\mathbf{p})}$$

$$\Rightarrow m \in \mathbb{Z}$$

\Rightarrow Für Bahndrehimpulse sind nur GANZZAHLIGE l-WERTE zulässig.

Ergebnis: Ortsdarstellung der Eigenzustände

$$\langle \vec{r} \| nlm \rangle = \Psi_{nlm} = R_{nl}(r) Y_l^m(\mathbf{J}, \mathbf{j})$$

Hamiltonoperator:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r) = \frac{\vec{r} \cdot \vec{p} \left(\vec{r} \cdot \vec{p} + \frac{\hbar}{i} \right)}{2mr^2} + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r) = \frac{1}{2m} \left[-\frac{\hbar^2}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r\Psi) \right] + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r)$$

$$-\frac{\hbar^2}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r\Psi) = p_r^2 \Psi$$

Aber:

$$-\frac{\hbar^2}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r\Psi) = p_r^2 \Psi \neq \frac{(\vec{r} \cdot \vec{p})^2}{r^2} \text{ wie im Klassischen}$$

Mit Hilfe des Separationsansatzes kann man eine radiale Schrödingergleichung mit effektivem Potenzial hinschreiben:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} (rR_{nl}) + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) - E \right) (rR_{nl}) = 0$$

mit dem Zentrifugalpotenzial: $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$

zusammengefasst: effektives Potenzial: $V_{\text{eff.}}(r) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r)$

Spin

Aus den Drehimpulsvertauschungsrelationen folgt:

$$l = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots \quad \text{möglich}$$

$$m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$$

Für den Spin \hat{S} bei $s = \frac{1}{2}$

existieren die Eigenwerte

$$m_s = \pm \frac{1}{2}$$

Das bedeutet, der Spin ist ein Zwei- Zustands- System:

$$\left| +\frac{1}{2} \right\rangle = |\uparrow\rangle$$

$$\left| -\frac{1}{2} \right\rangle = |\downarrow\rangle$$

Somit: $|m_s\rangle \in H_s$, ein zweidimensionaler Hilbertraum

Operator: ist der dimensionslose Spinoperator

$$\hat{\mathbf{S}} := \frac{2}{\hbar} \hat{\hat{S}}$$

$$\Rightarrow \hat{\mathbf{S}}_3 |\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle$$

$$\hat{\mathbf{S}}_3 |\downarrow\rangle = -|\downarrow\rangle$$

Weiter gilt: $\hat{\mathbf{S}}_1 |\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle$
 $\hat{\mathbf{S}}_1 |\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle$ Spin- flip- Operator

und

$$\hat{\mathbf{S}}_2 |\uparrow\rangle = i |\downarrow\rangle$$

$$\hat{\mathbf{S}}_2 |\downarrow\rangle = -i |\uparrow\rangle$$

Die Vertauschungs- Relation:

$$[\hat{\mathbf{S}}_j, \hat{\mathbf{S}}_k] = 2i \mathbf{e}_{jkl} \hat{\mathbf{S}}_l$$

Orthonormierung: $\langle \uparrow | \uparrow \rangle = \langle \downarrow | \downarrow \rangle = 1$
 $\langle \uparrow | \downarrow \rangle = 0$

Vollständigkeit : $|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow| = 1$

Darstellung der Spinoperatoren durch Matrizen:

$$\hat{\mathbf{S}}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{\mathbf{S}}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{\mathbf{S}}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

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

Mit $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |\downarrow\rangle$

Die in 2x2- Darstellung gezeigten Matrizen sind die Pauli- Spinmatrizen

Spin- Bahn - Produktzustände

$$|nlmm_s\rangle = |nlm\rangle |m_s\rangle \text{ Produktzustand aus Bahnzustand und Spinzustand}$$

$$|nlm\rangle |m_s\rangle \in H_B \times H_s \text{ direktes Produkt}$$

$$\langle n'l'm'_s | nlmm_s \rangle = \langle n'l'm' | nlm \rangle \langle m'_s | m_s \rangle$$

$$\langle n'l'm' | nlm \rangle \text{ in } H_B$$

$$\langle m'_s | m_s \rangle \text{ in } H_s$$

$$\hat{H} = \hat{H}_B + \hat{H}_S$$

mit

$$\left(\hat{H}_B \times 1_S + 1_B \times \hat{H}_S \right) |\Psi\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle$$

Dabei gilt:

$$\hat{H}_B = \frac{1}{2m_0} \left(\hat{\vec{p}} - e\hat{\vec{A}} \right)^2 + V \approx \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m_0} + V(r) - \frac{eB}{2m_0} \hat{L}_3 \quad \text{bildet im Hilbertraum HB ab (also im } H_B \rightarrow H_B$$

Bahndrehimpuls- Hilbertraum !

$$\text{Dabei: } \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m_0} + V(r) = \hat{H}_0$$

$$H_B \rightarrow H_B$$

und

$$\hat{H}_S = -\frac{eB}{2m_0} \hbar \hat{\mathbf{S}}_3$$

$$H_S \rightarrow H_S$$

In Matrix- Darstellung folgt dann:

$$\begin{pmatrix} \hat{H}_B + \hbar \mathbf{w}_l & 0 \\ 0 & \hat{H}_B - \hbar \mathbf{w}_l \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\Psi_1\rangle \\ |\Psi_2\rangle \end{pmatrix} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} |\Psi_1\rangle \\ |\Psi_2\rangle \end{pmatrix}$$

(Zeitabhängige Pauli- Gleichungen)

Anwendung: Zeeman- Effekt mit Spin $\mathbf{m}_B B = \hbar \mathbf{w}_l = \frac{|e|\hbar B}{2m_0}$

Zeitunabhängige Pauli- Gleichungen

$$\begin{aligned} (\hat{H}_B + \hbar \mathbf{w}_l) |n, l, m, \uparrow\rangle &= E |n, l, m, \uparrow\rangle \\ (\hat{H}_B - \hbar \mathbf{w}_l) |n, l, m, \downarrow\rangle &= E |n, l, m, \downarrow\rangle \\ \Leftrightarrow [H_0 + \mathbf{m}_B B(m + 2m_S)] |n, l, m, m_S\rangle &= E |n, l, m, m_S\rangle \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned} H_0 |n, l, m\rangle &= E_{nl} |n, l, m\rangle \\ E &= E_{nl} + \mathbf{m}_B B(m + 2m_S) \end{aligned}$$

Man erhält also sehr schnell ein Ergebnis für die Aufspaltung der atomaren Energieniveaus:

$$E = E_{nl} + \mathbf{m}_B B(m + 2m_S)$$

Dabei wird die Entartung teilweise aufgehoben

Spindynamik

$$\begin{aligned} \dot{\vec{\mathbf{S}}} &= \frac{i}{\hbar} [H_S, \vec{\mathbf{S}}] = i\mathbf{w}_l [\mathbf{S}_3, \vec{\mathbf{S}}] \text{ im Heisenberg- Bild} \\ \Rightarrow \langle \hat{\mathbf{S}}_1 \rangle_t &= \langle \hat{\mathbf{S}}_2 \rangle_0 \sin(2\mathbf{w}_l t) + \langle \hat{\mathbf{S}}_1 \rangle_0 \cos(2\mathbf{w}_l t) \\ \langle \hat{\mathbf{S}}_2 \rangle_t &= \langle \hat{\mathbf{S}}_{21} \rangle_0 \cos(2\mathbf{w}_l t) - \langle \hat{\mathbf{S}}_1 \rangle_0 \sin(2\mathbf{w}_l t) \\ \langle \hat{\mathbf{S}}_3 \rangle_t &= \langle \hat{\mathbf{S}}_3 \rangle_0 \end{aligned}$$

Für die Spin- Eigenzustände

$|m_S\rangle$ gilt:

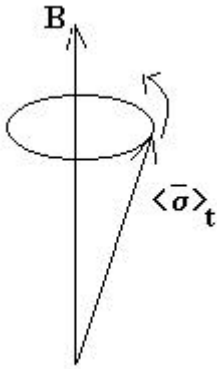
$$\langle \hat{S}_1 \rangle_0 = \langle \hat{S}_2 \rangle_0 = 0$$

$$\langle \hat{S}_3 \rangle_0 = \pm 1$$

Die Spin- Eigenzustände sind also stationär, das heißt: Es existiert keine Dynamik in den Pauli- Matrizen

Für eine spezielle Präparation der Anfangsbedingungen (kein Eigenzustand) gilt:

Spinpräzession ! Der Spin präzediert -> vergl. kohärente Zustände



Quantenmechanik

Einleitung

Inhalt im Grundstudium

Schrödingersche Wellenmechanik

einfache Anwendungen (eindimensionaler Oszi im unendlich tiefen Potenzialtopf, Potezialschwelle, H- Atom)

Inhalt im Hauptstudium

- Ausbau des math. Formalismus (Operatoren, Zustände, Hilbertraum, Darstellungen, Bilder)
- weitere Anwendungen (dreidimensionale Probleme, Mehrteilchen- QM, Spin und Systeme identischer Teilchen, Näherungsmethoden, Atom- und Molekülphysik, nichtstationäre Probleme, Streutheorie)
- Erweiterung der Theorie (Feld- oder 2. Quantisierung, relativistische Quantenmechanik)

Phänomene, die die klassische Physik nicht erklären kann:

- **makroskopische Systeme:**

(Gase, Flüssigkeiten, Festkörper)

- Energieverteilung der Strahlung schwarzer Körper
- Thermodynamisches Verhalten bei niedrigen Temperaturen (spezifische Wärme von Festkörpern)
- Schallphänomene in Festkörpern (Phononen)
- Ferromagnetismus
- Supraflüssigkeit (He-4)
- Supraleitung
- Josephson- Effekt (Tunneln)
- Quanten- Hall Effekt (Nobelpreis 1985: von Klitzing)
- Elektronenmikroskop (Ruska)
- Raster- Tunnelmikroskop(Binning und Rohrer, Nobelpreis 1986)
- Hoch- Temperatur- Supraleitung (Bednorz und Müller, Nobelpreis 1987)

- **Chemie- und Molekülphysik**

- Periodensystem der Elemente
- Molekülspektren
- Chemische Bindung

Atomphysik

- Atomspektren
- Größe und Stabilität der Atome
- photoelektrischer Effekt

Kernphysik

- Kernspektren
- Kernreaktionen
- radioaktiver Zerfall

Die Schrödingersche Wellenmechanik

Historisch

- bis 1900: Klassische Physik
- Eine Erweiterung der klassischen Physik wurde notwendig, da einige experimentelle Fakten nicht zu verstehen sind

1900: Planck

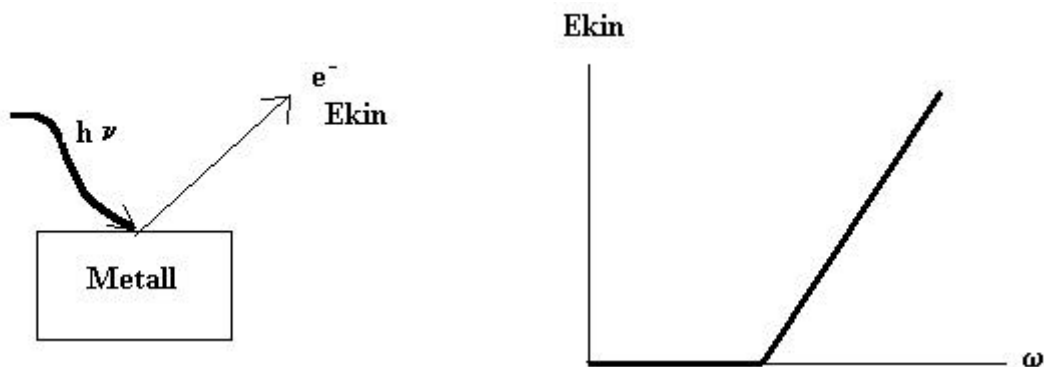
- Hohlraum- Strahlungsformel.

- Dabei erste Quantenhypothese: Energie Austausch zwischen Materie und Strahlung im thermodynamischen Gleichgewicht erfolgt in Quanten mit Energie $E = h\nu$
- $h = 6,6 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$ Plancksches Wirkungsquantum

1905: Einstein

Photoeffekt: Photonen als Lichtquanten mit der Energie $E = h\nu$
und dem Impuls $p = \hbar k$ (Compton 1925)

Beim Photoelektrischen Effekt werden trotz eintreffender Photonen zunächst gar keine Elektronen emittiert. Erst ab einer gewissen Schwellfrequenz des eingestrahlt Lichtes, nicht jedoch ab einer gewissen Schwellintensität kommt es dann zur Emission von Elektronen. Deren kinetische Energie steigt jedoch nicht mit der Intensität der eingestrahlt Photonen sondern hängt lediglich von der Frequenz des eingestrahlt Lichtes ab.



1912/13: N. Bohr

- Energieterme des Atoms
- Rutherford zeigt 1911 durch Streuung von α -Teilchen die Existenz von positiv geladenen Atomkernen mit sehr kleinem Radius.
- Modell: Elektronen kreisen um den Kern. Klassische Elektrodynamik fordert jedoch die Abstrahlung von Energie bei beschleunigten Ladungen. Dann müssten die Elektronen spiralförmig in den Kern stürzen.
- Bohrs ad hoc Postulat: Stabile Bahnen mit diskreten Energien sind möglich:
Energie: E_n
- Strahlung: $h\nu = E_2 - E_1$ bei Übergang $E_2 \rightarrow E_1$

Quantenbedingung:

$$\oint p dq = 2\pi p_j = nh, \quad n \text{ aus ganzen Zahlen}$$

Wir erinnern uns: Dies entspricht einer Transformation der klassischen Hamiltonfunktion auf Wirkungsvariablen!

Man bekommt eine Quantisierungsbedingung, wenn man fordert, dass der Drehimpuls auf den Bahnen quantisiert ist ! Dies war das eigentliche ad-hoc- Postulat von Bohr.

Seine Metapher war: Es existieren nur Bahnen, auf denen ein halbzahliges Vielfaches der Elektronenwellenlänge untergebracht werden kann, um die Elektronenwelle auf der Bahn stetig schließen zu können ! (dazu existieren schöne, veranschaulichende Bildchen mit ganzen Wellen auf den äußeren Bahnen !)

Aus den Gesetzen der klassischen Mechanik folgt dann aus dieser Quantisierungsbedingung für den Drehimpuls eine Quantisierungsbedingung an die Energie:

$$E_n = -\frac{Z^2 e^2}{a_B 2n^2} \quad \text{mit dem Bohrschen Radius } a_B = -\frac{\hbar^2}{m_e e^2}$$

Wir stellen analog zur Darstellung der kinetischen Energie in der Hamiltonschen Mechanik fest: Der Hamiltonoperator kann dargestellt werden:

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r) = \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + V(r)$$

1924 L. de Broglie: Materiewellen

Beliebigen, freien Teilchen wird mittels der Beziehungen $E = h\nu$ und $\bar{p} = \hbar \bar{k}$ eine Frequenz $\omega = 2\pi\nu$ und über $|\bar{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$ eine Wellenlänge (De-Broglie-Wellenlänge) zugeordnet.

Ganz in Analogie zum Licht

Dispersionsbeziehung der De-Broglie Welle:

nichtrelativistisch

relativistisch

$$E = \frac{p^2}{2m} = \hbar \omega(\bar{k})$$

$$E = \sqrt{m_0^2 c^4 + c^2 p^2}$$

$$\omega(\bar{k}) = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

$$\omega(\bar{k}) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{m_0^2 c^4 + c^2 \hbar^2 k^2}$$

Mit der Teilchengeschwindigkeit v ergibt sich:

$$p = mv \quad p = \frac{m_0 v}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad E = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

Phasengeschwindigkeit der de Broglie Welle:

$$v_{ph} := \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m} = \frac{v}{2}$$

$$v_{ph} := \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p} = \frac{c^2}{v} > c$$

$$v_{ph} = v = c \text{ für Photonen im Vakuum}$$

Gruppengeschwindigkeit:

$$v_{Gr} := \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} = v$$

$$v_{Gr} := \frac{d\omega}{dk} = \frac{c^2 k}{\omega} = \frac{c^2}{v_{ph}} = v$$

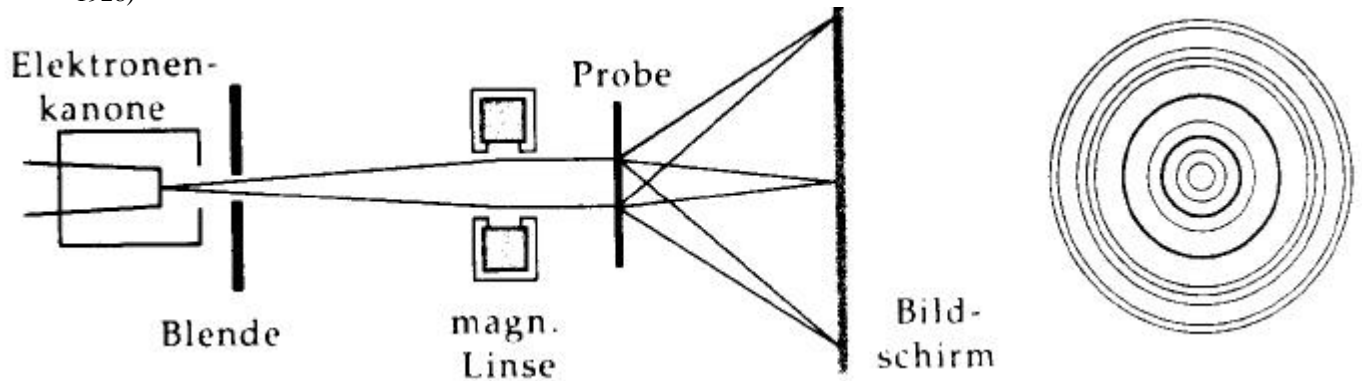
Die Gruppengeschwindigkeit der De-Broglie-Wellen ist also gleich der Teilchengeschwindigkeit

$$\text{Für ebene Wellen gilt: } v_{Gr} := \frac{d\omega}{dk} = \frac{\omega}{k} = v_{ph}$$

für ebene Wellen im Vakuum ist die Frequenz also linear von der Wellenzahl abhängig! Dies gilt nicht mehr im Medium!

Experimenteller Nachweis

- Elektronenstrahlen zeigen Interferenz, also eindeutige Welleneigenschaften (Davisson, Germer, 1927, Rupp 1928)



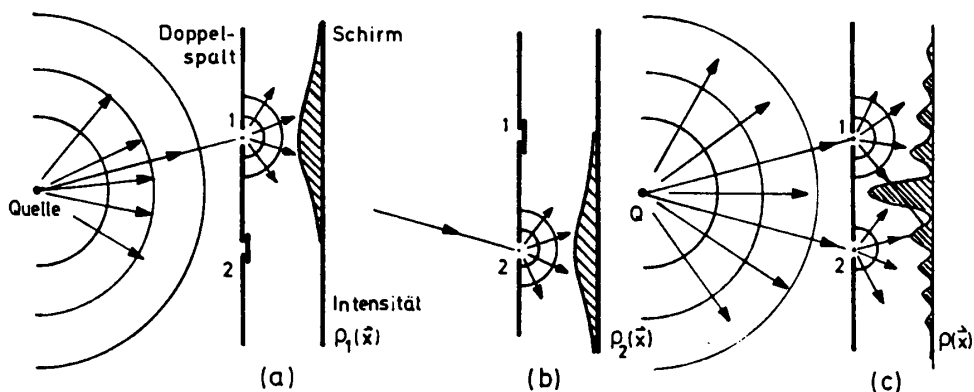
Aus einer Glühkathode mit Beschleunigungsspannung fliegen die Elektronen auf die Probe, eine Metallfolie mit Gitterkonstante a . Dabei zeigen sich Bereiche konstruktiver Interferenz auf dem Fluoreszenzschirm.

Die Bedingung für konstruktive Interferenz (Nebenmaxima) ist:

$$a \sin \theta = n \lambda$$

Anwendung: Elektronenmikroskopie

Doppelspaltexperiment:



Im Fall a) und b) wird nur ein Spalt freigegeben.

Die Intensität der Schwärzung: $I(\vec{x}, t) \sim |\Psi(\vec{x}, t)|^2$ folgt einer Gaußverteilung.

Der Aufbau wird derart realisiert, dass jedes Elektron einen lokalisierten Lichtblitz erzeugt.

$I(\vec{x}, t)$ ist also nicht als Materiedichte sondern als WSK- Dichte, das Teilchen am Ort \vec{x} zur Zeit t anzutreffen, zu interpretieren.

Die Häufigkeitsverteilung de Auftreffens ergibt dann das Beugungsbild.

Dies ist wesentlich. Es handelt sich eben nicht um Interferenz gleichzeitig propagierender Elektronen. Selbst mit einzelnen Elektronen ergibt sich das gezeigte Bild.

Im Fall c), wenn beide Spalte offen sind, kommt es gerade zu der angesprochenen interferierenden Verteilung.

Dabei gilt:

$$I(\vec{x}, t) \sim |\Psi_A(\vec{x}, t) + \Psi_B(\vec{x}, t)|^2$$

Dies ist das Superpositionsprinzip mit der Interpretation des Betragsquadrats als Wahrscheinlichkeit. Aus diesen beiden Axiomen folgt die Interferenz der Quantenmechanik ! Das Superpositionsprinzip folgt aus der Linearität der Schrödingergleichung !

Zusammenfassung: Welle- Teilchen- Dualismus (ohne äußere Potenziale)

Wellenexperimente

Licht: klassisch als Welle verstanden: ω, \bar{k}
 $\omega = c|\bar{k}|$

Elektron: quantenmechanische Vorstellung einer Welle: $\omega(\bar{k}) = \frac{\hbar k^2}{2m}$ $\omega = \frac{E}{\hbar}$ $\bar{k} = \frac{\bar{p}}{\hbar}$

Teilchenexperimente (Photoeffekt, Comptoneffekt)

$E = \hbar \omega$
 nicht klassisch bei Licht: $\bar{p} = \hbar \bar{k}$
 $E = cp$

klassisch bei Elektronen: E, \bar{p} wie bei Teilchen: $E = \frac{p^2}{2m}$ (nichtrelativistisch)

Weitere Entwicklung

1925: Schrödinger E.: Wellen- Mechanik

Schrödingergleichung: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = H\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V(\vec{r})\Psi$

Dies entspricht einer nichtrelativistischen Wellengleichung für die Wellenfunktion $\Psi(\vec{r}, t)$

1925: Heisenberg: Matrizenmechanik

Entwicklung der kanonischen Vertauschungsrelationen für die kanonische Variable \bar{q} , entsprechend $\bar{q} = \vec{r}$, Ort und $\bar{p} = \text{Impuls}$:

$$[p_k, q_l] := \frac{\hbar}{i} \mathbf{d}_{kl}$$

Interpretation von p und q als unendlichdimensionale Matrizen (in der heutigen Sprache: lineare Operatoren im Hilbertraum).

Ab 1925: Quantentheorie (Kopenhagener Deutung)

1927: Max Born: Statistische Interpretation der Wellenfunktion: Betragsquadrat ist Aufenthaltswahrscheinlichkeit

1932: J. v. Neumann: Äquivalenz von Wellen- und Matrizenmechanik

Dirac, P.: Relativistische Quantentheorie

R. Feynman: Quantenelektrodynamik

1.2 Kräftefreie Schrödingergleichung (Keine äußeren Potenziale)

Die Bewegungsgleichung für die Materiewellenfunktion $\Psi(\vec{r}, t)$ soll die folgenden Postulate erfüllen:

1. Sie soll eine DGL 1.Ordnung in der Zeit sein, damit $\Psi(\vec{r}, t)$ durch die Anfangsverteilung $\Psi(\vec{r}, 0)$ bestimmt ist (der qm. Zustand ist vollständig durch $\Psi(\vec{r}, t)$ festgelegt).
2. Sie soll linear in $\Psi(\vec{r}, t)$ sein, damit das Superpositionsprinzip gilt. Außerdem soll sie homogen sein.

Durch das Superpositionsprinzip sind Linearkombinationen von Lösungen wieder Lösungen. Damit werden die Interferenzeffekte mathematisch greifbar.

3. Die Gleichung soll keine speziellen Bewegungsgrößen wie E, \vec{p} enthalten. Nur so können Wellenpakete durch Überlagerung verschiedener \vec{p} - Werte gebildet werden.

4. Ebene Wellen: $\Psi(\vec{r}, t) = e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}$ mit $\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$ sollen Lösung sein. Dabei gilt

$$\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m} \text{ wegen des Zusammenhangs } E = \hbar \omega, p = \hbar k, E = \frac{p^2}{2m}$$

Somit auch für Photonen:

$$E = pc = \hbar \omega, p = \hbar k$$

$$\Rightarrow \frac{\omega}{k} = c$$

Also ergibt sich:

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi = -i \omega \Psi = -i \hbar \frac{k^2}{2m} \Psi = \frac{i \hbar^2}{\hbar 2m} \Delta \Psi$$

Also:

$$i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi$$

Dies ist die freie, zeitabhängige Schrödingergleichung

Bemerkungen

1. Die physikalische Bedeutung der Wellenfunktion $\Psi(\vec{r}, t): |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3 r$ ist die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen zur Zeit t im Volumen $d^3 r$ am Ort \vec{r} zu finden.

$\Psi(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)| e^{i j(r, t)}$ wird Wahrscheinlichkeitsamplitude genannt. Sie ist komplex und besteht aus Betrag und Phase.

Dabei sind die relativen Phasen in Interferenzexperimenten beobachtbar. $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$ ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte.

2. Normierung: $\int_V |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3 r = 1$

3. Die Schrödingergleichung ist ZEITUMKEHRINVARIANT, das heißt zu jedem Bewegungsablauf $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$ ist auch der zeitumgekehrte $|\Psi(\vec{r}, -t)|^2$ ein physikalisch möglicher Vorgang:

Die Transformationsvorschrift lautet: $t \rightarrow -t$
 $i \rightarrow -i$

Also: $\Psi(\vec{r}, t) \rightarrow \Psi^*(\vec{r}, -t)$

Beweis:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi \text{ werde gelöst von } \Psi(\vec{r}, t)$$

Die ganze Gleichung kann natürlich komplex konjugiert werden:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi^* = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi^*$$

Ersetzt man nun t durch -t, so folgt:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(\vec{r}, -t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi^*(\vec{r}, -t)$$

Also:

Mit $\Psi(\vec{r}, t)$ ist auch $\Psi^*(\vec{r}, -t)$ Lösung der Schrödingergleichung

Zu Punkt 3: Mathematisch bedeutet dies: Alle Transformationen müssen unitär sein ! Physikalisch sind nur unitäre Transformationen, weil man sonst durch Zeitumkehr nicht wieder in den Ausgangszustand zurückkommt !

Wellenpakete

Ebene Wellen der Form $\Psi(\vec{r}, t) = C e^{i(kx - \omega t)}$ haben eine räumlich homogene Wahrscheinlichkeitsdichte $|C|^2$, falls dieser Vorfaktor nicht vom Ort abhängt (im Gegensatz zu Kugelwellen).
 Die Phase verschwindet bei Betragsbildung völlig !

Lokalisierte Zustände können grundsätzlich durch die Superposition ebener Wellen dargestellt werden:

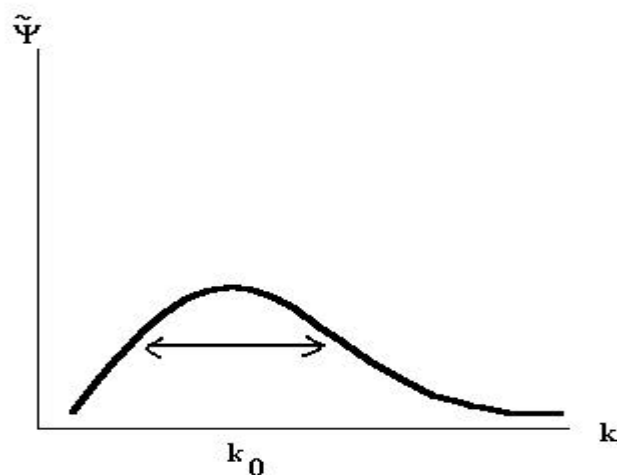
$$\Psi(\vec{r}, t) = \int \tilde{\Psi}(\vec{k}) e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} d^3k$$

$$\omega(\vec{k}) = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

Man kann sich derartige Wellenpakete veranschaulichen:

eindimensional:

Die Phase $kx - \omega(k)t$ kann nun um $k=k_0$ entwickelt werden:



$$\omega(\bar{k}) = \omega(k_0) + \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} (k - k_0) + \dots$$

Dabei sei:

$$\omega(k_0) := \omega_0$$

$$(k - k_0) := k'$$

$$\left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} = v_g$$

Somit folgt für obige Wellenfunktion (unser Paketchen):

$$\Psi(\vec{r}, t) = \int dk \tilde{\Psi}(k_0 + k') e^{i[(k_0 + k')x - (\omega_0 + v_g k')t]}$$

$$\Psi(\vec{r}, t) = e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \int dk \tilde{\Psi}(k_0 + k') e^{ik'[x - v_g t]}$$

Dabei stellt

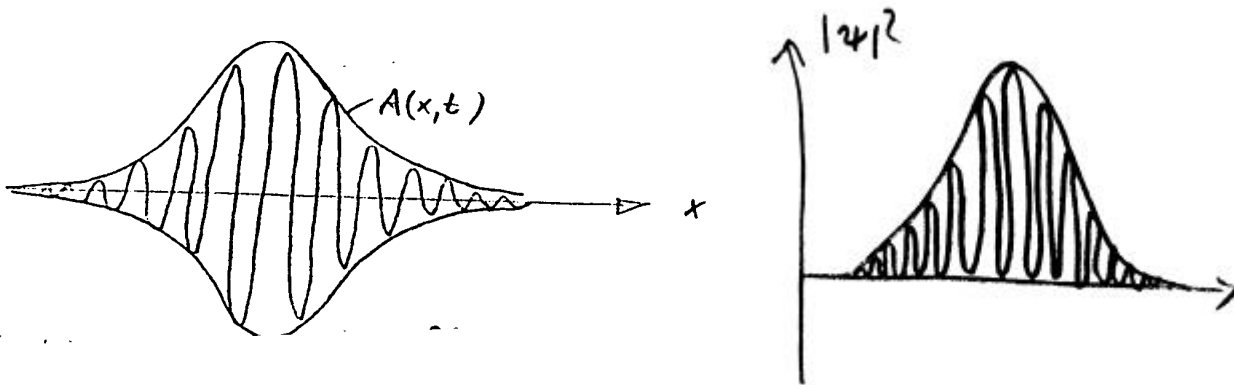
$e^{i(k_0 x - \omega_0 t)}$ ein Trägerwelle mit der Phasengeschwindigkeit $v_{Ph} = \frac{\omega_0}{k_0}$ dar.

und $\int dk \tilde{\Psi}(k_0 + k') e^{ik'[x - v_g t]}$ repräsentiert eine Einhüllende $A(x, t)$, die langsam zeit- und ortsveränderlich

ist, da ja nur die Terme mit $|k'| \ll k_0$ nennenswerte Beiträge zum Integral liefern.

Wegen der Taylorentwicklung ,macht dieser Schritt jedoch nur Sinn für Systeme, die um k_0 lokalisiert sind !
Also für impulsmäßig lokalisierte Systeme (endliche Farbbandbreite eines Lichtpulses etc...).

Grafisch:



Bewegung der Einhüllenden:

Setze:

$$A(x, t) = \int dk \tilde{\Psi}(k_0 + k') e^{ik'[x - v_g t]} = \text{const}$$

Dies gilt jedoch nur infinitesimal. Man kann jedoch das MAXIMUM von $A(x, t)$ wählen:

$$dA(x, t) = \frac{\partial A(x, t)}{\partial x} dx + \frac{\partial A(x, t)}{\partial t} dt$$

$$dA(x,t) = \int dk \tilde{\Psi}(k_0 + k) e^{ik'[x - v_g t]} \{ik' dx - ik' v_g dt\} = 0$$

Dies jedoch bedingt:

$$\{ik' dx - ik' v_g dt\} = 0 \text{ Also:}$$

$$dx = v_g dt \Rightarrow \left. \frac{dx}{dt} \right|_{A=\text{const}} = v_g$$

Jedenfalls bewegt sich der Schwerpunkt mit der Gruppengeschwindigkeit v_g

$$v_g = \left. \frac{d\mathbf{p}}{dk} \right|_{k_0} = \frac{\hbar k_0}{m} = \frac{p_0}{m} = v \text{ als klassische Teilchengeschwindigkeit}$$

Zeitliche Entwicklung der Einhüllenden:

Sei $t=0$

$$\Psi(x,0) = \int_{-\infty}^{\infty} dk \tilde{\Psi}(k) e^{ikx}$$

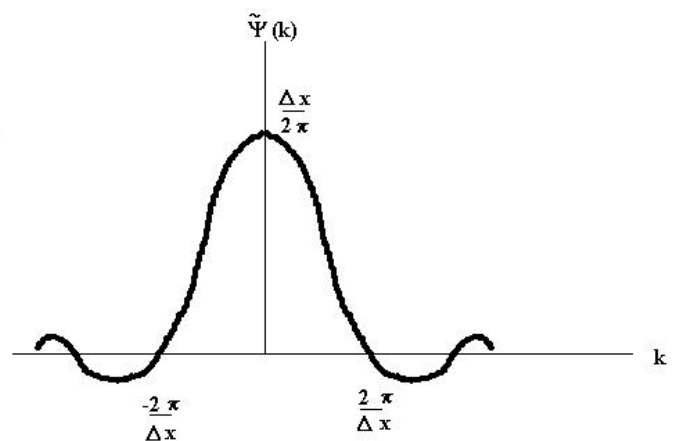
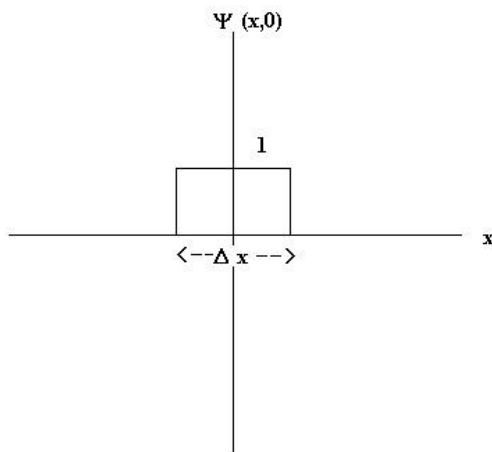
Dies ist gerade die Fourierdarstellung mit der Fourier-Transformierten

$$\Phi(k) = \sqrt{2\mathbf{p}} \tilde{\Psi}(k) :$$

$$\Phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\mathbf{p}}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi(x,0) e^{-ikx}$$

Interpretation der Unschärferelation: je schärfer lokalisiert im k -Raum das Wellenpaket ist, desto breiter ist es im x -Raum und umgekehrt. Dies ist jedoch eine ganz allgemeine Eigenschaft der Fouriertransformation.

Beispiel: Stufenfunktion (rec-Func)



$$\tilde{\Psi}(k) = \frac{1}{2\mathbf{p}} \int_{-\frac{\Delta x}{2}}^{\frac{\Delta x}{2}} dx e^{-ikx} = \frac{1}{2\mathbf{p}} \left. \frac{e^{-ikx}}{-ik} \right|_{-\frac{\Delta x}{2}}^{\frac{\Delta x}{2}} = \frac{\Delta x}{2\mathbf{p}} \frac{\sin\left(k \frac{\Delta x}{2}\right)}{k \frac{\Delta x}{2}}$$

Die Fouriertransformierte der Rec- Funktion ist als die Sincfunktion mit der inversen Breite der Spaltfunktion.

Denn: $\sin\left(k \frac{\Delta x}{2}\right)$ moduliert im k- Raum entsprechend schnell, wenn die Konstante Δx entsprechend groß ist !

Für $t > 0$ zerfließt das Wellenpaket, da sich die einzelnen k- Komponenten verschieden schnell ausbreiten:

$$v_{ph} = \frac{\mathbf{w}}{k} = \frac{\hbar k}{m} \text{ Grund ist die nichtlineare Dispersionsbeziehung } \mathbf{w}(k)$$

Das quantenmechanische Wellenpaket zeigt nun bereits im kräftefreien Fall Dispersion (Im Gegensatz zu elektromagnetischen Wellen im Vakuum).

Das heißt, beispielsweise ein lokalisiertes Gauß- Paket " zerfließt " bei Ausbreitung mit der Gruppengeschwindigkeit v_g .

Dies muss im Sinne von Wahrscheinlichkeit interpretiert werden. (Interessantes Argument gegen Befürworter einer Theorie von Materiedichte: Das Auseinanderlaufen des Paketes wäre ein Widerspruch zur Stabilität der Materie !) Es handelt sich um eine Verbreiterung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit und nicht um ein Zerfließen von Materie !!

Also: nicht die Materie ist hier diffus verteilt, sondern nur ihre Aufenthaltswahrscheinlichkeit !!

Makroskopische Objekte zerfließen auf sehr langer Zeitskala ! Auch hinsichtlich der Aufenthaltswahrscheinlichkeit !

1.2 Schrödingergleichung mit äußeren Potenzialen

Für $\Psi(\vec{r}, t) = e^{i(\vec{k}\vec{r} - \mathbf{w}t)}$ als Lösung der kräftefreien Schrödingergleichung gilt:

$$\frac{\hbar}{i} \nabla \Psi(\vec{r}, t) = \hbar \vec{k} \Psi(\vec{r}, t) = \vec{p} \Psi(\vec{r}, t)$$

Mit

\vec{p} , dem Impuls des Elektrons nach De Broglie

Im kräftefreien Zustand Ψ erhält man also den Meßwert des Impulses \vec{p} durch die Anwendung des

Impulsoperators $\frac{\hbar}{i} \nabla$ auf die Wellenfunktion

Die Gleichung $\frac{\hbar}{i} \nabla \Psi(\vec{r}, t) = \hbar \vec{k} \Psi(\vec{r}, t) = \vec{p} \Psi(\vec{r}, t)$ ist eine Eigenwertgleichung des Impulsoperators:

$$\hat{\vec{p}} \Psi(\vec{r}, t) = \vec{p} \Psi(\vec{r}, t)$$

Somit sehen wir im quantenmechanischen Formalismus folgende Zusammenhänge:

Zusand -> beschrieben durch Wellenfunktion Psi (beschreibt den Zustand vollständig)

Observable -> Beispiel: Impulsoperator $\frac{\hbar}{i} \nabla$

Meßwert: -> Eigenwert eines Operators, beim Impuls: $\hbar \vec{k} = \vec{p} \in R^3!$

Mittelwert vieler Messungen -> Erwartungswert: $\langle \hat{\vec{p}} \rangle = \int_{R^3} \Psi^* \hat{\vec{p}} \Psi d^3 r$

Für einen Impuls- Eigenzustand:

$$\int_{R^3} \Psi^* \hat{\vec{p}} \Psi d^3 r = \int_{R^3} \Psi^* \vec{p} \Psi d^3 r = \vec{p} \int_{R^3} \Psi^* \Psi d^3 r = \vec{p}$$

Bemerkung:

Klassische Mechanik: Der Impuls ist Erhaltungsgröße, falls keine äußeren Kräfte wirken

Quantenmechanik: Der Impuls-Eigenzustand $\Psi(\vec{r}, t) = e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}$ ist lediglich Lösung der FREIEN Schrödingergleichung

Operator der Energie/ Hamiltonoperator

$$\text{Kinetische Energie: } T = \frac{1}{2m} p^2 \rightarrow \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla \right)^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta =: \hat{H}$$

Da die Energie erhalten bleibt gewinnt man eine stationäre Schrödingergleichung:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

Die Bewegung des Zustandes wird wieder durch die Schrödingergleichung beschrieben:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H}\Psi$$

Diese ist jedoch die kräftefreie Schrödingergleichung.

Dies kann auf äußere Potenziale verallgemeinert werden: Wir ziehen die Analogie

Hamiltonfunktion \rightarrow Hamiltonoperator:

$$H(\vec{p}, \vec{q}) = T + V = \frac{1}{2m} p^2 + V(\vec{q}) \rightarrow \hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla \right)^2 + V(\hat{\vec{r}}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\hat{\vec{r}})$$

Die verallgemeinerte Koordinate q wird dabei durch den Orts- OPERATOR ersetzt .

also folgt:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \hat{H}\Psi(\vec{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\hat{\vec{r}}) \right) \Psi(\vec{r}, t)$$

Dies ist die Schrödinger- Gleichung, ein Postulat, durch einen Analogieschluss motiviert.

Vielelektronensysteme:

Die klassische Hamiltonfunktion für ein System N gleicher Teilchen mit den Koordinaten $\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_N$ und den Impulsen $\vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N$ lautet:

$$H(\vec{p}, \vec{q}) = T + V = \sum_i \left(\frac{1}{2m} p_i^2 + V(\vec{q}_i) \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} W(\vec{q}_i - \vec{q}_j)$$

W sei dabei der Wechselwirkungsoperator (noch unbekannt), so dass wir den Hamilton- Operator angeben können:

$$\hat{H} = \sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + V(\vec{r}_i) \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} W(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$$

Es ergibt sich die Schrödingergleichung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H}\Psi, \text{ deren Eigenfunktionen die Vielteilchenwellenfunktionen}$$

$\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t)$ sind.

Die Wahrscheinlichkeit, zur Zeit t das Elektron $i=1$ in d^3r_1, \dots usw... und das Elektron $i=N$ in d^3r_N anzutreffen lautet:

$$|\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t)|^2 d^3r_1 \dots d^3r_N$$

Also wird damit ein Gleichzeitiges Ereignis aller Elektronen beschrieben:

$$i = 1 \text{ an } \vec{r}_1, \dots$$

$$i = N \text{ an } \vec{r}_N$$

Dabei wird jedoch die Ununterscheidbarkeit zunächst noch nicht berücksichtigt.

Merke:

$|\Psi(\vec{r})|^2$ ist eine Funktion, die Wahrscheinlichkeitsdichte, das Teilchen über dem Ort anzutreffen, an best. orten anzutreffen. Es macht keinen Sinn, davon zu reden, wie große die Wahrscheinlichkeit ist, ein Teilchen am Ort \vec{r} anzutreffen. Diese Wahrscheinlichkeit ist immer NULL !!!

Das Elektron im elektromagnetischen Feld

Die Klassische Lagrangefunktion lautet: $L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) = T - V = \frac{m}{2} \dot{\vec{q}}^2 + e[\dot{\vec{q}} \cdot \vec{A}(\vec{q}, t) - \Phi(\vec{q}, t)]$

Das elektrische Feld lautet:

$$\vec{E} = -\nabla\Phi(\vec{q}, t) - \dot{\vec{A}}(\vec{q}, t) \text{ elektrisches Feld mit dem skalaren Potenzial } \Phi(\vec{q}, t)$$

Das magnetische :

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A}(\vec{q}, t) \text{ magnetische Induktion mit dem Vektorpotenzial } \vec{A}(\vec{q}, t)$$

und mit der Ladung $e < 0$ im mks- System ! (SI- Einheiten)

Die klassische Hamiltonfunktion finden wir über die kanonisch konjugierten Impulse:

$$p_i = \frac{\partial L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t)}{\partial \dot{q}_i} = m\dot{q}_i + eA_i(\vec{q}, t)$$

$$\Leftrightarrow \dot{\vec{q}} = \frac{1}{m}(\vec{p} - e\vec{A})$$

Dabei bezeichnet $\vec{p} - e\vec{A}$ den kinetischen Impuls. \vec{p} ist der kanonische Impuls (eine zum Ort kanonisch konjugierte Variable, kanonisch konjugiert \Leftrightarrow erfüllt Poissonklammerformalismus \rightarrow ist für den Hamiltonformalismus geeignet !)

Es ergibt sich die klassische Hamiltonfunktion:

$$H(\vec{p}, \vec{q}) = \vec{p}\dot{\vec{q}} - L = T + V = \left(m\dot{\vec{q}} + e\vec{A}\right)\dot{\vec{q}} - \frac{m}{2}\dot{\vec{q}}^2 - e(\dot{\vec{q}}\vec{A} - \Phi) = \frac{m}{2}\dot{\vec{q}}^2 + e\Phi = \frac{1}{2m}(\vec{p} - e\vec{A})^2 + e\Phi$$

Also können wir auch hier analog den Hamiltonoperator finden:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{\vec{p}} - e\vec{A}(\hat{\vec{r}}, t))^2 + e\Phi(\hat{\vec{r}}, t) = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - e\vec{A}(\hat{\vec{r}}, t)\right)^2 + e\Phi(\hat{\vec{r}}, t)$$

Wir identifizieren:

$$e\Phi(\hat{\vec{r}}, t) = V(\vec{r}, t)$$

Dies ist ein schönes Ergebnis, weil eben, wie in der klassischen Hamiltonfunktion die Kräfte als Gradienten der Potenziale folgen:

$$\vec{F}_{el.} = -e\nabla\Phi(\hat{\vec{r}}, t)$$

$$\vec{F}_{mag.} (Lorentz) = q\vec{v} \times \vec{B}$$

Diese Gleichung gilt natürlich nur für nichtrelativistische Elektronen,. Die Potenziale Φ, \vec{A} werden von außen vorgegeben. und sind nicht quantisiert

Eichtransformation:

$$\bar{A}'(\vec{r}, t) = \bar{A}(\vec{r}, t) + \nabla G(\vec{r}, t)$$

$$\Phi'(\vec{r}, t) = \Phi(\vec{r}, t) - \dot{G}(\vec{r}, t)$$

Dies ist eine zulässige Umeichung mit einer beliebigen, zweifach stetig diffbaren Funktion $G(\vec{r}, t)$

Durch Einsetzen in

$$\bar{E} = -\nabla\Phi(\vec{q}, t) - \dot{\bar{A}}(\vec{q}, t)$$

$$\bar{B} = \nabla \times \bar{A}(\vec{q}, t)$$

zeigt sich

$$\bar{E} = \bar{E}'$$

$$\bar{B} = \bar{B}'$$

Jedoch muss die Wellenfunktion auch umgeeicht werden:

$$\Psi'(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r}, t) e^{i \frac{e}{\hbar} G(\vec{r}, t)}$$

Die Beschränkung der Eichung auf Phasenfaktoren geschieht wegen der Eichinvarianz der Wahrscheinlichkeitsdichte:

$$|\Psi'(\vec{r}, t)|^2 = |\Psi(\vec{r}, t)|^2$$

Beweis:

$$\text{Zeige: } i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi' = \hat{H}' \Psi' \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H} \Psi$$

$$1) \quad \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi'(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{i} \nabla \left\{ \Psi(\vec{r}, t) e^{i \frac{e}{\hbar} G(\vec{r}, t)} \right\} = e^{i \frac{e}{\hbar} G(\vec{r}, t)} \left\{ \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi(\vec{r}, t) + e(\nabla G(\vec{r}, t)) \Psi(\vec{r}, t) \right\}$$

$$2) \quad \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - e\bar{A}' \right) \Psi'(\vec{r}, t) = e^{i \frac{e}{\hbar} G(\vec{r}, t)} \left\{ \frac{\hbar}{i} \nabla - e(\bar{A}' - \nabla G(\vec{r}, t)) \right\} \Psi(\vec{r}, t) = e^{i \frac{e}{\hbar} G(\vec{r}, t)} \left\{ \frac{\hbar}{i} \nabla - e\bar{A} \right\} \Psi(\vec{r}, t)$$

$$3) \quad \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - e\bar{A}' \right)^2 \Psi'(\vec{r}, t) = e^{i \frac{e}{\hbar} G(\vec{r}, t)} \left\{ \frac{\hbar}{i} \nabla - e\bar{A} \right\}^2 \Psi(\vec{r}, t)$$

$$4) \quad \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - e\bar{A}' \right)^2 \Psi'(\vec{r}, t) + e\Phi \Psi'(\vec{r}, t) = e^{i \frac{e}{\hbar} G(\vec{r}, t)} \left\{ \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - e\bar{A} \right)^2 + e\Phi - e\dot{G}(\vec{r}, t) \right\} \Psi(\vec{r}, t)$$

dabei:

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - e\bar{A}' \right)^2 \Psi'(\vec{r}, t) + e\Phi \Psi'(\vec{r}, t) = \hat{H}' \Psi'(\vec{r}, t)$$

$$\left(\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - e\bar{A} \right)^2 + e\Phi \right) \Psi(\vec{r}, t) = \hat{H} \Psi(\vec{r}, t)$$

Schritt 4 repräsentiert die linke Seite der Schrödingergleichung. Gleichzeitig:

$$5) \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi'(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \Psi(\vec{r}, t) e^{i \frac{e}{\hbar} G(\vec{r}, t)} \right\} = e^{i \frac{e}{\hbar} G(\vec{r}, t)} \{ i\hbar \dot{\Psi}(\vec{r}, t) + e\dot{G} \Psi(\vec{r}, t) \}$$

Da Gleichung 4) und 5) gleich sein müssen folgt als Bedingung

$$\hat{H} \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \dot{\Psi}(\vec{r}, t)$$

Was ja gerade die nicht umgekehrte Schrödingergleichung ist.

Fazit: Die Schrödingergleichung ist eichinvariant, falls die Wellenfunktion gemäß

$$\Psi'(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r}, t) e^{i \frac{e}{\hbar} G(\vec{r}, t)}$$

umgekehrt wird.

Einwurf bis Aharonov-Bohm -Effekt (kein Vorlesungsstoff !!)

Also: Die Quantenmechanik ist invariant gegen Phasenverschiebungen der Wellenfunktion ! Die Phase der Wellenfunktion kann damit gar keine Observable sein ! (absolut gesehen)

Interessanterweise wird in der Quantenfeldtheorie die Phase der Wellenfunktion als die kanonisch konjugierte Variable zur Ladung aufgefasst. (Es existiert also ein Poissonklammerformalismus. Die Phase ist ein verallgemeinerter Ort und die Ladung der dazu verallgemeinerte kanonisch konjugierte Impuls).

Die Ladung ist grundsätzlich erhalten. Dies gilt ebenso wie beispielsweise die grundsätzliche Erhaltung der Energie im Gesamtsystem. Nur durch nichtkonservative Potentiale kann die Energie dissipativ verloren gehen. In einer Gesamtwellenfunktion, die auch die Energie, also die Teilchen der Umgebung beinhaltet, geht jedoch keine Energie verloren. Dies kommt immer durch den entsprechenden Schritt zur Einschränkung auf ein Untersystem, welches in Wechselwirkung mit dem anderen System steht (Potenzial)

In diesem Sinne ist die Zeit als kanonisch konjugierte Variable zur Energie (Energie- Zeit- Unschärfe, heisenbergsche Bewegungsgleichung, Poissonklammerformalismus) auch nicht direkt beobachtbar. Wie man aus der Einschränkung des Problems mit der Energiedissipation sieht, gilt dies jedoch eingeschränkt. Die Zeit ist in gewisser Weise natürlich beobachtbar. Wir selbst machen dies als ein Lebewesen. Jedoch existiert kein Zeitoperator. Eine absolute Zeit scheint nicht zu existieren in unseren Bezugssystemen.

Mit der Ladung scheint dies noch einsichtiger. Es gilt Ladungserhaltung. Grundsätzlich. Nur neue entstehende Teilchen können die Ladung davontragen (Austauschbosonen der schwachen Wechselwirkung) Die dazu kanonisch konjugierte Phase ist jedoch nicht beobachtbar. Es existiert zu mindest kein hermitescher Phasenoperator, der beobachtbare Eigenwerte besitzt.

Also: Die Phase ist nicht beobachtbar, die Quantenmechanik ist invariant gegen Phasenverschiebungen der

Wellenfunktion $\Psi'(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r}, t) e^{i \frac{e}{\hbar} G(\vec{r}, t)}$ (Mit der Einschränkung, dass wegen der Eindeutigkeit der Wellenfunktion in geschlossenen Systemen die Phase dann um ganzzahlige Vielfache von 2π verschoben werden muss, was trotz der Unbeobachtbarkeit der Phase dann auf die beobachtbare Quantisierung bestimmter Observablen im entsprechenden Potenzial führt (Elementarladungen, geschlossene Wellenfunktion im Wasserstoffatom als Ansatz für die Impulsquantisierung, siehe unten beim Aharonov Bohm Effekt und der Flussquantisierung).

$$\Psi'(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r}, t) e^{i \frac{e}{\hbar} G(\vec{r}, t)}$$

mit $\Psi(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)| e^{i\vec{j}}$ und wegen $[\hat{q}, \vec{j}] \neq 0$ (Quantisierungsbedingung, die

Poissonklammerformalismus dann gemäß Vertauschungsrelation erfüllt), zum Ausdruck der kanonisch konjugierten Beziehung dieser Variablen, ist \vec{j} folglich unbeobachtbar und q grundsätzlich erhalten. Ebenso stellt man dies für die Nichtexistenz eines hermiteschen Zeitoperators fest, der beobachtbare, reelle Eigenwerte für eine absolute Zeit liefern sollte. Ebenso $[\hat{E}, \hat{t}] \neq 0$, also E, t- Unschärfe, wie q, \vec{j} - Unschärfe.

Hier kann man natürlich leicht nach weiteren Beispielen für absolute Erhaltungsgrößen und ihre zugehörigen kanonischen Variablen suchen. Beispielsweise bei Leptonenzahl und Baryonenzahl. Diese sind auch absolut erhalten. Oder die Anzahl der Leptonenfamilien (Baryonenfamilienzahlerhaltung wird unter der schwachen Wechselwirkung verletzt). Diese Verletzung wiederum gibt dann eine Nichterhaltung unter einer bestimmten Kraft, die über die Gründe der Beobachtbarkeit (spontane Symmetriebrechung) Aufschluss geben könnten. Dies müsste dazu genauer untersucht werden

Ist die kanonisch konjugierte Variable zur Leptonenzahl grundsätzlich nicht beobachtbar, die zur Baryonenzahl ebenso, die zur Baryonenfamilienzahl vielleicht dann doch wieder ? Unter der schwachen Wechselwirkung, die ja die Strangeness- Erhaltung verletzt ?

Warum wird die Erhaltung dann gerade hier gebrochen, kann man da veranschaulichende Modelle finden und Schlüsse ziehen ?

Potenziale verletzen Erhaltung. Andere Größen werden nicht so einfach beobachtbar, weil diese Potenziale existieren. Auf subtilerer Ebene muss diese Analogie zu suchen sein. In allen Potenzialen ist der Impuls \hat{p} nicht erhalten, (außer in reinen Wirbelfeldern). Ist dieses Potenzial dann nötig, um den Ort beobachtbar zu machen ? Im B- Feld, einem reinen Wirbelfeld ist die Ablenkung proportional zum Impuls, jedoch ist der Impuls hinsichtlich dieses Feldes erhalten ! (Natürlich ist der Impuls hier dennoch nicht vollständig erhalten, weil immer andere Felder vorhanden sind, mindestens die reine Selbstwechselwirkung mit dem eigenen Feld))

$\nabla\Phi \neq 0 \Rightarrow \frac{d\hat{p}}{dt} \neq 0 \Leftrightarrow \frac{dH}{d\hat{x}} \neq 0$ (der Impuls ist hier natürlich selbst auch beobachtbar, Ladung ist grundsätzlich beobachtbar). Vor allem jedoch ist der Ort beobachtbar, er existiert. Das Teilchen hat einen Ort im Moment der Messung.

Wenn alle Orte gleich sind, also völlige Invarianz bezüglich des Ortes herrscht, dann kann man den Ort natürlich nicht messen. Es gibt keinen beobachtbaren Ort und der Impuls ist in jedem Fall erhalten. So bald ein Potenzial existiert, irgendwelcher Art, wird diese Symmetrie aufgebrochen. So bald eine schwache Wechselwirkung existiert, besteht die Symmetrie bezüglich der kanonischen Variable zur Strangeness nicht mehr..., die Strangeness ist zeitlich nicht mehr erhalten.

Jedoch ist beispielsweise $\frac{dE}{dt} = 0$, nach einem Zeitoperator kann man lange suchen. Er existiert nicht, zu mindest nicht als hermitescher Operator mit reellen Eigenwerten.

Ebenso für die Phase $\frac{dQ}{dt} = 0$, es existiert kein hermitescher Phasenoperator, der reelle Eigenwerte, die Phase, die beobachtbar wäre, liefern würde.

Nebenbemerkung: Die Dimension aller Kommutatoren ist die einer Wirkung. Sie wird minimal sein, jedoch verschwindet sie prinzipiell nicht bei kanonisch konjugierten Variablen mit Unschärfe (☺)

$$[[\hat{E}, \hat{t}], [\hat{p}, \hat{x}], \dots] = J_S$$

Man könnte hier ein Postulat formulieren, welches lautet: Die Prinzipielle Invarianz der Quantenmechanik gegen die Transformation hinsichtlich einer verallgemeinerten Variable, macht diese Variable aus Symmetriegründen prinzipiell unbeobachtbar. Diese Variable muss dann zu mindest zyklisch sein (die Lagrange- und Hamiltonfunktionen dürfen nicht von ihr abhängen). Die zugehörige kanonisch konjugierte Variable (mit den zugehörigen Vertauschungsrelationen) ist dann zeitlich vollständig erhalten, bis auf die Unschärfe.

Sollte für Phasen- und Ladungsoperator $[\hat{q}, \hat{J}] = 0$ gelten, so stört dies die obige Argumentation nicht, jedoch würde dies im Rahmen der Theorie beweisen, dass die Ladung nicht fluktuiert. Möglicherweise hätte es gar besondere Auswirkungen auf die prinzipielle Unbeobachtbarkeit der Phase. Vielleicht auch auf die Art der Unbeobachtbarkeit unter verschiedenen Messungen. So können wir die Zeit wahrnehmen, nicht jedoch unbedingt die Phase.

Aharonov-Bohm- Effekt

Zunächst werde ein Magnetfeld $\vec{B}(\vec{r})$ im Inneren einer langen Spule erzeugt.
Außerhalb der Spule sei $B=0$

Die Spule werde von einem zeitlich konstanten Strom durchflossen, so dass $\vec{B}(\vec{r})$ zeitunabhängig wird.
Außerhalb der Spule ist $B=0$, jedoch muss das Vektorpotenzial nicht notwendigerweise verschwinden. Es darf nur keine Wirbel aufweisen.
Außerhalb der Spule gilt:

$$\vec{B}(\vec{r}) = \nabla \times \vec{A} = 0$$

$$\Rightarrow \vec{A} = \nabla \Lambda(\vec{r}) \neq 0$$

Das Vektorpotenzial muss sich als Gradient eines skalaren Feldes darstellen lassen (im Außenraum).

Betrachten wir den Bereich $\vec{B}(\vec{r}) = \nabla \times \vec{A} = 0$

Wir können das magnetostatische Potenzial $\Lambda(\vec{r})$ retour aus dem Vektorpotenzial gewinnen:

$$\Lambda(\vec{r}) = \int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}} \vec{A}(\vec{s}) d\vec{s}$$

$$\Rightarrow \nabla \Lambda(\vec{r}) \neq 0$$

Wegen $\nabla \Lambda(\vec{r}) \neq 0$ ist das System integrierbar \rightarrow Lösbar durch Integration !

Für einen beliebigen Weg innerhalb des einfach zusammenhängenden Gebietes mit $\vec{B}(\vec{r}) = \nabla \times \vec{A} = 0$

Unsere Wellenfunktion gehorcht der Gleichung:

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - e\vec{A} \right)^2 \Psi(\vec{r}, t) + e\Phi \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t)$$

Wir führen die Eichtransformation durch:

$$\vec{A}' = \vec{A} - \nabla \Lambda(\vec{r}) := \vec{A} + \nabla G(\vec{r}) = 0$$

Wie oben gezeigt wurde, gehorcht nun die Wellenfunktion

$$\Psi'(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r}, t) e^{-i \frac{e}{\hbar} \Lambda(\vec{r}, t)}$$

$$\text{der Gleichung } \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla \right)^2 \Psi'(\vec{r}, t) + e\Phi \Psi'(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi'(\vec{r}, t)$$

Ansatz: Umeichung der Wellenfunktion bei der Eichtransformation der Potenziale !

Also:

$$\Psi'(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r}, t) e^{-i \frac{e}{\hbar} \int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}} \vec{A}(\vec{s}) d\vec{s}}$$

Der Phasenterm ist also wegababhängig ! Es kommt zu Interferenzen !

Dabei gilt:

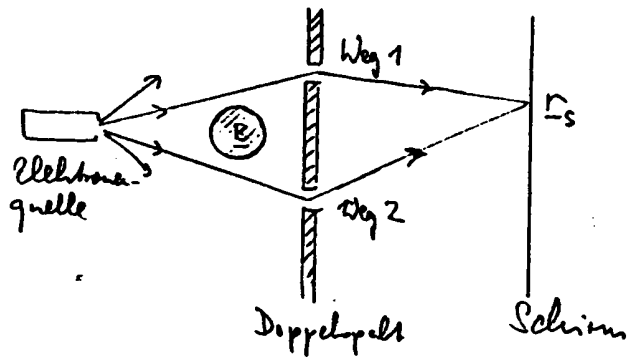
$$\Psi(\vec{r}, t) : \vec{A} \neq 0$$

und für

$$\Psi'(\vec{r}, t) : \vec{A}' = 0$$

Elektroneninterferenzexperiment:

Neben der geschilderten Spule führe man ein Elektroneninterferenzexperiment durch:



Das Elektron bewegt sich dabei nur in Gebieten mit $B=0$ (die Spule ist durch einen unendlich hohen Potenzialwall abgeschirmt).

Falls nur Spalt 1 offen ist, so gilt:

$$\Psi_1(\vec{r}_s) = \Psi_1' e^{-i \frac{e}{\hbar} \int \vec{A}(\vec{s}) d\vec{s}}$$

Falls nur Spalt 2, so gilt:

$$\Psi_2(\vec{r}_s) = \Psi_2' e^{-i \frac{e}{\hbar} \int \vec{A}(\vec{s}) d\vec{s}}$$

$$\Psi_i(\vec{r}_s) \rightarrow \vec{A} \neq 0$$

Mit $\Psi_2' \rightarrow \vec{A}' = 0$

Sind beide Spalte offen:

$$\Psi(\vec{r}_s) = \Psi_1(\vec{r}_s) + \Psi_2(\vec{r}_s) = \Psi_1' e^{-i \frac{e}{\hbar} \int \vec{A}(\vec{s}) d\vec{s}} + \Psi_2' e^{-i \frac{e}{\hbar} \int \vec{A}(\vec{s}) d\vec{s}}$$

Es gilt:

$$\int_1 \vec{A}(\vec{s}) d\vec{s} - \int_2 \vec{A}(\vec{s}) d\vec{s} = \oint \vec{A}(\vec{s}) d\vec{s} = \int d\vec{f} \text{ rot } \vec{A} = \int \vec{B} d\vec{f} = \Phi_B$$

Dies ist der EINGESCHLOSSENE magnetische Fluss, also der magnetische Fluss innerhalb der Spule.

Damit folgt:

$$\Psi(\vec{r}_s) = \Psi_1' e^{-i \frac{e}{\hbar} \int \vec{A}(\vec{s}) d\vec{s}} + \Psi_2' e^{-i \frac{e}{\hbar} \int \vec{A}(\vec{s}) d\vec{s}} = \left(\Psi_1'(\vec{r}_s, t) e^{-i \frac{e}{\hbar} \Phi_B} + \Psi_2'(\vec{r}_s, t) \right) e^{-i \frac{e}{\hbar} \int \vec{A}(\vec{s}) d\vec{s}}$$

Denn:

$$\begin{aligned}
 \Psi(\vec{r}_s) &= \Psi_1' e^{-i\frac{e}{\hbar} \int \vec{A}(\vec{s}) d\vec{s}} + \Psi_2' e^{-i\frac{e}{\hbar} \int \vec{A}(\vec{s}) d\vec{s}} = \left(\Psi_1'(\vec{r}_s, t) e^{i\frac{e}{\hbar} \int \vec{A}(\vec{s}) d\vec{s}} - i\frac{e}{\hbar} \int \vec{A}(\vec{s}) d\vec{s} + \Psi_2'(\vec{r}_s, t) \right) e^{-i\frac{e}{\hbar} \int \vec{A}(\vec{s}) d\vec{s}} \\
 &= \left(\Psi_1'(\vec{r}_s, t) e^{-i\frac{e}{\hbar} \int \vec{A}(\vec{s}) d\vec{s}} + \Psi_2'(\vec{r}_s, t) \right) e^{-i\frac{e}{\hbar} \int \vec{A}(\vec{s}) d\vec{s}} = \left(\Psi_1'(\vec{r}_s, t) e^{-i\frac{e}{\hbar} \int d\vec{f} \text{ rot} \vec{A}} + \Psi_2'(\vec{r}_s, t) \right) e^{-i\frac{e}{\hbar} \int \vec{A}(\vec{s}) d\vec{s}} \\
 &= \left(\Psi_1'(\vec{r}_s, t) e^{-i\frac{e}{\hbar} \int \vec{B} d\vec{f}} + \Psi_2'(\vec{r}_s, t) \right) e^{-i\frac{e}{\hbar} \int \vec{A}(\vec{s}) d\vec{s}} = \left(\Psi_1'(\vec{r}_s, t) e^{-i\frac{e}{\hbar} \Phi_B} + \Psi_2'(\vec{r}_s, t) \right) e^{-i\frac{e}{\hbar} \int \vec{A}(\vec{s}) d\vec{s}}
 \end{aligned}$$

Das bedeutet, die relative Phase zwischen Ψ_1 und Ψ_2 und damit auch das Interferenzbild ändert sich, wenn sich

der eingeschlossene magnetische Fluss $\int \vec{B} d\vec{f} = \Phi_B$ verschiebt, obgleich die Elektronenwellen ausschließlich

im FELDFREIEN Gebiet $\vec{B} = 0$ verlaufen:

$$|\Psi(\vec{r}_s)|^2 = \left| \Psi_1' e^{-i\frac{e}{\hbar} \int \vec{A}(\vec{s}) d\vec{s}} + \Psi_2' e^{-i\frac{e}{\hbar} \int \vec{A}(\vec{s}) d\vec{s}} \right|^2 = |\Psi_1'|^2 + |\Psi_2'|^2 + 2\text{Re} \left[\Psi_1' \Psi_2'^* e^{-i\frac{e}{\hbar} \Phi_B} \right]$$

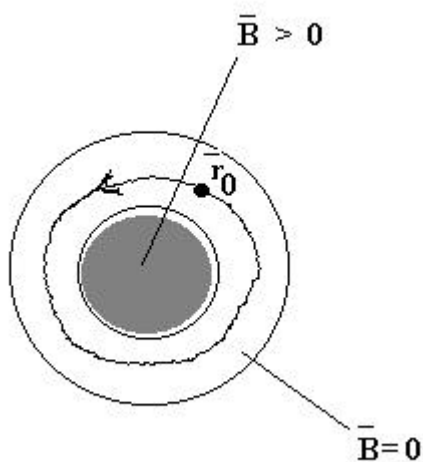
Flußquantisierung in Supraleitern

bei $T < T_c$ (kritische = Sprungtemperatur) werden viele Materialien supraleitend.

Die Elektronen bilden Cooper-Paare (Ladung $2e$).

Meißner-Effekt: Magnetfeld wird aus dem Supraleiter verdrängt (Supraleiter 1. Art)

Betrachten wir einen supraleitenden Hohlzylinder:



Die Wellenfunktion der Cooperpaare (eines Cooperpaares) lautet:

$$\Psi(\vec{r}) = \Psi'(\vec{r}) e^{i \frac{2e}{\hbar} \int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}} \vec{A}(\vec{s}) d\vec{s}}$$

Das heißt für $\vec{r}_0 = \vec{r} \Rightarrow \Psi(\vec{r}) = \Psi'(\vec{r})$

Für einen geschlossenen Weg um den Zylinder gilt:

$$\Psi(\vec{r}_0) = \Psi'(\vec{r}_0) e^{i \frac{2e}{\hbar} \oint \vec{A}(\vec{s}) d\vec{s}} = \Psi'(\vec{r}_0)$$

Wegen der Eindeutigkeit der Wellenfunktion folgt daraus aber:

$$\frac{2e}{\hbar} \oint \vec{A}(\vec{s}) d\vec{s} = 2\pi n \quad (\text{Die Wellenfunktion muss sich schließen !})$$

$$\oint \vec{A}(\vec{s}) d\vec{s} = \Phi_B$$

Also ist der eingeschlossene Fluß quantisiert !:

$$\Phi_B = n\Phi_0$$

mit dem magnetischen Flußquantum

$$\Phi_0 := \frac{\hbar p}{e} = \frac{h}{2e} = 2,07 \cdot 10^{-15} \text{ Vs}$$

Also:

Wir haben zwei Beispiele für beobachtbare Folgen aus der Invarianz:

- 1) Aharanov- Bohm - Effekt
- 2) Flussquantisierung in Supraleitern !

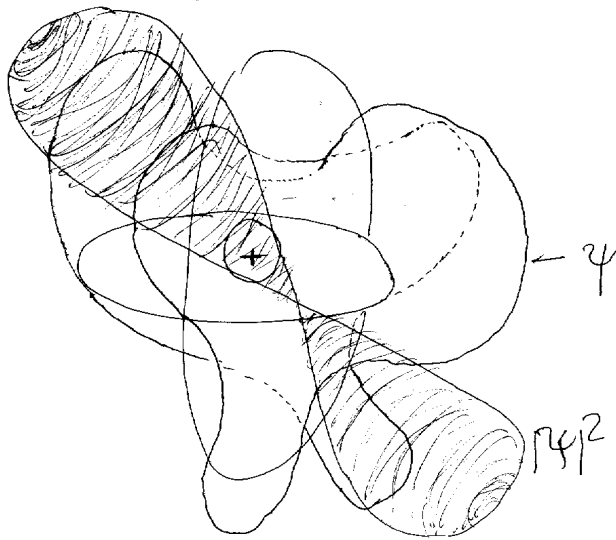
Ergänzung: Wellenfunktion, Eindeutigkeit, Stetigkeit und Flussquantisierung

Dass sich in einem ringförmigen System die Wellenfunktion schließen muss (also stetig sein muss, damit die Aufenthaltswahrscheinlichkeit nicht springt !), kann als äquivalent zu ihrer Eindeutigkeit betrachtet werden. Das Springen der Phase an einem Punkt macht ja die Phase an diesem Punkt uneindeutig.

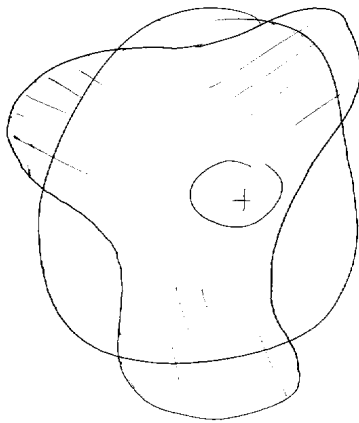
Dies ist ein bereits von Bohr gefundenes Phänomen, welches er anschaulich zur Darstellung der Drehimpulsquantisierung verwendet hat.

Eine Wellenfunktion im Wasserstoffatom muss sich aufgrund der Kugelsymmetrie des Potentials schließen und der Drehimpuls wie die Energieeigenwerte sind quantisiert, da dies nur für ganzzahlige Veränderungen der Wellenzahl und der damit verbundenen Notwendigkeit, in ein Orbital ganz "hineinzupassen" verbunden ist (siehe Abbildung)

Im Wellenbild kann dies als guter Ansatz für alle Quantisierungsphänomene betrachtet werden. In unserem Fall ist ganz explizit die Eichinvarianz unter Phasentransformationen im Zusammenhang zur Ladungserhaltung. Das Maß des Kommutators zwischen Phase und Ladung bestimmt die Fluktuation der Ladung. (Und der Phase, die jedoch sowieso unbeobachtbar ist). Die Ladung ist quantisiert, nämlich in Einheiten der Elementarladung. Dies gilt jedoch nicht für gebundene Zustände, die sich unter der starken Wechselwirkung bilden (Quarks). Sie haben gedrittelte Ladungen.



2 dim



1.4 Kontinuitätsgleichung

Schrödingergleichung für Teilchen in Potenzialen V und A (beide reell):

$$i\hbar\dot{\Psi}(\vec{r},t) = \hat{H}\Psi = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - e\vec{A}\right)^2\Psi(\vec{r},t) + V\Psi(\vec{r},t)$$

$$V = e\Phi$$

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{\Psi}(\vec{r},t) &= \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - e\vec{A}\right)\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - e\vec{A}\right)\Psi(\vec{r},t) + V\Psi(\vec{r},t) \\ &= \frac{1}{2m}\left[-\hbar^2\Delta\Psi + i\hbar e\nabla(\vec{A}\Psi) + i\hbar e\vec{A}(\nabla\Psi) + e^2 A^2\Psi\right] + V\Psi(\vec{r},t) \end{aligned}$$

Dabei sind alle Terme außer dem ersten und dem letzten (V) magnetfeldabhängig, also abhängig von $\vec{A}(\vec{r},t)$

Die Gleichung kann komplex konjugiert werden:

$$i\hbar\dot{\Psi}^*(\vec{r},t) = \frac{1}{2m}\left[-\hbar^2\Delta\Psi^* - i\hbar e\nabla(\vec{A}\Psi^*) - i\hbar e\vec{A}(\nabla\Psi^*) + e^2 A^2\Psi^*\right] + V\Psi^*(\vec{r},t)$$

Damit ergibt sich eine Bewegungsgleichung für die Wahrscheinlichkeitsdichte:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\Psi(\vec{r}, t) \Psi^*(\vec{r}, t)) = \Psi^*(\vec{r}, t) i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) + \Psi(\vec{r}, t) i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(\vec{r}, t)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = i\hbar (\Psi^*(\vec{r}, t) \dot{\Psi}(\vec{r}, t) + \dot{\Psi}^*(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t)) = \Psi^* \hat{H} \Psi - \Psi (\hat{H} \Psi)^*$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \frac{-\hbar^2}{2m} (\Psi^* \Delta \Psi - \Psi \Delta \Psi^*) + \frac{e^2}{2m} [\Psi^* \bar{A}^2 \Psi - \Psi \bar{A}^2 \Psi^*] + \Psi^* V \Psi - \Psi V \Psi^* \\ + \frac{i\hbar e}{2m} (\Psi^* \nabla (\bar{A} \Psi) + \bar{A} \Psi \nabla \Psi^* + \Psi \nabla (\bar{A} \Psi^*) + \bar{A} \Psi^* \nabla \Psi)$$

$$\Psi^* \bar{A}^2 \Psi - \Psi \bar{A}^2 \Psi^* = 0$$

$$\Psi^* V \Psi - \Psi V \Psi^* = 0$$

$$\Psi^* \nabla (\bar{A} \Psi) + \bar{A} \Psi \nabla \Psi^* = \Psi \nabla (\bar{A} \Psi^*) + \bar{A} \Psi^* \nabla \Psi = \nabla (\Psi \bar{A} \Psi^*)$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \frac{-\hbar^2}{2m} (\Psi^* \Delta \Psi - \Psi \Delta \Psi^*) + \frac{i\hbar e}{m} \nabla (\Psi \bar{A} \Psi^*)$$

$$\Psi^* \Delta \Psi - \Psi \Delta \Psi^* = \nabla (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) - (\nabla \Psi^* \nabla \Psi - \nabla \Psi \nabla \Psi^*) \\ (\nabla \Psi^* \nabla \Psi - \nabla \Psi \nabla \Psi^*) = 0$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) + \frac{i\hbar e}{m} \nabla (\Psi \bar{A} \Psi^*)$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \nabla \left[\frac{-\hbar^2}{2m} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) + \frac{i\hbar e}{m} (\Psi \bar{A} \Psi^*) \right]$$

Diese Gleichung hat die Form einer Kontinuitätsgleichung der lokalen Wahrscheinlichkeitserhaltung für die Wahrscheinlichkeitsdichte quantenmechanischer Wellenfunktionen im elektromagnetischen Feld

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 + \nabla \cdot \vec{j} = 0$$

Die Wahrscheinlichkeitsstromdichte lautet:

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) - \frac{e}{m} (\Psi \bar{A} \Psi^*) \\ = \frac{1}{2m} \left\{ \Psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - e \bar{A} \right) \Psi + \Psi \left(-\frac{\hbar}{i} \nabla - e \bar{A} \right) \Psi^* \right\}$$

Denn:

Wenn die Kontinuitätsgleichung $\frac{\partial}{\partial t} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 + \nabla \cdot \vec{j} = 0$ erfüllt sein soll, so muss der

Wahrscheinlichkeitsstrom die obige Form haben !

Die Kontinuitätsgleichung erhält man sauber durch Anwenden der Schrödingergleichung auf Die Wahrscheinlichkeit !

Dabei bezeichnet man

$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*)$ als die freie Wahrscheinlichkeitsstromdichte, die im elektromagnetischen

Potenzial durch den Potenzialterm $-\frac{e}{m} (\Psi \bar{A} \Psi^*)$ ergänzt wird

$$\vec{j} = \frac{1}{2m} \left\{ \Psi^* \hat{\vec{p}}_{kin} \Psi + \Psi \left(\hat{\vec{p}}_{kin} \Psi \right)^* \right\}$$

Mit dem kinetischen Impulsoperator

$$\hat{P}_{kin} := \frac{\hbar}{i} \nabla - e\bar{A}$$

Führt man den kinetischen Impuls ein, so ist die Form analog zur Darstellung der freien Wahrscheinlichkeitsstromdichte verallgemeinert !

Bemerkungen

1. Neben dem kanonischen Impulsoperator: $\hat{P} := \frac{\hbar}{i} \nabla$, wobei klassisch $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$ haben wir es nun mit

dem kinetischen Impulsoperator $\hat{P}_{kin} := \frac{\hbar}{i} \nabla - e\bar{A}$ zu tun. Dieser hängt mit dem Geschwindigkeitsoperator

$\hat{v} := \frac{\hat{P}_{kin}}{m}$ zusammen, wobei der **Geschwindigkeitsoperator** $\hat{v} := \frac{\hat{P}_{kin}}{m}$ **NICHT** die Zeitableitung des Orts- Operators repräsentiert.

Also: $\hat{P}_{kin} = m\hat{v}$ und $\hat{p} \neq m\hat{v}$

2. Mit Hilfe des Geschwindigkeitsoperators lautet die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 + \nabla \cdot \vec{j} = 0 \text{ mit } \vec{j} = \frac{1}{2} \{ \Psi * \hat{v} \Psi + \Psi (\hat{v} \Psi)^* \}$$

Dies ist ganz analog zur Kontinuitätsgleichung für klassische Dichten:

$$\vec{r} + \nabla \cdot \vec{j} = 0 \text{ mit } \vec{j} = \vec{r} \cdot \vec{v}$$

Quantenmechanisch muss man lediglich die symmetrische reelle Form $\vec{j} = \text{Re} \{ \Psi * \hat{v} \Psi \}$ wählen, da hier $\vec{r} \cdot \hat{v}$ oder $\hat{v} \vec{r}$ nicht wohldefiniert ist. (Worauf wirkt der Operator ?)

3. In $\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{p} - e\bar{A}(\vec{r}, t))^2 = \frac{1}{2m} (\hat{p}^2 - e\hat{p}\bar{A} - e\bar{A}\hat{p} + e^2 A^2)$ ist die Reihenfolge der Faktoren zu beachten !

Nur in der Coulomb- Eichung $\nabla \cdot \bar{A} = 0$ gilt:

$$(\hat{p}\bar{A} + \bar{A}\hat{p})\Psi = \frac{\hbar}{i} [\nabla(\bar{A}\Psi) + \bar{A}(\nabla\Psi)] = \frac{\hbar}{i} [(\nabla \cdot \bar{A})\Psi + 2\bar{A}(\nabla\Psi)]$$

$$\nabla \cdot \bar{A} = 0$$

Im Spezialfall der Coulomb- Eichung. Somit:

$$(\hat{p}\bar{A} + \bar{A}\hat{p})\Psi = 2\bar{A}\hat{p}\Psi$$

Also in diesem Fall:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{p} - e\bar{A}(\vec{r}, t))^2 = \frac{1}{2m} (\hat{p}^2 - 2e\bar{A}\hat{p} + e^2 A^2)$$

Merke: Die Coulombeichung bringt \bar{A} und \hat{p} zum Vertauschen !

4. Im Gaußschen Maßsystem gilt:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \bar{A} \right)^2$$

1.5 Zeitunabhängige Schrödinger- Gleichung und stationäre Zustände

$i\hbar\dot{\Psi}(\vec{r},t) = \hat{H}\Psi$ ist (Schrödinger- Bild) eine Schrödingergleichung mit dem zeitunabhängigen

Hamiltonoperator \hat{H}

Es ergibt sich ein Anfangs- bzw. Randwertproblem:

Die Anfangsbedingung $\Psi(\vec{r},0)$ ist gegeben.

Aus der Normierbarkeit folgt:

$$\int_{R^3} |\Psi(\vec{r},t)|^2 d^3r < \infty$$

$$\Rightarrow |\Psi(\vec{r},t)| \rightarrow 0 \quad \text{für} \quad |\vec{r}| \rightarrow \infty$$

Eine spezielle Lösung findet man über den **Separationsansatz**:

$$\Psi(\vec{r},t) = \mathbf{j}(\vec{r}) + T(t)$$

$$i\hbar \dot{\mathbf{j}} = T \hat{H} \mathbf{j}$$

$$i\hbar \mathbf{j} \frac{\dot{T}}{T} = \frac{\hat{H} \mathbf{j}}{\mathbf{j}}$$

da in der letzten Zeile rechts nur Abhängigkeit vom Ort und links nur Abhängigkeit von der Zeit vorliegt, kann diese Übereinstimmung nur gelten, wenn beide Seiten für sich konstant sind. Also:

$$i\hbar \mathbf{j} \frac{\dot{T}}{T} = \frac{\hat{H} \mathbf{j}}{\mathbf{j}} = E = \text{const.}$$

Also:

$$\dot{T} = -\frac{i}{\hbar} E T$$

$$\hat{H} \mathbf{j}(\vec{r}) = E \mathbf{j}(\vec{r})$$

Wir finden eine Lösung für den zeitabhängigen Teil:

$$T_E(t) = c e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \quad \text{und erhalten gleichzeitig eine zeitunabhängige Schrödingergleichung: } \hat{H} \mathbf{j}(\vec{r}) = E \mathbf{j}(\vec{r})$$

Somit haben wir als Eigenwertproblem des Hamilton- Operators:

$\hat{H} \mathbf{j}(\vec{r}) = E \mathbf{j}(\vec{r})$ die Energie- Eigenfunktionen $\mathbf{j}_E(\vec{r})$ und die Energie- Eigenwerte E. Dies sind die möglichen Meßwert der Observablen "Energie".

Die Energie- Eigenzustände lauten:

$$\Psi_E(\vec{r},t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \mathbf{j}_E(\vec{r})$$

Diese heißen stationäre Zustände, da die zugehörige Wahrscheinlichkeitsdichte

$$|\Psi_E(\vec{r},t)|^2 = |\mathbf{j}_E(\vec{r})|^2 \quad \text{zeitunabhängig ist.}$$

Also: Die Wahrscheinlichkeit bleibt erhalten !! (wegen Normierbarkeit !)

Nebenbemerkung:

Die Wellenfunktion $\Psi_E(\vec{r},t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \mathbf{j}_E(\vec{r})$ selbst ist natürlich zeitabhängig, da die Materiewelle mit

$\omega = \frac{E}{\hbar}$ oszilliert. Dies gilt auch mit Potenzial (mit Potenzial nimmt die Oszillationsfrequenz sogar zu, da die

Energie steigt !)

Weiterhin sind jedoch alle Erwartungswerte von Observablen (nicht die Observablen selbst, sondern ihre Erwartungswerte !) innerhalb von Eigenzuständen (und nur in diesen) zeitunabhängig:

$$\langle F(\hat{p}, \hat{r}) \rangle = \int \Psi_E^* (\vec{r}, t) F(\hat{p}, \hat{r}) \Psi_E (\vec{r}, t) d^3 r = \int \mathbf{j}_E (\vec{r})^* F(\hat{p}, \hat{r}) \mathbf{j}_E (\vec{r}) = \int \mathbf{j}_E (\vec{r})^* F\left(\frac{\hbar}{i} \nabla, \hat{r}\right) \mathbf{j}_E (\vec{r})$$

Insbesondere gilt:

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle = 0$$

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{r} \rangle = 0$$

Ehrenfest- Theorem

Nach dem Ehrenfest'schen Theorem (Siehe III: Statistische Physik)
gilt mit

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle = 0$$

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{r} \rangle = 0$$

auch

$$\langle \hat{p} \rangle = m \frac{d}{dt} \langle \hat{r} \rangle = 0$$

$$\langle \nabla V \rangle = - \frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle = 0$$

Bemerkungen

1. Die Energie- Eigenwerte E des Hamilton- Operators $\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - e \vec{A}(\vec{r}, t) \right)^2 + V$ sind reell.

Beweis:

Nach § 1.4 gilt:

$$\{ \Psi^* \hat{H} \Psi - (\hat{H} \Psi)^* \Psi \} = -i\hbar \nabla \cdot \vec{j}$$

$$\int_{R^3} \{ \Psi^* \hat{H} \Psi - (\hat{H} \Psi)^* \Psi \} d^3 r = -i\hbar \int_{R^3} \nabla \cdot \vec{j} d^3 r = -i\hbar \int_{\partial R^3} \vec{j} \cdot d\vec{f}$$

Der Rand des R^3 liegt jedoch im Unendlichen. Aus Gründen der Normierbarkeit muss der Strom dort jedoch verschwinden.

Also gilt:

$$\int_{R^3} \{ \Psi^* \hat{H} \Psi - (\hat{H} \Psi)^* \Psi \} d^3 r = -i\hbar \int_{R^3} \nabla \cdot \vec{j} d^3 r = -i\hbar \int_{\partial R^3} \vec{j} \cdot d\vec{f} = 0$$

Andererseits aber gilt:

$$\int_{R^3} \Psi^* \hat{H} \Psi d^3 r = E$$

$$\int_{R^3} (\hat{H} \Psi)^* \Psi d^3 r = \int_{R^3} (E \Psi)^* \Psi d^3 r = E^*$$

Also folgt:
 $E = E^*$

Für ein komplexes E mit

$E = E_1 + iE_2$ wäre $|\Psi_E|^2 = e^{\frac{2E_2}{\hbar}t} |\mathbf{j}_E|^2$ und würden für $E_2 < 0$ zerfallen (und für $E_2 > 0$ explodieren !)
 Somit folgt bereits aus der Kontinuitätsgleichung, dass alle Energieeigenwerte reell sind !!

2. Die Energie- Eigenzustände sind scharf in der Energie, jedoch beliebig unscharf in der Zeit:

$$\langle \hat{H} \rangle = E \text{ Erwartungswert} = \text{Eigenwert}$$

$$\text{Unschärfe: } \Delta H := \sqrt{\langle (\hat{H} - \langle \hat{H} \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle (\hat{H})^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle^2} = \sqrt{E^2 - E^2} = 0$$

E und t sind wie \hat{p}, \hat{q} zueinander konjugierte Variablen, jedoch keine Operatoren !

Dies ist analog zur Situation, dass der Impuls in Impuls- Eigenzuständen beliebig scharf ist. Die Wahrscheinlichkeitsverteilung ist dann ortsunabhängig (also beliebig unscharf im Ort, also: gleichverteilt !, konstant !):

$$\langle \hat{p} \rangle = \int_{R^3} \Psi^* \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi d^3 r = \hbar \bar{k} \int_{R^3} \Psi^* \Psi d^3 r = \hbar \bar{k} \quad \text{scharf}$$

$$|\mathbf{j}(\vec{r})|^2 = 1 \text{ unabhängig von } r$$

Dies läuft analog zur klassischen Mechanik. Dort bedingt die Zeittranslationsinvarianz der Hamiltonfunktion eine Erhaltung der Energie (E Erhaltungsgröße) und die Ortstranslationsinvarianz der Hamiltonfunktion bedingt eine Impulserhaltung.

Die Bedingung der Normierbarkeit schränkt die zulässigen Werte der Energie deutlich ein.
 Randbedingungen \rightarrow Eigenwertproblem !

Allgemeine Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung

Ein jeder Zustand kann nach stationären Zuständen $\mathbf{j}_n(\vec{r})$ entwickelt werden:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \mathbf{j}_n(\vec{r})$$

Für verschiedene E_n ist dies jedoch kein stationärer Zustand mehr: Also ist die Wahrscheinlichkeitsverteilung zeitabhängig:

$$\Psi(\vec{r}, t) * \Psi(\vec{r}, t) = \sum_{n,m} c_m^* c_n e^{-\frac{i}{\hbar} (E_n - E_m) t} \mathbf{j}_m^*(\vec{r}) \mathbf{j}_n(\vec{r}) \text{ zeitabhängig !!}$$

$\Psi(\vec{r}, t)$ ist kein Energie- Eigenzustand !

Die Entwicklungskoeffizienten c_n lassen sich durch die Anfangsbedingungen bestimmen:

$$\Psi(\vec{r}, 0) = \sum_n c_n \mathbf{j}_n(\vec{r}) = \Psi_0(\vec{r})$$

Falls $\{\mathbf{j}_n(\bar{r})\}$ ein vollständiges Orthonormalsystem darstellt, kann jede stückweise stetige Funktion nach den stationären Zuständen $\mathbf{j}_n(\bar{r})$ entwickelt werden:

$$\int_R \mathbf{j}_m^*(\bar{r}) \mathbf{j}_n(\bar{r}) d^3r = \mathbf{d}_{nm} \Rightarrow \sum_n c_n \int_R \mathbf{j}_m^*(\bar{r}) \mathbf{j}_n(\bar{r}) d^3r = \sum_n c_n \mathbf{d}_{nm} = c_m$$

Orthonormierung:

$$\sum_n c_n \int_R \mathbf{j}_m^*(\bar{r}) \mathbf{j}_n(\bar{r}) d^3r = \int_{R^3} \Psi_0(\bar{r}) \mathbf{j}_m^*(\bar{r}) d^3r = c_m$$

Man sagt: Durch die Anfangsbedingung können die Entwicklungskoeffizienten "herausprojiziert" werden.

P.S.: Dies ist im Dirac- Formalismus wesentlich einfacher !!

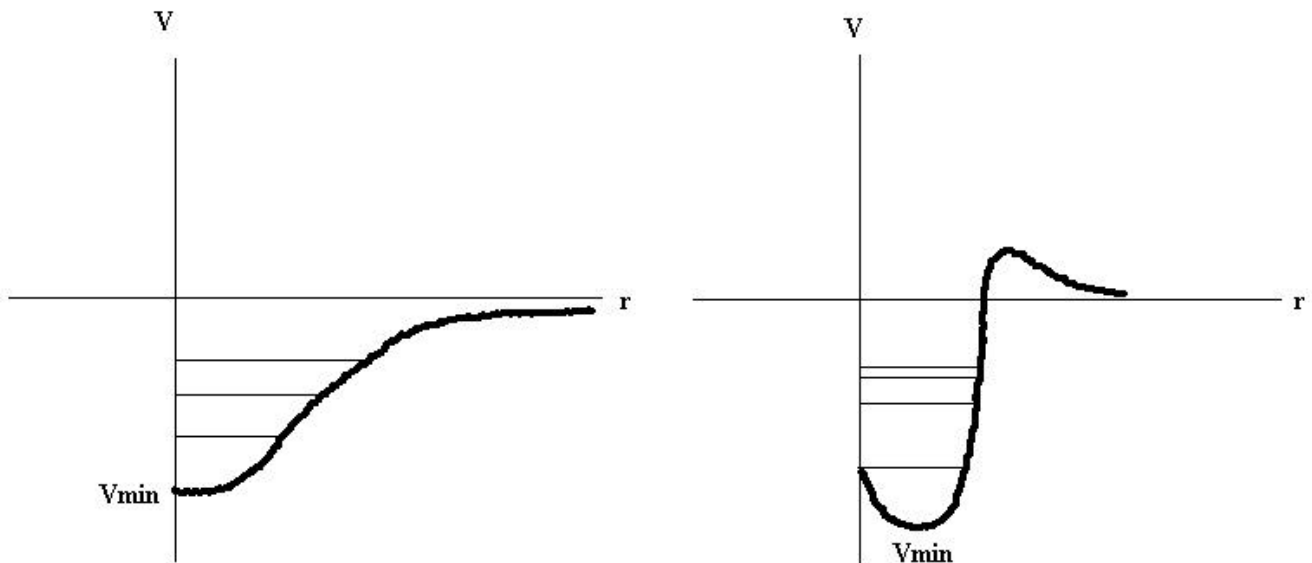
1.6 Allgemeine Eigenschaften der stationären Zustände

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

die zeitunabhängige Schrödingergleichung mit dem skalaren Potenzial V

Annahme: $V(\vec{r}) \rightarrow 0$ für $|\vec{r}| \rightarrow \infty$

außerdem soll das Potenzial stückweise stetig sein und nach unten beschränkt.



Dann gilt:

a) $E < 0$

Prinzipiell sind nur diskrete Eigenwerte $E > V_{\min}$ möglich.

Dies ist ein klarer Widerspruch zur klassischen Mechanik, nach der alle Zustände mit $E \geq V_{\min}$ möglich sind.

Die Anzahl der Eigenwerte und ihr Abstand hängt jedoch von der Form von V ab.

Wenn $\lim_{r \rightarrow \infty} |V(\vec{r})| \sim \frac{1}{r^{2+d}}$ mit $d > 0$. Das Potenzial muss also nur für r gegen unendlich dieses Verhalten zeigen. Dann existieren nur ENDLICH viele diskrete Werte.

Also: es gibt genau dann endlich viele Zustände im Potenzial, wenn das Potenzial schneller verschwindet als $1/r^2$.

Typische Beispiele sind kurzreichweitige Potenziale wie die Dipol- Dipol- Wechselwirkung $|V(\vec{r})| \sim \frac{1}{r^6}$ oder

der rechteckige Potenzialtopf.

Bei sehr flachen Potenzialen (sehr flaches V_{\min}) existiert möglicherweise gar kein Zustand im Potenzialtopf (gar kein Eigenwert existiert).

In eindimensionalen Potenzialen allerdings existiert stets ein Eigenwert $E < 0$.

Langreichweitige, langsam abfallende Potenziale können unendlich viele $E < 0$ mit einem Häufungspunkt bei $E=0$ haben (Wasserstoffatom). Dies trifft vor allem für das $1/r$ - Potenzial zu !

Eigenzustände zu $E < 0$

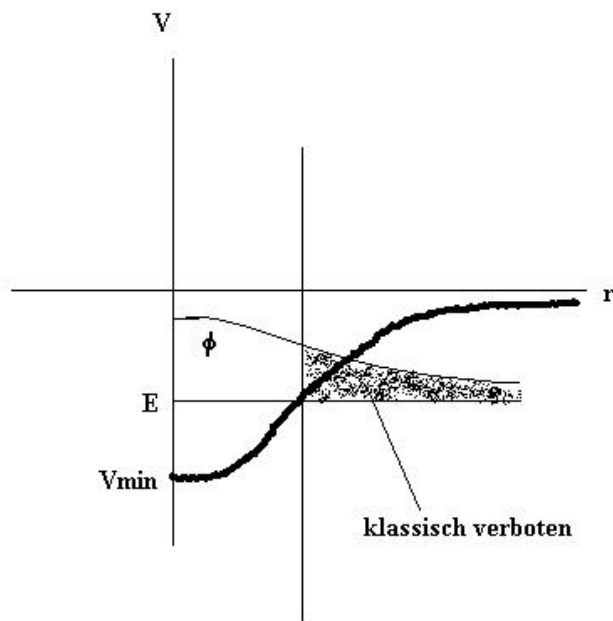
Sind in jedem Fall Normierbar: $\int_{R^3} d^3r |\mathbf{j}(\vec{r})|^2 = 1$

$\lim_{\vec{r} \rightarrow \infty} \mathbf{j}(\vec{r}) \rightarrow 0$ hinreichend rasch !. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist damit im Endlichen lokalisiert.

Das bedeutet: Die Zustände sind gebunden .

Es existieren also gebundene Zustände im Bereich $E < 0$ (vergleiche: elliptische Bahnen bei $1/r$ - Potenzialen für $E < 0$)

Im Gegensatz zur klassischen Mechanik ist jedoch die Aufenthaltswahrscheinlichkeit auch in Bereichen mit $E < V(r)$ von Null verschieden:



Klassisch: $\frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}) = E$

Grund dafür ist die Unschärferelation: $\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$

Für ebene Wellen als Lösung der Schrödingergleichung der Form e^{ikx}

gilt dann wegen $k \sim \sqrt{E - V} \in \text{Im}$, falls $E < V$

somit $e^{ikx} = e^{-\text{Re}}$ -> exponentiell gedämpftes Eindringen in die Barriere !

b) $E > 0$

Hier ist das Energiespektrum grundsätzlich kontinuierlich. Die Eigenfunktionen sind dabei nicht normierbar:

$\lim_{\vec{r} \rightarrow \infty} \mathbf{j}(\vec{r}) \rightarrow \text{const}$ oder oszilliert.

Beispiel: Ebene Welle $\mathbf{j}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}}$ ist Lösung von

$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \mathbf{j}(\vec{r}) = E \mathbf{j}(\vec{r})$ mit $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} > 0$

$k \in R \Rightarrow e^{ikr}$ ist oszillierend !

$\mathbf{j}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}}$ ist also Lösung der Schrödingergleichung mit $V=0$

Es gibt keine Einschränkungen an $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} > 0$. Die Energie ist gleich der kinetischen Energie ! Falls $V=0$

Das Teilchen ist ganz klar nicht im Endlichen lokalisiert.

Man spricht auch von einem stationären Streuzustand.

Beispiel: Elektronen in Metallen -> Elektronengas !

Nebenbemerkung: Wellenpakete und damit auch Photonen sind KEINE stationären Zustände (= Energie-Eigenzustände). Die unendliche Delokalisation stellt sich also als Problem hier noch gar nicht an Photonen oder Wellenpakete im Allgemeinen. (für " Energieeigenzustände")

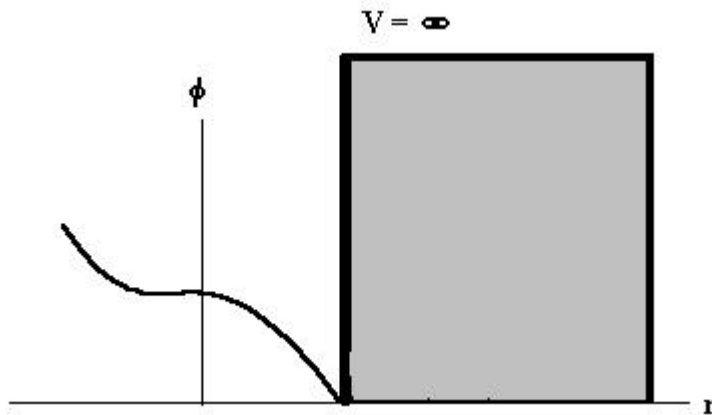
Bemerkungen

1. Die Klassifizierung $E < 0$ und $E > 0$ gilt auch dann noch, wenn $V(\vec{r})$ Punktsingularitäten hat, also auch beim

$$V(\vec{r}) \sim \frac{1}{r} \text{ bei } r=0 \text{ oder beim Delta- Potenzial}$$

2. In Bereichen mit $V(\vec{r}) \rightarrow \infty$ gilt grundsätzlich $\mathbf{j} = 0$. Auch quantenmechanisch kann hier das Teilchen nicht eindringen. Insbesondere folgt als Randbedingung an einer unendlich hohen Potentialschwelle:

$$\mathbf{j} \big|_{Rand} = 0$$



3. Qualitativ verschieden ist das Verhalten bei periodischen Potenzialen $V(\vec{r})$. Dies beobachtet man beispielsweise bei Elektronen in Kristallen. So entstehen beispielsweise Energiebänder.

Eindimensionale stationäre Zustände

In Spezialfällen lassen sich Probleme separieren/reduzieren:

$$V(\vec{r}) = V_1(x_1) + V_2(x_2) + V_3(x_3)$$

Separation in kartesischen Koordinaten:

$$\mathbf{j}(\vec{r}) = \mathbf{j}_1(x_1)\mathbf{j}_2(x_2)\mathbf{j}_3(x_3)$$

Die Schrödingergleichung lautet:

$$\sum_{i=1}^3 \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + V_i(x_i) \right] \mathbf{j}_1(x_1)\mathbf{j}_2(x_2)\mathbf{j}_3(x_3) = E \mathbf{j}_1(x_1)\mathbf{j}_2(x_2)\mathbf{j}_3(x_3)$$

$$\Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{j}_i''(x_i) + V_i(x_i) \mathbf{j}_i(x_i) = E^{(i)} \mathbf{j}_i(x_i)$$

$$\text{mit } E = E^{(1)} + E^{(2)} + E^{(3)}$$

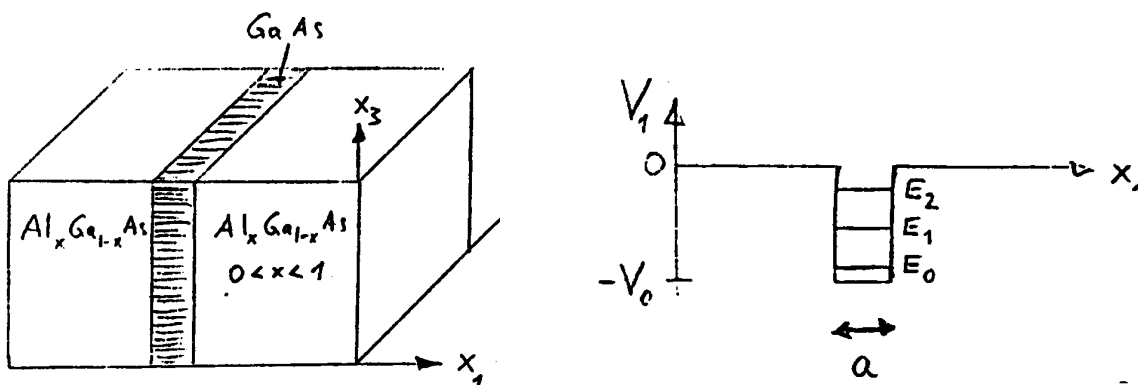
Insbesondere (Beispiel): $V_2 + V_3 = 0 \rightarrow$ freie Bewegung in x_2 und x_3 -Richtung

$$\mathbf{j}(\vec{r}) = \mathbf{j}_1(x_1) e^{ik_2 x_2} e^{ik_3 x_3}$$

$$E = E^{(1)} + \frac{k_2^2 \hbar^2}{2m} + \frac{k_3^2 \hbar^2}{2m}$$

Beispiel: Quantentopf in Halbleitern (Quantum Well)

Halbleiterschichtstruktur:



Durch die Variation des Legierungsverhältnis x und durch die Schichtdicke läßt sich V_0 und a maßgeschneidert produzieren und somit auch die Lage und Zahl der Energieniveaus im Halbleiter.

Das effektive Potenzial der Leitungselektronen ist der Quantentopf wie im rechten Diagramm dargestellt.

Beispiel: Für GaAs/ AlGaAs der Form:

$GaAs / Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ erhält man $V_0 = 250$ meV. Bei einer Schichtdicke des GaAs von 10 nm ergeben sich 3 gebundene Zustände im Quantentopf.

Durch die gebundenen Zustände im Quantentopf und die freie Beweglichkeit in x_2 - und x_3 -Richtung mit der effektiven Masse m^* ergibt sich ein zweidimensionaler Leiter, wenn die Spannung in x_2 - oder x_3 -Richtung angelegt wird. Legt man einen Strang durch das Material, so gewinnt man einen eindimensionalen Leiter.

Beispiel: Kugelsymmetrisches Potenzial

Sei $V(r)$ kugelsymmetrisch, so bietet sich Separation in Kugelkoordinaten an: r, \mathbf{j} :

$$\Phi(\vec{r}) = R(r) + Y(\mathbf{j})$$

Beispiel: H-Atom mit Coulombpotenzial $V = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$

1.7 Eigenschaften eindimensionaler stationärer Zustände

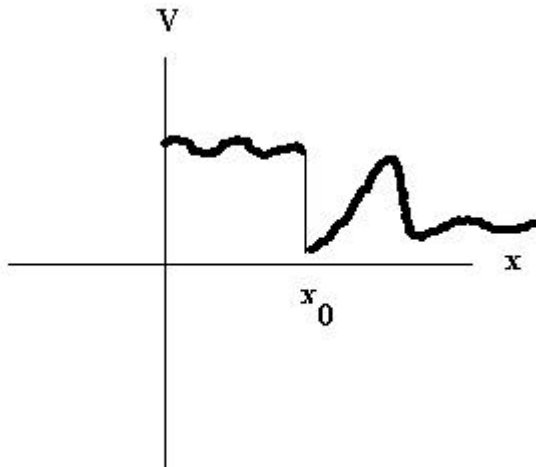
1) Stetigkeitsbedingung:

Bei stückweise stetigem Potenzial (Sprünge sind erlaubt, dürfen aber nicht die Regel sein). Außerdem ist das Potenzial ansonsten beliebig, sind $\Phi(x), \Phi'(x)$ stetig.

Die eindimensionale Zeitunabhängige Schrödingergleichung lautet:

$$\mathbf{j}''(x) = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E] \mathbf{j}(x)$$

Das Potenzial habe nun einen Sprung bei $x=x_0$:



Wäre nun $\mathbf{j}'(x) \sim \Theta[x - x_0]$ unstetig an der Stelle $x=x_0$, so ergebe sich: $\mathbf{j}''(x) \sim \mathbf{d}[x - x_0]$. Die rechte Seite der Schrödingergleichung ist jedoch an jedem Punkt beschränkt (die Wellenfunktion selbst muss normierbar sein). Somit ergibt sich ein Widerspruch.

Oft ist es zweckmäßig die sogenannte Eigenableitung zu verwenden. Diese logarithmische Ableitung ist stetig: (Eigenableitung = logarithmische Ableitung):

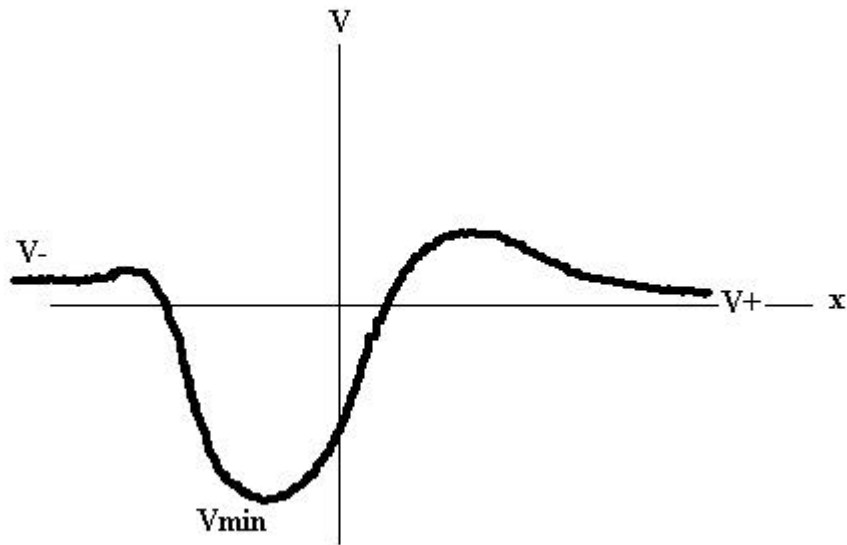
$$\frac{d}{dx} \ln \mathbf{j}(x) \Big|_{x_0} = \frac{\mathbf{j}'(x)}{\mathbf{j}(x)}$$

Für ein \mathbf{d} -förmiges Potenzial gilt: $V(x) = \mathbf{d}(x - x_0)$:

$\mathbf{j}(x)$ ist stetig

$\mathbf{j}'(x)$ hat endlichen Sprung bei x_0

Charakterisierung des Energiespektrums



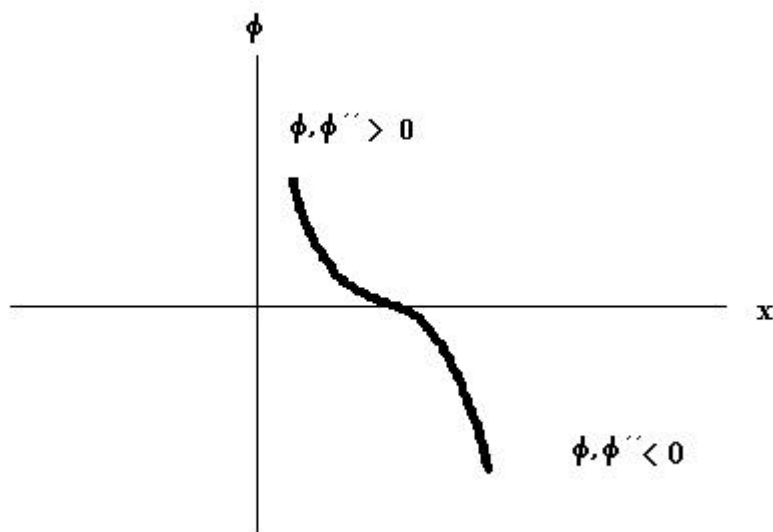
Gegeben sei ein stückweise stetiges, nach unten beschränktes Potenzial mit $V_+ \leq V_- \leq \infty$

Für den Bereich $E < V(x)$ (klassische verboten), gilt:

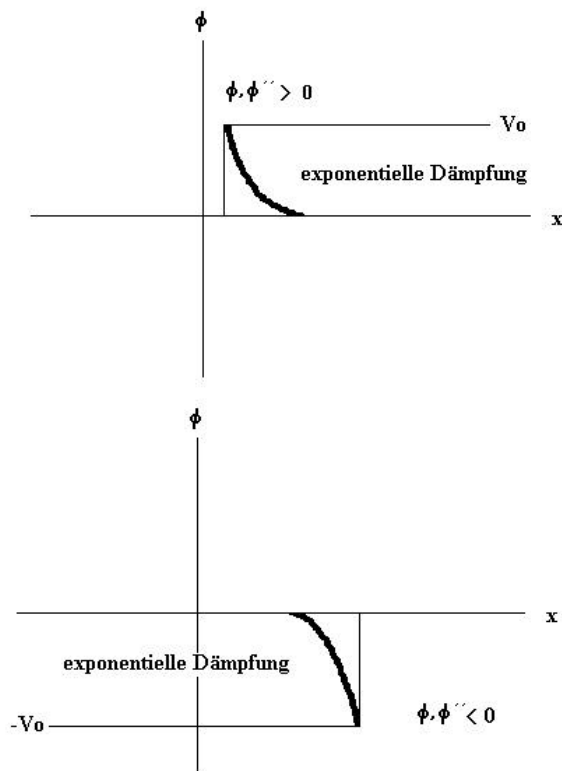
$$\frac{j''(x)}{j(x)} = \frac{2m}{\hbar^2}(V(x) - E) > 0$$

Also für den Fall $j(x), j''(x) > 0$ ist die Krümmung konvex und für $j(x), j''(x) < 0$ (zweite mögliche Alternative) ist die Krümmung konkav.

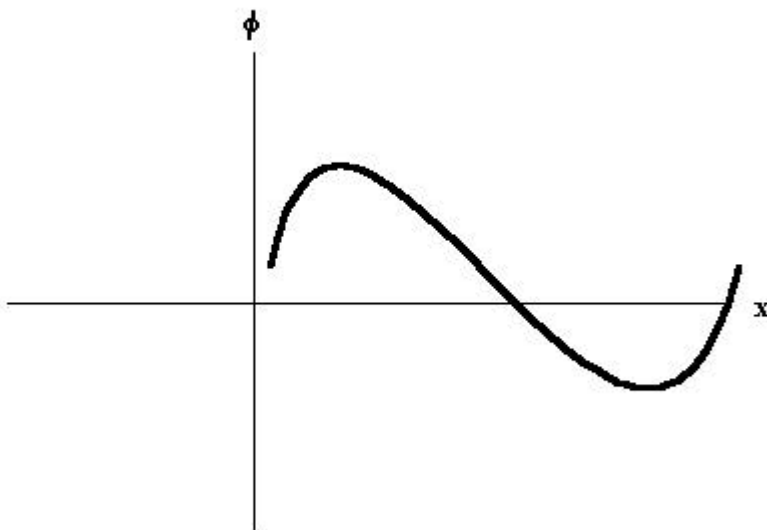
Jedenfalls ist die Wellenfunktion von der x- Achse "weggekrümmt", also allgemein gesprochen "divergent":



Dies ist deutlicher zu erkennen, wenn man Potenziale einzeichnet, die hier größer sind als die Energie: Es gibt immer exponentielle Dämpfung in derartigen Fällen:



Im Bereich $E > V(x)$ gilt: $\frac{j''(x)}{j(x)} = < 0$. Dieser Bereich ist auch klassisch erlaubt. Hier ist die Krümmung stets zur x- Achse hin, also im Wesentlichen oszillierend:



Damit können wir unsere Eigenfunktionen klassifizieren:

- 1) $E < V_{\min}(x)$: Die Energie liegt überall unterhalb des Potentials $\rightarrow j(x)$ divergiert nach ∞ . Keine Lösung existiert !
- 2) $V_{\min}(x) < E < V_+(x)$: Es existieren gebundene Zustände;
 - bei symmetrischem (vollkommen rotationssymmetrisch) Potenzial V existiert mindestens ein gebundener Zustand $j_0(x)$ \rightarrow eindimensionale Potentzialtöpfe sind immer vollkommen rotationssymmetrisch ! \rightarrow es existiert immer ein gebundener Zustand.

Dies ist anders bei 2- / 3- dimensionalen Potenzialtöpfen ! Wenn diese nicht vollständig rotationssymmetrisch sind, kann es sein, dass kein Zustand existiert, wenn die Töpfe flach genug sind !

- Das Energiespektrum ist diskret und nicht entartet: $E_0 < E_1 < \dots$

entartet heißt: zu einem Eigenwert gehören mehrere, linear unabhängige Eigenfunktionen !

- Knotensatz: Die zum n-ten Eigenwert E_n gehörende Eigenfunktion $\mathbf{j}_n(x)$ hat n Knoten (Nullstellen im Inneren des Definitionsbereichs).

Beweis des Knotensatzes

Zu JEDEM E existiert genau eine Lösung $\mathbf{j}_E(x)$ der Gleichung $\mathbf{j}''_E(x) = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]\mathbf{j}_E(x)$ mit

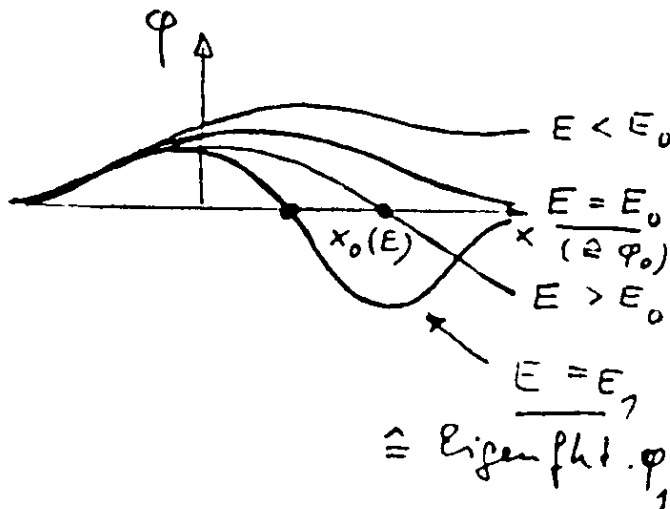
$\lim_{x \rightarrow -\infty} \mathbf{j}_E(x) = 0$ (Bilde z.B. Linearkombination von 2 linear unabhängigen Lösungen).

Dies gilt natürlich nur im nicht entarteten Fall ! Wie er unter 2) für $V_{\min}(x) < E < V_+(x)$ der Fall ist !

Nun ist dann aber im Allgemeinen $\lim_{x \rightarrow +\infty} \mathbf{j}_E(x) \neq 0$. Verschiebt man nun E so, dass auch

$\lim_{x \rightarrow +\infty} \mathbf{j}_E(x) = 0$ -> dann erhalten wir die Energien, die die speziellen diskreten Eigenwerte E repräsentieren.

Die Behauptung ist: zwischen 2 Eigenwerten muss immer ein weiterer Knoten vom Inneren an den Rand wandern:



Beweis:

Sei $x_0(E)$ eine Nullstelle von $\mathbf{j}_E(x)$. Nun bilde man die Wronski- Determinante von $\mathbf{j}_E(x)$ und von

$$z(x) \doteq \frac{\partial \mathbf{j}_E(x)}{\partial E}$$

Es gilt:

$$(\mathbf{j}_E' z - \mathbf{j}_E z') \Big|_{-\infty}^{x_0} = \int_{-\infty}^{x_0} (\mathbf{j}_E'' z - \mathbf{j}_E z'') dx$$

Dabei:

$$\begin{aligned} (\mathbf{j}_E' z - \mathbf{j}_E z') \Big|_{-\infty}^{x_0} &= \mathbf{j}_E'(x_0)z(x_0) - \mathbf{j}_E(x_0)z'(x_0) - \mathbf{j}_E'(-\infty)z(-\infty) + \mathbf{j}_E(-\infty)z'(-\infty) \\ \mathbf{j}_E(x_0) &= \mathbf{j}_E'(-\infty) = 0 \\ \Rightarrow (\mathbf{j}_E' z - \mathbf{j}_E z') \Big|_{-\infty}^{x_0} &= \mathbf{j}_E'(x_0)z(x_0) \end{aligned}$$

Außerdem:

$$(\mathbf{j}_E'' z - \mathbf{j}_E z'') = \mathbf{j}_E'' z + \mathbf{j}_E' z' - \mathbf{j}_E' z' - \mathbf{j}_E z''$$

Aus der Schrödingergleichung $\mathbf{j}_E''(x) = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E] \mathbf{j}_E(x)$ folgt durch Differenziation nach der

Energie:

$$z'' = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E] z - \frac{2m}{\hbar^2} \mathbf{j}_E(x)$$

Kombiniert man dies mit

$$\mathbf{j}_E''(x) = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E] \mathbf{j}_E(x)$$

und

$$(\mathbf{j}_E' z - \mathbf{j}_E z') \Big|_{-\infty}^{x_0} = \int_{-\infty}^{x_0} (\mathbf{j}_E'' z - \mathbf{j}_E z'') dx$$

so folgt:

$$\mathbf{j}_E'(x_0)z(x_0) = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{x_0} \mathbf{j}_E^2 dx > 0$$

Mit

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{d}{dE} \mathbf{j}_E(x_0) = \frac{\partial \mathbf{j}_E(x_0)}{\partial E} + \mathbf{j}_E'(x_0) \frac{\partial x_0}{\partial E} \\ \frac{\partial \mathbf{j}_E}{\partial E} &= z \end{aligned}$$

folgt schließlich:

$$0 = \frac{dx_0}{dE} = - \frac{z(x_0)}{\mathbf{j}_E'(x_0)} = -z(x_0)^2 \left[\int_{-\infty}^{x_0} \mathbf{j}_E^2 dx \right]^{-1} < 0$$

Also wandern die Nullstellen mit abnehmender Energie nach rechts. Bei jedem Eigenwert verschwindet eine Nullstelle bei ∞ .

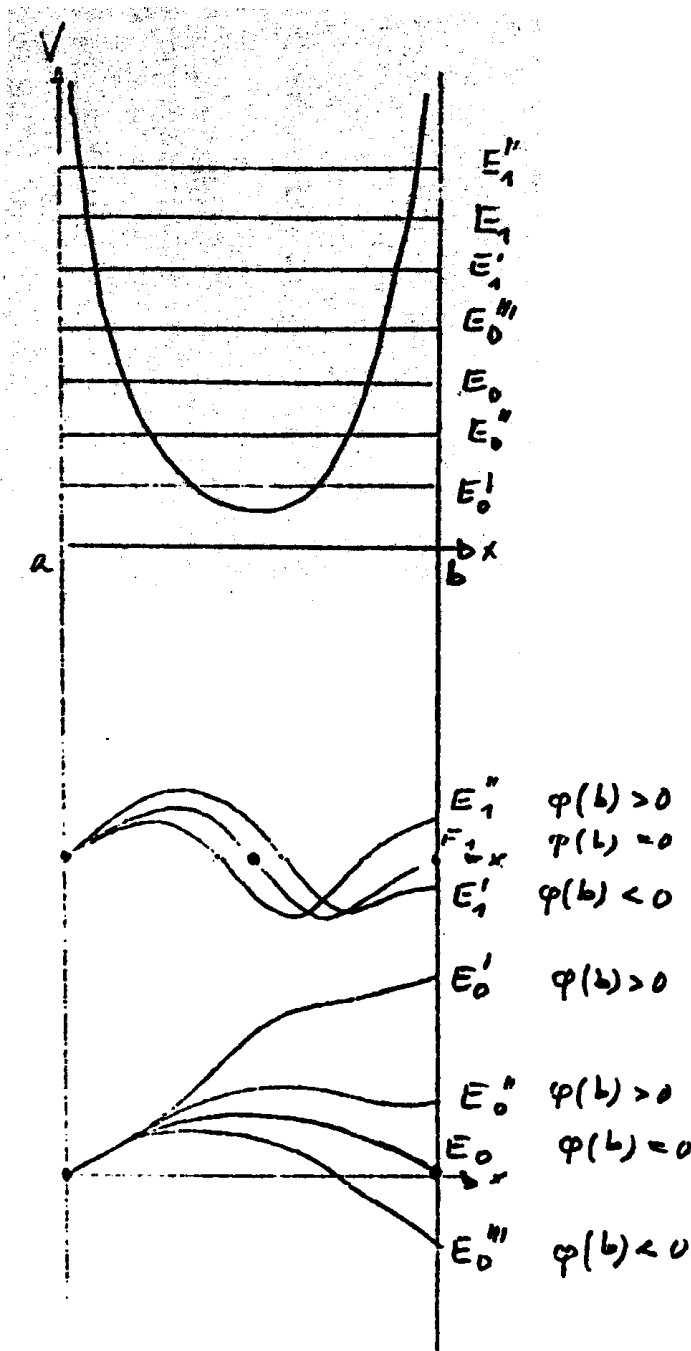
Für $E = V_{\min}$ hat $\mathbf{j}_E(x)$ KEINE endliche Nullstelle mehr:

Sonst wäre für $-\infty < x_0(E) < +\infty$:

$$\int_{-\infty}^{x_0} (\mathbf{j}_E' \mathbf{j}_E) dx = - \int_{-\infty}^{x_0} (\mathbf{j}_E \mathbf{j}_E') dx = \frac{2m}{\hbar^2} (V - E) \int_{-\infty}^{x_0} \mathbf{j}_E^2 dx > 0$$

Also ein Widerspruch !

Illustration des Knotensatzes für spezielle Potenziale:



Die zu E_1 oder E_1' gehörigen Funktionen besitzen einen Knoten. Nur die Funktion zu E_1 ist jedoch eine Eigenfunktion. Die Funktion zu E_1'' weist bereits 2 Knoten auf.

Bei E_0 existieren keine Knoten bei E_0 , E_0' und E_0'' . Allerdings ist nur die zu E_0 gehörige Funktion eine Eigenfunktion. Die Funktion zu E_0'' hat bereits einen Knoten, jedoch ist diese keine Eigenfunktion.

Das zugehörige Potenzial $V(x) \rightarrow \infty$ für $x \rightarrow a, b$. Also KEIN Parabelpotenzial !

Die Randbedingungen seien $j(a) = j(b) = 0$.

Die Forderung $j(a) = 0$ kann zu jedem E erfüllt werden. Und zwar durch Linearkombination zweier linear unabhängiger Lösungen.

Im Allgemeinen ist dann jedoch

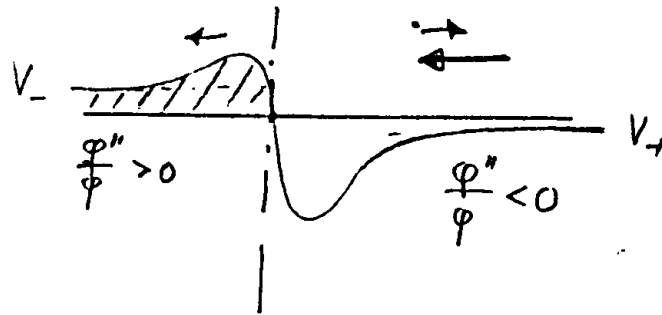
$j(b) \neq 0$. Verschiebt man E so, dass auch $j(b) = 0$, so trifft man die speziellen, diskreten Eigenwerte.

zwischen 2 Eigenwerten muss immer ein weiterer Knoten vom Rand ins Innere wandern.

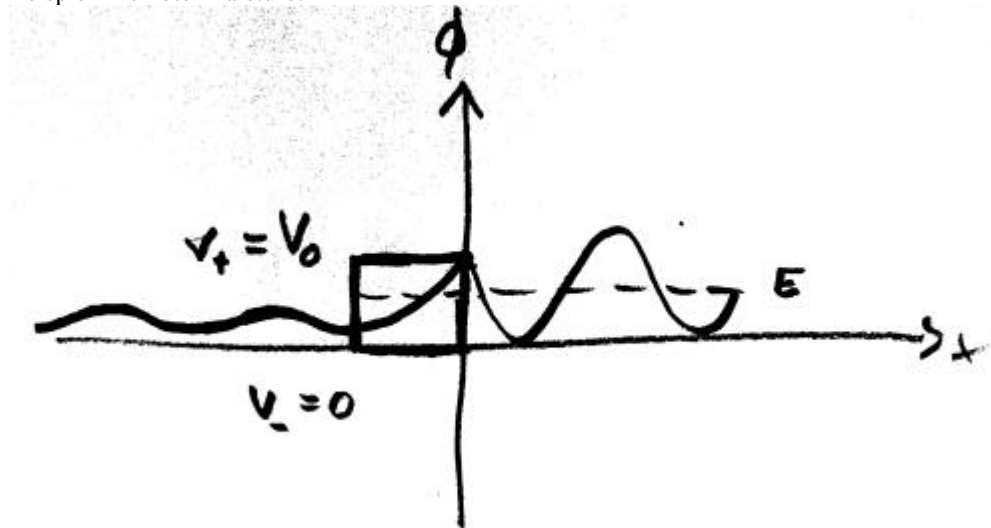
Speziell: Symmetrische Potenziale:

Bei symmetrischen Potenzialen: $V(x) = V(-x)$ sind die Eigenfunktionen abwechselnd von gerader Parität, also symmetrisch: $\mathbf{j}(x) = \mathbf{j}(-x)$ und antisymmetrisch (von ungerader Parität): $\mathbf{j}(x) = -\mathbf{j}(-x)$. Dies kann für Entartung und Nichtentartung gezeigt werden.

- 3) $V_+ < E < V_-$ In diesem Fall existiert ein Kontinuum von Streuzuständen (nicht entartet). Die Welle läuft von rechts ein:



Beispiel mit Potenzialstufe:



Linke Seite:

Die asymptotische Lösung lautet $\mathbf{j}(x) \sim e^{\pm Mx}$
 $M^2 = V_- - E$

Aber: $\mathbf{j}(x) \sim e^{+Mx}$ divergiert und ist somit unphysikalisch:

$$\mathbf{j}(x) \sim e^{-Mx}$$

Rechte Seite:

Die asymptotische Lösung lautet $\mathbf{j}(x) \sim e^{\pm ikx}$ Die Lösung oszilliert also asymptotisch.
 $k^2 = E - V_+$

- 4) $E > V_-$: Ergibt ein Kontinuum von Streuzuständen (2-fach entartet). Die Welle läuft in diesem Fall von links oder von rechts ein, da die Energie auf beiden Seiten höher als das Potenzial ist. Alle Lösungen oszillieren !

Zeige

Nicht entartete Eigenfunktionen sind (bis auf einen trivialen Faktor) reell !

2. Formalismus der Quantenmechanik

2.1 Zustandsvektoren im Hilbertraum

$\Psi(\vec{r})$ sei ein Vektor im Hilbertraum als Wellenfunktion.

Dabei wird zunächst noch keine Aussage über stationäre oder zeitabhängige Vektoren gemacht. Noch ist t einfach als Argument unterdrückt. (Zeitlosigkeit)

Fourier- Trafo der Impulsdarstellung liefert $\Psi(\vec{r})$:

$$\Psi(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int_{R^3} d^3k \Phi(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad \text{in Ortsdarstellung}$$

Laßt Euch hier nicht verwirren. Die Verwendung von x und k als kanonisch konjugierte Variablen ist völlig analog zu x - p als Variablen, denn wegen

$$\vec{p} = \hbar \vec{k}$$

entspricht die Verwendung von \vec{p} als kanonisch konjugierte Variable alleine der Mitnahme des Vorfaktors

$$\frac{1}{\hbar^2}$$

$$\Psi(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int_{R^3} d^3p \Phi\left(\frac{\vec{p}}{\hbar}\right) e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}}$$

Die Umkehrung ist nach dem Fourier- Theorem möglich:

$$\int_{R^3} d^3x \Psi(\vec{r}) e^{-i\vec{k}\vec{r}} = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int_{R^3} d^3k \Phi(\vec{k}) \int d^3r e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}}$$

$$\int_{R^3} d^3r e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}} = (2\pi)^3 \delta(\vec{k}-\vec{k}')$$

$$\Rightarrow \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int_{R^3} d^3k \Phi(\vec{k}) \int d^3r e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}} = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int_{R^3} d^3k \Phi(\vec{k}) (2\pi)^3 \delta(\vec{k}-\vec{k}') = (2\pi)^{\frac{3}{2}} \Phi(\vec{k}')$$

$$\Rightarrow \Phi(\vec{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int_{R^3} d^3x \Psi(\vec{r}) e^{-i\vec{k}\vec{r}}$$

$$p = \hbar k$$

Mit Hilfe:

$$\tilde{\Psi}(\vec{p}) = \hbar^{-\frac{3}{2}} \Phi(\vec{k})$$

Ergibt sich die gängige Darstellung

$$\Psi(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int_{R^3} d^3p \tilde{\Psi}(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}}$$

$$\tilde{\Psi}(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int_{R^3} d^3r \Psi(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}}$$

Dies ist die umkehrbare und Eindeutige Darstellung der Wellenfunktion in Orts- und Impulsdarstellung (Eindeutigkeit nach dem Sampling- Theorem).

Da die Natur der Dinge diese Transformation beinhaltet sind keine Informationen unter einem gewissen Produkt aus Ort und Impuls in der Wellenfunktion enthalten. (Sampling- Theorem) Da die Wellenfunktion aber per Definition das System vollständig beschreiben soll, kann in dem System keine Information enthalten sein, die eine größere Genauigkeit als diese der Unschärferelation aufweist.

Also ist die Heisenbergsche Unschärferelation der Ausdruck einer inhärenten Unschärfe, die in der Natur der Dinge liegt, wenn denn der Formalismus der Quantenmechanik und ihre Axiome richtig sind.

Wiederholung

Angeichts eines informationstheoretischen Zugangs zur Quantenmechanik ist dies eine wichtige Aussage:

Wir haben also als Transformationsvorschrift zwischen kanonisch konjugierten Variablen die Fouriertransformation:

$$\Psi(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int_{R^3} d^3 p \tilde{\Psi}(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}}$$

$$\tilde{\Psi}(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int_{R^3} d^3 r \Psi(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}}$$

Als minimale Einheit der Wirkung (gemäß Hamiltonschem Prinzip) gewinnen wir:

$$\Delta x \Delta p = \frac{1}{2} \hbar \text{ (im eindimensionalen Fall)}$$

also für unser Informationsminimum:

$$\Delta x \Delta k = \frac{1}{2}$$

Dies folgt unmittelbar aus der Fouriertransformation als Trafo- Vorschrift ! (Sampling- Theorem)

Die Wellenfunktion kann unter dieser Quantisierung keine Information beinhalten !

Aber: Die Wellenfunktion beschreibt das System vollständig (Axiom der Quantenmechanik !)

Somit existiert in der Natur keine Information unter

$$\Delta x \Delta p < \frac{1}{2} \hbar$$

Geometrische Analogie der Transformation zwischen Orts- und Impulsdarstellung:

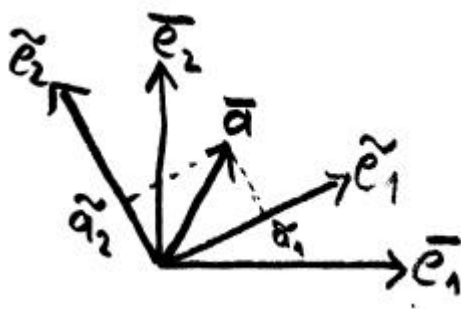
Sei $V = R^n$ ein n- dimensionaler Vektorraum, das heißt, die Metrik sei durch ein euklidisches Skalarprodukt

$$\langle \vec{a} | \vec{b} \rangle = \sum_{i=1}^n a_i b_i \text{ erklärt.}$$

Seien $\{\vec{e}_1, \vec{e}_2, \dots, \vec{e}_n\}$, $\{\vec{e}_1', \vec{e}_2', \dots, \vec{e}_n'\}$ und $\{\tilde{\vec{e}}_1, \tilde{\vec{e}}_2, \dots, \tilde{\vec{e}}_n\}$ drei beliebige Basen des R^n .

Ein Vektor kann natürlich bezüglich der einen oder der anderen Basis dargestellt werden:

$$\vec{a} = \sum_{j=1}^n a_j \vec{e}_j = \sum_{j=1}^n a_j' \vec{e}_j' = \sum_{j=1}^n \tilde{a}_j \tilde{\vec{e}}_j$$



Die Basen sollen die folgenden Eigenschaften haben:

Orthonormalität: $\langle \bar{e}_i | \bar{e}_j \rangle = \langle \bar{e}_i' | \bar{e}_j' \rangle = \mathbf{d}_{ij}$

Die Projektion auf die Basisvektoren erfolgt durch die Bildung des Skalarproduktes:

$$\langle \bar{e}_i | \bar{a} \rangle = a_i = \sum_j a_j \langle \bar{e}_i | \bar{e}_j \rangle = \sum_j a_j \mathbf{d}_{ij}$$

$$\langle \bar{e}_i' | \bar{a} \rangle = a_i' = \sum_j a_j \langle \bar{e}_i' | \bar{e}_j' \rangle = \sum_j a_j \mathbf{d}_{ij}$$

Natürlich kann jeder Vektor in einer beliebigen Basis formal entwickelt werden. Die Entwicklungskoeffizienten sind die Projektionen auf die jeweiligen Basisvektoren und natürlich von der Wahl der Basis abhängig :

$$\bar{a} = \sum_j a_j |\bar{e}_j\rangle = \sum_j \langle \bar{e}_j | \bar{a} \rangle |\bar{e}_j\rangle = \sum_j |\bar{e}_j\rangle \langle \bar{e}_j | \bar{a} \rangle$$

$$\bar{a} = \sum_j a_j |\bar{e}_j'\rangle = \sum_j \langle \bar{e}_j' | \bar{a} \rangle |\bar{e}_j'\rangle = \sum_j |\bar{e}_j'\rangle \langle \bar{e}_j' | \bar{a} \rangle$$

Im Sinne von:

$$\langle \bar{b} | \bar{a} \rangle = \sum_j b_j a_j = \sum_j \langle \bar{b} | \bar{e}_j \rangle \langle \bar{e}_j | \bar{a} \rangle = \sum_j \langle \bar{b} | \bar{e}_j' \rangle \langle \bar{e}_j' | \bar{a} \rangle$$

Formal gilt damit:

$$\sum_{j=1}^n |\bar{e}_j\rangle \langle \bar{e}_j| = \sum_{j=1}^n |\bar{e}_j'\rangle \langle \bar{e}_j'|$$

Dies ist die VOLLSTÄNDIGKEITSRELATION: Die Basis- Vektoren spannen den n- dimensionalen R^n auf.

Übertragung auf Orts- und Impulsdarstellung quantentheoretischer Zustände:

Der Zustandsvektor im Hilbertraum benötigt zur vollständigen Beschreibung einen 2n- dimensional Hilbertraum bei n Freiheitsgraden. In Orts- und Impulsdarstellung wird jedoch nur die jeweilige Komponente, ergo die Projektion der gesamten Wellenfunktion auf den Ortsanteil oder die Projektion der gesamten Wellenfunktion auf den Impulsanteil dargestellt.

Dies ist vergleichbar mit einem System aus orthogonalen Achsen, wobei man die Projektion einer Funktion in diesem Raum auf eine bestimmte Anzahl von Achsen, beispielsweise auf die Anzahl Achsen, die die Bezeichnung r_i tragen, betrachtet (Ortsdarstellung).

Die Anteile sind jedoch natürlich nicht voneinander unabhängig, sondern sie gehen durch die Fouriertrafo ineinander über !

Es macht ebenso Sinn, $\Psi(\bar{r})$ und $\tilde{\Psi}(\bar{p})$ als Projektionen eines abstrakten Zustandsvektors im Hilbertraum H auf die \bar{r} bzw. \bar{p} - Basis = Darstellung zu betrachten:

$$\Psi(\bar{r}) := \langle \bar{r} | \Psi \rangle$$

mit $\Psi \in H$ als Zustandsvektor.

$$\Psi(\bar{p}) := \langle \bar{p} | \Psi \rangle$$

Axiome des Hilbertraums H:

1) H ist ein komplexer Vektorraum:

- Assoziativität: $|\Psi_1\rangle + (|\Psi_2\rangle + |\Psi_3\rangle) = (|\Psi_1\rangle + |\Psi_2\rangle) + |\Psi_3\rangle$
- Nullelement: $\exists |0\rangle \in H : |0\rangle + |\Psi\rangle = |\Psi\rangle = |\Psi\rangle + |0\rangle \forall |\Psi\rangle \in H$
- Inverses: $\forall |\Psi\rangle \exists -|\Psi\rangle : |\Psi\rangle + -|\Psi\rangle = |0\rangle$
- Kommutativität: $|\Psi_1\rangle + |\Psi_2\rangle = |\Psi_2\rangle + |\Psi_1\rangle$

Dadurch werden die Elemente aus H zu einer kommutativen Gruppe

Weiter gilt: Distributivgesetz:

$$\mathbf{a}(|\Psi_1\rangle + |\Psi_2\rangle) = \mathbf{a}|\Psi_1\rangle + \mathbf{a}|\Psi_2\rangle \quad \forall \mathbf{a} \in \mathbb{C}$$

$$(\mathbf{a} + \mathbf{b})|\Psi\rangle = \mathbf{a}|\Psi\rangle + \mathbf{b}|\Psi\rangle$$

Das Assoziativgesetz und weitere Rechenregel bei Multiplikation mit 1 und Null aus den komplexen Zahlen:

$$(\mathbf{a})(\mathbf{b}|\Psi\rangle) = (\mathbf{ab})|\Psi\rangle$$

$$1 \cdot |\Psi\rangle = |\Psi\rangle$$

$$0 \cdot |\Psi\rangle = |0\rangle$$

2) H hat ein Skalarprodukt: $\langle \cdot | \cdot \rangle : H \times H \rightarrow \mathbb{C}$ mit:

$$\langle \Psi | \Psi \rangle \geq 0 : \langle \Psi | \Psi \rangle = 0 \rightarrow |\Psi\rangle = |0\rangle$$

$$\langle \Psi | \Psi_1 + \Psi_2 \rangle = \langle \Psi | \Psi_1 \rangle + \langle \Psi | \Psi_2 \rangle$$

$$\langle \Psi_1 | \mathbf{a}\Psi_2 \rangle = \mathbf{a}\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle$$

$$\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \langle \Psi_2 | \Psi_1 \rangle^*$$

Damit bereits kann gezeigt werden: $\langle \mathbf{a}\Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \mathbf{a}^* \langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle$

Das Skalarprodukt induziert eine Norm: $\| \cdot \| : H \rightarrow \mathbb{R}$

$$\| \Psi \| \geq 0 : \| \Psi \| = 0 \rightarrow |\Psi\rangle = |0\rangle$$

$$\| \mathbf{a}\Psi \| = |\mathbf{a}| \| \Psi \|^2$$

$$\| \Psi_1 + \Psi_2 \| \leq \| \Psi_1 \| + \| \Psi_2 \|^2$$

Dabei ist letzteres, die Dreiecksungleichung, bedingt durch die Definition:

$$\| \Psi \| = \sqrt{\langle \Psi | \Psi \rangle}$$

3) H ist vollständig. Das heißt: Jede konvergente Folge $\{\Psi_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ konvergiert gegen ein $|\Psi\rangle \in H$

Also: konvergente Folge von Eigenzuständen: Cauchy- Kriterium: $\lim_{n \rightarrow \infty} \| \Psi_{n+1} - \Psi_n \| = 0$

Bemerkungen

1) Die Norm verallgemeinert den Abstandsbegriff auf abstrakte Räume. Das Skalarprodukt verallgemeinert den Winkelbegriff auf abstrakte Räume:

$$\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle, \| \Psi_1 \| > 0, \| \Psi_2 \| > 0 \Rightarrow \text{Die beiden Zustände } |\Psi_2\rangle \text{ und } \langle \Psi_1| \text{ sind orthogonal.}$$

2) Für $|\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle \in H$ gilt: $|\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle| \leq \| \Psi_1 \| \cdot \| \Psi_2 \|$ (Schwarzsche Ungleichung)

3) Äquivalent sind $\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle$ und (Ψ_1, Ψ_2)

4) Zu unterscheiden sind:

$$|\Psi\rangle = \text{Ket- Vektor (nach Dirac -> Dirac- Schreibweise)}$$

$$\langle \Psi| = \text{Bra- Vektor}$$

Zusammen (Skalarprodukt): Bra-c-ket

Dabei bilden die $\{|\Psi\rangle\}$ den zu $\{\langle\Psi|\}$ dualen Hilbertraum H^* :

$$|\Psi\rangle = I_1|\Psi_1\rangle + I_2|\Psi_2\rangle, \quad \langle\Psi| = I_1, I_2 \in C$$

impliziert mit beliebigem $\langle\Phi|$:

$$\langle\Phi|\Psi\rangle = I_1\langle\Phi|\Psi_1\rangle + I_2\langle\Phi|\Psi_2\rangle$$

$$\Rightarrow \langle\Phi|\Psi\rangle^* = I_1^* \langle\Phi|\Psi_1\rangle^* + I_2^* \langle\Phi|\Psi_2\rangle^*$$

$$\Rightarrow \langle\Psi|\Phi\rangle = I_1^* \langle\Psi_1|\Phi\rangle + I_2^* \langle\Psi_2|\Phi\rangle$$

$$\Rightarrow \langle\Psi| = I_1^* \langle\Psi_1| + I_2^* \langle\Psi_2|$$

Aber: H ist der zu H^* duale Vektorraum, H^* ist isomorph zu H

5) H heißt separabel, falls er eine überall dichte, abzählbare Teilmenge D besitzt

Das heißt: $\forall |\Psi\rangle \in H \quad \exists \{\Psi_n\}_n \subset D$

Dies ist äquivalent dazu, dass ein Hilbertraum H separabel heißt, wenn er eine abzählbare Hilbert-Basis besitzt, es also ein abzählbares, vollständig orthonormiertes System in H gibt. Eine Isometrie Φ zwischen

Hilberträumen H und K ist eine stetige, bijektive, lineare Abbildung $\Phi: H \rightarrow K$ so dass $\|\Phi(x)\|_K = \|x\|_H$ für alle $x \in H$.

Anwendung auf die Ortsdarstellung

$$\Psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \Psi \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int_{R^3} d^3p \tilde{\Psi}(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int_{R^3} d^3p e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} \langle \vec{p} | \Psi \rangle$$

$$\tilde{\Psi}(\vec{p}) = \langle \vec{p} | \Psi \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int_{R^3} d^3r \Psi(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int_{R^3} d^3r e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} \langle \vec{r} | \Psi \rangle$$

$e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}}$ ist in der Ortsdarstellung eine Eigenfunktion (Wohlgermerkt, eine Funktion!) zum Impuls, also die Ortsdarstellung des Impulszustandes Impuls-Eigenzustandes $|\vec{p}\rangle$. Der Zustand, der den Impuls repräsentiert und durch Anwendung des Impulsoperators den Impuls liefert.

Denn:

$$\frac{\hbar}{i} \nabla e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} = \vec{p} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}}$$

In Algebraischer Schreibweise bedeutet dies (inklusive Normierung):

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

Impulseigenfunktion in Ortsdarstellung

$$\langle \vec{p} | \vec{r} \rangle \sim e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}}$$

Ortseigenfunktion in Impulsdarstellung

(Diese beiden gehen durch komplexe Konjugation ineinander über !)

Damit folgt:

$$\Psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \Psi \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int_{R^3} d^3p e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}} \langle \vec{p} | \Psi \rangle = \int_{R^3} d^3p \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \Psi \rangle$$

$$\tilde{\Psi}(\vec{p}) = \langle \vec{p} | \Psi \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int_{R^3} d^3r e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}} \langle \vec{r} | \Psi \rangle = \int_{R^3} d^3r \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle^* \langle \vec{r} | \Psi \rangle = \int_{R^3} d^3r \langle \vec{p} | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \Psi \rangle$$

Da \vec{r} und \vec{p} vollständige Darstellungen sind, folgt:

$$|\Psi\rangle = \int_{R^3} d^3p |\vec{p}\rangle \langle \vec{p} | \Psi \rangle = \int_{R^3} d^3r |\vec{r}\rangle \langle \vec{r} | \Psi \rangle$$

analog zur Entwicklung des Vektors $|\vec{a}\rangle \in R^n$ nach Basisvektoren (in seinen Koordinaten, mit seinen Koordinaten als Entwicklungskoeffizienten).

$$\vec{a} = \sum_j a_j |\vec{e}_j\rangle = \sum_j |\vec{e}_j\rangle \langle \vec{e}_j | \vec{a} \rangle = \sum_j a_j |\vec{e}_j\rangle = \sum_j |\vec{e}_j\rangle \langle \vec{e}_j | \vec{a} \rangle$$

Somit folgt jedoch:

$$\int_{R^3} d^3p |\vec{p}\rangle \langle \vec{p}| = \int_{R^3} d^3r |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}| = 1 \quad \text{als Vollständigkeits-Relation. Nebenbemerkung: Der Hilbertraum der Zustände hat unendliche Dimension.}$$

Als Grenzwert definiert man den Dirac- Vektor, als Grenzwert einer diskreten Basis:

$$|\vec{p}\rangle \notin H$$

$$|\vec{p}\rangle := \lim_{\Delta p \rightarrow 0} |\vec{p}, \Delta \vec{p}\rangle$$

Eigenschaften der Funktionen, die H aufspannen:

Dual:

$$\langle \Psi | = \int_{R^3} d^3p \langle \Psi | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | = \int_{R^3} d^3r \langle \Psi | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} |$$

Man spricht auch vom " Einschieben einer 1 !".

$$\langle \Psi | \vec{r} \rangle = \int_{R^3} d^3p \langle \Psi | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \vec{r} \rangle = \int_{R^3} d^3p \tilde{\Psi}(\vec{p}) * (2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}} = \langle \vec{r} | \Psi \rangle^* = \Psi(\vec{r})^*$$

Skalarprodukt:

$$\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \int_{R^3} d^3r \langle \Psi_1 | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \Psi_2 \rangle = \int_{R^3} d^3r \Psi_1(\vec{r})^* \Psi_2(\vec{r}) = \int_{R^3} d^3p \tilde{\Psi}_1(\vec{p}) * \tilde{\Psi}_2(\vec{p})$$

Norm:

$$\|\Psi\| = \left[\int_{R^3} d^3r \langle \Psi | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \Psi \rangle \right]^{\frac{1}{2}} = \left[\int_{R^3} d^3r |\Psi(\vec{r})|^2 \right]^{\frac{1}{2}}$$

Alle Funktionen im Hilbertraum müssen also insbesondere quadratintegrabel sein.

Somit folgt:

$$H = L^2(R^3) = \left\{ \Psi : R^3 \rightarrow C \mid \left[\int_{R^3} d^3r |\Psi(\vec{r})|^2 < \infty \right] \right\}$$

Nebenbemerkung:

Die Linearität des Vektorraumes garantiert das Superpositionsprinzip für Wellenfunktionen !

2.2 Operatoren im Hilbertraum

Übergang zur Quantentheorie in der Ortsdarstellung

In der Wellenmechanik nach Schrödinger haben wir statt dem Impuls (klassisch) den Impulsoperator zur Beschreibung der Observable:

$$\vec{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla$$

Die Eigenwertgleichung in der Ortsdarstellung des Impulszustandes lautet:

$$\frac{\hbar}{i} \nabla \left(\frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} \right) = \frac{\hbar}{i} \nabla \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle = \vec{p} \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle$$

Multiplikation mit $|\vec{r}\rangle$ und Aufintegration liefert:

$$\int d^3r |\vec{r}\rangle \left(\frac{\hbar}{i} \nabla \right) \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle = \vec{p} \int d^3r |\vec{r}\rangle \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle = \vec{p} |\vec{p}\rangle$$

Also:

$$\hat{\vec{p}} |\vec{p}\rangle = \vec{p} |\vec{p}\rangle$$

mit dem ABSTRAKTEN (Darstellungsfreien) Impulsoperator:

$$\hat{\vec{p}} := \int d^3r |\vec{r}\rangle \left(\frac{\hbar}{i} \nabla \right) \langle \vec{r} |$$

Dabei gilt: einen darstellungsfreien Operator bekommt man immer, indem man einen Operator in bestimmter Darstellung wählt und zwischen den Projektor auf diese Darstellung packt (einen vollständigen Projektor !)

-> Bei Anwendung wird die entsprechende Wellenfunktion, egal in welcher Darstellung erst mal auf die entsprechende Darstellung projiziert, in der dann der Operator wirken kann. Man braucht sich keine Sorgen mehr

machen. Der Operator $\hat{\vec{p}} := \int d^3r |\vec{r}\rangle \left(\frac{\hbar}{i} \nabla \right) \langle \vec{r} |$ ist in dieser Weise darstellungsfrei !

Verallgemeinerung

Sei $F(\vec{r}, \vec{p})$ eine klassische Observable, beispielsweise der Impuls, die Energie, der Drehimpuls, ...), so ergibt sich F als Operator in der Ortsdarstellung:

$$F(\vec{r}, \vec{p}) \rightarrow \hat{F}(\hat{\vec{r}}, \frac{\hbar}{i} \nabla)$$

Der abstrakte (darstellungsfreie Operator) folgt durch Aufintegration der Projektionen (Einschub des Vollständigen Satzes von Eigenfunktionen, auf die projiziert wird, Einschub einer Eins):

$$\hat{F} = \int d^3r |\vec{r}\rangle \hat{F}(\hat{\vec{r}}, \frac{\hbar}{i} \nabla) \langle \vec{r} |$$

Umgekehrt, falls die Observable in abstrakter Operatorform gegeben ist:

$$|\Phi\rangle := \hat{F} |\Psi\rangle$$

So folgt für die Ortsdarstellung dieses Zustandes

$$\langle \vec{r} | \Phi \rangle = \langle \vec{r} | \hat{F} | \Psi \rangle = \int d^3r' \langle \vec{r} | \hat{F} | \Psi \rangle \langle \vec{r}' | = \int d^3r' \langle \vec{r} | \hat{F} | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | \Psi \rangle$$

Auch hier wurde wieder eine 1, also ein vollständiger Satz von Basisfunktionen eingeschoben.

Somit aber:

$$\Phi(\vec{r}) = \int d^3r' \langle \vec{r} | \hat{F} | \vec{r}' \rangle \Psi(\vec{r}')$$

Im Allgemeinen werden die Operatoren in speziellen Darstellungen, wie der obigen Ortsdarstellung zu LINEAREN INTEGRALOPERATOREN (nichtlokal!)

Für die Ortsdarstellung für ein Teilchen im Potenzial F gilt speziell

$$\langle \vec{r} | \hat{F} | \vec{r}' \rangle = \mathbf{d}(\vec{r} - \vec{r}') \hat{F}(\vec{r}, \frac{\hbar}{i} \nabla) \quad (\text{lokaler Differenzialoperator, Lokalisation an } \vec{r}')$$

Übungsweise soll der nichtlokale Hamiltonoperator bestimmt werden.

Ortsoperator:

$$\hat{\vec{r}} \Psi(\vec{r}) = \vec{r} \Psi(\vec{r})$$

$$\hat{\vec{r}} \langle \vec{r} | \Psi \rangle = \vec{r} \langle \vec{r} | \Psi \rangle$$

Dabei ist $\hat{\vec{r}}$ der Operator, $\langle \vec{r} | \Psi \rangle$ die Eigenfunktion und \vec{r} der Eigenwert.

$$\langle \vec{r} | \hat{\vec{r}} | \Psi \rangle = \int d^3 r' \langle \vec{r} | \hat{\vec{r}} | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | \Psi \rangle = \vec{r} \langle \vec{r} | \Psi \rangle$$

$$\Rightarrow \langle \vec{r} | \hat{\vec{r}} | \vec{r}' \rangle = \vec{r} \mathbf{d}(\vec{r} - \vec{r}')$$

In der Impulsdarstellung:

$$\Phi := \hat{\vec{r}} | \Psi \rangle$$

$$\Phi(\vec{p}) \equiv \langle \vec{p} | \Phi \rangle = \langle \vec{p} | \hat{\vec{r}} | \Psi \rangle$$

$$\Phi(\vec{p}) = \int d^3 r \langle \vec{p} | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \hat{\vec{r}} | \Psi \rangle$$

$$\langle \vec{p} | \vec{r} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{-i\frac{\vec{p}\vec{r}}{\hbar}}$$

$$\langle \vec{r} | \hat{\vec{r}} | \Psi \rangle = \vec{r} \langle \vec{r} | \Psi \rangle$$

$$\Rightarrow \Phi(\vec{p}) = \int d^3 r \langle \vec{p} | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \hat{\vec{r}} | \Psi \rangle = \int d^3 r \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{-i\frac{\vec{p}\vec{r}}{\hbar}} \vec{r} \Psi(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int d^3 r \vec{r} e^{-i\frac{\vec{p}\vec{r}}{\hbar}} \Psi(\vec{r})$$

$$\vec{r} e^{-i\frac{\vec{p}\vec{r}}{\hbar}} = -\frac{\hbar}{i} \nabla_p \left(e^{-i\frac{\vec{p}\vec{r}}{\hbar}} \right)$$

$$\nabla_p \equiv \left(\frac{\partial}{\partial p_x}, \frac{\partial}{\partial p_y}, \frac{\partial}{\partial p_z} \right)$$

$$\Rightarrow \Phi(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int d^3 r \vec{r} e^{-i\frac{\vec{p}\vec{r}}{\hbar}} \Psi(\vec{r}) = -\frac{\hbar}{i} \nabla_p \left[\int d^3 r \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{-i\frac{\vec{p}\vec{r}}{\hbar}} \Psi(\vec{r}) \right]$$

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{-i\frac{\vec{p}\vec{r}}{\hbar}} = \langle \vec{p} | \vec{r} \rangle$$

$$\Rightarrow \Phi(\vec{p}) = -\frac{\hbar}{i} \nabla_p \left[\int d^3 r \langle \vec{p} | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \Psi \rangle \right] = -\frac{\hbar}{i} \nabla_p \tilde{\Psi}(\vec{p})$$

Also: Für die Impulsdarstellung des Ortsoperators gilt:

$$\hat{\vec{r}} \rightarrow -\frac{\hbar}{i} \nabla_p$$

Energiedarstellung

Sei in der Ortsdarstellung

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \text{ der eindimensionale Hamiltonoperator}$$

Dazu die Eigenfunktionen:

$$\hat{H} \mathbf{j}_n(x) = E_n \mathbf{j}_n(x), n=0,1,2,\dots$$

$$\text{Mit } \mathbf{j}_n(x) := \langle x | n \rangle$$

$$\hat{H} \left(x, \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right) \langle x | n \rangle = E_n \langle x | n \rangle$$

Ergibt sich:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle \hat{H} \left(x, \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right) \langle x | n \rangle = E_n |n\rangle$$

Mit dem darstellungsfreien Hamiltonoperator

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle \hat{H} \left(x, \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right) \langle x |$$

Die Orthonormierung verlangt:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \mathbf{j}_m^*(x) \mathbf{j}_n(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle m | x \rangle \langle x | n \rangle = \langle m | n \rangle = \mathbf{d}_{mn}$$

Bei diskreten Eigenfunktionen.

Dies ist aber analog zur kontinuierlichen Darstellung:

$$\langle \vec{r} | \vec{r}' \rangle = \mathbf{d}(\vec{r}' - \vec{r})$$

$$\langle \vec{p} | \vec{p}' \rangle = \mathbf{d}(\vec{p}' - \vec{p})$$

Häufig (aber nicht immer !!) ist die Energiedarstellung VOLLSTÄNDIG (sie ist beispielsweise beim eindimensionalen harmonischen Oszi vollständig):

$$\langle x | \Psi \rangle = \Psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \mathbf{j}_n(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \langle n | \Psi \rangle \langle x | n \rangle$$

$$\Rightarrow \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n| = 1$$

Vollständigkeitsrelation !

Dann gilt auch die Spektraldarstellung des Hamiltonoperators. Jedoch nur, wenn die Darstellung der zugehörigen Observable vollständig ist:

$$\hat{H} = \sum_{n=0}^{\infty} \hat{H} |n\rangle \langle n| = \sum_{n=0}^{\infty} E_n |n\rangle \langle n|$$

Der Operator kann durch die Summe aller Koordinaten in den entsprechenden Eigenzuständen angegeben werden, wenn das System der Zustände eine vollständige Basis repräsentiert. (Und die Zustände Eigenzustände des Operators sind)

$|n\rangle \langle n|$ ist dabei der Projektionsoperator auf den n. Eigenzustand.

Allgemein gilt:

Aus einer Quantenmechanischen Observable wird ein linearer Operator im Hilbertraum: $\hat{F} : H \rightarrow H$.

Bei reellen Observablen, besser: reellen Erwartungswerten der Observablen muss der zugehörige Operator nicht nur linear, sondern auch hermitesch sein

$$\hat{F}(\mathbf{I}_1|\Psi_1\rangle + \mathbf{I}_2|\Psi_2\rangle) = \mathbf{I}_1\hat{F}|\Psi_1\rangle + \mathbf{I}_2\hat{F}|\Psi_2\rangle$$

$$\mathbf{I}_1, \mathbf{I}_2 \in \mathbb{C}$$

Definition:

Der zu $\hat{F} : H \rightarrow H$ adjungierte Operator \hat{F}^+ ist definiert durch:

$$\hat{F}|\Psi\rangle = |\Phi\rangle \Leftrightarrow \langle\Psi|\hat{F}^+ = \langle\Phi|$$

Adjungierte Operatoren wirken also nach links

In Klammer- und Integraldarstellung schaut dies folgendermaßen aus:

$$(\Psi_1, \hat{F}\Psi_2) = (\hat{F}^+\Psi_1, \Psi_2) \quad \forall \Psi_1, \Psi_2 \in H$$

Integraldarstellung in Ortsdarstellung:

$$\int d^3r \Psi_1^*(\vec{r}) (\hat{F}\Psi_2(\vec{r})) = \int d^3r (\hat{F}^+\Psi_1^*(\vec{r})) (\Psi_2(\vec{r}))$$

Def.: ein linearer Operator \hat{F} heißt selbstadjungiert (HERMITESCH), falls: $\hat{F} = \hat{F}^+$

$$(\Psi_1, \hat{F}\Psi_2) = (\hat{F}\Psi_1, \Psi_2) \quad \forall \Psi_1, \Psi_2 \in H$$

$$\int d^3r \Psi_1^*(\vec{r}) (\hat{F}\Psi_2(\vec{r})) = \int d^3r (\hat{F}\Psi_1^*(\vec{r})) (\Psi_2(\vec{r}))$$

Die linearen Operatoren bilden eine Algebra. Dabei ist die Multiplikation definiert durch:

$$(\hat{F} \cdot \hat{G})|\Psi\rangle = \hat{F} \cdot (\hat{G}|\Psi\rangle)$$

Mit dem Einheitsoperator 1:

$$1 \cdot \hat{F} = \hat{F} \cdot 1 = \hat{F}$$

Nulloperator 0:

$$0 \cdot \hat{F} = \hat{F} \cdot 0 = 0$$

und dem Kommutator:

$$[\hat{F}, \hat{G}] := \hat{F} \cdot \hat{G} - \hat{G} \cdot \hat{F}$$

Es gilt, was als Übung bewiesen werden kann:

$$1) \quad (\hat{F} \cdot \hat{G})^+ = \hat{G}^+ \cdot \hat{F}^+$$

$$2) \quad \hat{F}^{++} = \hat{F}$$

3) Für zusammengesetzte Zustände:

$$|\Psi\rangle = \mathbf{I}_1|\Psi_1\rangle + \mathbf{I}_2|\Psi_2\rangle$$

$$\Rightarrow \hat{F}(\mathbf{I}_1|\Psi_1\rangle + \mathbf{I}_2|\Psi_2\rangle) = \mathbf{I}_1\hat{F}|\Psi_1\rangle + \mathbf{I}_2\hat{F}|\Psi_2\rangle \quad \text{Linearität}$$

und

$$|\Psi\rangle = \mathbf{I}_1|\Psi_1\rangle + \mathbf{I}_2|\Psi_2\rangle$$

$$\Rightarrow \langle\Psi|\hat{F}^+ = \mathbf{I}_1^* \langle\Psi_1|\hat{F}^+ + \mathbf{I}_2^* \langle\Psi_2|\hat{F}^+ \quad \text{Antilinearität}$$

Das Skalarprodukt ist linear im 2. Faktor und antilinear im 1. Faktor !

Weitere Relationen:

$$[\hat{F}, \hat{G}]^+ = \hat{G}^+ \cdot \hat{F}^+ - \hat{F}^+ \cdot \hat{G}^+ = [\hat{G}^+, \hat{F}^+]$$

Falls $[\hat{F}, \hat{G}] = 0$ gilt, so folgt:

$$e^{\hat{F}} e^{\hat{G}} = e^{\hat{G}} e^{\hat{F}}$$

$$e^{\hat{G} + \hat{F}} = e^{\hat{G}} e^{\hat{F}}$$

Außerdem:

$$[\hat{F}\hat{G}, \hat{H}] = \hat{F}[\hat{G}, \hat{H}] + [\hat{F}, \hat{H}]\hat{G}$$

Sowie die Baker- Hausdorff- Identität:

$$e^{\hat{F}} \hat{G} e^{-\hat{F}} = \hat{G} + [\hat{F}, \hat{G}] + \frac{1}{2!} [\hat{F}, [\hat{F}, \hat{G}]] + \dots$$

Mit

$$e^{\hat{F}} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\hat{F})^n}{n!}$$

Matrixelemente

$\langle \Psi_1 | \hat{F} | \Psi_2 \rangle$ heißt Matrixelement von \hat{F} mit dem Bra $\langle \Psi_1 |$ und dem Ket $|\Psi_2 \rangle$

Mit

$$\hat{F} |\Psi_2 \rangle = |\Phi \rangle \Leftrightarrow \langle \Psi_2 | \hat{F}^+ = \langle \Phi |$$

$$\Rightarrow \langle \Psi_1 | \Phi \rangle = \langle \Phi | \Psi_1 \rangle^* = \langle \Psi_2 | \hat{F}^+ | \Psi_1 \rangle^*$$

Also:

$$\langle \Psi_1 | \hat{F} | \Psi_2 \rangle = \langle \Psi_2 | \hat{F}^+ | \Psi_1 \rangle^*$$

Für hermitesche Operatoren gilt:

$$\langle \Psi_1 | \hat{F} | \Psi_2 \rangle = \langle \Psi_2 | \hat{F} | \Psi_1 \rangle^*$$

Erwartungswerte

$$\langle \hat{F} \rangle = \int d^3r \Psi^*(\vec{r}) \hat{F}(\vec{r}, \frac{\hbar}{i} \nabla) \Psi(\vec{r}) \text{ in Ortsdarstellung}$$

$$\langle \hat{F} \rangle = \int d^3r \langle \Psi | \vec{r} \rangle \hat{F}(\vec{r}, \frac{\hbar}{i} \nabla) \langle \vec{r} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{F}(\vec{r}, \frac{\hbar}{i} \nabla) | \Psi \rangle$$

Für hermitesche Operatoren sind die Erwartungswerte immer reell:

$$\langle \Psi | \hat{F}(\vec{r}, \frac{\hbar}{i} \nabla) | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{F}(\vec{r}, \frac{\hbar}{i} \nabla) | \Psi \rangle^*$$

Umgekehrt gilt: Operatoren mit reellen Eigenwerten sind hermitesch ! (im Allgemeinen).

Physikalische Observablen sind also immer durch hermitesche Operatoren darzustellen

2.3 Eigenwerte und Eigenzustände von hermiteschen Operatoren

Annahme: Eine physikalische Observable F habe in einem normierten Zustand $|\Psi \rangle$ einen scharfen Wert:

$$\langle (\Delta \hat{F})^2 \rangle = \int d^3r \Psi^*(\vec{r}) (\Delta \hat{F})^2 \Psi(\vec{r}) = \langle (\hat{F} - \langle \hat{F} \rangle)^2 \rangle = \langle \hat{F}^2 \rangle - \langle \hat{F} \rangle^2$$

$$= \int d^3r \Psi^*(\vec{r}) (\hat{F})^2 \Psi(\vec{r}) - \left(\int d^3r \Psi^*(\vec{r}) \hat{F} \Psi(\vec{r}) \right)^2 = 0$$

$$\Leftrightarrow \langle \Psi | \hat{F}^2 | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{F} | \Psi \rangle^2$$

Für hermitesches F als physikalische Observable mit $\langle \Psi | \hat{F} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{F} | \Psi \rangle^*$

Sei $\hat{F} | \Psi \rangle := | \Phi \rangle \Leftrightarrow \langle \Psi | \hat{F} = \langle \Phi |$

So folgt aus

$$\langle \Psi | \hat{F}^2 | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{F} | \Psi \rangle^2, \text{ dass}$$

$$\langle \Phi | \Phi \rangle = \langle \Psi | \hat{F}^2 | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{F} | \Psi \rangle^2 = \langle \Phi | \Psi \rangle^2 = |\langle \Phi | \Psi \rangle|^2$$

Die schwarzsche Ungleichung sagt jedoch :

$$|\langle \Phi | \Psi \rangle|^2 \leq \|\Phi\|^2 \|\Psi\|^2$$

$$\|\Psi\|^2 = 1$$

$$\Rightarrow \|\Phi\|^2 \|\Psi\|^2 = \|\Phi\|^2 = \langle \Phi | \Phi \rangle$$

$$|\langle \Phi | \Psi \rangle|^2 \leq \langle \Phi | \Phi \rangle$$

Das Gleichheitszeichen gilt genau dann, wenn die Zustände parallel sind, also folgt:

$$| \Phi \rangle = a | \Psi \rangle \quad a \in \mathbb{C}$$

$$\Leftrightarrow \hat{F} | \Psi \rangle = a | \Psi \rangle$$

Das heißt, für den normierten Zustand $| \Psi \rangle$ folgt alleine aus der Schwarzschen Ungleichung, dass

$| \Psi \rangle$ Eigenzustand zu \hat{F} ist.

Theorem 1: Eigenwerte hermitescher Operatoren sind reell

Beweis:

$$\langle \Psi | \hat{F} | \Psi \rangle = a \langle \Psi | \Psi \rangle = a = \langle \Psi | \hat{F}^+ | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{F} | \Psi \rangle^* = a^*$$

$$\Rightarrow a \in \mathbb{R}$$

Vergleiche Energie- Eigenwert

Eigenwerte hermitescher Operatoren können DISKRET oder KONTINUIERLICH sein !

Theorem 2: Eigenzustände hermitescher Operatoren zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal:

Beweis:

$$\hat{F} | \Psi_1 \rangle = F_1 | \Psi_1 \rangle$$

$$\hat{F} | \Psi_2 \rangle = F_2 | \Psi_2 \rangle$$

$$\Rightarrow \langle \Psi_2 | \hat{F} = F_2 \langle \Psi_2 |$$

$$\langle \Psi_1 | \hat{F} | \Psi_2 \rangle = F_2 \langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle$$

$$\langle \Psi_2 | \hat{F} | \Psi_1 \rangle = F_1 \langle \Psi_2 | \Psi_1 \rangle = \langle \Psi_1 | \hat{F} | \Psi_2 \rangle^* = F_2 \langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle \quad \text{falls } \hat{F} = \hat{F}^+, F_2 = F_2^*$$

$$\langle \Psi_2 | \hat{F} | \Psi_1 \rangle = \langle \hat{F}^+ \Psi_2 | \Psi_1 \rangle = F_2 \langle \Psi_2 | \Psi_1 \rangle$$

$$\langle \Psi_2 | \hat{F} | \Psi_1 \rangle - \langle \Psi_2 | \hat{F} | \Psi_1 \rangle = (F_2 - F_1) \langle \Psi_2 | \Psi_1 \rangle$$

Da die Eigenwerte nach Voraussetzung verschieden sein sollen, gilt für die zugehörigen Eigenzustände:

$$\langle \Psi_2 | \Psi_1 \rangle = 0$$

Wegen der Normierung gilt:

$$\langle \Psi_n | \Psi_m \rangle = \delta_{nm}$$

Kontinuierlicher Fall:

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

$$\langle \vec{r} | \vec{r}' \rangle = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

Die Zustände sind im kontinuierlichen Fall nicht normierbar, also nicht Element des Hilbertraumes. Sind aber als Limes einer diskreten Basis aufzufassen:

$$|\vec{p}\rangle \notin H$$

$$|\vec{p}\rangle := \lim_{\Delta p \rightarrow 0} |\vec{p}, \Delta \vec{p}\rangle \quad (\text{vergleiche Fick, S. 114})$$

-> sogenannte Dirac- Zustände !

Entartung (Unter Entartung versteht man, dass zum selben Eigenwert verschiedene Eigenzustände existieren) Dadurch können beispielsweise verschiedene Elektronen den gleichen Energiewert annehmen oder verschiedene Teilchen mit der exakt identisch gleichen Energie auftreten !

$\hat{F}|n, \mathbf{a}\rangle = F_n |n, \mathbf{a}\rangle$ $n=0,1,2,3,\dots$ $\mathbf{a} = 1,2,3,\dots = \mathbf{a}_n$, der sogenannte Entartungsindex. Man spricht von \mathbf{a}_n - facher Entartung

Aus $\hat{F}|n, \mathbf{a}\rangle = F_n |n, \mathbf{a}\rangle$ folgt bereits: $(F_n - F_m) \langle m, \mathbf{a}' | n, \mathbf{a} \rangle = 0 \Rightarrow \langle m, \mathbf{a}' | n, \mathbf{a} \rangle = \delta_{mn}$

Somit also müssen nur die HAUPTQUANTENZAHLEN, wie man sagt, der Zustände gleich sein.

Möglich wäre $\langle n, \mathbf{a}' | n, \mathbf{a} \rangle \neq 0$ für $\mathbf{a} \neq \mathbf{a}'$.

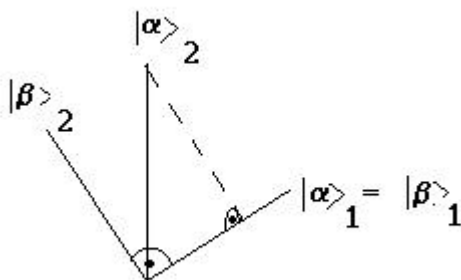
Also müssen miteinander entartete Zustände eines bestimmten Hauptniveaus nicht orthogonal sein.

Jedoch kann man im Unterraum der Entarteten Zustände Transformationen durchführen. Dies ist der Eigenraum zum Eigenwert F_n .

In diesem Eigenraum kann man die entarteten Zustände durch eine lineare Transformation in orthonormierte Eigenzustände $|n, \mathbf{b}\rangle$ überführen:

$$|n, \mathbf{b}\rangle = \sum_{\mathbf{a}=1}^{\mathbf{a}_n} |n, \mathbf{a}\rangle c_{ab}$$

Eine geeignete Trafo wäre beispielsweise das Schmidtsche Orthogonalisierungsverfahren:



Also gilt dann:

$$\langle n, \mathbf{b} | m, \mathbf{b}' \rangle = \delta_{mn} \delta_{bb'}$$

Theorem 3:

Zwei hermitesche Operatoren \hat{F} und \hat{G} kommutieren genau dann, wenn sie ein gemeinsames System von Eigenvektoren besitzen:

Beweis:

$$\begin{aligned} \text{Sei } [\hat{F}, \hat{G}] &= 0 \text{ und } \hat{F}|n\rangle = F_n|n\rangle \\ \Rightarrow [\hat{F}, \hat{G}]|n\rangle &= \hat{F}\hat{G}|n\rangle - \hat{G}\hat{F}|n\rangle = \hat{F}\hat{G}|n\rangle - F_n\hat{G}|n\rangle = 0 \\ \Rightarrow \hat{F}\hat{G}|n\rangle &= F_n\hat{G}|n\rangle \end{aligned}$$

Also ist $\hat{G}|n\rangle$ Eigenzustand zum Operator \hat{F} mit Eigenwert F_n

Ist F_n nicht entartet, so folgt $\hat{G}|n\rangle \sim |n\rangle$, also ist $|n\rangle$ auch Eigenzustand zu \hat{G}

Ist F_n entartet, so kann, explizit berechenbar durch Schmidtsche Orthogonalisierung, der Eigenraum E von \hat{F} zum Eigenwert F_n durch orthonormierte $|n, \mathbf{b}\rangle$ $\mathbf{b} = 1, \dots, s$ aufgespannt werden.

Dann kann der Eigenvektor $\hat{G}|n, \mathbf{b}\rangle$ entwickelt werden, gemäß $\hat{G}|n, \mathbf{b}\rangle = \sum_{\mathbf{b}'} |n, \mathbf{b}'\rangle c_{\mathbf{b}'\mathbf{b}}$

Die Matrix $c_{\mathbf{b}'\mathbf{b}} := \langle n, \mathbf{b}' | \hat{G} | n, \mathbf{b} \rangle = c^*_{\mathbf{b}\mathbf{b}'}$ ist hermitesch, kann also durch eine unitäre Transformation U diagonalisiert werden:

$$|n, \mathbf{g}\rangle = \sum_{\mathbf{b}} U_{\mathbf{g}\mathbf{b}} |n, \mathbf{b}\rangle$$

Mit $\sum_{\mathbf{b}} U_{\mathbf{g}\mathbf{b}} U_{\mathbf{b}\mathbf{g}'} = \mathbf{d}_{\mathbf{g}\mathbf{g}'}$ ("Drehung der Basis")

Somit

$$\begin{aligned} c_{\mathbf{b}'\mathbf{b}} &= \langle n, \mathbf{b}' | \hat{G} | n, \mathbf{b} \rangle = G_{n\mathbf{b}} \mathbf{d}_{\mathbf{b}'\mathbf{b}} \\ \hat{G}|n, \mathbf{b}\rangle &= \sum_{\mathbf{b}'} |n, \mathbf{b}'\rangle c_{\mathbf{b}'\mathbf{b}} = G_{n\mathbf{b}} |n, \mathbf{b}\rangle \end{aligned}$$

Also ist $|n, \mathbf{b}\rangle$ auch Eigenvektor zu \hat{G}

Nebenbemerkung: Im Allgemeinen wird dadurch die Entartung aufgehoben !

Leicht: Umkehrung:

Sei $\{|n\rangle\}$ ein vollständiges System von Eigenvektoren zu \hat{F}, \hat{G}
 $\hat{F}\hat{G}|n\rangle = F_n G_n |n\rangle = G_n F_n |n\rangle = \hat{G}\hat{F}|n\rangle \Rightarrow [\hat{F}, \hat{G}] = 0$

Definition

Ein Operator $U : H \rightarrow H$ heißt UNITÄR, falls $U^+ U = U U^+ = 1$

Daraus folgt: $U^+ = U^{-1}$

$$|\Psi'\rangle := U |\Psi\rangle$$

$$\text{Mit } \langle \Phi' | := \langle \Phi | U^+$$

folgt für beliebige Ψ, Φ

$$\langle \Phi' | \Psi' \rangle = \langle \Phi | U^+ U | \Psi \rangle = \langle \Phi | \Psi \rangle$$

Das heißt, das Skalarprodukt ist bei unitären Transformationen invariant. Umgekehrt: Will man nur Trafos zulassen, für die das Skalarprodukt invariant bleibt (Erhaltung der Wahrscheinlichkeit), so sind dies die unitären !

- Unitäre Operatoren transformieren das quantenmechanische System ganz grundsätzlich von einer Basis in eine andere.
- dabei dürfen sich natürlich Aufenthalts- und Übergangswahrscheinlichkeiten (die Skalarprodukte) nicht ändern
- Nur unitäre Transformationen sind erlaubt !

Insbesondere:

Transformationen in die Eigenbasis eines Operators \hat{F} = Diagonalisierung von \hat{F}

$$\langle \Phi | \hat{F} | \Psi \rangle := \langle \Phi | U^\dagger \hat{F} U | \Psi \rangle$$

$$| \Psi \rangle = U^\dagger | \Psi' \rangle$$

$$U^\dagger \hat{F} U = \hat{F}$$

$$\langle \Phi | \hat{F} | \Psi \rangle = \langle \Phi | \hat{F} | \Psi \rangle = F_\Psi \mathbf{d}_{\Psi\Phi}$$

Wobei letzte Relation natürlich nur gilt, falls $| \Psi \rangle, | \Phi \rangle \in \text{Eigenbasis}$ mit F_Ψ als Eigenwert

$$U^\dagger \hat{F} U = \hat{F} \text{ diagonal !}$$

2.4 Die Quantisierung

Physikalische Observablen → hermitesche Operatoren im Hilbertraum

z.B. Ort: $x \rightarrow \hat{x}$

Geschwindigkeit: $\dot{x} \rightarrow \dot{\hat{x}} := \frac{\hat{p}_{kin}}{m} = \frac{\hat{p} - e\bar{A}}{m}$ hat nichts mehr mit der Zeitableitung von x zu tun !

Dabei existieren in der Quantenmechanik auch nichtklassische Observablen:

1. Parität: \hat{P} als der Spiegeloperator.

$$\hat{P}\Psi(\vec{r}) = \Psi(-\vec{r})$$

Der Spiegeloperator ist in der Ortsdarstellung definiert durch

$$\hat{P}|\vec{r}\rangle = |-\vec{r}\rangle$$

Dies kann jedoch bedeuten: $\hat{P}|\Psi\rangle = \pm |\Psi\rangle$ mit dem Pluszeichen für symmetrische und dem Minus für antisymmetrische Zustände.

$$\hat{P}^2 = 1$$

Die Eigenwerte des Paritätsoperator sind ± 1 . Es gilt:

$$\hat{P}^{-1} = \hat{P}^+ = \hat{P}$$

2. Der Projektionsoperator. Er löst die Frage: Ist das System im Zustand $|\Psi\rangle$?

Der Projektionsoperator lautet:

$$\hat{P}_\Psi := |\Psi\rangle\langle\Psi|$$

Die grundsätzliche Definition eines Projektionsoperators ist lediglich $\hat{P}_\Psi \cdot \hat{P}_\Psi = \hat{P}_\Psi$

Die Wirkung:

$$\hat{P}_\Psi |\Psi\rangle = |\Psi\rangle\langle\Psi|\Psi\rangle = |\Psi\rangle 1 = |\Psi\rangle \text{ Eigenwert } +1$$

$$\hat{P}_\Psi |\Phi\rangle = |\Psi\rangle\langle\Psi|\Phi\rangle = 0 \text{ Eigenwert } 0, \text{ falls } |\Phi\rangle \perp |\Psi\rangle$$

Befindet sich ein Zustand $|\Phi\rangle$ teilweise im Zustand $|\Psi\rangle$, so gilt:

$$\hat{P}_\Psi |\Phi\rangle = |\Psi\rangle \langle \Psi | \Phi \rangle = c |\Psi\rangle$$

Dabei ist c eine Wahrscheinlichkeitsamplitude für das Antreffen des Zustands $|\Psi\rangle$ in $|\Phi\rangle$, also die Wurzel des Anteils von $|\Phi\rangle$ in $|\Psi\rangle$

Vertauschungsrelationen

Das Operatorkalkül ermöglicht die Beschreibung mit nicht vertauschbaren Observablen:

$$[\hat{F}, \hat{G}] = 0 \Leftrightarrow \hat{F} \text{ und } \hat{G} \text{ besitzen ein gemeinsames System von Eigenzuständen}$$

$$[\hat{F}, \hat{G}] = 0 \Leftrightarrow \text{Observablen F und G sind gleichzeitig scharf meßbar}$$

$$[\hat{F}, \hat{G}] \neq 0 \Leftrightarrow \text{Observablen F und G sind NICHT gleichzeitig scharf meßbar.}$$

Quantisierung = Aufstellung von Vertauschungsrelationen

Es gelten die kanonischen Vertauschungsrelationen:

$$[\hat{p}_i, \hat{x}_k] = -\frac{\hbar}{i} \mathbf{d}_{ik} \quad i=1,2,3 \text{ kartesische Koordinaten}$$

$$[\hat{p}_i, \hat{p}_k] = [\hat{x}_i, \hat{x}_k] = 0$$

Übungsweise kann man zeigen:

$$[\hat{p}, T] = ?$$

$$[F, \hat{x}_k] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial F}{\partial p_k}$$

$$[F, \hat{p}_k] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial F}{\partial x_k}$$

Berechnung in der Ortsdarstellung:

$$[\hat{p}_i, \hat{x}_k] \Psi(\vec{r}) = \frac{\hbar}{i} \partial_i (x_k \Psi) - x_k \frac{\hbar}{i} \partial_i \Psi = \frac{\hbar}{i} \mathbf{d}_{ik} \Psi$$

Nebenbemerkung: Hieraus können alle weiteren Kommutatoren berechnet werden.

Der Meßprozeß:

$$|\Phi\rangle \xrightarrow{1. \text{ Messung von } F} |\Phi'\rangle \xrightarrow{2. \text{ Messung von } F} |\Phi''\rangle$$

Dabei ändert sich der Zustand durch die Wechselwirkung mit dem Messapparat.

Die Messwerte sind F' in $|\Phi'\rangle$ und F'' in $|\Phi''\rangle$.

Forderung: $F' = F''$

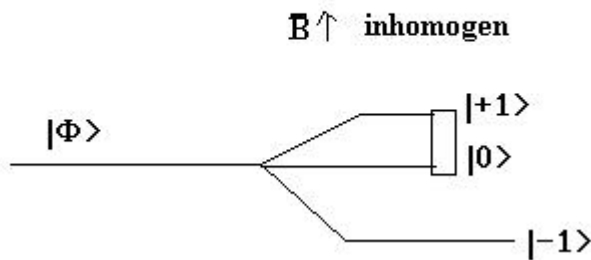
$\rightarrow F' = F'' = F_n$ (Eigenwert)

$$|\Phi'\rangle = |\Phi''\rangle = |n\rangle \text{ Eigenzustand zu } \hat{F}$$

Also: $|\Phi\rangle \rightarrow |n\rangle$

Der beliebige Zustand wird durch die Messung auf einen Eigenzustand projiziert.
Man spricht von einer Reduktion des Zustandsvektors durch die Messung.

Beispiel: Stern- Gerlach - Apparatur:



Von links kommt ein Ensemble von Teilchen mit dem magnetischen Moment m_z .

Dabei kennzeichnet rechts $|-1\rangle$ den Eigenzustand zu $m_z = -1$

Erwartungswert = Mittelwert über viele Messungen mit identisch präparierten Ausgangszuständen $|\Psi\rangle$:

$$\langle \Psi | \hat{F} | \Psi \rangle = \sum_{n, n'} \langle \Psi | n \rangle \langle n | \hat{F} | n' \rangle \langle n' | \Psi \rangle$$

$$\langle n | \hat{F} | n' \rangle = F_n \delta_{nn'}$$

$$\Rightarrow \langle \Psi | \hat{F} | \Psi \rangle = \sum_n F_n |\langle n | \Psi \rangle|^2$$

Mit der Wahrscheinlichkeit, im Zustand $|\Psi\rangle$ (vor der Messung) den Messwert F_n zu messen:

$$p(F_n) = |\langle n | \Psi \rangle|^2$$

Vergleiche dazu: Aufenthaltswahrscheinlichkeit in Ortsdarstellung:

$$p(\vec{r}) = |\Psi(\vec{r})|^2 = |\langle \vec{r} | \Psi \rangle|^2$$

Wie wir bereits kennengelernt haben, läßt sich mit dem Projektionsoperator schreiben:

$$|\langle n | \Psi \rangle|^2 = \langle \Psi | n \rangle \langle n | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{P}_n | \Psi \rangle = \langle \hat{P}_n \rangle$$

Maximalmessung:

Es können nicht ALLE Observablen gleichzeitig scharf gemessen werden. Gleichzeitige Messung eines vollständigen Satzes vertauschbarer Observablen heißt MAXIMALMESSUNG.

Vollständig heißt: Der Satz kann durch keine weiteren unabhängigen Observablen ergänzt werden. Das heißt: Die gemeinsamen Eigenzustände sind auch nicht entartet !

Bei Entartung: weitere vertauschbare Operatoren hinzufügen, bis die gemeinsamen Eigenräume eindimensional sind

→ der Zustand $|n, \mathbf{a}, \dots\rangle$ ist durch Maximalmessung vollständig bestimmt.

Spezialfall:

Falls Energie- Eigenwerte nicht entartet sind (z.B. gebundene eindimensionale Zustände), so ist der HAMILTON- OPERATOR \hat{H} eine vollständige Observable

Bei Entartung: Weitere, mit \hat{H} vertauschbare Observable hinzufügen (z.B. Drehimpuls, vergl. Kapitel 3)

Der **Hilbertraum \mathbf{H}** eines physikalischen Systems wird durch die gemeinsamen Eigenvektoren (Basis) eines vollständigen Satzes vertauschbarer Observablen aufgespannt.

Nichtvertauschbarkeit und Unschärfe

Seien \hat{F} und \hat{G} hermitesche Operatoren und $|\Psi\rangle$ ein beliebiger Zustand.

$$\Delta\hat{F} := \hat{F} - \langle\hat{F}\rangle$$
$$\Delta\hat{G} := \hat{G} - \langle\hat{G}\rangle \quad \text{sind ebenfalls hermitesche Operatoren}$$

Bilde:

$$f(\mathbf{I}) := \langle (\Delta\hat{F} + i\mathbf{I}\Delta\hat{G})(\Delta\hat{F} - i\mathbf{I}\Delta\hat{G}) \rangle$$
$$= \langle (\Delta\hat{F})^2 \rangle - i\mathbf{I}\langle [\Delta\hat{F}, \Delta\hat{G}] \rangle + \mathbf{I}^2 \langle (\Delta\hat{G})^2 \rangle$$
$$\langle (\Delta\hat{F})^2 \rangle := \mathbf{a} \geq 0$$
$$\langle [\Delta\hat{F}, \Delta\hat{G}] \rangle := \mathbf{b}$$
$$\langle (\Delta\hat{G})^2 \rangle := \mathbf{g} \geq 0$$

Dies ist eine quadratische Funktion von \mathbf{I} mit $f(\mathbf{I}) \rightarrow \infty$ für $\mathbf{I} \rightarrow \infty$

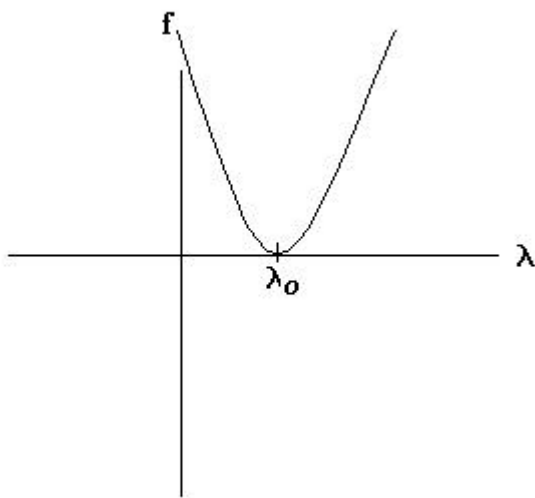
Lemma:

Für hermitesche Operatoren \hat{F} und \hat{G} gilt:

$$\langle \hat{A}\hat{A} \rangle \geq 0$$
$$\langle i\hat{A} \rangle^+ = -\langle i\hat{A} \rangle$$
$$\langle \hat{A}\hat{B} \rangle^* = \langle \hat{B}\hat{A} \rangle$$

Mit $\hat{Q} := \Delta\hat{F} - i\mathbf{I}\Delta\hat{G} \Rightarrow \hat{Q}^+ := \Delta\hat{F} + i\mathbf{I}\Delta\hat{G}$:

$$f(\mathbf{I}) = \langle \Psi | \hat{Q}^+ \hat{Q} | \Psi \rangle$$
$$\langle \Psi | \hat{Q}^+ = \langle \Phi |$$
$$\hat{Q} | \Psi \rangle = | \Phi \rangle$$
$$\Rightarrow f(\mathbf{I}) = \langle \Phi | \Phi \rangle \geq 0 \quad \forall \mathbf{I}$$



Suche nach dem Minimum:

$$f'(\mathbf{l}) = -i\mathbf{b} + 2\mathbf{l}\mathbf{g} = 0$$

$$\Rightarrow \mathbf{l}_0 = \frac{i}{2} \frac{\mathbf{b}}{\mathbf{g}}$$

$$\langle (\Delta \hat{F})^2 \rangle := \mathbf{a} \geq 0$$

$$\langle [\Delta \hat{F}, \Delta \hat{G}] \rangle := \mathbf{b}$$

$$\langle (\Delta \hat{G})^2 \rangle := \mathbf{g} \geq 0$$

$$f(\mathbf{l}_0) = \mathbf{a} + \frac{\mathbf{b}^2}{2\mathbf{g}} - \frac{\mathbf{b}^2}{4\mathbf{g}} = \mathbf{a} + \frac{\mathbf{b}^2}{4\mathbf{g}} \geq 0$$

$$\mathbf{b}^2 = \langle [\Delta \hat{F}, \Delta \hat{G}] \rangle^2 = \langle [\hat{F}, \hat{G}] \rangle^2 = -\langle [\hat{G}, \hat{F}] \rangle \langle [\hat{F}, \hat{G}] \rangle = -\langle [\hat{F}, \hat{G}] \rangle * \langle [\hat{F}, \hat{G}] \rangle = -|\langle [\hat{F}, \hat{G}] \rangle|^2$$

$$\Rightarrow \langle (\Delta \hat{F})^2 \rangle \langle (\Delta \hat{G})^2 \rangle \geq \frac{1}{4} |\langle [\hat{F}, \hat{G}] \rangle|^2$$

Somit jedoch ergibt sich die quantenmechanische Unschärfe gemäß

$$\sqrt{\langle (\Delta \hat{F})^2 \rangle \langle (\Delta \hat{G})^2 \rangle} \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{F}, \hat{G}] \rangle| \quad (\text{Unschärferelation})$$

Speziell:

$$[\hat{p}, \hat{x}] = \frac{\hbar}{i} 1$$

$$\sqrt{\langle (\Delta \hat{p})^2 \rangle \langle (\Delta \hat{x})^2 \rangle} \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{p}, \hat{x}] \rangle| = \frac{\hbar}{2}$$

Heisenbergsche Unschärferelation für die Orts- und Impulsunschärfe

Zusammenfassung

- 1) Der Zustand des Systems wird im Zustandsvektor $|\Psi\rangle$ ausgedrückt
- 2) Die Observable F wird dargestellt durch den hermiteschen Operator \hat{F} .
- 3) Die Mittelwerte von Observablen ergeben sich als Erwartungswert $\langle\Psi|\hat{F}|\Psi\rangle$
- 4) Die Messung von F liefert einen Messwert, welcher immer Eigenwert der Observablen ist, also F_n . Der Zustand wird dabei auf einen Eigenzustand reduziert: $|\Psi\rangle \rightarrow |n\rangle$
- 4) Die Zeitentwicklung der Zustände wird durch die Schrödingergleichung beschrieben:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = \hat{H} |\Psi\rangle$$

Nebenbemerkung: Die Quantenmechanik ist keine Wellen- oder Teilchenmechanik sondern eine Zustandsmechanik. Der Dualismus zwischen Welle und Teilchen wird in einem einheitlichen Formalismus aufgelöst.

2.5 Dynamik im Schrödinger- Heisenberg- und Wechselwirkungsbild

Betrachte die zeitabhängigen Zustände $|\Psi\rangle_t$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle_t = \hat{H} |\Psi\rangle_t$$

Die zeitabhängige Schrödingergleichung kann formal gelöst werden:

$$|\Psi\rangle_t = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} |\Psi\rangle_0 = U(t,0) |\Psi\rangle_0$$

Definition des Operators U geschieht über eine Potenzreihe:

$$U(t,0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t \right)^n \text{ Zeitentwicklungsoperator}$$

Setzt man dies in die Schrödingergleichung ein, so folgt:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar} t \right)^n \hat{H}^n |\Psi\rangle_0 = \hat{H} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar} t \right)^n \hat{H}^n |\Psi\rangle_0 = \hat{H} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n-1!} \left(-\frac{i}{\hbar} t \right)^{n-1} \hat{H}^{n-1} |\Psi\rangle_0$$

Da H hermitesch ist, muss U(t,0) ein unitärer Operator sein !

$$H^+ = H$$

Klar:
$$\Rightarrow U^+ = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i}{\hbar} t \right)^n \hat{H}^n \Rightarrow U^+ U = 1$$

Die adjungierte Schrödingergleichung lautet:

$$\langle \Psi |_t \hat{H} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \Psi |_t$$

Mit der formalen Lösung:

$$\langle \Psi |_t = \langle \Psi |_0 e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} = \langle \Psi |_0 U^+(t,0)$$

Der Erwartungswert eines Operators, der auch explizit zeitabhängig sein kann, z.B. über $\bar{A}(t)$ ergibt sich für

$$\hat{F} = \hat{F}(\hat{r}, \hat{p}, t):$$

$$\langle \hat{F} \rangle = \langle \Psi |_t \hat{F} |\Psi\rangle_t$$

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{F} \rangle = \frac{d}{dt} \langle \Psi |_t \hat{F} |\Psi\rangle_t = \langle \Psi |_t \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} |\Psi\rangle_t + \left(\frac{\partial}{\partial t} \langle \Psi |_t \right) \frac{d}{dt} \hat{F} |\Psi\rangle_t + \langle \Psi |_t \hat{F} \left(\frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle_t \right)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} \langle \Psi |_t \right) = -\frac{1}{i\hbar} \langle \Psi |_t \hat{H}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle_t = \frac{1}{i\hbar} \hat{H} |\Psi\rangle_t$$

Also:

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{F} \rangle = \frac{d}{dt} \langle \Psi | \hat{F} | \Psi \rangle_t = \langle \Psi | \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}] | \Psi \rangle_t$$

Ein nicht explizit zeitabhängiger Operator ist grundsätzlich zeitlich konstant, wenn er mit dem Hamiltonoperator vertauscht.

Für einen nicht explizit zeitabhängigen Operator gilt folglich:

$$[\hat{H}, \hat{F}] = 0 \Rightarrow \frac{d}{dt} \langle \hat{F} \rangle = 0$$

Klassisches Analogon: Poisson- Klammern

- in der klassischen Mechanik finden wir analog die Poissonklammern:

Sei $F(\bar{q}, \bar{p}, t)$ eine klassische Observable und $H(\bar{q}, \bar{p})$ die klassische Hamiltonfunktion, so gilt:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} F(\bar{q}, \bar{p}, t) &= \frac{\partial}{\partial t} F(\bar{q}, \bar{p}, t) + \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\partial F(\bar{q}, \bar{p}, t)}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial F(\bar{q}, \bar{p}, t)}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) \\ \frac{d}{dt} F(\bar{q}, \bar{p}, t) &= \frac{\partial}{\partial t} F(\bar{q}, \bar{p}, t) + \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\partial F(\bar{q}, \bar{p}, t)}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial F(\bar{q}, \bar{p}, t)}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) = \frac{\partial}{\partial t} F(\bar{q}, \bar{p}, t) + \{H, F\} \end{aligned}$$

Also gilt in der Quantenmechanik die anschauliche Relation:

$$\{H, F\} \rightarrow \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}]$$

Definiere:

Observable " zeitliche Veränderung von $F(\bar{q}, \bar{p}, t)$ " als Operator:

$$\hat{F}^\circ = \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}]$$

Fundamentalbeziehung der Dynamik der Quantentheorie, aber keine Differenzialgleichung für \hat{F} , da im Allgemeinen:

$$\hat{F}^\circ \neq \frac{d\hat{F}}{dt}$$

Der Operator der zeitlichen Veränderung ist lediglich über seinen Erwartungswert definiert:

$$\langle \hat{F}^\circ \rangle = \frac{d}{dt} \langle \hat{F} \rangle$$

Speziell gilt, analog zu den klassischen Hamiltonschen Gleichungen:

$$\hat{r}^\circ = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{r}]$$

$$\hat{p}^\circ = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{p}]$$

Merke dazu (Ehrenfest- Theorem):

$$\partial_t \hat{r} = 0$$

$$\partial_t \hat{p} = 0$$

-> die partiellen Zeitableitungen verschwinden. Die Operatoren für Ort und Impuls sind nicht explizit zeitabhängig !

Mit der Allgemeinen Hamiltonfunktion für ein Potenzial, nämlich

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r})$$

folgt:

$$[\hat{H}, \hat{x}_k] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}_k}$$

$$[\hat{H}, \hat{p}_k] = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{x}_k}$$

Also:

$$\hat{r}^\circ = \frac{\hat{p}}{m}$$

$$\hat{p}^\circ = -\nabla V(\hat{r})$$

Denn:

$$[\hat{H}, \hat{x}_k] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}_k} = \frac{\hbar}{i} \hat{x}_k^\circ \Rightarrow \hat{x}^\circ = \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}} = \frac{\hat{p}}{m}$$

$$[\hat{H}, \hat{p}_k] = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{x}_k} \Rightarrow \hat{p}^\circ = -\frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{x}} = -\nabla V(\hat{x})$$

Merke:

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{r} \rangle = \langle \hat{r}^\circ \rangle$$

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle = \langle \hat{p}^\circ \rangle$$

Woraus das Ehrenfestsche Theorem folgt:

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{r} \rangle = \frac{1}{m} \langle \hat{p} \rangle$$

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle = -\langle \nabla V(\hat{r}) \rangle$$

$$\text{da ja: } \partial_t \hat{r} = 0$$

$$\partial_t \hat{p} = 0$$

das heißt, die Erwartungswerte quantenmechanischer Observablen gehorchen den klassischen Bewegungsgleichungen

Bilder:

Da die Erwartungswerte invariant bei unitären Transformationen U sind, sind Operatoren und Zustände nur bis auf UNITÄR-ÄQUIVALENZ festgelegt:

$$|\Psi\rangle \rightarrow |\Psi'\rangle = U|\Psi\rangle$$

$$\hat{F} \rightarrow \hat{F}' = U\hat{F}U^\dagger$$

Für verschiedene, zeitabhängige U erhält man sogenannte verschiedene "Bilder":

Im Folgenden gelte $\frac{\partial \hat{F}}{\partial t} = 0$, also keine explizite Zeitabhängigkeit !

Merke: Hat man ein Bild gefunden, so kann man die Zustände und Operatoren durch eine beliebige unitäre Trafo "verdrehen" und man hat ein neues Bild !

Schrödingerbild:

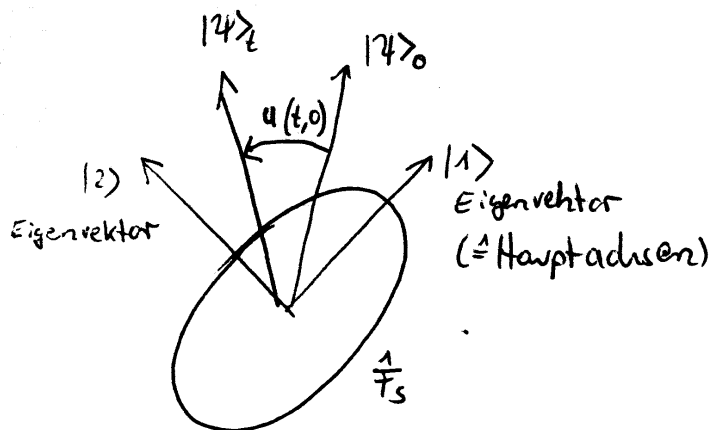
Operatoren $\hat{F}_S(\hat{r}, \hat{p})$ zeitunabhängig

Eigenvektoren $|n\rangle$ zeitunabhängig

Aber: Allgemeine Zustände, Zustandsvektoren: $|\Psi\rangle$ zeitabhängig (Die Zeitabhängigkeit wird dabei durch die Schrödingergleichung beschrieben):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle_t = \hat{H} |\Psi\rangle_t$$

Veranschaulichung im R^2 :



Unitäre Transformationen, wie die Zeitentwicklung, sind IMMER Drehungen im Hilbertraum!

Im Schrödingerbild werden somit die Zustände im Hilbertraum durch unitäre Transformationen gedreht !

Im R^2 entspricht \hat{F}_S einer 2x2- Matrix, definiert eine symmetrische, quadratische Form. (Übungsaufgabe !)

Die Eigenvektoren des Systems sind Hauptachsen und die Zeitentwicklung des Zustandes folgt:

$$|\Psi\rangle_t = U(t,0) |\Psi\rangle_0$$

Das Heisenbergbild

$$\langle \hat{F}_S \rangle = \langle \Psi | \hat{F}_S | \Psi \rangle_t = \langle \Psi |_0 U^\dagger(t,0) \hat{F}_S U(t,0) | \Psi \rangle_0$$

$$U^\dagger(t,0) \hat{F}_S U(t,0) = \hat{F}_H(t)$$

In diesem Bild sind die

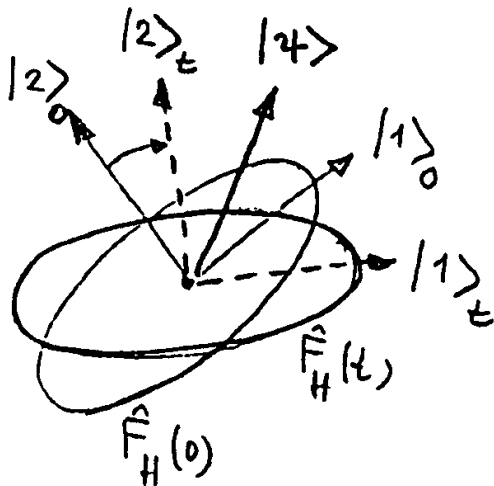
Operatoren $\hat{F}_H(t)$ zeitabhängig

und damit Eigenvektoren $|n\rangle$ zeitabhängig

Aber: Allgemeine Zustände, Zustandsvektoren: $|\Psi\rangle = |\Psi\rangle_0$ zeitunabhängig:

Veranschaulichung im R^2 :

Im Heisenbergbild werden folglich die Operatoren und ihre Eigenvektoren (zwangsläufig) unter unitären Transformationen im Hilbertraum verdreht (als Zeitentwicklung).



Aus

$$\hat{F}_H(t) = e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \hat{F}_S e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}$$

folgt:

$$\frac{d}{dt} \hat{F}_H(t) = \frac{i}{\hbar} \hat{H} e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \hat{F}_S e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} + e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \hat{F}_S \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \right) e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}$$

Also:

$$\frac{d}{dt} \hat{F}_H(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}_H] \quad (\text{Operatoren im Heisenbergbild gehorchen der Von-Neumann-}$$

Bewegungsgleichung)

Somit folgt für das Heisenbergbild:

$$\hat{F}^{\circ}_H = \frac{d}{dt} \hat{F}_H(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}_H]$$

Insbesondere gilt:

$$\frac{d}{dt} \hat{H}_H = 0$$

also die bildunabhängige Darstellung

$$\hat{H}_H = \hat{H}_S = \hat{H}$$

Merke: Der Hamiltonian ist grundsätzlich bildunabhängig.

Wechselwirkungsbild

$$\text{Sei } \hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}^1$$

mit dem ungestörten Hamiltonoperator \hat{H}^0 und der Störung \hat{H}^1 .

Es gilt die Zeitentwicklung des Operators F für das Wechselwirkungsbild:

$$\hat{F}_W(t) = e^{\frac{i\hat{H}^0 t}{\hbar}} \hat{F}_S e^{-\frac{i\hat{H}^0 t}{\hbar}}$$

Somit gilt wieder die Relation

$$\frac{d}{dt} \hat{F}_W(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}^0, \hat{F}_W]$$

Also:

$$\frac{d}{dt} \hat{H}^0 = 0$$

Somit ist auch hier der ungestörte Hamiltonian $\hat{H}^0 = \hat{H}_S = \hat{H}_H$ bildunabhängig.

Aber:

$$\frac{d}{dt} \hat{H}_W(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}^0, \hat{H}_W] = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}^0, \hat{H}^1] \neq 0 \text{ im Allgemeinen}$$

$$\langle \hat{F}_S \rangle = \langle \Psi |_t \hat{F}_S | \Psi \rangle_t = \langle \Psi |_t e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} e^{+\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} \hat{F}_S e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} e^{+\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} | \Psi \rangle_t$$

$$\langle \Psi |_t e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} = \langle \Psi |_W$$

$$e^{+\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} \hat{F}_S e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} = \hat{F}_W(t)$$

$$e^{+\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} | \Psi \rangle_0 = | \Psi \rangle_W$$

$$\langle \hat{F}_S \rangle = \langle \Psi |_W \hat{F}_W(t) | \Psi \rangle_W$$

Bemerkung: Die Erwartungswertbildung formal gilt natürlich für alle Bilder.

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} | \Psi \rangle_W = \frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 e^{+\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} | \Psi \rangle_t + e^{+\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} \frac{\partial}{\partial t} | \Psi \rangle_t$$

$$\frac{\partial}{\partial t} | \Psi \rangle_t = \frac{1}{i\hbar} \hat{H}_S | \Psi \rangle_t = \frac{1}{i\hbar} \hat{H}_S e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} | \Psi \rangle_W$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} | \Psi \rangle_W = \frac{1}{i\hbar} (-\hat{H}^0 | \Psi \rangle_W + \hat{H}_W | \Psi \rangle_W)$$

wegen

$$e^{+\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} \hat{H}_S e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} = \hat{H}_W$$

$$e^{+\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} | \Psi \rangle_t = | \Psi \rangle_W$$

Aber:

$$\hat{H}_W = \hat{H}^0 + \hat{H}^1$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} | \Psi \rangle_W = \frac{1}{i\hbar} \hat{H}^1 | \Psi \rangle_W$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} | \Psi \rangle_W = \frac{1}{i\hbar} \hat{H}_W^1 | \Psi \rangle_W$$

$$\frac{d}{dt} \hat{F}_W(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}^0, \hat{F}_W]$$

Merke: Die Zeitentwicklung der Zustände erfolgt hier über den Störoperator im Hamiltonian:

$$| \Psi \rangle_W(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}^1 t} | \Psi \rangle_W(0)$$

Zur Verdeutlichung des Wechselwirkungsbildes soll auch der Hamiltonoperator einen Index erhalten. Dies bedeutet: Operatoren, Eigenvektoren und allgemeine Zustände sind zeitabhängig.

Operatoren $\hat{F}_W(t)$ zeitabhängig, Abhängigkeit gegeben durch ungestörten Hamiltonoperator \hat{H}^0

und damit Eigenvektoren $|n\rangle$ zeitabhängig, ebenso durch den ungestörten Hamiltonian

Aber: Allgemeine Zustände, Zustandsvektoren: $|\Psi\rangle_W$ zeitabhängig mit gegebener Zeitentwicklung durch den Störoperator \hat{H}_W .

2.6 Der harmonische Oszillator

Anwendungsbeispiel der abstrakten Darstellung im Hilbertraum: der eindimensionale harmonische Oszillator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}^2 \quad \text{Als Hamiltonoperator}$$

Es gilt die Vertauschungsrelation

$$[\hat{p}, \hat{x}] = \frac{\hbar}{i}$$

Besser:

$$[\hat{p}_l, \hat{x}_k] = \frac{\hbar}{i} \mathbf{d}_{kl}$$

Definition eines Operators, des Leiteroperators (nicht hermitesch !!)

$$a := \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hat{p} - i\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x}$$

$$a^+ := \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hat{p} + i\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x}$$

$$\Rightarrow aa^+ = \frac{1}{2m\hbar\omega} \hat{p}^2 + \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{x}^2 + \frac{i}{2\hbar} (\hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p}) = \frac{1}{2m\hbar\omega} \hat{p}^2 + \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{x}^2 + \frac{i}{2\hbar} [\hat{p}, \hat{x}]$$

$$[\hat{p}, \hat{x}] = \frac{\hbar}{i}$$

$$\Rightarrow aa^+ = \frac{1}{2m\hbar\omega} \hat{p}^2 + \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{x}^2 + \frac{1}{2} = \frac{1}{\hbar\omega} \hat{H} + \frac{1}{2}$$

Merke:

Ausgangspunkt unserer ganzen Überlegungen ist eine Definition, nämlich die Definition der Leiteroperatoren:

$$a := \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hat{p} - i\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x}$$

$$a^+ := \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hat{p} + i\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x}$$

Ebenso:

$$a^+a = \frac{1}{2m\hbar\omega} \hat{p}^2 + \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{x}^2 - \frac{i}{2\hbar} (\hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p}) = \frac{1}{2m\hbar\omega} \hat{p}^2 + \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{x}^2 - \frac{i}{2\hbar} [\hat{p}, \hat{x}]$$

$$[\hat{p}, \hat{x}] = \frac{\hbar}{i}$$

$$\Rightarrow a^+a = \frac{1}{2m\hbar\omega} \hat{p}^2 + \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{x}^2 - \frac{1}{2} = \frac{1}{\hbar\omega} \hat{H} - \frac{1}{2}$$

$$\Rightarrow [a, a^+] = 1$$

$$aa^+ + a^+a = \frac{2}{\hbar\omega} \hat{H}$$

Somit:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \hbar \omega (aa^\dagger + a^\dagger a) = \frac{1}{2} \hbar \omega (a^\dagger a + 1 + a^\dagger a) = \hbar \omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right)$$

Merke dazu:

$$aa^\dagger = \frac{1}{2m\hbar\omega} \hat{p}^2 + \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{x}^2 + \frac{i}{2\hbar} (\hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p}) = \frac{1}{2m\hbar\omega} \hat{p}^2 + \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{x}^2 + \frac{i}{2\hbar} [\hat{p}, \hat{x}]$$

Somit:

$$\frac{i}{2\hbar} [\hat{p}, \hat{x}] \text{ als verantwortlicher Term für die Grundzustandsenergie:}$$

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega$$

Also: Die Grundzustandsenergie folgt direkt aus der Unschärfe !

Weitere Vertauschungsrelationen:

$$\begin{aligned} (aa^\dagger)a &= \frac{1}{\hbar\omega} \hat{H}a + \frac{1}{2}a \\ &= a(a^\dagger a) = \frac{1}{\hbar\omega} a\hat{H} - \frac{1}{2}a \\ \Rightarrow [a, \hat{H}] &= a\hat{H} - \hat{H}a = \hbar\omega a \end{aligned}$$

Ebenso die adjungierte Version:

$$-[a^\dagger, \hat{H}] = (a\hat{H})^* - (\hat{H}a)^* = \hbar\omega a^\dagger$$

Verallgemeinerung

$$\left[a, (a^\dagger)^n \right] = n(a^\dagger)^{n-1} = \frac{\partial}{\partial a^\dagger} (a^\dagger)^n$$

Beweis: Vollständige Induktion:

$$n=1 \quad \left[a, (a^\dagger)^1 \right] = 1$$

$$\text{Sei } \left[a, (a^\dagger)^n \right] = n(a^\dagger)^{n-1} = \frac{\partial}{\partial a^\dagger} (a^\dagger)^n \text{ für } n \geq 1$$

$$\left[a, (a^\dagger)^{n+1} \right] = a(a^\dagger)^{n+1} - (a^\dagger)^{n+1}a = a(a^\dagger)^{n+1} - (a^\dagger)^n aa^\dagger + (a^\dagger)^n aa^\dagger - (a^\dagger)^{n+1}a$$

$$\Rightarrow \left[a, (a^\dagger)^{n+1} \right] = \left[a, (a^\dagger)^n \right] a^\dagger + (a^\dagger)^n \left[a, a^\dagger \right]$$

$$\left[a, (a^\dagger)^n \right] = n(a^\dagger)^{n-1}$$

$$\Rightarrow \left[a, (a^\dagger)^{n+1} \right] = n(a^\dagger)^{n-1} a^\dagger + (a^\dagger)^n = (n+1)(a^\dagger)^n$$

Adjungierte Version:

$$\left[a^\dagger, a^n \right] = -n(a)^{n-1} = -\frac{\partial}{\partial a} (a)^n$$

Somit gilt für beliebige, in Potenzreihen von Auf- oder Absteiger entwickelbare Funktionen f:

$$\left[a, f(a^+) \right] = \frac{\partial}{\partial a^+} f(a^+)$$

$$\left[a^+, f(a) \right] = -\frac{\partial}{\partial a} f(a)$$

Eigenwerte von H

Sei $|E\rangle$ ein normierter Eigenvektor von \hat{H} mit $\hat{H}|E\rangle = E|E\rangle$

So gilt:

$$\hbar\omega \langle E|a^+a|E\rangle = \langle E|\hat{H} - \frac{\hbar\omega}{2}|E\rangle = \langle E|E - \frac{\hbar\omega}{2}|E\rangle = E - \frac{\hbar\omega}{2}$$

$$\langle E|a^+a|E\rangle = \langle \Psi|\Psi\rangle \geq 0$$

Das bedeutet:

$$E \geq \frac{\hbar\omega}{2}$$

Das Energiespektrum ist also nach unten beschränkt und gleichzeitig vernichtet der

$$E \geq \frac{\hbar\omega}{2} \Leftrightarrow a|E\rangle = 0$$

Absteigeoperator den Zustand mit der niedrigsten Energie

Behauptung

$a|E\rangle$ ist Eigenzustand zu \hat{H} mit dem Eigenwert $E - \hbar\omega$:

$$\text{Also: } \hat{H}a|E\rangle = (E - \hbar\omega)a|E\rangle$$

Beweis:

$$\hat{H}a|E\rangle = (a\hat{H} - \hbar\omega)a|E\rangle = a(\hat{H} - \hbar\omega)|E\rangle = a(E - \hbar\omega)|E\rangle = (E - \hbar\omega)a|E\rangle$$

Dabei gilt

$$\hat{H}a|E\rangle = (a\hat{H} - \hbar\omega)a|E\rangle$$

wegen

$$[a, \hat{H}] = \hbar\omega a$$

Durch wiederholte Anwendung könnte man Eigenzustände $|E\rangle \neq 0$ mit beliebig tiefer Energie erzeugen, wenn

nicht $E \geq \frac{\hbar\omega}{2}$ gelten würde.

Daher existiert ein $m \in \mathbb{N}$ so dass $a^m|E\rangle = 0$ aber $a^{m-1}|E\rangle \neq 0$

Also definiere man einen Grundzustand:

$$|0\rangle := a^{m-1}|E\rangle$$

Vorsicht ! Dieser ist gerade nicht ein NULL- KET, sondern: Der Zustand zur Quantenzahl n=0

$$\hat{H}|0\rangle = \hbar\omega \left(a^+a + \frac{1}{2} \right) |0\rangle = \frac{1}{2} \hbar\omega |0\rangle$$

wegen

$$a|0\rangle = a^m|E\rangle = 0$$

Also:

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

$$a|0\rangle = a^m|E\rangle = 0$$

Weiter:

$$\hat{H}a^+|0\rangle = (a^+H + \hbar\omega a^+)|0\rangle = a^+(\hat{H} + \hbar\omega)|0\rangle = a^+\left(\frac{\hbar\omega}{2} + \hbar\omega\right)|0\rangle = \frac{3\hbar\omega}{2}a^+|0\rangle$$

Der erste Schritt gilt wieder wegen der Vertauschungsrelation

$$[a^+, \hat{H}] = -\hbar\omega a^+$$

Das heißt nun aber, dass $a^+|0\rangle$ der Eigenzustand von \hat{H} zum Eigenwert $\frac{3\hbar\omega}{2}$ ist.

Vollständige Induktion

$$\hat{H}(a^+)^n|0\rangle = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)(a^+)^n|0\rangle$$

Dann:

$$\hat{H}(a^+)^{n+1}|0\rangle = (a^+\hat{H} + \hbar\omega a^+)(a^+)^n|0\rangle = a^+(\hat{H} + \hbar\omega)(a^+)^n|0\rangle$$

$$(\hat{H} + \hbar\omega)(a^+)^n|0\rangle = \left(\hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega\right)(a^+)^n|0\rangle$$

$$\Rightarrow \hat{H}(a^+)^{n+1}|0\rangle = a^+(\hat{H} + \hbar\omega)(a^+)^n|0\rangle = \hbar\omega\left(n + 1 + \frac{1}{2}\right)(a^+)^{n+1}|0\rangle$$

Normierung der Eigenzustände $(a^+)^n|0\rangle$:

Der Grundzustand sei normiert:

$$\langle 0|0\rangle = 1$$

Dann folgt für den n-ten angeregten Zustand:

$$|n\rangle = \mathbf{a}_n (a^+)^n|0\rangle \text{ mit Normierungsfaktor } \mathbf{a}_n:$$

$$1 = \langle n|n\rangle = |\mathbf{a}_n|^2 \langle 0|a^n (a^+)^n|0\rangle$$

$$\langle 0|a^n (a^+)^n|0\rangle = \langle 0|a^{n-1} \left((a^+)^n a + \left[a, (a^+)^n \right] \right) |0\rangle$$

wegen

$$\left[a, (a^+)^n \right] = n(a^+)^{n-1}$$

Somit:

$$\langle 0|a^n (a^+)^n|0\rangle = \langle 0|a^{n-1} \left((a^+)^n a + \left[a, (a^+)^n \right] \right) |0\rangle = \langle 0|a^{n-1} (a^+)^n a|0\rangle + n \langle 0|a^{n-1} (a^+)^{n-1}|0\rangle$$

$$\langle 0|a^{n-1} (a^+)^n a|0\rangle = 0$$

$$\Rightarrow n \langle 0|a^{n-1} (a^+)^{n-1} a|0\rangle = n(n-1) \langle 0|a^{n-2} (a^+)^{n-2} a|0\rangle \Rightarrow \dots \Rightarrow$$

Dieser Algorithmus wird n- mal angewendet:

$$\Rightarrow \langle 0|a^n (a^+)^n a|0\rangle = n! \langle 0|0\rangle = n!$$

Somit folgt bis auf einen willkürlichen Phasenfaktor:

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^n|0\rangle \text{ für NORMIERTE EIGENZUSTÄNDE des harmonischen Oszillators}$$

und diese gehören zu den Energiewerten

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

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$$

Quantensprechweise:

$E_n - E_{n-1} = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - \hbar \omega \left(n - 1 + \frac{1}{2} \right) = \hbar \omega$ ist die Energie eines "Schwingungsquants". Man sagt auch, es IST ein Schwingungsquant !

$|n\rangle$ ist ein Zustand mit n Schwingungsquanten (Phononen) der Frequenz ω

a ist der Vernichtungsoperator für Schwingungsquanten

a^+ der Erzeugungsoperator für Schwingungsquanten

$$a|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} a (a^+)^n |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left\{ (a^+)^n a + \left[a, (a^+)^n \right] \right\} |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} n (a^+)^{n-1} |0\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$$

$$a^+|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^{n+1} |0\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$$

Teilchenzahloperator

$$N := a^+ a$$

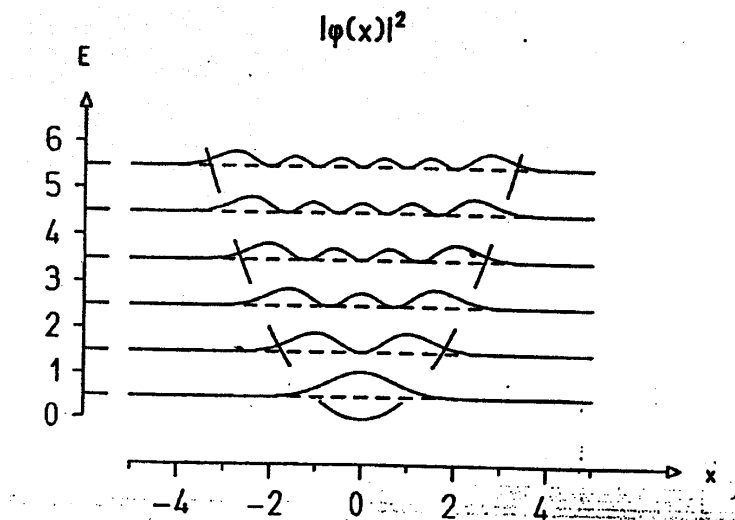
$$N|n\rangle = a^+ a|n\rangle = a^+ \sqrt{n} |n-1\rangle = \sqrt{n} \sqrt{n} |n\rangle = n|n\rangle$$

In Übereinstimmung mit

$$\hat{H}|n\rangle = \hbar \omega \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right) |n\rangle = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle$$

Veranschaulichung

Die folgende Grafik demonstriert die äquidistanten Energieniveaus im Oszillatorpotenzial. Dabei werden die stationären Zustände $|\psi_j(x)\rangle^2$ dargestellt, also als Aufenthaltswahrscheinlichkeit

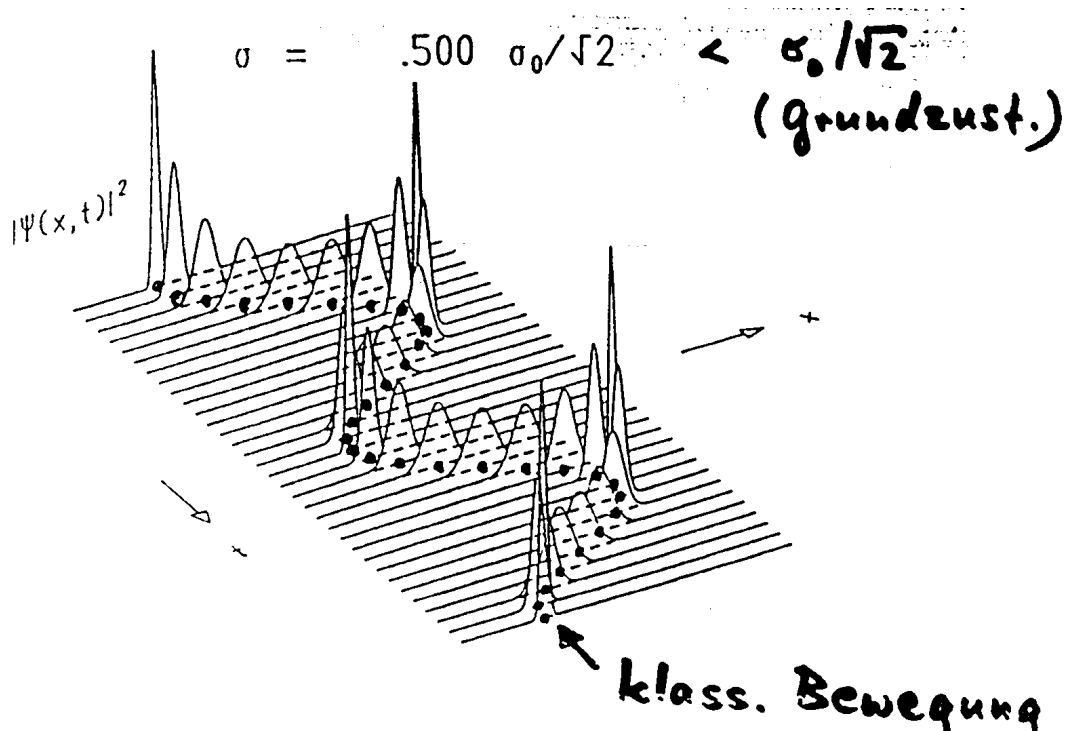


Die Bewegung eines Wellenpaketes im Harmonischen Oszillator, also im x^2 - Potenzial für $S = \frac{0,5S_0}{\sqrt{2}}$, also

mit einem $S < \frac{S_0}{\sqrt{2}}$, wobei $\frac{S_0}{\sqrt{2}}$ das S des Grundzustands darstellt, sieht folgendermaßen aus:

Es ist das $S = \frac{S_0}{\sqrt{2}}$ für die kohärenten / Glauber - Zustände

Das heißt: Die Standardabweichung des quantenmechanischen Oszillators ist kleiner als bei Berechnung über Glauberzustände (kohärente Zustände)



Zusammenhang mit der Ortsdarstellung

Bisher haben wir vollständig darstellungsfrei gerechnet! Nun soll die darstellungsfreie Rechnung durch Operatoren in expliziten Darstellungen ersetzt werden!

Mit $j_n(x) = \langle x | n \rangle$ und $a := \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hat{p} - i\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x}$ gilt:

$$a \left(x, \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right) j_n(x) = \left(\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hat{p} - i\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} \right) j_n(x)$$

$$\hat{x} := \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x}$$

$$x := \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x$$

$$\Rightarrow a \left(x, \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right) j_n(x) = \frac{1}{i\sqrt{2}} \left(\hat{x} + \frac{d}{d\mathbf{x}} \right) j_n(\mathbf{x})$$

$$\hat{x} := \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x}$$

Dabei gilt: sind dimensionslose Größen, die sogenannten Normalkoordinaten!

$$x := \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x$$

In $\Rightarrow a\left(x, \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}\right) \mathbf{j}_n(x) = \frac{1}{i\sqrt{2}} \left(\hat{\mathbf{x}} + \frac{d}{d\mathbf{x}}\right) \mathbf{j}_n(\mathbf{x})$ wird über $\left(\hat{\mathbf{x}} + \frac{d}{d\mathbf{x}}\right)$ der Impulsanteil durch die Ortsdarstellung des Impulsoperators ersetzt.

Den Grundzustand gewinnt man leicht aus dem Ansatz $a|\mathbf{j}_0\rangle = 0$ mit $|\mathbf{j}_0\rangle := |0\rangle$

Wegen $a|0\rangle = 0$ folgt für $n=0$:

$$0 = \left(\hat{\mathbf{x}} + \frac{d}{d\mathbf{x}}\right) \mathbf{j}_0(\mathbf{x})$$

$$\Rightarrow \frac{d\mathbf{j}_0}{d\mathbf{x}} = -\mathbf{x} \mathbf{j}_0$$

Somit ergibt sich:

$$\mathbf{j}_0(\mathbf{x}) = A_0 e^{\left(-\frac{\mathbf{x}^2}{2}\right)}$$

$$A_0 = \left(\frac{m\omega}{\hbar p}\right)^{\frac{1}{4}}$$

Wobei sich A_0 aus der Normierung ergibt. Der Grundzustand im Oszillator ist also ein Gaußzustand, eine normierte Gaußglocke mit einer Halbwertsbreite, die in \mathbf{x} enthalten ist.

Für die angeregten Zustände gilt:

$$\mathbf{j}_1(\mathbf{x}) = a^+ \mathbf{j}_0(\mathbf{x}) = \frac{1}{i\sqrt{2}} \left(\mathbf{x} - \frac{d}{d\mathbf{x}}\right) \mathbf{j}_0(\mathbf{x}) = -\frac{1}{i\sqrt{2}} e^{\left(\frac{\mathbf{x}^2}{2}\right)} \frac{d}{d\mathbf{x}} \left(e^{\left(-\frac{\mathbf{x}^2}{2}\right)} \mathbf{j}_0(\mathbf{x})\right)$$

$$\Rightarrow \mathbf{j}_1(\mathbf{x}) = -\frac{1}{i\sqrt{2}} e^{\left(\frac{\mathbf{x}^2}{2}\right)} \frac{d}{d\mathbf{x}} (A_0 e^{(-\mathbf{x}^2)})$$

$$A_0 = \left(\frac{m\omega}{\hbar p}\right)^{\frac{1}{4}}$$

Die angeregten Zustände werden also einfach durch Anwendung des Aufsteigeoperators aus dem Grundzustand erzeugt !

Für den n -ten angeregten Zustand (Induktion !) damit:

$$\mathbf{j}_n(\mathbf{x}) = \frac{(a^+)^n}{\sqrt{n!}} \mathbf{j}_0(\mathbf{x}) = \frac{1}{i^n \sqrt{2^n n!}} \left(\mathbf{x} - \frac{d}{d\mathbf{x}}\right)^n \mathbf{j}_0(\mathbf{x}) = \frac{1}{i^n} \frac{A_0}{\sqrt{2^n n!}} (-1)^n e^{\left(\frac{\mathbf{x}^2}{2}\right)} \frac{d^n}{(d\mathbf{x})^n} e^{-\mathbf{x}^2}$$

$$\frac{A_0}{\sqrt{2^n n!}} := A_n$$

$$A_0 = \left(\frac{m\omega}{\hbar p}\right)^{\frac{1}{4}}$$

$$(-1)^n e^{\left(\frac{\mathbf{x}^2}{2}\right)} \frac{d^n}{(d\mathbf{x})^n} e^{-\mathbf{x}^2} := H_n(\mathbf{x}) e^{-\frac{\mathbf{x}^2}{2}}$$

Dabei kann $\frac{1}{i^n}$ als Phasenfaktor (für die Wahrscheinlichkeit irrelevant) weggelassen werden

und H_n bezeichnet die sogenannten Hermite'schen Polynome vom Grad n.

Die Eigenzustände des harmonischen Oszillators beinhalten also die Hermite- Polynome

$$\mathbf{j}_n(\mathbf{x}) = \frac{1}{i^n} \frac{A_0}{\sqrt{2^n n!}} (-1)^n e^{\left(\frac{\mathbf{x}^2}{2}\right)} \frac{d^n}{(d\mathbf{x})^n} e^{-\mathbf{x}^2}$$

$$\Rightarrow \mathbf{j}_n(\mathbf{x}) = \frac{\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{(-2)^n n!}} H_n(\mathbf{x}) e^{-\frac{\mathbf{x}^2}{2}}$$

Explizit lauten diese Hermite'schen Polynome (wie aus obiger Relation berechnet werden kann):

$$H_0(\mathbf{x}) = 1$$

$$H_1(\mathbf{x}) = 2\mathbf{x}$$

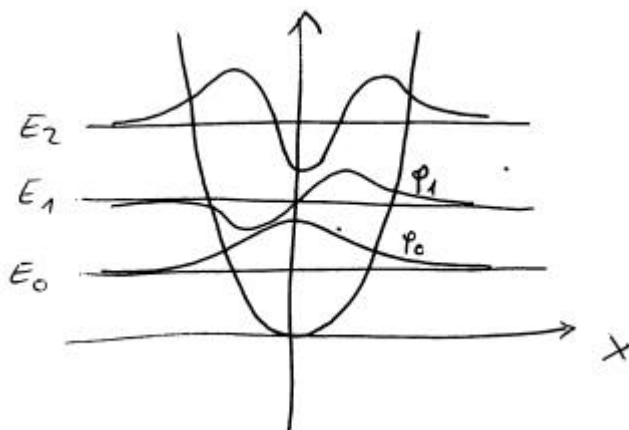
$$H_2(\mathbf{x}) = 4\mathbf{x}^2 - 2$$

$$H_3(\mathbf{x}) = 2\mathbf{x}^3 - 12\mathbf{x}$$

Letztendlich bezeichnet

$$(-1)^n \text{ die Parität von } \mathbf{j}_n$$

Die Wellenfunktionen im Oszillatorpotenzial (die Wurzeln der Wahrscheinlichkeiten) werden folgendermaßen schematisch dargestellt:



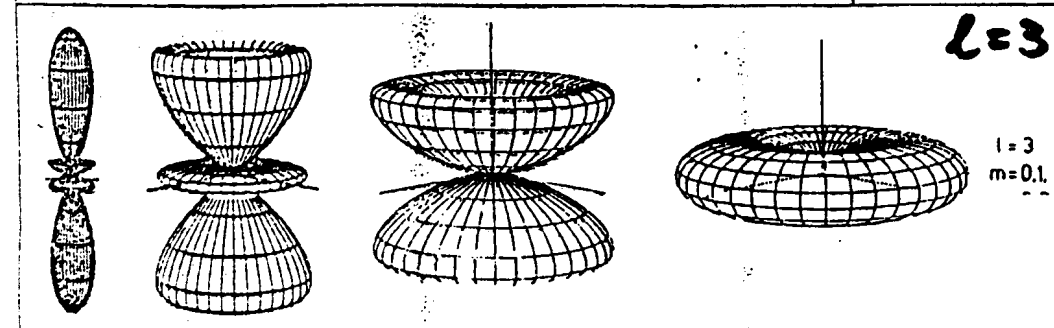
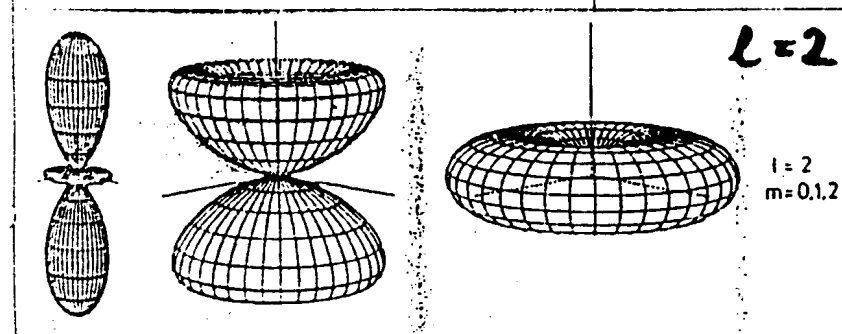
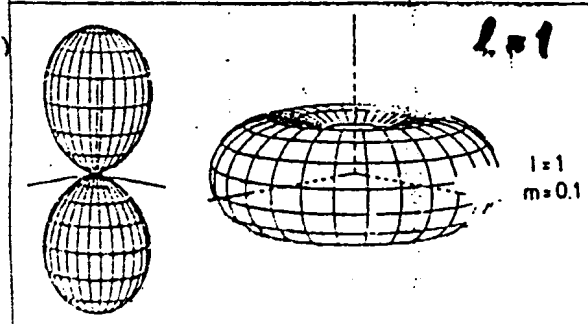
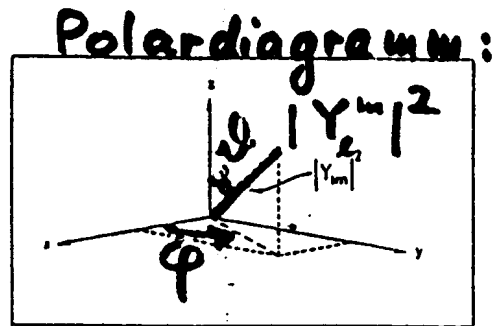
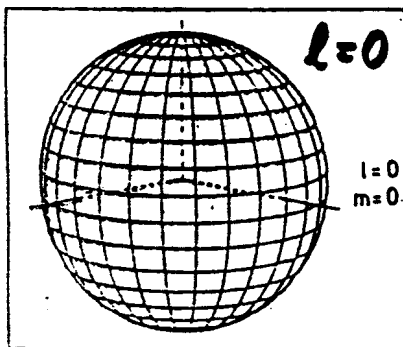
Für das Wasserstoffatom ergeben sich als Wellenfunktion die Kugelflächenfunktionen $Y_l^m(\mathbf{J}, \mathbf{j})$.

Bei Polardiagrammen gibt dabei der Betrag des Radiusvektors, der das Diagramm zeichnet

$$r = \left| Y_l^m(\mathbf{J}, \mathbf{j}) \right|^2 \text{ das Betragsquadrat der Kugelflächenfunktion an.}$$

Also die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Elektrons im Kraftfeld des Protons.

Dabei gibt es für verschiedene Drehimpulsquantenzahlen L verschiedene Wellenfunktionen zum gleichen Energieeigenwert. Die Niveaus sind (ohne den Spin) L+1 - fach entartet ! die Charakterisierung erfolgt durch die magnetische Quantenzahl m



Einwurf: Kohärente (quasiklassische) Zustände

Abstract

Untersucht man die stationären Zustände $|j_n\rangle$ des harmonischen Oszillators, so sind die Erwartungswerte von Ort und Impuls in einem solchen Zustand Null. Statt dessen ergeben sich von Null verschiedene Erwartungswerte $\langle \hat{X}^2 \rangle$ und $\langle \hat{P}^2 \rangle$, sogenanntes Quantenrauschen, welches für die Heisenbergsche

Unschärferelation verantwortlich ist.

Aus der klassischen Mechanik ist jedoch bekannt, dass Ort und Impuls eines Oszillators sich periodisch ändern. Sie können nur dann konstant gleich null sein, wenn das auch für die Energie der Fall ist.

Für die Energie gilt jedoch: $\langle \hat{H} \rangle = (n + \frac{1}{2})\hbar \omega$. Bekanntlich gelangt die Quantenmechanik für große Quantenzahlen hinsichtlich ihrer Ergebnisse zu den gleichen Resultaten wie die klassische Mechanik. Es drängt sich also die Frage auf: Kann man Quantenzustände konstruieren, für die die physikalischen Voraussagen der Quantenmechanik zumindest bei einem makroskopischen Oszillator mit den Aussagen der klassischen Mechanik identisch sind ?

Derartige Zustände existieren. Es sind kohärente Überlagerungen aller stationären Zustände $|j_n\rangle$. Man nennt sie deshalb auch quasiklassische oder kohärente Zustände.

Bei der elektromagnetischen Strahlung kann man den Fall beobachten, dass klassische Lösungen übergehen in Effekte, die deutlichen Quantencharakter zeigen. Die Interferenz von Photonen am Doppelspalt bei äußerst geringen Intensitäten ist nur ein Beispiel. Die kohärenten Zustände spielen deshalb auch in der Quantenoptik eine große Rolle. Sie wurden von Glauber eingeführt und heißen demnach auch Glauberzustände.

Bekanntlich vertauschen die Operatoren für Ort und Impuls nicht. Ein Zustand, aus dem exakt die klassischen Ergebnisse resultieren kann demnach gar nicht existieren. Wir begnügen uns mit der Suche nach einem Zustand, für den zu einer beliebigen Zeit t die Erwartungswerte von Ort, Impuls und Energie möglichst nahe an den entsprechenden klassischen Werten liegen.

Das Ergebnis wird ein Kompromiss sein, bei dem keine der drei Observablen vollständig bestimmt ist, jedoch wird sich herausstellen, dass man im makroskopischen Grenzfall die Standardabweichungen der Größen gänzlich vernachlässigen darf. Am Beispiel eines makroskopischen Oszillators wird gezeigt, dass beispielsweise die Ortsunschärfe weit unter einem Kerndurchmesser liegt und damit die Ergebnisse der klassischen Mechanik weit genauer sind als dass man in makroskopischen Grenzfällen ihre Abweichungen mit physikalischen Methoden heute messen könnte.

Der klassische Oszillator

Wir erinnern uns an die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen des Oszillators mit Masse m und Kreisfrequenz ω :

$$\frac{d}{dt}x(t) = \frac{1}{m}p(t)$$

$$\frac{d}{dt}p(t) = -m\omega^2 x(t)$$

Ansatz sind immer die HAMILTONSCHEN GLEICHUNGEN !

Für den Übergang in die Quantenmechanik werden die Hamiltonschen Gleichungen mit dem Absteiger/Aufsteiger- Formalismus formuliert !

Der Einfachheit halber werden dimensionslose Größen eingeführt:

$$\hat{x}(t) = \mathbf{b}x(t)$$

$$\hat{p}(t) = \frac{1}{\hbar\mathbf{b}}p(t)$$

$$\mathbf{b} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

Damit haben wir hier: $\hat{x}(t), \hat{p}(t)$ als Normalkoordinaten. Ich bitte, den wechselhaften Formalismus zu entschuldigen ! Hier beschreibt nun ausnahmsweise das "Dach" die Normalkoordinaten !

Die Bewegungsgleichungen lauten:

$$\frac{d}{dt} \hat{x}(t) = \mathbf{w} \hat{p}(t)$$

$$\frac{d}{dt} \hat{p}(t) = -\mathbf{w} \hat{x}(t)$$

Klassisch ist ein solcher Oszillator bestimmt, wenn für alle Zeiten Ort **und** Impuls bekannt sind. Das Problem des Oszillators eines Freiheitsgrades ist also zweidimensional, man fasst die beiden Größen x und p zu einer

komplexen Größe $\mathbf{a}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\hat{x}(t) + i\hat{p}(t)]$ zusammen.

Das Gleichungssystem ist dann äquivalent zu einer Gleichung

$$\frac{d}{dt} \mathbf{a}(t) = -i\mathbf{w}\mathbf{a}(t)$$

Die Lösung lautet

$$\mathbf{a}(t) = \mathbf{a}(0) \exp(-i\mathbf{w}t) \quad \text{mit} \quad \mathbf{a}(0) = \mathbf{a}_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} [\hat{x}(0) + i\hat{p}(0)]$$

In der komplexen Ebene beschreibt $\mathbf{a}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\hat{x}(t) + i\hat{p}(t)]$ einen Vektor, der mit der

Winkelgeschwindigkeit $-\mathbf{w}$ um den Ursprung rotiert. Dabei gibt die Abszisse $\frac{\hat{x}(t)}{\sqrt{2}}$ an, auf der Ordinate findet

sich $\frac{\hat{p}(t)}{\sqrt{2}}$. Die Darstellung ist also sehr einfach und eine Bewegung mit bestimmten Anfangsbedingungen ist

durch den Punkt \mathbf{a}_0 bereits vollständig charakterisiert.

Aus $\mathbf{a}(t) = \mathbf{a}(0) \exp(-i\mathbf{w}t)$ ergibt sich mit $\mathbf{a}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\hat{x}(t) + i\hat{p}(t)]$ nun:

$$\hat{x}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\mathbf{a}(0) \exp(-i\mathbf{w}t) + \mathbf{a}(0)^* \exp(i\mathbf{w}t)]$$

$$\hat{p}(t) = \frac{-i}{\sqrt{2}} [\mathbf{a}(0) \exp(-i\mathbf{w}t) - \mathbf{a}(0)^* \exp(i\mathbf{w}t)]$$

Die klassische Energie des Systems ist zeitlich konstant:

$$E = \frac{1}{2m} [p(0)]^2 + \frac{1}{2} m\mathbf{w}^2 [x(0)]^2$$

$$E = \frac{\hbar\mathbf{w}}{2} \{ [p(0)]^2 + [x(0)]^2 \} = \hbar\mathbf{w} |\mathbf{a}_0|^2$$

Für einen makroskopischen Oszillator ist die Energie viel größer als $\hbar\mathbf{w}$. Also gilt $|\mathbf{a}_0| \gg 1$

Definition der quasiklassischen Zustände

Ziel: Die Erwartungswerte $\langle \hat{X} \rangle, \langle \hat{P} \rangle, \langle \hat{H} \rangle$ sollen zu allen Zeiten praktisch gleich den Werten $\hat{x}, \hat{p}, \hat{H}$ der klassischen Bewegung sein.

Einfach ist die Berechnung der Erwartungswerte in algebraischer Schreibweise. Ort, Impuls und Energie werden dabei durch Auf- und Absteiger ausgedrückt:

$$\hat{X} = \mathbf{bX} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^+)$$

$$\hat{P} = \frac{1}{\hbar \mathbf{b}} P = -\frac{i}{\sqrt{2}}(a - a^+)$$

$$\hat{H} = \hbar \mathbf{w}(a^+ a + \frac{1}{2})$$

wegen $\langle a^+ \rangle = \langle a \rangle^*$ ist zunächst a wieder als "komplexer, nicht hermitescher Operator" zu sehen, dessen Realteil dem Ort und dessen Imaginärteil dem Impuls entspricht.

Umgekehrt: Wir betrachten Ort- und Impuls als Real- und Imaginärteil eines noch unbestimmten und zu bestimmenden Operators, des "Aufsteigers". Dieser ist dann nicht-hermitesch !

Die zeitliche Entwicklung eines Matricelements erfolgt durch die Differentialgleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle a \rangle(t) = \langle [a, H] \rangle(t)$$

$$[a, H] = \hbar \mathbf{w} [a, a^+ a] = \hbar \mathbf{w} a$$

wegen:

$$\frac{d}{dt} \langle a \rangle(t) = \frac{i}{\hbar} \langle [H, a] \rangle(t)$$

Also folgt eine Differentialgleichung für den Absteiger

$$\langle a \rangle(t) = \langle a \rangle(0) e^{(-i\mathbf{w}t)}$$

mit $[a^+, H] = \hbar \mathbf{w} [a^+, a^+ a] = -\hbar \mathbf{w} a^+$ folgt:

$$\langle a^+ \rangle(t) = \langle a^+ \rangle(0) e^{(i\mathbf{w}t)} = \langle a \rangle^*(0) e^{(i\mathbf{w}t)}$$

Also:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle a^+ \rangle = \langle [a^+, H] \rangle = -\hbar \mathbf{w} \langle a^+ \rangle$$

Diese Bewegungsgleichungen für Auf- und Absteiger entsprechen der klassischen Gleichung

$$\mathbf{a}(t) = \mathbf{a}(0) \exp(-i\mathbf{w}t)$$

Werden die Lösungen für die zeitliche Entwicklung dieser Operatoren in unsere Definition von Energie, Ort und Impuls eingesetzt, so ergibt sich:

$$\langle \hat{X} \rangle(t) = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} (a + a^+) \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\langle a \rangle(0) e^{-i\omega t} + \langle a \rangle^*(0) e^{i\omega t} \right]$$

$$\langle \hat{P} \rangle(t) = \left\langle \frac{i}{\sqrt{2}} (a - a^+) \right\rangle = -\frac{i}{\sqrt{2}} \left[\langle a \rangle(0) e^{-i\omega t} - \langle a \rangle^*(0) e^{i\omega t} \right]$$

$$\langle \hat{H} \rangle(t) = \langle \hat{H} \rangle(0) = \hbar \omega \left\langle a^+ a + \frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \omega \langle a^+ a \rangle(0) + \frac{\hbar \omega}{2}$$

Vergleicht man dies mit der Lösung für den klassischen Fall (Remember: Ort und Impuls wurden als komplexe

Zahl $\mathbf{a}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\hat{x}(t) + i\hat{p}(t)]$ zusammengefasst, deren Bewegungsgleichung $\frac{d}{dt} \mathbf{a}(t) = -i\omega \mathbf{a}(t)$ beide

Hamiltonsche Gleichungen erfüllt), die denn lauteten:

$$\hat{x}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\mathbf{a}(0) \exp(-i\omega t) + \mathbf{a}(0)^* \exp(i\omega t)]$$

$$\hat{p}(t) = \frac{-i}{\sqrt{2}} [\mathbf{a}(0) \exp(-i\omega t) - \mathbf{a}(0)^* \exp(i\omega t)]$$

So ist notwendig und hinreichend für unsere Bedingung

$$\langle \hat{X} \rangle(t) = \hat{x}(t)$$

$$\langle \hat{P} \rangle(t) = \hat{p}(t)$$

dass

$$\langle a \rangle(0) = \mathbf{a}_0$$

Fazit:

Nach Aufstellen der Quantisierungsbedingungen (Kommutatoren) und der Bewegungsgleichungen (Ausgangspunkt) werden die eigentlichen Glauberzustände konstruiert, indem $\langle \hat{H} \rangle$ mit dem klassischen Ergebnis verglichen wird.

Unser Ziel war es nun also, durch den Vergleich mit dem komplexen Parameter zur Charakterisierung der klassischen Bewegung Zustände zu suchen, in denen die klassische Bewegung quantenmechanisch möglichst gut approximiert wird. Diese Zustandsvektoren müssen normierbar sein und wir erhalten als erstes die Bedingung

$$\langle a \rangle(0) = \langle \Psi(0) | a | \Psi(0) \rangle = \mathbf{a}_0$$

(Normierbarkeitsbedingung)

Eine weitere Bedingung wurde uns durch die Energie geschenkt, für die gilt:

$$\langle \hat{H} \rangle(t) = \langle \hat{H} \rangle(0) = \hbar \omega \left\langle a^+ a + \frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \omega \langle a^+ a \rangle(0) + \frac{\hbar \omega}{2} = \hbar \omega |\mathbf{a}_0|^2$$

(Energiebedingung, gerade angesprochen)

Näherung:

Da für einen klassischen Operator $|\mathbf{a}_0| \gg 1$ können wir den Term $\frac{\hbar \omega}{2}$ vernachlässigen und es gilt als zweite

Bedingung an den Zustandsvektor $\langle a^+ a \rangle(0) = |\mathbf{a}_0|^2$

Diese beiden Bedingungen genügen jedoch zur Bestimmung des normierten Vektors $|\Psi(0)\rangle$ bis auf einen Phasenfaktor.

Merke: nach obiger Definition gilt:

$$|\mathbf{a}|^2 = \frac{p^2}{2m\hbar} + \frac{1}{2}q^2m\frac{\mathbf{w}}{\hbar}$$

Grundsätzliches Vorgehen beim Problem , etwas quantisieren zu müssen:

Ausgangspunkt ist immer die Schrödingergleichung bzw. die Von-Neumann-Bewegungsgleichung und die Vertauschungsrelation. Man muss also Vertauschungsrelationen aufstellen. Das ist die eigentliche Quantisierung. Hier haben wir entsprechend dieser Aussage

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle a \rangle(t) = \langle [a, H] \rangle(t)$$

$$[a, H] = \hbar \mathbf{w} [a, a^\dagger a] = \hbar \mathbf{w} a$$

verwendet ! (Im Heisenbergbild !)

Wirkung des Vernichtungsoperators auf quasiklassische Zustände

Mit dem Operator

$$b = a - \mathbf{a}_0$$

Kann die Norm des Kets $b(\mathbf{a}_0)|\Psi_0\rangle$ berechnet werden:

$$\langle \Psi_0 | b^\dagger(\mathbf{a}_0) b(\mathbf{a}_0) | \Psi_0 \rangle = \langle \Psi_0 | a^\dagger a | \Psi_0 \rangle - \mathbf{a}_0 \langle \Psi_0 | a^\dagger | \Psi_0 \rangle - \mathbf{a}_0^* \langle \Psi_0 | a | \Psi_0 \rangle + \mathbf{a}_0^* \mathbf{a}_0$$

Mit

$$\langle a \rangle(0) = \langle \Psi(0) | a | \Psi(0) \rangle = \mathbf{a}_0 \text{ und } \langle a^\dagger a \rangle(0) = |\mathbf{a}_0|^2 \text{ folgt dann:}$$

$$\langle \Psi_0 | b^\dagger(\mathbf{a}_0) b(\mathbf{a}_0) | \Psi_0 \rangle = \mathbf{a}_0^* \mathbf{a}_0 - \mathbf{a}_0 \mathbf{a}_0^* - \mathbf{a}_0 \mathbf{a}_0^* + \mathbf{a}_0^* \mathbf{a}_0 = 0$$

Jedoch ist nur der Nullvektor vom Betrag Null, woraus folgt:

$$b(\mathbf{a}_0)|\Psi_0\rangle = 0$$

also:

$$a|\Psi_0\rangle = \mathbf{a}_0|\Psi_0\rangle$$

Somit folgt aus unseren Bedingungen, dass $|\Psi_0\rangle$ Eigenzustand zum Vernichtungsoperator mit dem Eigenwert

\mathbf{a}_0 sein muss, damit der Zustandsvektor $|\Psi_0\rangle$ den Bedingungen einer klassischen Bewegung mit dem

Parameter \mathbf{a}_0 genügt. Im Folgenden heiße $|\Psi_0\rangle := |\mathbf{a}_0\rangle$. Der Eigenvektor von a zum Eigenwert \mathbf{a} ist $|\mathbf{a}\rangle$:

$$a|\mathbf{a}\rangle = \mathbf{a}|\mathbf{a}\rangle$$

Aus dieser Eigenwertgleichung lassen sich die Lösungen $|\mathbf{a}\rangle$ bestimmen, indem $|\mathbf{a}\rangle$ in den quantenmechanischen Eigenzuständen des harmonischen Oszillators entwickelt wird. (Diese ergeben sich durch Lösung der Schrödingergleichung):

$$|\mathbf{a}\rangle = \sum_n c_n(\mathbf{a}) |\mathbf{j}_n\rangle$$

Die Wirkung des Absteigers auf die qm- Eigenzustände ist jedoch bekannt:

$$a|\mathbf{a}\rangle = a \sum_n c_n(\mathbf{a}) |\mathbf{j}_n\rangle = \sum_n c_n(\mathbf{a}) \sqrt{n} |\mathbf{j}_{n-1}\rangle = \mathbf{a}|\mathbf{a}\rangle = \mathbf{a} \sum_n c_n(\mathbf{a}) |\mathbf{j}_n\rangle$$

$$\sum_n c_n(\mathbf{a}) \sqrt{n} |\mathbf{j}_{n-1}\rangle = \mathbf{a} \sum_n c_n(\mathbf{a}) |\mathbf{j}_n\rangle$$

(Verschiebung des Summationsindex)

$$\rightarrow c_{n+1}(\mathbf{a}) = \frac{\mathbf{a}}{\sqrt{n+1}} c_n(\mathbf{a})$$

Man hat also eine Rekursionsformel für die Entwicklungskoeffizienten gefunden:

$$c_n(\mathbf{a}) = \frac{\mathbf{a}^n}{\sqrt{n!}} c_0(\mathbf{a})$$

Es bleibt nun also, $c_0(\mathbf{a})$ zu bestimmen. Allerdings kennen wir weitere Bedingungen an die $c_n(\mathbf{a})$. So sollten nämlich alle Zustände $|\mathbf{a}\rangle$ normierbar sein. Dies bedeutet jedoch, da die quantenmechanischen Eigenzustände selbst normiert sind:

$$\sum_n |c_n(\mathbf{a})|^2 = 1 = \sum_n \frac{|\mathbf{a}|^{2n}}{n!} |c_0(\mathbf{a})|^2 = |c_0(\mathbf{a})|^2 e^{|\mathbf{a}|^2}$$

Vereinbaren wir noch, dass $c_0(\mathbf{a})$ reell und positiv sein soll, so ergibt sich:

$$c_0(\mathbf{a}) = e^{-\frac{|\mathbf{a}|^2}{2}}$$

$$\rightarrow |\mathbf{a}\rangle = e^{-\frac{|\mathbf{a}|^2}{2}} \sum_n \frac{\mathbf{a}^n}{\sqrt{n!}} |\mathbf{j}_n\rangle$$

Die kohärenten Zustände sind damit vollständig bestimmt.

Die $|\mathbf{j}_n\rangle$ sind die bekannten, oben bestimmten Zustände des rein quantenmechanischen Oszillators.

Erwartungswerte und Streuungen von Energie, Ort und Impuls

Nun kann man die Energie eines Oszillators im kohärenten Zustand $|\mathbf{a}\rangle = e^{-\frac{|\mathbf{a}|^2}{2}} \sum_n \frac{\mathbf{a}^n}{\sqrt{n!}} |\mathbf{j}_n\rangle$ berechnen und mit dem klassischen Ergebnis vergleichen:

Eine Energiemessung liefert den Wert $E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega$ mit der

Wahrscheinlichkeit $P_n(\mathbf{a}) = |c_n|^2 = e^{-|\mathbf{a}|^2} \frac{|\mathbf{a}|^{2n}}{n!}$. Dies ist eine Poisson-Verteilung.

Man sieht, dass auch die Wahrscheinlichkeiten einer Rekursion genügen:

$$P_n(\mathbf{a}) = \frac{|\mathbf{a}|^2}{n} P_{n-1}(\mathbf{a})$$

Aus dieser Beziehung lässt sich ableiten, dass $P_n(\mathbf{a})$ für $n =$ ganzzahliger Teil von $|\mathbf{a}|^2$ maximal wird (unter der Bedingung, dass n ganzzahlig ist).

Mit $\langle \mathbf{a} | a^\dagger a | \mathbf{a} \rangle = \mathbf{a}^* \mathbf{a}$ sieht man:

$$\langle \hat{H} \rangle_{\mathbf{a}} = \hbar \omega \langle \mathbf{a} | \left[a^\dagger a + \frac{1}{2} \right] | \mathbf{a} \rangle = \hbar \omega \left[\mathbf{a}^* \mathbf{a} + \frac{1}{2} \right] = \hbar \omega \left[|\mathbf{a}|^2 + \frac{1}{2} \right]$$

Für unserer Bedingung an makroskopische Oszillatoren: $|\mathbf{a}| \gg 1$, sieht man also, dass die im kohärenten Zustand zu erwartende Energie nur wenig von der Energie E_n abweicht, die bei Messung in $|\mathbf{j}_n\rangle$ mit maximaler Wahrscheinlichkeit $P_n(\mathbf{a})$ zu erwarten ist.

Ebenso einfach kann man mit Hilfe von $[a, a^\dagger] = 1$ den Erwartungswert

$$\langle \hat{H}^2 \rangle_{\mathbf{a}} = \hbar^2 \omega^2 \langle \mathbf{a} | \left[a^\dagger a + \frac{1}{2} \right]^2 | \mathbf{a} \rangle = \hbar^2 \omega^2 \left[|\mathbf{a}|^4 + 2|\mathbf{a}|^2 + \frac{1}{4} \right] \text{ berechnen}$$

und man erhält dann eine Standardabweichung

$$\Delta \hat{H}_{\mathbf{a}} = \hbar \omega |\mathbf{a}|$$

Die relative Standardabweichung

$$\frac{\Delta \hat{H}_{\mathbf{a}}}{\langle \hat{H} \rangle_{\mathbf{a}}} \approx \frac{1}{|\mathbf{a}|} \ll 1 \text{ für große } |\mathbf{a}|$$

Damit ist die Energie im kohärenten Zustand relativ gut bestimmt

Remember:

$$\hat{X} = \frac{\hbar}{m\omega} \mathbf{X} = \frac{1}{\sqrt{2}} (a + a^\dagger)$$

$$\hat{P} = \frac{1}{\hbar m} P = -\frac{i}{\sqrt{2}} (a - a^\dagger)$$

Somit, wie jeder leicht nachrechnen kann, ergibt sich:

$$\langle X \rangle_{\mathbf{a}} = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \operatorname{Re}(\mathbf{a})$$

$$\langle P \rangle_{\mathbf{a}} = \sqrt{2m\hbar\omega} \operatorname{Im}(\mathbf{a})$$

$$\langle X^2 \rangle_{\mathbf{a}} = \frac{\hbar}{2m\omega} [(\mathbf{a} + \mathbf{a}^*)^2 + 1]$$

$$\langle P^2 \rangle_{\mathbf{a}} = \frac{m\omega\hbar}{2} [1 - (\mathbf{a} - \mathbf{a}^*)^2]$$

Also kann man direkt die Standardabweichungen angeben:

$$\Delta X_{\mathbf{a}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$$

$$\Delta P_{\mathbf{a}} = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}$$

Beide hängen nun nicht mehr von \mathbf{a} ab und Ihr Produkt liefert den nach der Unschärferelation minimalen erlaubten Wert:

$$\Delta X_{\mathbf{a}} \cdot \Delta P_{\mathbf{a}} = \frac{\hbar}{2}$$

Erzeugung quasiklassischer Zustände aus dem gm.- Grundzustand

Wir definieren den Operator

$$D(\mathbf{a}) = e^{(\mathbf{a}\mathbf{a}^+ - \mathbf{a}^*\mathbf{a})}$$

$$D^+(\mathbf{a}) = e^{(\mathbf{a}^*\mathbf{a} - \mathbf{a}\mathbf{a}^+)}$$

Mit Hilfe von $[\mathbf{a}^+, \mathbf{a}^*\mathbf{a}] = \mathbf{a}^*\mathbf{a} = |\mathbf{a}|^2$ und

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{\frac{-[A,B]}{2}} \text{ falls } [[A,B], A] = [[A,B], B] = 0$$

folgt:

$$D(\mathbf{a}) = e^{\frac{|\mathbf{a}|^2}{2}} e^{\mathbf{a}\mathbf{a}^+} e^{-\mathbf{a}^*\mathbf{a}}$$

Wenn wir diesen Operator nun auf den Grundzustand der quantenmechanischen Zustände $|\mathbf{j}_0\rangle$ wirken lassen, so ergibt sich wegen

$$e^{-\mathbf{a}^*\mathbf{a}}|\mathbf{j}_0\rangle = \left[1 - \mathbf{a}^*\mathbf{a} + \frac{(\mathbf{a}^*)^2\mathbf{a}^2}{2!} + \dots\right]|\mathbf{j}_0\rangle = |\mathbf{j}_0\rangle$$

$$D(\mathbf{a})|\mathbf{j}_0\rangle = e^{\frac{|\mathbf{a}|^2}{2}} e^{\mathbf{a}\mathbf{a}^+}|\mathbf{j}_0\rangle = e^{\frac{|\mathbf{a}|^2}{2}} \sum_n \frac{(\mathbf{a}\mathbf{a}^+)^n}{n!}|\mathbf{j}_0\rangle = e^{\frac{|\mathbf{a}|^2}{2}} \sum_n \frac{\mathbf{a}^n}{\sqrt{n!}}|\mathbf{j}_n\rangle = |\mathbf{a}\rangle$$

Die Wirkung von $D(\mathbf{a}) = e^{\frac{|\mathbf{a}|^2}{2}} e^{\mathbf{a}\mathbf{a}^+} e^{-\mathbf{a}^*\mathbf{a}}$ ist folglich die unitäre Transformation, die aus dem Grundzustand $|\mathbf{j}_0\rangle$ den quasiklassischen Zustand $|\mathbf{a}\rangle$ erzeugt.

Dies ist die einfachste Variante. Merke:

$$D(\mathbf{a}) = e^{(\mathbf{a}\mathbf{a}^+ - \mathbf{a}^*\mathbf{a})}$$

$$\mathbf{a}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}[x(t) + ip(t)]$$

$$a = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \hat{p} - \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x}$$

Kohärente Wellenfunktionen in Ortsdarstellung

Bleibt noch, die Wellenfunktion

$$\Psi_{\mathbf{a}}(x) = \langle x|\mathbf{a}\rangle = \langle x|D(\mathbf{a})|\mathbf{j}_0\rangle \text{ zu berechnen (} |\mathbf{a}\rangle \text{ in Ortsdarstellung)}$$

Dazu kann man den Operator

$\mathbf{a}^+ - \mathbf{a}^*\mathbf{a}$ durch X und P ausdrücken:

$$\mathbf{a}^+ - \mathbf{a}^*\mathbf{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \left(\frac{\mathbf{a} - \mathbf{a}^*}{\sqrt{2}} \right) X - \frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}} \left(\frac{\mathbf{a} + \mathbf{a}^*}{\sqrt{2}} \right) P$$

Daraus folgt:

$$D(\mathbf{a}) = e^{(\mathbf{a}^\dagger - \mathbf{a}^*)} = e^{\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \left(\frac{\mathbf{a} - \mathbf{a}^*}{\sqrt{2}} \right) X} e^{-\frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}} \left(\frac{\mathbf{a} + \mathbf{a}^*}{\sqrt{2}} \right) P} e^{\frac{\mathbf{a}^{*2} - \mathbf{a}^2}{4}}$$

Dies kann nun zur Berechnung der Ortsdarstellung des kohärenten Zustands herangezogen werden:

$$\Psi_{\mathbf{a}}(x) = \langle x | e^{\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \left(\frac{\mathbf{a} - \mathbf{a}^*}{\sqrt{2}} \right) X} e^{-\frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}} \left(\frac{\mathbf{a} + \mathbf{a}^*}{\sqrt{2}} \right) P} e^{\frac{\mathbf{a}^{*2} - \mathbf{a}^2}{4}} | \mathbf{j}_0 \rangle$$

$$\Psi_{\mathbf{a}}(x) = e^{\frac{\mathbf{a}^{*2} - \mathbf{a}^2}{4}} \langle x | e^{\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \left(\frac{\mathbf{a} - \mathbf{a}^*}{\sqrt{2}} \right) X} e^{-\frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}} \left(\frac{\mathbf{a} + \mathbf{a}^*}{\sqrt{2}} \right) P} | \mathbf{j}_0 \rangle$$

$$\Psi_{\mathbf{a}}(x) = e^{\frac{\mathbf{a}^{*2} - \mathbf{a}^2}{4}} e^{\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \left(\frac{\mathbf{a} - \mathbf{a}^*}{\sqrt{2}} \right) X} \langle x | e^{-\frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}} \left(\frac{\mathbf{a} + \mathbf{a}^*}{\sqrt{2}} \right) P} | \mathbf{j}_0 \rangle$$

$e^{\frac{iP}{\hbar}}$ ist jedoch gerade der Translationsoperator um \mathbf{l} längs der x- Achse. Darum gilt:

$$\langle x | e^{-\frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}} \left(\frac{\mathbf{a} + \mathbf{a}^*}{\sqrt{2}} \right) P} = \left\langle x - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\mathbf{a} + \mathbf{a}^*) \right|$$

$$\Psi_{\mathbf{a}}(x) = e^{\frac{\mathbf{a}^{*2} - \mathbf{a}^2}{4}} e^{\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \left(\frac{\mathbf{a} - \mathbf{a}^*}{\sqrt{2}} \right) X} \mathbf{j}_0 \left(x - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\mathbf{a} + \mathbf{a}^*) \right)$$

Wegen

$$\langle X \rangle_{\mathbf{a}} = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \operatorname{Re}(\mathbf{a}) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\mathbf{a} + \mathbf{a}^*)$$

$$\langle P \rangle_{\mathbf{a}} = \sqrt{2m\hbar\omega} \operatorname{Im}(\mathbf{a}) = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (\mathbf{a} - \mathbf{a}^*)$$

kann man schließlich schreiben:

$$\Psi_{\mathbf{a}}(x) = e^{\frac{\mathbf{a}^{*2} - \mathbf{a}^2}{4}} e^{\frac{i\langle P \rangle_{\mathbf{a}}}{\hbar} x} \mathbf{j}_0 \left(x - \langle X \rangle_{\mathbf{a}} \right) \quad (\text{in Ortsdarstellung !})$$

Fazit: Multipliziert man die Wellenfunktion $\mathbf{j}_0(x)$ des Grundzustands des eindimensionalen Oszillators mit

dem oszillierenden Faktor $e^{\frac{i\langle P \rangle_{\mathbf{a}}}{\hbar} x}$ und verschiebt man sie dann um $\langle X \rangle_{\mathbf{a}}$ längs der x- Achse, so erhält man

die Ortswellenfunktion für den Zustand $|\mathbf{a}\rangle$. Der Phasenfaktor $e^{\frac{\mathbf{a}^{*2} - \mathbf{a}^2}{4}}$ kann man vernachlässigen, da er physikalisch keine Rolle spielt.

Für uns bedeutet dies: Die Gaußzustände werden gewonnen, indem man die quantenmechanischen Zustände in klassischer Weise um $\langle X \rangle_{\mathbf{a}}$ verschiebt.

Aus der Quantenmechanik ist bekannt:

$$\mathbf{j}_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \quad \Delta X_{\mathbf{a}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$$

$$\mathbf{j}_n(\mathbf{x}) = \frac{1}{i^n} \frac{A_0}{\sqrt{2^n n!}} (-1)^n e^{\left(\frac{\mathbf{x}^2}{2}\right)} \frac{d^n}{(d\mathbf{x})^n} e^{-\mathbf{x}^2}$$

$$\Rightarrow \mathbf{j}_n(\mathbf{x}) = \frac{\left(\frac{m\mathbf{w}}{\hbar\mathbf{p}}\right)^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{(-2)^n n!}} H_n(\mathbf{x}) e^{-\frac{\mathbf{x}^2}{2}}$$

Also: mit $\Delta X_{\mathbf{a}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\mathbf{w}}}$:

$$\mathbf{j}_0(x) = \left(\frac{m\mathbf{w}}{\hbar\mathbf{p}}\right)^{\frac{1}{4}} e^{\left(-\frac{x^2}{4(\Delta X_{\mathbf{a}})^2}\right)}$$

Somit gilt:

$$\mathbf{j}_0(x - \langle X \rangle_{\mathbf{a}}) = \left(\frac{m\mathbf{w}}{\hbar\mathbf{p}}\right)^{\frac{1}{4}} e^{\left(-\frac{1}{4} \left(\frac{x - \langle X \rangle_{\mathbf{a}}}{\Delta X_{\mathbf{a}}}\right)^2\right)}$$

und man kann explizit angeben:

$$\Psi_{\mathbf{a}}(x) = e^{\frac{\mathbf{a}^{*2} - \mathbf{a}^2}{4}} \left(\frac{m\mathbf{w}}{\hbar\mathbf{p}}\right)^{\frac{1}{4}} e^{\frac{i\langle P \rangle_{\mathbf{a}} x}{\hbar}} e^{\left(-\frac{1}{4} \left(\frac{x - \langle X \rangle_{\mathbf{a}}}{\Delta X_{\mathbf{a}}}\right)^2\right)}$$

Dies ist im Moment noch völlig zeitunabhängig. Zeitabhängigkeit kann man jedoch leicht einbauen. Man muss lediglich $\langle X \rangle_{\mathbf{a}}$ durch $\langle X \rangle_{\mathbf{a}}(t)$ ersetzen !

Die Wahrscheinlichkeitsdichte des kohärenten Zustands im Ortsraum ergibt sich demnach zu

$$|\Psi_{\mathbf{a}}(x)|^2 = \sqrt{\left(\frac{m\mathbf{w}}{\hbar\mathbf{p}}\right)} e^{\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{x - \langle X \rangle_{\mathbf{a}}}{\Delta X_{\mathbf{a}}}\right)^2\right)}$$

Man erhält also für jeden $|\mathbf{a}\rangle$ -Zustand ein Gauß-Paket.

Es läßt sich zeigen, dass die kohärenten Zustände (die ja, wie gezeigt, normierbar sind), die Orthogonalitätsbedingungen und die Vollständigkeitsrelation erfüllen.

Zeitliche Entwicklung eines quasiklassischen Zustands

Der harmonische Oszi sei zum Anfangszustand in einem bestimmten $|\mathbf{a}\rangle$ -Zustand:

$$|\mathbf{y}(0)\rangle = |\mathbf{a}_0\rangle$$

Wir wissen:

$$|\mathbf{a}\rangle = e^{-\frac{|\mathbf{a}|^2}{2}} \sum_n \frac{\mathbf{a}^n}{\sqrt{n!}} |\mathbf{j}_n\rangle. \text{ Die Zeitentwicklung der quantenmechanischen Eigenzustände ist jedoch}$$

aus der zeitabhängigen Schrödingergleichung bekannt:

$$\mathbf{y}_n(x, t) = e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \mathbf{y}_n(x)$$

Wir haben oben den Ortsschieber kennengelernt ! Hier sehen wir wieder hinsichtlich der konjugierten Variablen Zeit und Energie: Unser Zeitentwicklungsoperator ist ein "Zeitschieber":

$$e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \text{ als Zeitschieber !}$$

Somit kann angegeben werden:

$$|\mathbf{y}(t)\rangle = e^{-\frac{|\mathbf{a}_0|^2}{2}} \sum_n \frac{\mathbf{a}_0^n}{\sqrt{n!}} e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} |\mathbf{j}_n\rangle = e^{-\frac{|\mathbf{a}_0|^2}{2}} e^{-\frac{i\omega t}{2}} \sum_n \frac{\mathbf{a}_0^n}{\sqrt{n!}} e^{-in\omega t} |\mathbf{j}_n\rangle$$

Nun ist aber:

$$e^{-\frac{|\mathbf{a}_0|^2}{2}} e^{-\frac{i\omega t}{2}} \sum_n \frac{\mathbf{a}_0^n}{\sqrt{n!}} e^{-in\omega t} |\mathbf{j}_n\rangle = e^{-\frac{i\omega t}{2}} \left| \mathbf{a} = \mathbf{a}_0 e^{-i\omega t} \right\rangle$$

Und es ergibt sich der zeitentwickelte Zustand explizit:

$$|\mathbf{y}(t)\rangle = e^{-\frac{i\omega t}{2}} \left| \mathbf{a} = \mathbf{a}_0 e^{-i\omega t} \right\rangle$$

Es genügt also, \mathbf{a}_0 durch $\mathbf{a}_0 e^{-i\omega t}$ zu ersetzen und den so erhaltenen Ket- Vektor mit $e^{-\frac{i\omega t}{2}}$ zu multiplizieren ,

um vom Anfangszustand zum zeitentwickelten Zustand zu gelangen. $e^{-\frac{i\omega t}{2}}$ ist dabei ohnehin ein globaler Phasenfaktor ohne physikalische Konsequenzen. Somit bleibt der kohärente Zustand stets ein Eigenvektor zum Vernichtungsoperator mit dem Eigenwert $\mathbf{a}_0 e^{-i\omega t}$. Dies ist jedoch nichts anderes als der Parameter

$$\mathbf{a}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\hat{x}(t) + i\hat{p}(t)], \text{ der den Zustand des klassischen Oszillators vollständig charakterisiert.}$$

Zeitliche Entwicklung der physikalischen Eigenschaften

Wir verwenden nun $\mathbf{a} = \mathbf{a}_0 e^{-i\omega t}$ und erhalten sofort

$$\langle X \rangle_{\mathbf{a}} = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \operatorname{Re}(\mathbf{a}_0 e^{-i\omega t})$$

$$\langle P \rangle_{\mathbf{a}} = \sqrt{2m\hbar\omega} \operatorname{Im}(\mathbf{a}_0 e^{-i\omega t})$$

Dies entspricht nun genau den klassischen Beziehungen

$$\hat{x}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\mathbf{a}(0) \exp(-i\omega t) + \mathbf{a}(0)^* \exp(i\omega t)]$$

$$\hat{p}(t) = \frac{-i}{\sqrt{2}} [\mathbf{a}(0) \exp(-i\omega t) - \mathbf{a}(0)^* \exp(i\omega t)]$$

Wir erhalten

$$\langle H \rangle_{\mathbf{a}} = \hbar \omega \left[|\mathbf{a}_0|^2 + \frac{1}{2} \right]$$

$$\Delta H_{\mathbf{a}} = \hbar \omega |\mathbf{a}_0|$$

$$\Delta X_{\mathbf{a}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$$

$$\Delta P_{\mathbf{a}} = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}$$

Somit sind Energie und alle Schwankungen in Energie, Ort und Impuls zeitunabhängig. Das Wellenpaket bleibt zu jedem Zeitpunkt minimal. Es zerfließt also nicht.

$$\Psi_{\mathbf{a}}(x) = e^{\frac{\mathbf{a}^{*2} - \mathbf{a}^2}{4}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{\frac{i\langle P \rangle_{\mathbf{a}} x}{\hbar}} e^{\left(-\frac{1}{4} \left(\frac{x - \langle X \rangle_{\mathbf{a}}}{\Delta X_{\mathbf{a}}} \right)^2 \right)}$$

$$\Psi_{\mathbf{a}}(x, t) = \langle x | \Psi(t) \rangle = e^{\frac{\mathbf{a}^{*2} - \mathbf{a}^2}{4}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{\frac{-i\omega t}{2}} e^{\frac{i\langle P \rangle_{\mathbf{a}} x}{\hbar}} e^{\left(-\frac{1}{4} \left(\frac{x - \langle X \rangle_{\mathbf{a}}}{\Delta X_{\mathbf{a}}} \right)^2 \right)}$$

Das Gaußsche Wellenpaket erhält also als Zeitentwicklungsfaktor lediglich eine oszillierende Phase. Die Form des Pakets bleibt vollständig erhalten.

$$\text{Zu allen Zeiten bleibt } |\Psi_{\mathbf{a}}(x)|^2 = \left| \mathbf{j}_0 [x - \langle X \rangle(t)] \right|^2 = \sqrt{\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)} e^{\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{x - \langle X \rangle_{\mathbf{a}}}{\Delta X_{\mathbf{a}}} \right)^2 \right)}$$

Die Bewegung des Wellenpaketes ist also eine harmonische Schwingung entlang der x- Achse mit der Periode

$$T = \frac{2\pi}{\omega}$$

Während das freie Gaußpaket zerfließt, passiert dies in einem parabelförmigen Potenzial nicht mehr. Man kann sich dies so vorstellen, dass das Potenzial das Paket aus Bereichen mit großem Potenzial wieder zurückdrängt und so der Verbreiterung entgegenwirkt.

Für sehr große $|\mathbf{a}|$ ändern sich die Standardabweichungen für Ort und Impuls nicht. Statt dessen werden die

Amplituden $\langle X \rangle(t)$ und $\langle P \rangle(t)$ sehr groß im Vergleich zu ΔX und ΔP . Mit wachsendem $|\mathbf{a}|$ kann man also eine quantenmechanische Bewegung erhalten, für die Ort und Impuls des Oszillators beliebig genau bestimmt sind (relativ beliebig genau). Für große $|\mathbf{a}|$ beschreibt also der kohärente Zustand die Bewegung des makroskopischen Oszillators gut. Die Ergebnisse sind gleichwertig der Betrachtung von Ort, Impuls und Energie als klassische Größen

Bewegung des Gaußpaketes

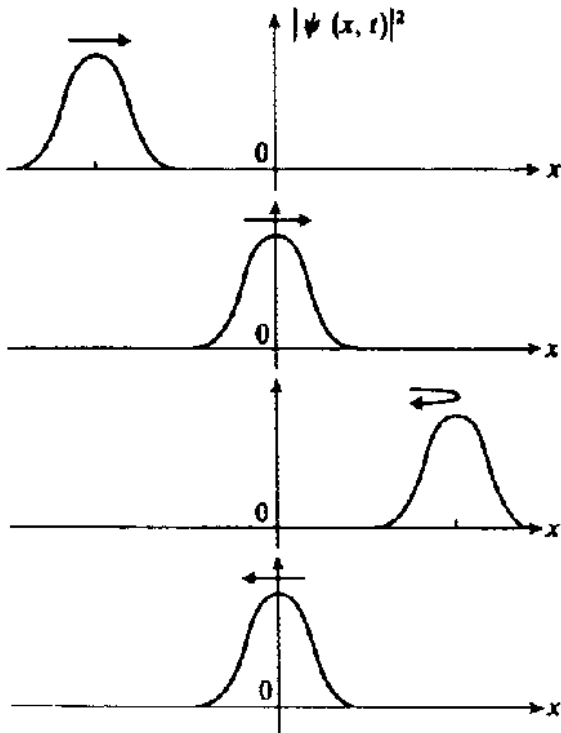


Abb.5.23 Bewegung des zum Zustand $|\alpha\rangle$ gehörenden Wellenpakets: Unter dem Einfluß des parabolischen Potentials $V(x)$ oszilliert das Paket, ohne dabei seine Form zu ändern.

Beispiel eines makroskopischen Oszillators:

Seien: $m = 1\text{ kg}$, $g \sim 10\text{ m/s}^2$, $l = 0,1\text{ m}$

Es gilt: $T = 2\pi\sqrt{\frac{l}{g}}$

Es folgt: $T \sim 0,63\text{ s}$ und $\omega = 10\text{ rad/s}$

Der Oszillator werde um die Amplitude $x_m = 1\text{ cm}$ ausgelenkt

Wegen

$$\langle X \rangle_a = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \operatorname{Re}(\mathbf{a}_0 e^{-i\omega t})$$

gilt:

$$|\mathbf{a}| = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x_m$$

Dies ergibt bei uns einen Zahlenwert:

$$|\mathbf{a}| \approx 2,2 \cdot 10^{15} \gg 1$$

Die zeitunabhängigen Standardabweichungen in Energie, Ort und Impuls ergeben sich zu

$$\frac{\Delta H_{\mathbf{a}}}{\langle H \rangle_{\mathbf{a}}} \approx \frac{1}{|\mathbf{a}|} \approx 0,4 \cdot 10^{-15} \ll 1$$

$$\Delta X_{\mathbf{a}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \approx 2,2 \cdot 10^{-18} \text{ m} \ll x_m$$

$$\Delta P_{\mathbf{a}} = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \approx 2,2 \cdot 10^{-17} \text{ kgm/s}$$

$$\rightarrow \Delta v \approx 2,2 \cdot 10^{-17} \text{ m/s} \ll 0,1 \text{ m/s}$$

Man sieht: Die Ortsunschärfe ist kleiner als ein Kerndurchmesser, die Geschwindigkeitsunschärfe um ähnliche Verhältnisse kleiner als die maximale Geschwindigkeit von 0,1 m/s und auch die relative Genauigkeit der Oszillatorenergie ist ausgezeichnet.

Für die Beschreibung eines makroskopischen Oszillators reichen also die Gesetze der klassischen Mechanik in weitem Maße aus.

3. Drehimpuls

3.1 Drehimpuls- Eigenzustände

Drehimpulsoperator:

$$\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p}$$

In Komponenten:

$$\hat{L}_j = \epsilon_{jkl} \hat{r}_k \hat{p}_l$$

$\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p}$ ist hermitesch:

$$\hat{L}_j^+ = \epsilon_{jkl} (\hat{r}_k \hat{p}_l)^+ = \epsilon_{jkl} \hat{p}_l^+ \hat{r}_k^+ = \epsilon_{jkl} \hat{p}_l \hat{r}_k = \epsilon_{jkl} \hat{r}_k \hat{p}_l$$

Vertauschungs- Relationen:

$$\begin{aligned} [\hat{L}_1, \hat{L}_2] &= [(\hat{r}_2 \hat{p}_3 - \hat{r}_3 \hat{p}_2), (\hat{r}_3 \hat{p}_1 - \hat{r}_1 \hat{p}_3)] = \hat{r}_2 \hat{p}_3 \hat{r}_3 \hat{p}_1 - \hat{r}_2 \hat{p}_3 \hat{r}_1 \hat{p}_3 - \hat{r}_3 \hat{p}_2 \hat{r}_3 \hat{p}_1 + \hat{r}_3 \hat{p}_2 \hat{r}_1 \hat{p}_3 \\ &\quad - \hat{r}_3 \hat{p}_1 \hat{r}_2 \hat{p}_3 + \hat{r}_3 \hat{p}_1 \hat{r}_3 \hat{p}_2 + \hat{r}_1 \hat{p}_3 \hat{r}_2 \hat{p}_3 - \hat{r}_1 \hat{p}_3 \hat{r}_3 \hat{p}_2 \\ &= \hat{r}_2 \hat{p}_3 \hat{r}_3 \hat{p}_1 - \hat{r}_1 \hat{p}_3 \hat{r}_3 \hat{p}_2 + \hat{r}_3 \hat{p}_2 \hat{r}_1 \hat{p}_3 - \hat{r}_3 \hat{p}_1 \hat{r}_2 \hat{p}_3 = \hat{r}_2 \hat{p}_3 \hat{r}_3 \hat{p}_1 - \hat{r}_2 \hat{r}_3 \hat{p}_3 \hat{p}_1 + \hat{r}_1 \hat{r}_3 \hat{p}_3 \hat{p}_2 - \hat{r}_1 \hat{p}_3 \hat{r}_3 \hat{p}_2 \\ &= \hat{r}_2 [\hat{p}_3, \hat{r}_3] \hat{p}_1 + \hat{r}_1 [\hat{r}_3, \hat{p}_3] \hat{p}_2 = \frac{\hbar}{i} \hat{r}_2 \hat{p}_1 - \frac{\hbar}{i} \hat{r}_1 \hat{p}_2 = i\hbar \hat{L}_3 \end{aligned}$$

Allgemein: $[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i\hbar \hat{L}_l$ mit (jkl) zyklisch

$$\hat{L}_1 \hat{L}_2 - \hat{L}_2 \hat{L}_1 = i\hbar \hat{L}_3$$

$$\hat{L}_2 \hat{L}_3 - \hat{L}_3 \hat{L}_2 = i\hbar \hat{L}_1$$

$$\hat{L}_3 \hat{L}_1 - \hat{L}_1 \hat{L}_3 = i\hbar \hat{L}_2$$

$$\rightarrow \hat{L} \times \hat{L} = i\hbar \hat{L}$$

Schreibt man dies mit dem Epsilon- Tensor, so gilt einfacher:

$$[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i\hbar \hat{L}_l \text{ mit (jkl) zyklisch}$$

$$\Rightarrow \epsilon_{jkl} \hat{L}_j \hat{L}_k = i\hbar \hat{L}_l$$

$$\Rightarrow (\hat{L} \times \hat{L})_l = i\hbar \hat{L}_l \Rightarrow \hat{L} \times \hat{L} = i\hbar \hat{L}$$

Wegen $[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i\hbar \hat{L}_l$ also kann es keine gemeinsamen Eigenvektoren zu je zwei Drehimpulskomponenten geben.

Aber:

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_k] = 0 \text{ für } k = 1, 2, 3$$

Beweis: Übung

Merke:

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_k] = [\hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2 + \hat{L}_3^2, \hat{L}_k]$$

$$[\hat{L}_1^2, \hat{L}_k] = \hat{L}_1 [\hat{L}_1, \hat{L}_k] + [\hat{L}_1, \hat{L}_k] \hat{L}_1$$

Es gibt also gemeinsame Eigenvektoren zu EINEM L_k , konventionshalber \hat{L}_3 und \hat{L}^2 .

Definition von Leiteroperatoren (vergl. harmonischer Oszi):

$$\hat{L}_+ := \hat{L}_1 + i\hat{L}_2 \quad \text{nicht hermitesch}$$

$$\hat{L}_- := \hat{L}_1 - i\hat{L}_2$$

Es gilt vielmehr:

$$(\hat{L}_+)^+ = \hat{L}_-$$

$$(\hat{L}_-)^+ = \hat{L}_+$$

Vertauschungsrelationen

$$[\hat{L}_+, \hat{L}_3] = [\hat{L}_1, \hat{L}_3] + i[\hat{L}_2, \hat{L}_3] = -i\hbar\hat{L}_2 - \hbar\hat{L}_1 = -\hbar(\hat{L}_1 + i\hat{L}_2)$$

$$[\hat{L}_+, \hat{L}_3] = -\hbar\hat{L}_+$$

$$[\hat{L}_-, \hat{L}_3] = \hbar\hat{L}_-$$

L+- Form und adjungierte Form.

Auch dies kann verallgemeinert werden:

$$[(\hat{L}_+)^n, \hat{L}_3] = -n\hbar(\hat{L}_+)^{n-1}$$

$$[(\hat{L}_-)^n, \hat{L}_3] = n\hbar(\hat{L}_-)^{n-1}$$

Beweis: Durch vollständige Induktion:

Für n = 1 gezeigt. Sei es nun richtig für ein n größer/gleich 1

Dann:

$$[(\hat{L}_+)^{n+1}, \hat{L}_3] = (\hat{L}_+)^n [(\hat{L}_+), \hat{L}_3] + [(\hat{L}_+)^n, \hat{L}_3] (\hat{L}_+) = (\hat{L}_+)^n (-\hbar\hat{L}_+) - n\hbar(\hat{L}_+)^{n-1} \hat{L}_+ = -(n+1)\hbar(\hat{L}_+)^n$$

Weiter gilt:

$$\hat{L}_+ \hat{L}_- = (\hat{L}_1 + i\hat{L}_2)(\hat{L}_1 - i\hat{L}_2) = \hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2 - i[\hat{L}_1, \hat{L}_2] = \hat{L}^2 - \hat{L}_3^2 + \hbar\hat{L}_3$$

$$\hat{L}_- \hat{L}_+ = \hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2 + i[\hat{L}_1, \hat{L}_2] = \hat{L}^2 - \hat{L}_3^2 - \hbar\hat{L}_3$$

$$\rightarrow [\hat{L}_+, \hat{L}_-] = 2\hbar\hat{L}_3$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_+] = 0$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_-] = 0$$

Mittels \hat{L}_+, \hat{L}_- gelingt die Zerlegung von \hat{L}^2 in mit \hat{L}^2 vertauschbare Operatoren $\hat{L}_3, \hat{L}_+, \hat{L}_-$:

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2 + \hat{L}_3^2 = \hat{L}_3^2 + \hat{L}_+ \hat{L}_- - \hbar\hat{L}_3$$

Warum ?

Nun:

Wir suchen einen vollständigen Satz von vertauschbaren. Observablen (nötig für Quantisierung -> Quantisierungsbedingung entspricht Kommutatoren, wir brauchen aber möglichst viele Größen, deren Kommutator verschwindet.). Ziel: Maximalmessung ermöglichen !

Aber: \hat{L}_1, \hat{L}_2 scheiden aus. Mittels \hat{L}_+, \hat{L}_- bekommt man dagegen dann einen Ersatz für \hat{L}_1, \hat{L}_2 , der mit \hat{L}^2 vertauscht. Man hat also wieder einen vollständigen Satz von Observablen (hinsichtlich des Drehimpulsproblems) (3 Stück, entsprechend der drei nötigen Angaben für die drei Komponenten des Drehimpulsvektors ! im Dreidimensionalen. Diesmal vertauscht jedoch alles !

Allerdings sind \hat{L}_+, \hat{L}_- keine Observablen, sondern die Erzeugenden für höhere Drehimpulszustände.

Die möglichen Observablen sind \hat{L}^2 und \hat{L}_3 , wobei die Komponente selbst willkürlich ist. Hier wählen wir die dritte aus.

Wir können das System also über zwei Quantenzahlen charakterisieren !

Eigenwerte und Eigenzustände

Die gemeinsamen normierten Eigenvektoren $|a,b\rangle$ von \hat{L}^2 und \hat{L}_3 gehorchen den Eigenwertgleichungen

$$\hat{L}^2|a,b\rangle = a|a,b\rangle$$

$$\hat{L}_3|a,b\rangle = b|a,b\rangle$$

Prinzipiell: Für alle Observablen müssen wir Quantenzahlen einführen. Zum formalen Vorgehen schreibt man diese Quantenzahlen einfach in einen Zustandsvektor. Diese Quantenzahlen sind Eigenwerte der Observablen, also mögliche Messwerte. Unser formaler Zustand aus Quantenzahlen ist per Definition ein Eigenvektor zu diesen Quantenzahlen.

Dann muss man nur noch Bedingungen finden, die aus der Eigenwertgleichung Information liefern, die herangezogen werden kann, um die Quantenzahlen einzuschränken bzw. zu bestimmen.

Bei uns gilt:

Da \hat{L} hermitesch ist, gilt:

$$a = \langle a,b|\hat{L}^2|a,b\rangle = \sum_{i=1}^3 \langle a,b|\hat{L}_i^+ \hat{L}_i|a,b\rangle$$

$$\langle a,b|\hat{L}_i^+ \hat{L}_i|a,b\rangle = \langle \Phi|\Phi\rangle \geq 0$$

$$a = \langle a,b|\hat{L}^2|a,b\rangle = \sum_{i=1}^3 \langle a,b|\hat{L}_i^+ \hat{L}_i|a,b\rangle \geq \langle a,b|\hat{L}_3^2|a,b\rangle \geq 0$$

$$\langle a,b|\hat{L}_3^2|a,b\rangle = b^2$$

$$\rightarrow a \geq b^2 \geq 0$$

Weiter gilt:

$$\hat{L}_{\pm}|a,b\rangle \text{ sind auch Eigenzustände zu } \hat{L}^2 \text{ und } \hat{L}_3 :$$

Vorsicht:

$$|a,b\rangle \text{ sind keine Eigenzustände zu } \hat{L}_{\pm} \text{ aber } \hat{L}_{\pm}|a,b\rangle \text{ sind Eigenzustände zu } \hat{L}^2 \text{ und } \hat{L}_3 :$$

Beweis:

$$\hat{L}^2 \hat{L}_{\pm}|a,b\rangle = \hat{L}_{\pm} \hat{L}^2|a,b\rangle = a \hat{L}_{\pm}|a,b\rangle$$

$$\hat{L}_3 \hat{L}_{\pm}|a,b\rangle = (\hat{L}_{\pm} \hat{L}_3 - [\hat{L}_{\pm}, \hat{L}_3])|a,b\rangle$$

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

$$\rightarrow (\hat{L}_{\pm} \hat{L}_3 - [\hat{L}_{\pm}, \hat{L}_3])|a,b\rangle = \hat{L}_{\pm} (\hat{L}_3 \pm \hbar)|a,b\rangle = \hat{L}_{\pm} (b \pm \hbar)|a,b\rangle$$

Also:

$$\hat{L}_3 \hat{L}_{\pm}|a,b\rangle = (b \pm \hbar) \hat{L}_{\pm}|a,b\rangle$$

Das bedeutet:

$$\hat{L}_{\pm} \text{ erhöhen/ erniedrigen den Eigenwert von } \hat{L}_3 \text{ um } \hbar .$$

-> wir bekommen hier Informationen, indem wir Produkte aus Operatoren auf unsere formalen Eigenzustände wirken lassen. Dieses Vorgehen ist sehr typisch, kann man sich mal merken !

Die n - bzw. m - malige Anwendung bei festem b_0 liefert:

$$\hat{L}_3(\hat{L}_+)^n |a, b_0\rangle = (b_0 + n\hbar)(\hat{L}_+)^n |a, b_0\rangle$$

$$\hat{L}_3(\hat{L}_-)^m |a, b_0\rangle = (b_0 - m\hbar)(\hat{L}_-)^m |a, b_0\rangle$$

Das Spektrum von \hat{L}_3 ist nach oben und nach unten beschränkt:

$$a = \langle a, b | \hat{L}^2 | a, b \rangle = \sum_{i=1}^3 \langle a, b | \hat{L}_i^+ \hat{L}_i | a, b \rangle$$

$$\langle a, b | \hat{L}_i^+ \hat{L}_i | a, b \rangle = \langle \Phi | \Phi \rangle \geq 0$$

$$a = \langle a, b | \hat{L}^2 | a, b \rangle = \sum_{i=1}^3 \langle a, b | \hat{L}_i^+ \hat{L}_i | a, b \rangle \geq \langle a, b | \hat{L}_3^2 | a, b \rangle \geq 0$$

$$\langle a, b | \hat{L}_3^2 | a, b \rangle = b^2$$

$$\rightarrow \sqrt{a} \geq b \geq -\sqrt{a}$$

Also existiert ein größter Eigenwert $b_{\max} = b_0 + n_{\max}\hbar$ und ein kleinster Eigenwert $b_{\min} = b_0 - m_{\max}\hbar$ mit

$$\hat{L}_+ |a, b_{\max}\rangle = \hat{L}_- |a, b_{\min}\rangle = 0$$

Daraus folgt:

$$0 = \hat{L}_- \hat{L}_+ |a, b_{\max}\rangle = (\hat{L}^2 - \hat{L}_3^2 - \hbar \hat{L}_3) |a, b_{\max}\rangle = (a - b_{\max}^2 - \hbar b_{\max}) |a, b_{\max}\rangle$$

$$0 = \hat{L}_+ \hat{L}_- |a, b_{\min}\rangle = (\hat{L}^2 - \hat{L}_3^2 + \hbar \hat{L}_3) |a, b_{\min}\rangle = (a - b_{\min}^2 + \hbar b_{\min}) |a, b_{\min}\rangle$$

Also:

$$a = b_{\max}^2 + \hbar b_{\max} = b_{\min}^2 - \hbar b_{\min}$$

Andererseits existiert ein $n \in N_0$ mit $|a, b_{\max}\rangle = (\hat{L}_+)^n |a, b_{\min}\rangle$

Also: $b_{\max} = b_{\min} + n\hbar$

Setzt man dies in $a = b_{\max}^2 + \hbar b_{\max} = b_{\min}^2 - \hbar b_{\min}$ ein, so folgt:

$$b_{\min}^2 + 2n\hbar b_{\min} + n^2\hbar^2 + \hbar(b_{\min} + n\hbar) = b_{\min}^2 - \hbar b_{\min}$$

$$2n\hbar b_{\min} + n^2\hbar^2 + \hbar(2b_{\min} + n\hbar) = 0$$

$$\Rightarrow b_{\min} = -\frac{n(n+1)\hbar^2}{2(n+1)\hbar} = -\frac{n}{2}\hbar =: -l\hbar$$

mit

$$l := \frac{n}{2}$$

Somit:

$$a = b_{\min}(b_{\min} - \hbar) = (-l)(-l-1)\hbar^2$$

$$a = l(l+1)\hbar^2$$

$$b_{\max} = b_{\min} + 2l\hbar = l\hbar$$

Mögliche Eigenwerte von \hat{L}^2 : $a = l(l+1)\hbar^2$

$n \in \mathbb{N}$

$$\Rightarrow l = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$$

Mögliche Eigenwerte von \hat{L}_3 für festes l :

$$b = m\hbar$$

mit

$$m = -l, -l+1, -l+2, \dots, l-2, l-1, l$$

$m=-l \rightarrow$ gehört zu b_{\min}

$m=+l \rightarrow$ gehört zu b_{\max}

Es können keine weiteren Eigenwerte von \hat{L}_3 zwischen diesen Werten liegen, weil man sonst durch wiederholte Anwendung von \hat{L}_+ bzw. \hat{L}_- die Schranken $|m| \leq l$ verletzen könnte.

Zu jedem l gibt es $2l+1$ Werte von m :

Dies entspricht der energetisch gleichen $2l+1$ -fachen Richtungsentartung von \hat{L}^2

welche von außen, z.B. durch Magnetfelder, aufgehoben werden kann.

Die Tatsache, dass \hat{L}_+ bzw. \hat{L}_- den Drehimpulseigenzustand jeweils exakt um \hbar erhöhen bzw. erniedrigen, ist also eine Konsequenz aus dem Kommutator $[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i\hbar \hat{L}_l$, besser, wegen dem zyklischen Anspruch an j, k, l : $[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i\hbar \mathbf{e}_{jkl} \hat{L}_l$. Der wurde nämlich oben mit eingesetzt um die Eigenwertprobleme zu bestimmen. (siehe oben).

Also bedingt der Kommutator $[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i\hbar \mathbf{e}_{jkl} \hat{L}_l$ die Drehimpulsquantisierung.

Tabelle:

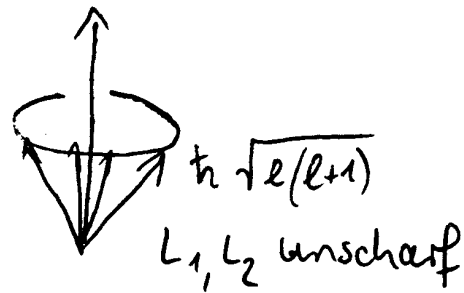
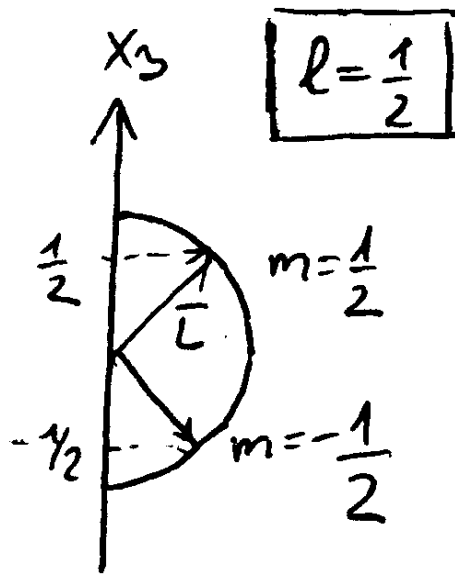
Quantenzahlen	Eigenwert von \hat{L}	Richtungsquantenzahl m
1	$\hbar\sqrt{l(l+1)}$	m
0	0	0
$\frac{1}{2}$	$\hbar\sqrt{\frac{3}{4}}$	$-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$
1	$\hbar\sqrt{2}$	$-1, 0, 1$
$\frac{3}{2}$	$\hbar\sqrt{\frac{15}{4}}$	$-\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$

$$\hat{L}^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle$$

$$\hat{L}_3 |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle$$

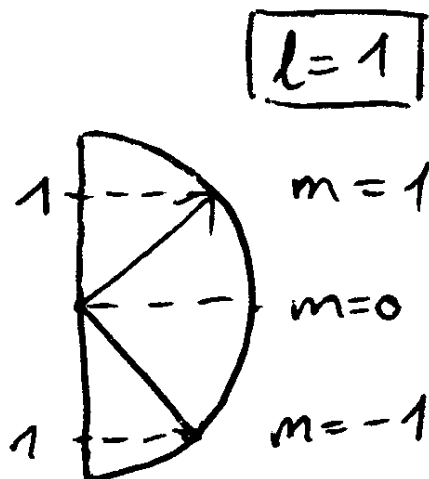
Diracsches Vektormodell:

Darstellung der Richtungsquantisierung:



$m = \frac{1}{2} \rightarrow$ Der Drehimpuls steht parallel zur x_3 - Achse

$m = -\frac{1}{2} \rightarrow$ der Drehimpuls steht antiparallel zur x_3 - Achse



Zur Übung ist zu zeigen:

$$\langle l, m | \hat{L}_i | l, m \rangle = 0 \text{ für } i=1,2$$

$$\langle l, m | (\hat{L}_i - \langle \hat{L}_i \rangle)^2 | l, m \rangle = 0 \text{ soll berechnet werden}$$

Nebenbemerkung: Die Drehimpulsquantisierung ist eine Folge der Nichtvertauschbarkeit der einzelnen Komponenten des Drehimpulses !

Ortsdarstellung des Bahndrehimpulses

$$\langle \vec{r} | \hat{p} | l, m \rangle = \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi_{lm}(\vec{r})$$

$$\langle \vec{r} | \vec{r} | l, m \rangle = \vec{r} \Psi_{lm}(\vec{r})$$

$$\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p}$$

ergibt:

$$\langle \vec{r} | \hat{L}_3 | l, m \rangle = \frac{\hbar}{i} (\hat{x}_1 \partial_2 - \hat{x}_2 \partial_1) \Psi_{lm}(\vec{r}) = \hbar m \Psi_{lm}(\vec{r})$$

In Kugelkoordinaten:

$$x_1 = r \sin \theta \cos \phi$$

$$x_2 = r \sin \theta \sin \phi$$

$$x_3 = r \cos \theta$$

$$x_1 \partial_2 - x_2 \partial_1 = \frac{\partial}{\partial \phi}$$

Aber:

$$x_1 \partial_2 - x_2 \partial_1 = \frac{\partial}{\partial \phi} = \frac{i}{\hbar} \hat{L}_z$$

$$\Rightarrow \hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}$$

in Kugelkoordinaten !

$$\Rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \Psi_{lm}(r, \theta, \phi) = \hbar m \Psi_{lm}(r, \theta, \phi) \text{ Eigenwertgleichung für } \hat{L}_z.$$

Lösung

$$\Psi_{lm}(r, \theta, \phi) = e^{im\phi} f_{lm}(r, \theta)$$

$$m = -l, \dots, l$$

Eindeutigkeit:

$$e^{im\phi} = e^{im(\phi+2\pi)}$$

$$\Rightarrow m \in \mathbb{Z}$$

\Rightarrow Für Bahndrehimpulse sind nur GANZZAHLIGE l-WERTE zulässig.

Prosaisch: Die Wellenfunktion muss eindeutig sein. Durch Drehung um 360° muss sie also in sich selbst

übergehen. Damit fällt jedoch wegen $\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}$ die Möglichkeit weg, dass magnetische

Drehimpulsquantenzahlen halbzahlige sind, sonst würde die Wellenfunktion bei Drehung um 360° ihr

Vorzeichen wechseln wegen $e^{i\frac{1}{2}\phi} = -e^{i\frac{1}{2}(\phi+2\pi)} = e^{i\pi} e^{i\frac{1}{2}\phi}$ Widerspruch zur Eindeutigkeit !!!

$$e^{im\phi} = e^{im(\phi+2\pi)}$$

$$\Rightarrow m \in \mathbb{Z}$$

Leiteroperatoren:

$$\langle \bar{r} | \hat{L}_{\pm} | l, m \rangle = \frac{\hbar}{i} (\hat{x}_2 \partial_3 - \hat{x}_3 \partial_2 \pm i \hat{x}_3 \partial_1 \mp i \hat{x}_1 \partial_3) \Psi_{lm}(\bar{r}) = \hbar e^{\pm i j} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \mathbf{J}} + i \cot \mathbf{J} \frac{\partial}{\partial \mathbf{j}} \right) \Psi_{lm}(r, \mathbf{J}, \mathbf{j})$$

$$\hbar e^{\pm i j} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \mathbf{J}} + i \cot \mathbf{J} \frac{\partial}{\partial \mathbf{j}} \right) \Psi_{lm}(r, \mathbf{J}, \mathbf{j}) = \hbar e^{i(m \pm 1)j} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \mathbf{J}} - m \cot \mathbf{J} \right) f_{lm}(r, \mathbf{J})$$

Für $m=l$ (Maximalwert) ist

$$\hat{L}_+ |l, l\rangle = 0$$

$$\Rightarrow \hbar e^{i(l+1)j} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{J}} - l \cot \mathbf{J} \right) f_{ll}(r, \mathbf{J}) = 0$$

Lösung:

$$\int \frac{df_{ll}(r, \mathbf{J})}{f} = l \int \cot \mathbf{J} d\mathbf{J}$$

$$f_{ll}(r, \mathbf{J}) = (-1)^l \sqrt{\frac{(2l+1)!}{2}} \frac{1}{2^l l!} (\sin \mathbf{J})^l R_{ll}(r)$$

Mit dem Normierungsfaktor

$$\sqrt{\frac{(2l+1)!}{2}} \frac{1}{2^l l!}$$

Erzeugung der anderen $f_{lm}(r, \mathbf{J})$:

$$\Psi_{l, l-1}(\bar{r}) \propto \langle \bar{r} | \hat{L}_- | ll \rangle = \hbar e^{i(l-1)j} \left(-\frac{\partial}{\partial \mathbf{J}} - l \cot \mathbf{J} \right) f_{ll}(r, \mathbf{J}) = \hbar e^{i(l-1)j} (\sin \mathbf{J})^{1-l} \frac{\partial}{\partial \cos \mathbf{J}} [(\sin \mathbf{J})^l f_{ll}(r, \mathbf{J})]$$

Normierung:

$$\Psi_{l, m}(r, \mathbf{J}, \mathbf{j}) = R_{lm}(r) Y_l^m(\mathbf{J}, \mathbf{j})$$

Mit den Kugelflächenfunktionen

$$Y_l^m(\mathbf{J}, \mathbf{j}) = \frac{e^{imj}}{\sqrt{2p}} \cdot \frac{(-1)^m}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!}} \frac{1}{(\sin \mathbf{J})^m} \frac{d^{l-m}}{d(\cos \mathbf{J})^{l-m}} (\sin \mathbf{J})^{2l}$$

$$Y_l^m(\mathbf{J}, \mathbf{j}) = \frac{e^{imj}}{\sqrt{2p}} \cdot (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!}} P_l^m(\cos \mathbf{J})$$

Wobei

$$P_l(x) := \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{(dx)^l} (x^2 - 1)^l \text{ Legendre- Polynom l- ten Grades}$$

$$P_l^m(x) := (1 - x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{(dx)^m} P_l(x) \text{ zugeordnetes Legendre- Polynom}$$

Dabei variiert die Definition in der Literatur je nach Wahl der Phase

Die Kugelflächenfunktionen sind orthonormiert

$$\int_0^{2\pi} d\mathbf{j} \int_0^{\pi} d\mathbf{J} \sin \mathbf{J} [Y_l^m(\mathbf{J}, \mathbf{j})]^* Y_l^{m'}(\mathbf{J}, \mathbf{j}) = \mathbf{d}_{ll'} \mathbf{d}_{mm'}$$

Dies bedeutet:

$$\int_0^{2\pi} d\mathbf{j} \int_0^{\pi} d\mathbf{J} \sin \mathbf{J} [Y_l^m(\mathbf{J}, \mathbf{j})]^* Y_l^m(\mathbf{J}, \mathbf{j}) = 1$$

oder in einer diskreten Basis:

$$\sum_{l,m} (Y_l^m)^* Y_l^m = 1 \rightarrow \text{was an bekannte Vollständigkeitsbedingungen erinnert !}$$

Die Kugelflächenfunktionen sind also ein vollständiges Orthonormalsystem, nach dem sich alle Funktionen auf der Einheitskugel entwickeln lassen:

$$F(\mathbf{J}, \mathbf{j}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l c_l^m Y_l^m(\mathbf{J}, \mathbf{j})$$

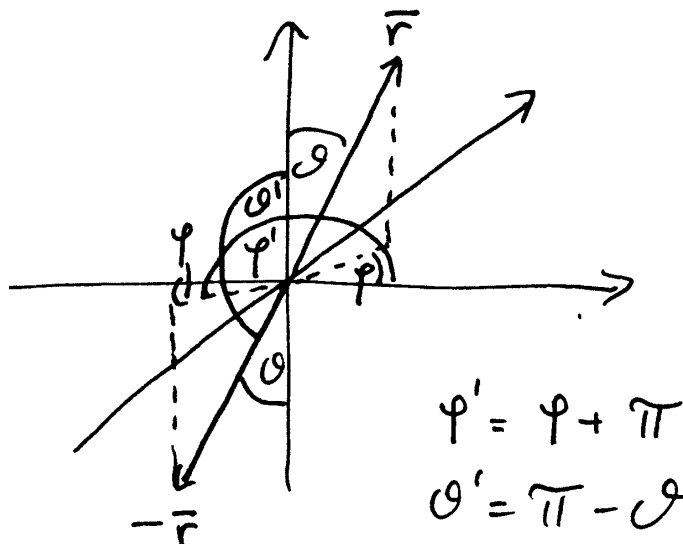
Eine weitere Eigenschaft der Kugelflächenfunktionen:

$$Y_l^{m*}(\mathbf{J}, \mathbf{j}) = (-1)^m Y_l^{-m}$$

Die Inversion am Ursprung liefert: (also: $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$), also $(\mathbf{J}, \mathbf{j}) \rightarrow (\mathbf{p} - \mathbf{J}, \mathbf{j} + \mathbf{p})$:

$$Y_l^m(\mathbf{p} - \mathbf{J}, \mathbf{j} + \mathbf{p}) = (-1)^l Y_l^m(\mathbf{J}, \mathbf{j})$$

Fazit: Die Bahndrehimpuls Eigenzustände $|l, m\rangle$ haben die Parität $(-1)^l$ (steckt ebenfalls in den Eigenschaften der Kugelfunktionen, Legendre Polynome, wie auch immer, die sich eben als Eigenvektoren unseres Drehimpulsproblems ergeben haben !)



Eigenfunktion	Knotenlinien von $\text{Re}\{Y_l^m\}$	l	m	Bemerkungen/ Parität
$Y_0^0 = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$	0	0	0	gerade (s-Orbitale)
$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta$	1	1	0	ungerade (p-Orbitale)
$Y_1^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{\pm i\phi}$	1	1	± 1	ungerade (ebenfalls p-Orb.) $\Psi_{p_x} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin\theta \cos\phi$ $\Psi_{p_y} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin\theta \sin\phi$
$Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3\cos^2\theta - 1)$	2	2	0	gerade (d-Orbitale)
$Y_2^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin\theta \cos\theta e^{\pm i\phi}$	2	2	± 1	gerade (d-Orbitale)
$Y_2^{\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2\theta e^{\pm 2i\phi}$	2	2	± 2	gerade (d-Orbitale)

Keine Knotenlinie

$$Y_0^0 = \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \quad n=1 \rightarrow m=0, l=0$$



Eine Knotenlinie

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta \quad n=2, l=1, m=0$$



Merke: Wir haben prinzipiell immer den gleichen Gesamtdrehimpuls in diesen Zuständen ! Nur einmal ist eben die z- Komponente Null (wie hier) und einmal nicht (dafür wäre z.B. die x- Komponente des Drehimpuls im

folgenden Beispiel $Y_1^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{\pm i\phi}$ NULL !)

$$Y_1^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{\pm i\phi} \quad n=2, l=1, m=\pm 1$$



Zwei Knotenlinien

$$Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3\cos^2\theta - 1) \quad n=3, l=2, m=0$$



$$Y_2^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{8p}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi}$$

$$n=3, l=2, m=\pm 1$$

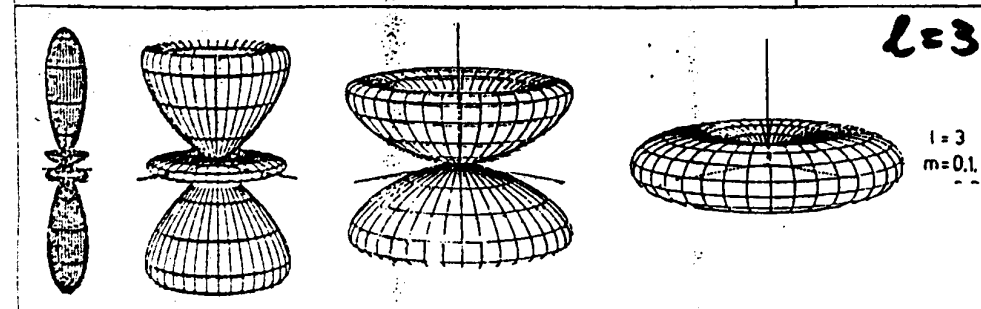
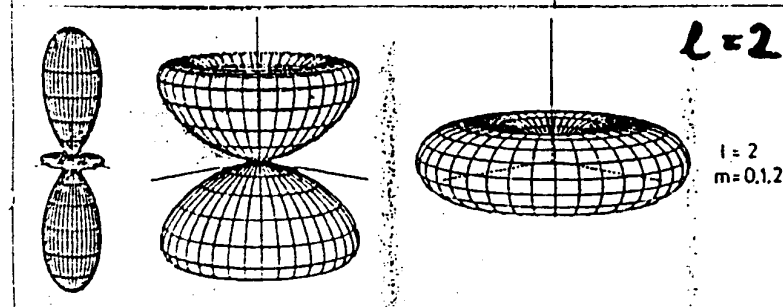
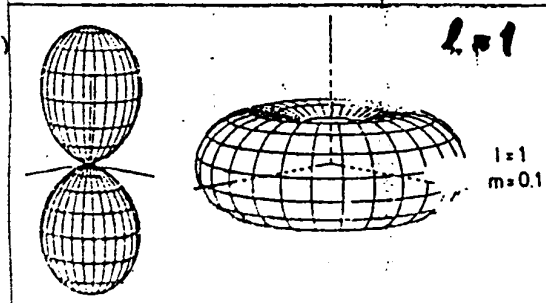
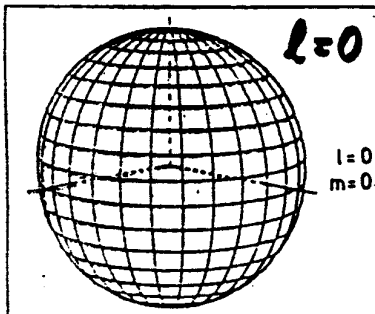
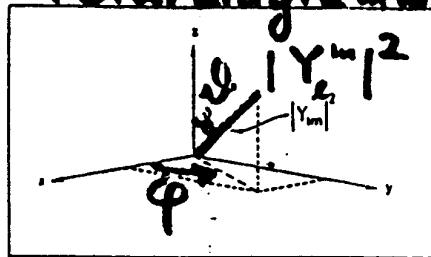


$$Y_2^{\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32p}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi}$$

$$n=3, l=2, m=\pm 2$$



Polardiagramm:



3.3 Kugelsymmetrische Potenziale

$$\begin{aligned} [\hat{L}_3, \hat{r}_1] &= [(\hat{r}_1 \hat{p}_2 - \hat{r}_2 \hat{p}_1), \hat{r}_1] = -\hat{r}_2 [\hat{p}_1, \hat{r}_1] = i\hbar \hat{r}_2 \\ [\hat{L}_3, \hat{r}_2] &= [(\hat{r}_1 \hat{p}_2 - \hat{r}_2 \hat{p}_1), \hat{r}_2] = \hat{r}_1 [\hat{p}_2, \hat{r}_2] = -i\hbar \hat{r}_1 \\ [\hat{L}_3, \hat{r}_3] &= [(\hat{r}_1 \hat{p}_2 - \hat{r}_2 \hat{p}_1), \hat{r}_3] = 0 \end{aligned}$$

Allgemein:

$$\begin{aligned} [\hat{L}_j, \hat{r}_k] &= i\hbar \hat{r}_l \\ [\hat{L}_j, \hat{r}_k] &= i\hbar \mathbf{e}_{jkl} \hat{r}_l \quad \text{mit j,k,l zyklisch} \end{aligned}$$

Analog:

$$[\hat{L}_j, \hat{p}_k] = i\hbar \mathbf{e}_{jkl} \hat{p}_l$$

$$\begin{aligned} [\hat{L}_3, \hat{r}_1^2] &= [\hat{L}_3, \hat{r}_1] \hat{r}_1 + \hat{r}_1 [\hat{L}_3, \hat{r}_1] = i\hbar \hat{r}_2 \hat{r}_1 + \hat{r}_1 i\hbar \hat{r}_2 = 2i\hbar \hat{r}_2 \hat{r}_1 \\ [\hat{L}_3, \hat{r}_2^2] &= [\hat{L}_3, \hat{r}_2] \hat{r}_2 + \hat{r}_2 [\hat{L}_3, \hat{r}_2] = -i\hbar \hat{r}_1 \hat{r}_2 - \hat{r}_2 i\hbar \hat{r}_1 = -2i\hbar \hat{r}_1 \hat{r}_2 \\ [\hat{L}_3, \hat{r}_3^2] &= [\hat{L}_3, \hat{r}_3] \hat{r}_3 + \hat{r}_3 [\hat{L}_3, \hat{r}_3] = 0 \end{aligned}$$

Damit folgt jedoch für die gesamten Vektoren:

$$[\hat{L}_j, \hat{r}^2] = [\hat{L}_j, \hat{p}^2] = 0 \quad j=1,2,3$$

$$[\hat{L}_j, H] = 0, \text{ falls } H = \hat{H}(\hat{r}^2, \hat{p}^2)$$

Also

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r) \text{ mit Zentralpotenzial } V(r)$$

Theorem

Für alle rotationssymmetrischen Hamiltonoperatoren gilt:

$$[\hat{L}_j, H] = 0$$

$$[\hat{L}^2, H] = 0$$

Und der Drehimpuls ist eine Erhaltungsgröße, also

$$\dot{\vec{L}} = 0$$

Analogie in der KLASSISCHEN Mechanik:

Im Zentralpotenzial ist der Drehimpuls eine Erhaltungsgröße

Tieferer Grund: \vec{L} ist die Erzeugende infinitesimaler Drehungen

$$\text{Wegen } [\hat{L}^2, H] = \hat{L}[\hat{L}, H] + [\hat{L}, H]\hat{L} \Rightarrow [\hat{L}^2, H] = 0 \Rightarrow [\hat{L}_j, H] = 0$$

Sei $V(r)$ im Folgenden kugelsymmetrisch.

Dann gibt es gemeinsame Eigenzustände von H und \hat{L}_j für jedes j aber nicht zu H und \vec{L} .

(H läßt sich als L^2 darstellen (siehe im Folgenden!) und mit L^2 vertauscht immer nur eine Komponente, die anderen nicht, da ja die Komponenten des Drehimpulses untereinander nicht vertauschen!)

Wegen

$$\begin{aligned} [\hat{L}_3, H] &= 0 \\ [\hat{L}^2, H] &= 0 \\ [\hat{L}^2, \hat{L}_3] &= 0 \end{aligned}$$

können wir gemeinsame Eigenzustände zu H , \hat{L}^2 und \hat{L}_3 finden.

Zusammenhang zwischen \hat{L}^2 und $H = \frac{p^2}{2m} + V$

$$\hat{L}^2 = \mathbf{e}_{jkl} \mathbf{e}_{jmn} x_k p_l x_m p_n$$

$$\mathbf{e}_{jkl} \mathbf{e}_{jmn} = \mathbf{d}_{km} \mathbf{d}_{ln} - \mathbf{d}_{kn} \mathbf{d}_{lm}$$

$$\hat{L}^2 = \mathbf{e}_{jkl} \mathbf{e}_{jmn} x_k p_l x_m p_n = (\mathbf{d}_{km} \mathbf{d}_{ln} - \mathbf{d}_{kn} \mathbf{d}_{lm}) x_k p_l x_m p_n$$

Summationskonvention !!

Es folgt:

$$\hat{L}^2 = \mathbf{e}_{jkl} \mathbf{e}_{jmn} x_k p_l x_m p_n = (\mathbf{d}_{km} \mathbf{d}_{ln} - \mathbf{d}_{kn} \mathbf{d}_{lm}) x_k p_l x_m p_n =$$

$$= x_m p_n x_m p_n - x_n p_m x_m p_n$$

$$p_n x_m = x_m p_n - i\hbar \mathbf{d}_{mn}$$

$$x_n p_m = p_m x_n + i\hbar \mathbf{d}_{mn}$$

$$\Rightarrow \hat{L}^2 = x_m x_m p_n p_n - p_m x_n x_m p_n - 2i\hbar x_m p_m$$

$$p_m x_n x_m p_n = p_m x_m x_n p_n$$

$$p_m x_m = x_m p_m - i\hbar \mathbf{d}_{mm}$$

$$\mathbf{d}_{mm} = 3$$

$$\Rightarrow \hat{L}^2 = x_m x_m p_n p_n - p_m x_n x_m p_n - 2i\hbar x_m p_m = x_m^2 p_n^2 - x_m p_m x_n p_n + 3i\hbar x_n p_n - 2i\hbar x_m p_m$$

$$\Rightarrow \hat{L}^2 = x_m^2 p_n^2 - (x_m p_m)(x_n p_n) + i\hbar x_m p_m$$

$$\hat{L}^2 = r^2 p^2 - (\vec{r} \cdot \vec{p})^2 + i\hbar(\vec{r} \cdot \vec{p})$$

Somit:

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{1}{2mr^2} \left[(\hat{\vec{r}} \cdot \hat{\vec{p}})^2 - i\hbar(\hat{\vec{r}} \cdot \hat{\vec{p}}) + \hat{L}^2 \right]$$

Klassisch:

$$\frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2mr^2} \left[(\vec{r} \cdot \vec{p})^2 + L^2 \right]$$

$$\text{mit } (\vec{r} \cdot \vec{p}) = rp_r$$

Ortsdarstellung in Kugelkoordinaten

$$x_1 = r \sin \theta \cos \phi$$

$$x_2 = r \sin \theta \sin \phi$$

$$x_3 = r \cos \theta$$

Die Differenziale transformieren sich dabei folgendermaßen:

$$\frac{\partial}{\partial r} = \frac{\partial x_j}{\partial r} \frac{\partial}{\partial x_j} = \frac{x_j}{r} \frac{\partial}{\partial x_j} \quad \text{Wobei der letzte Zusammenhang natürlich nur für die obigen Vektorkomponenten gilt}$$

!

Somit:

$$\vec{r} \cdot \vec{p} = \frac{\hbar}{i} x_j \frac{\partial}{\partial x_j} = \frac{\hbar}{i} r \frac{\partial}{\partial r} \quad \text{wegen} \quad \frac{\partial}{\partial r} = \frac{x_j}{r} \frac{\partial}{\partial x_j}$$

$$\hat{p} = -i\hbar \nabla$$

$$\hat{p}_r = -i\hbar \frac{\partial}{\partial r}$$

$$\hat{r} \hat{p} = \hat{p} \hat{r} = \frac{\hbar}{i} r \frac{\partial}{\partial r}$$

$$\hat{L}_z = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \phi}$$

Operator der kinetischen Energie:

$$\begin{aligned} (\vec{r} \cdot \vec{p}) \left[(\vec{r} \cdot \vec{p}) + \frac{\hbar}{i} \right] \Psi(r, \theta, \phi) &= -\hbar^2 r \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} + 1 \right) \Psi(r, \theta, \phi) \\ &= -\hbar^2 r \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) + \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right] = -\hbar^2 r \left[\left(r \frac{\partial^2 \Psi}{\partial r^2} \right) + 2 \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right] = -\hbar^2 r \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r \Psi) \end{aligned}$$

Alternativ:

$$(\vec{r} \cdot \vec{p}) \left[(\vec{r} \cdot \vec{p}) + \frac{\hbar}{i} \right] \Psi(r, \theta, \phi) = -\hbar^2 \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right)$$

Also: (Im quantenmechanischen Fall sei $\vec{r} = \hat{r}$, $\vec{p} = \hat{p}$)

$$\frac{p^2}{2m} \Psi(r, \theta, \phi) = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r \Psi) + \frac{L^2}{2mr^2} \Psi$$

einen einfachen Ausdruck hätte man auch erhalten, indem man einfach Laplace, also $\frac{p^2}{2m} = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta$ in

Kugelkoordinaten schreibt

Es gilt für den Operator der kinetischen Energie

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta$$

Laplaceoperator in Kugelkoordinaten:

$$\Delta\Psi = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \Psi \right) + \frac{1}{r^2 \sin J} \frac{\partial}{\partial J} \left(\sin J \frac{\partial}{\partial J} \Psi \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 J} \frac{\partial^2}{\partial j^2} \Psi$$

Schrödingergleichung für $\Psi(r, \mathbf{J}, \mathbf{j})$:

$$H\Psi(r, \mathbf{J}, \mathbf{j}) = \frac{p^2}{2m} \Psi(r, \mathbf{J}, \mathbf{j}) + V(r) \Psi(r, \mathbf{J}, \mathbf{j}) = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r\Psi) + \left[\frac{L^2}{2mr^2} + V(r) \right] \Psi = E\Psi(r, \mathbf{J}, \mathbf{j})$$

In Analogie zur klassischen Hamiltonfunktion identifiziert man

$$\hat{p}_r = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \text{ als Radialimpuls- Operator}$$

mit der Vertauschungsrelation:

$$[\hat{p}_r, \hat{r}] = \frac{\hbar}{i}$$

Es gilt:

$$\frac{p^2}{2m} = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2} \quad \text{Nachrechnen !}$$

Ortsdarstellung von L^2 :

$$L^2\Psi(r, \mathbf{J}, \mathbf{j}) = -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin J} \frac{\partial}{\partial J} \left(\sin J \frac{\partial \Psi(r, \mathbf{J}, \mathbf{j})}{\partial J} \right) + \frac{1}{\sin^2 J} \frac{\partial^2 \Psi(r, \mathbf{J}, \mathbf{j})}{\partial j^2} \right\}$$

Nebenbemerkung:

H erhält man auch direkt durch die Transformation von

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta\Psi + V\Psi = E\Psi \quad \text{auf Kugelkoordinaten (Laplace- Operator in Kugelkoordinaten ausdrücken !)}$$

Lösung der Schrödingergleichung durch Separationsansatz:

$$\Psi(r, \mathbf{J}, \mathbf{j}) = R(r)Y(\mathbf{J}, \mathbf{j})$$

mit

$$L^2Y(\mathbf{J}, \mathbf{j}) = \hbar^2 l(l+1)Y(\mathbf{J}, \mathbf{j})$$

Also:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (rR) + \frac{R}{2mr^2} (L^2Y) + Y(V(r) - E)R = 0$$

$$L^2Y = \hbar^2 l(l+1)Y$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (rR) + \frac{R}{2mr^2} (\hbar^2 l(l+1)Y) + Y(V(r) - E)R = 0$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} (rR) + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) - E \right) (rR) = 0$$

(Laguerre Differenzialgleichung !)

Dabei wird $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$ analog zur klassischen Mechanik als Zentrifugalpotenzial bezeichnet

Im Endeffekt können wir von einer radialen Schrödingergleichung mit einem effektiven Potenzial sprechen:

$$V_{eff.} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r)$$

Merke als Kurzform für Differenziale:

$$d^2(rR) = d(R + r dR) = 2dR + r d^2 R$$

für ein Differenzial entlang der Radiusvariable !

Bindungszustände im anziehenden Zentralpotenzial:

$$\text{Sei } \lim_{r \rightarrow 0} |V(r)| \leq \frac{M}{r^a} \text{ mit } a < 2$$

Also: dominiere das Zentrifugalpotenzial gegenüber V für $r \rightarrow 0$,
so gilt:

Es existieren für ein anziehendes Potenzial $V(r)$, also negatives Potenzial wie im 1dimensionalen Fall grundsätzlich endlich oder unendlich viele gebundene Zustände. Dabei sind es unendlich viele für $a < 2$, ansonsten nur endlich viele (Potenzialtopf !). Bei Kugelsymmetrie des Potenzialtopfs existiert immer mindestens EIN gebundener Zustand !

Dabei existiert eine Serie E_{nl} $n=0,1,2,3,\dots$ usw... zu jedem $l < n$

Jeder Zustand ist dabei bezüglich m ($m=-l,\dots,+l$) $2l+1$ fach entartet.

Also: es existieren endlich oder unendlich viele E_{nl} zu jedem l mit jeweils $2l+1$ facher Entartung.

Voraussetzung: Am Ursprung muss die Zentrifugalbarriere dominieren !

Zusammenfassung Kugelsymmetrische Potenziale:

Jeweils vertauschbar sind:

$$L^2 \text{ mit } L_j, H$$

und

$$H \text{ mit } L^2, L_j.$$

Also existieren gemeinsame Eigenzustände zu H, L^2, L_3 . Es ist möglich, einen Operator, z.B. den Hamiltonian durch diese Größen auszudrücken

ALSO: Schreibe die vertauschenden Operatoren auf !

Wir haben jedoch gesehen, dass

$$[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i\hbar \epsilon_{jkl} \hat{L}_l \Leftrightarrow \hat{L} \times \hat{L} = i\hbar \hat{L}$$

ALSO: Schreibe die Quantisierungsbedingungen (Kommutatoren) auf !

Wir haben als Leiteroperatoren:

$$\begin{aligned} \hat{L}_+ &:= \hat{L}_1 + i\hat{L}_2 \\ \hat{L}_- &:= \hat{L}_1 - i\hat{L}_2 \end{aligned} \quad \text{nicht hermitesch}$$

mit $\hat{L}_{\pm}|l, m\rangle \sim |l, m \pm 1\rangle$ nicht hermitesch. Es handelt sich also um Leiteroperatoren für die magnetische Quantenzahl.

$$\Rightarrow \hat{L}^2|l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1)|l, m\rangle$$

$$\hat{L}_3|l, m\rangle = \hbar m|l, m\rangle$$

$$\Rightarrow l = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots$$

$$m = -l, -l+1, \dots, l$$

ALSO: Suche einen vollständigen Satz vertauschbarer Operatoren !

Durch die Untersuchung der Wirkung von Produkten von Operatoren kann dann das Eigenwertproblem eingegrenzt oder sogar gelöst werden.

Der Bahndrehimpulsoperator kann zusammengesetzt werden:

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}$$

Das Spektrum ist einzuschränken:

$$\Rightarrow l = 0, 1, 2, \dots$$

$$m = -l, -l+1, \dots, l$$

Schließlich kann eine Wellenfunktion in der Ortsdarstellung angegeben werden:

$$\langle \hat{\vec{r}} | nlm \rangle = \Psi_{nlm} = \Psi(r, \mathbf{J}, \mathbf{j}) = R_{nl}(r) Y_l^m(\mathbf{J}, \mathbf{j})$$

als Separationsansatz.

Direkt aus der Existenz gemeinsamer Eigenzustände zu H, L^2, L_3 kann man den Hamiltonian zusammenstellen:

$$\begin{aligned} H\Psi &= \left(\frac{p^2}{2m} + V(r) \right) \Psi = \left(\frac{(\vec{r} \cdot \vec{p}) \left[(\vec{r} \cdot \vec{p}) + \frac{\hbar}{i} \right]}{2mr^2} + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r) \right) \Psi \\ &= H\Psi = \frac{1}{2m} \left[-\frac{\hbar^2}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r\Psi) \right] + \frac{L^2}{2mr^2} \Psi + V(r) \Psi \\ &\quad - \frac{\hbar^2}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r\Psi) = p_r^2 \end{aligned}$$

Dabei:

$$p_r^2 \neq \frac{(\vec{r} \cdot \vec{p})^2}{r^2} \quad (\text{klassisch})$$

Es ergibt sich die Schrödingergleichung:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} (rR) + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) - E \right) (rR) = 0$$

als radiale Schrödingergleichung mit dem Zentrifugalpotenzial $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$

und dem effektiven Potenzial $V_{eff.}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$

Der Separationsansatz liefert den Zustand als Produkt:

$$\langle \hat{r} | nlm \rangle = \Psi_{nlm}(\vec{r}) = \Psi(r, \mathbf{J}, \mathbf{j}) = R_{nl}(r) Y_l^m(\mathbf{J}, \mathbf{j}) = \frac{u_{nl}(r)}{r} Y_l^m(\mathbf{J}, \mathbf{j})$$

$$R_{nl}(r) = \frac{u_{nl}(r)}{r}$$

Aus der Normierbarkeit

$$\int d^3r |\Psi_{nlm}|^2 = \int d\Omega |Y_l^m(\mathbf{J}, \mathbf{j})|^2 \int_0^\infty r^2 \left| \frac{u_{nl}(r)}{r} \right|^2 = \int d\Omega |Y_l^m(\mathbf{J}, \mathbf{j})|^2 \int_0^\infty |u_{nl}(r)|^2 < \infty$$

folgt:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} |u_{nl}(r)| \leq \frac{a}{r^e}$$

$$\text{mit } e > \frac{1}{2}$$

Asymptotisches Verhalten für $r \rightarrow \infty$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} u = Eu$$

$$\Rightarrow u \sim e^{-kr}$$

$$k := \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(-E)}$$

Verhalten für $r \rightarrow 0$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] u = 0$$

Ansatz: $u(r) \sim r^s$:

$$-s(s-1) + l(l+1) = 0$$

$$\Rightarrow s_1 = l+1; s_2 = -l$$

Jedoch ist $s_2 = -l$ nicht zulässig, da $R(r) \sim r^{-l-1}$ singulär an der Stelle $r=0$

Es ist notwendig, dass $\lim_{r \rightarrow 0} u(r) = 0$

Nebenbemerkung:

Für $l=0$ ist die radiale Schrödingergleichung

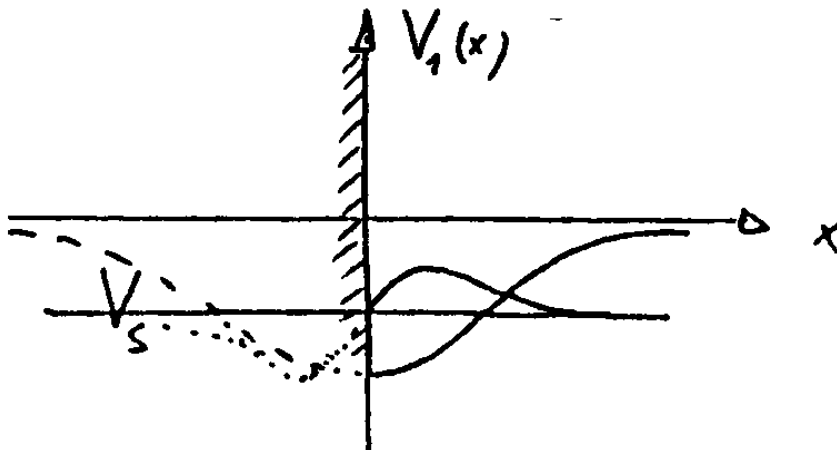
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} u + (V(r) - E)u = 0 \text{ mit } u(0) = 0 \text{ äquivalent zur eindimensionalen Schrödingergleichung mit}$$

$$V_1(x) = V(x) \text{ für } x > 0$$

$$V_1(x) = \infty \text{ für } x \leq 0$$

Vergleiche: Harmonischer Oszi !

Symmetrische Fortsetzung des Potenzials V_s :



Nur die antisymmetrischen Eigenzustände von V_s sind auch Eigenzustände von V_1

Fazit: Der Grundzustand von V_1 entspricht dem ersten angeregten Zustand von V_s (radialsymmetrisches Potenzial der Schrödingergleichung).

Es gilt: Das eindimensionale symmetrische Potenzial besitzt mindestens einen Bindungszustand !
Dreidimensionale Potenziale besitzen dagegen nicht immer Bindungszustände.

Einwurf : Symmetrien/ Invarianzen und Erhaltungssätze (KEIN STOFF DER QUANTENMECHANIK !! auf den folgenden 17 Seiten !)

Bereits a priori erscheint es einleuchtend, dass eine Vertauschbarkeit verschiedener Variablen eine Symmetrie bedeutet. In gewisser Hinsicht ist es unerheblich, ob man erst die Energie und dann den Drehimpuls misst, da beide miteinander vertauschen.

Umgekehrt wissen wir aus der von- Neumann- Bewegungsgleichung (Heisenberg- Bewegungsgleichung), dass ein verschwindender Kommutator immer einen Erhaltungssatz bedingt. Somit kann eine Analogie gefunden werden zwischen der Von Neumann- Bewegungsgleichung und dem Noether- Theorem.

Erinnern wir uns an die klassische Mechanik:

Die kanonischen Gleichungen lauten:

$$\dot{P}_k = -\frac{\partial H}{\partial Q_k} \equiv 0 \Rightarrow P_k = \mathbf{a}_k = \text{const}$$

$$\dot{Q}_k = \frac{\partial H}{\partial P_k} \equiv 0 \Rightarrow Q_k = \mathbf{b}_k = \text{const}$$

Für ein hamiltonsches System. Man redet bei verschwindender Ableitung von zyklischen Koordinaten. Mittels der Hamilton- Jacobi- Theorie ist es möglich, eine Transformation zu finden derart, dass alle Koordinaten zyklisch werden. Dies entspricht dann einer Transformation auf paarweise vertauschende Operatoren. Es entspricht dem Auffinden eines vollständigen Satzes vertauschbarer Operatoren.

Auf die Hamilton- Jacobi Theorie soll nun jedoch nicht näher eingegangen werden. Erinnern wir uns statt dessen an das Noether- Theorem:

Kontinuierliche Symmetrien und Erhaltungssätze

Betrachte kontinuierliche Transformationen, unter denen das physikalische System invariant ist. In diesem Fall gibt es zu jeder kontinuierlichen Invarianz gegen infinitesimale Transformationen eine Erhaltungsgröße I (Integral der Bewegung oder auch Konstante der Bewegung), das heißt, in diesem Fall gilt:

$$\frac{dI}{dt} = 0 \text{ entlang der Bahn der angenommenen Bewegung (längs der Bahn).}$$

Dies ist die allgemeine Aussage des Theorems von Emmy Noether

Das Noether- Theorem ist im Lagrangeformalismus formuliert. Zu diesem müssen wir zurück. Durch die Legendre- Transformation kann man jedoch leicht zum Hamiltonformalismus wechseln.

Das Noether Theorem

Voraussetzung: **Autonomes**, das heißt, nicht explizit zeitabhängiges System mit f Freiheitsgraden und einer Lagrangefunktion

$$L(q_1, \dots, \dot{q}_1, \dots, t)$$

Theorem (E.Noether, 1882-1935)

Die Lagrangefunktion $L(q_1, \dots, \dot{q}_1, \dots, t)$ eines autonomen Systems sei unter der Transformation $\bar{q} \rightarrow h^s(\bar{q})$ invariant. Dabei ist s ein eindimensionaler Parameter und $h^{s=0}(\bar{q}) = \bar{q}$ die Identität.

Dann gibt es ein Integral der Bewegung

$$I(\bar{q}, \dot{\bar{q}}) = \sum_{i=1}^f \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \left(\frac{d}{ds} h^s(q_i) \right)_{s=0}$$

Beweis:

Sei $\bar{q} = \bar{q}(t)$ eine Lösung der Lagrange Gleichung. Dann ist auch $\bar{q}(s, t) := h^s(\bar{q}, t)$ Lösung, das heißt:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L(\bar{q}(s, t), \dot{\bar{q}}(s, t))}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial L(\bar{q}(s, t), \dot{\bar{q}}(s, t))}{\partial q_i}$$

Invarianz der Lagrangefunktion für beliebige s:

$$\begin{aligned} \frac{d}{ds} L(\bar{q}(s, t), \dot{\bar{q}}(s, t)) &= \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} \left(\frac{dq_i}{ds} \right) + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \left(\frac{d\dot{q}_i}{ds} \right) \right) = 0 \\ \Rightarrow \frac{d}{dt} I(\bar{q}, \dot{\bar{q}}) &= \sum_{i=1}^f \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \left(\frac{d}{ds} h^s(q_i) \right)_{s=0} \right) = \sum_{i=1}^f \left(\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \left(\frac{dq_i}{ds} \right) + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \frac{d}{dt} \left(\frac{dq_i}{ds} \right) \right) \end{aligned}$$

Mit

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} &= \frac{\partial L}{\partial q_i} \\ \frac{d}{dt} \left(\frac{dq_i}{ds} \right) &= \left(\frac{d\dot{q}_i}{ds} \right) \end{aligned}$$

und mit Hilfe von

$$\frac{d}{ds} L(\bar{q}(s,t), \dot{\bar{q}}(s,t)) = \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} \left(\frac{dq_i}{ds} \right) + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \left(\frac{d\dot{q}_i}{ds} \right) \right) = 0$$

folgt dann:

$$\frac{d}{dt} I(\bar{q}, \dot{\bar{q}}) = \frac{d}{ds} L = 0$$

Räumliche Translationsinvarianz

Seien die Kräfte konservativ und seien keine Randbedingungen:

$$L = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i \dot{\bar{r}}_i^2 - V(\bar{r}_1, \dots, \bar{r}_N)$$

Eine Translation in Richtung x ist damit eine Translation der Form:

$$h^s : \bar{r}_i \rightarrow \bar{r}_i + s \bar{e}_x \quad i = 1, \dots, N$$

Der Parameter s ist dabei beliebig.

Die Translationsinvarianz entlang der x -Achse bewirkt nun:

$$L(h^s(\bar{r}_i), \dot{\bar{r}}_i) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i \dot{\bar{r}}_i^2 - V(\bar{r}_1 + s \bar{e}_x, \dots, \bar{r}_N + s \bar{e}_x) = L(\bar{r}_i, \dot{\bar{r}}_i) \text{ Forderung!}$$

$$\frac{dL}{ds} = - \sum_{i=1}^N (\nabla_{\bar{r}_i} \cdot \bar{e}_x) V = - \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial x_i} V = 0 \text{ Forderung!}$$

Das bedeutet aber: es darf keine äußere Kraft in x -Richtung geben !

Für die Transformation gilt:

$$h^s(\bar{r}_i) = \bar{r}_i + s \bar{e}_x \quad i = 1, \dots, N$$

$$h^{s=0}(\bar{r}_i) = \bar{r}_i \text{ (Identität)}$$

$$\frac{d}{ds} h^s(\bar{r}_i) = \bar{e}_x$$

Für unser Integral der Bewegung gilt jedoch:

$$I = \sum_{i=1}^N \nabla_{\bar{r}_i} L \frac{dh^s}{ds} = \sum_i m_i \dot{\bar{r}}_i \cdot \bar{e}_x = \sum_i m_i \dot{x}_i = P_x$$

Fazit: die Translationsinvarianz in x -Richtung bestimmt die Erhaltung der x -Komponente des Gesamtimpulses. Dieser Zusammenhang ist leicht für die anderen Komponenten zu zeigen.

Dies kann auch umgekehrt betrachtet werden:

Wähle $q_1 = s$ als verallgemeinerte Koordinate:

Nun gilt die Transformation:

$$\bar{r}_i = \bar{r}_i(q_1, \dots, q_f, t) = q_1 \bar{e}_x + \Delta \bar{r}_i(q_1, \dots, q_f, t)$$

mit

$q_1 \bar{e}_x$ als Schwerpunktskoordinate und

$\Delta \bar{r}_i(q_1, \dots, q_f, t)$ als Relativpositionen.

Es folgt:

$$\frac{\partial}{\partial q_1} \bar{r}_i = \bar{e}_x$$

$$\frac{\partial}{\partial \dot{q}_1} \dot{\bar{r}}_i = \frac{\partial}{\partial q_1} \bar{r}_i = \bar{e}_x \text{ wegen } \dot{\bar{r}}_i = \sum_k \frac{\partial}{\partial q_k} \bar{r}_i \dot{q}_k + \frac{\partial}{\partial t} \bar{r}_i$$

Invarianz

Erhaltungssatz

$$\frac{\partial L}{\partial q_1} = 0 \Leftrightarrow \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_1} = 0 \text{ äquivalent zum Erhaltungssatz } \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_1} = \text{const}$$

Allgemein heißt $\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} = p_j$ der zur Koordinate q_j konjugierte verallgemeinerte Impuls.

Falls gilt dass $\frac{\partial L}{\partial q_1} = 0 \Leftrightarrow \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_1} = 0$, wenn also die Lagrangefunktion invariant gegen q_1 -Änderungen

ist, dann nennt man q_1 eine **zyklische** Koordinate. der zu q_1 konjugierte Impuls ist in diesem Fall eine **Erhaltungsgröße**.

Hier:

$$p_1 = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_1} = \frac{\partial}{\partial \dot{q}_1} (T - V) = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_1} = \frac{\partial}{\partial \dot{q}_1} \left(\sum_i \frac{1}{2} m_i \dot{\bar{r}}_i^2 \right) = \sum_i m_i \dot{\bar{r}}_i \frac{\partial}{\partial \dot{q}_1} \dot{\bar{r}}_i$$

$$\text{mit } \frac{\partial}{\partial \dot{q}_1} \dot{\bar{r}}_i = \bar{e}_x$$

$$p_1 = \sum_i m_i \dot{\bar{r}}_i \bar{e}_x = P_x$$

Verallgemeinerung auf Nichtkonservative Kräfte

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_1} - \frac{\partial T}{\partial q_1} = Q_1 = \sum_i \bar{X}_i \frac{\partial}{\partial q_1} \bar{r}_i = \bar{e}_x \sum_i \bar{X}_i$$

X_i kennzeichnet dabei die Kraft. Nun steht rechts also die resultierende Kraft in x -Richtung. Existiert keine resultierende Kraft in x -Richtung (Translationsinvarianz in x -Richtung), so gilt:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_1} - \frac{\partial T}{\partial q_1} = Q_1 = \sum_i \bar{X}_i \frac{\partial}{\partial q_1} \bar{r}_i = \bar{e}_x \sum_i \bar{X}_i = 0$$

Invarianz sagt

$$\frac{\partial T}{\partial q_1} = Q_1 = 0 \Rightarrow \frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_1} = 0 \Leftrightarrow P_x = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_1} = \text{const}$$

Nebenbedingung für das fehlen konservativer Kräfte (Falls Q_1 konservative Kraft ist)

$$Q_1 = 0 \Rightarrow \frac{\partial}{\partial q_1} V(\bar{r}_1 + q_1 \bar{e}_x, \dots, \bar{r}_N + q_1 \bar{e}_x) = \sum_i \nabla_{r_i} V \frac{\partial}{\partial q_1} (q_1 \bar{e}_x) = \bar{e}_x \sum_i \nabla_{r_i} V = -\bar{e}_x \sum_i \bar{X}_i = 0$$

Beispiel: ein Teilchen im Potenzial $V=V(y,z)$

Das Potenzial hänge nicht von x ab: $\frac{\partial L}{\partial x} = 0$

Daraus folgt: $\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m \dot{x} = P_x = \text{const}$

In diesem Fall existiert ein Integral der Bewegung:

$$I(\bar{r}, \dot{\bar{r}}) = \frac{\partial L}{\partial \dot{\bar{r}}} \cdot \frac{dh^s}{ds} = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = P_x = \text{const}$$

wegen

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\bar{r}}} = \nabla_{\dot{\bar{r}}} L$$

$$\frac{dh^s}{ds} = \bar{e}_x$$

Beispiel: 2 Teilchen mit innerer Paarwechselwirkung

$V(\bar{r}_1, \bar{r}_2) = V(\bar{r}_1 - \bar{r}_2)$ Das Potenzial kann auch anisotrop sein.

Es sollen keine äußeren Kräfte wirken, so dass das Potenzial unabhängig von den Schwerpunktskoordinaten wird.

Gleichzeitig soll Translationsinvarianz entlang x-, y- und z- Richtung vorliegen:

$$L(\bar{r}_1, \bar{r}_2, \dot{\bar{r}}_1, \dot{\bar{r}}_2) = \frac{m_1}{2} \dot{\bar{r}}_1^2 + \frac{m_2}{2} \dot{\bar{r}}_2^2 - V(\bar{r}_1 - \bar{r}_2)$$

$$L(h^s(\bar{r}_1), h^s(\bar{r}_2), \dot{\bar{r}}_1, \dot{\bar{r}}_2) = \frac{m_1}{2} \dot{\bar{r}}_1^2 + \frac{m_2}{2} \dot{\bar{r}}_2^2 - V((\bar{r}_1 - s\bar{e}_i) - (\bar{r}_2 - s\bar{e}_i)) = L(\bar{r}_1, \bar{r}_2, \dot{\bar{r}}_1, \dot{\bar{r}}_2)$$

für alle $i = x, y, z$

Somit existieren gleich drei Integrale der Bewegung:

$$I_x = \frac{\partial L}{\partial \dot{\bar{r}}_1} \bar{e}_x + \frac{\partial L}{\partial \dot{\bar{r}}_2} \bar{e}_x = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_1} + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_2} = m_1 \dot{x}_1 + m_2 \dot{x}_2 = P_x = \text{const}$$

$$I_y = \frac{\partial L}{\partial \dot{\bar{r}}_1} \bar{e}_y + \frac{\partial L}{\partial \dot{\bar{r}}_2} \bar{e}_y = \frac{\partial L}{\partial \dot{y}_1} + \frac{\partial L}{\partial \dot{y}_2} = m_1 \dot{y}_1 + m_2 \dot{y}_2 = P_y = \text{const}$$

$$I_z = \frac{\partial L}{\partial \dot{\bar{r}}_1} \bar{e}_z + \frac{\partial L}{\partial \dot{\bar{r}}_2} \bar{e}_z = \frac{\partial L}{\partial \dot{z}_1} + \frac{\partial L}{\partial \dot{z}_2} = m_1 \dot{z}_1 + m_2 \dot{z}_2 = P_z = \text{const}$$

Dies ist, aufgrund des Fehlens äußerer Kräfte, gerade der Schwerpunkts- Erhaltungssatz:

$$M \ddot{\bar{R}} = \bar{P} = \text{const}$$

Mit den Schwerpunktskoordinaten

$$\bar{R} := \frac{1}{M} \sum_{i=1}^2 m_i \bar{r}_i$$

Und der Gesamtmasse

$$M := \sum_{i=1}^2 m_i$$

Räumliche Isotropie

Nebenbedingung: konservative Kräfte, keine Zwangsbedingungen

Es erfolgt eine Drehung des Bezugssystems um den Winkel $\mathbf{j} = s$ um die z- Achse.

An einer Skizze kann man sich schnell verdeutlichen:

$$h^s : \bar{\mathbf{r}}_i = (x_i, y_i, z_i) \rightarrow \bar{\mathbf{r}}_i' = (x_i', y_i', z_i')$$

Dabei gilt:

$$x_i' = x_i \cos s + y_i \sin s$$

$$y_i' = y_i \cos s - x_i \sin s$$

$$z_i' = z_i$$

Rotationsinvarianz für die Drehung um die z- Achse:

Betrachten wir infinitesimale Transformationen (Drehungen um die z- Achse mit kleinen Winkeln $d\mathbf{j} = d\mathbf{s}$

$$\begin{pmatrix} x_i' \\ y_i' \\ z_i' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos s & \sin s & 0 \\ -\sin s & \cos s & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_i \\ y_i \\ z_i \end{pmatrix} \approx \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & s & 0 \\ -s & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} x_i \\ y_i \\ z_i \end{pmatrix}$$

Dabei gilt die rechtsseitige Taylorentwicklung für kleine Winkel. Wir schreiben

$$\begin{pmatrix} 0 & s & 0 \\ -s & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = -s \bar{\bar{\mathbf{J}}}_z$$

Mit $\bar{\bar{\mathbf{J}}}_z$ als Erzeugende für infinitesimale Drehungen um die z- Achse.

Somit folgt:

$$\begin{pmatrix} x_i' \\ y_i' \\ z_i' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_i \\ y_i \\ z_i \end{pmatrix} + s \begin{pmatrix} y_i \\ -x_i \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_i \\ y_i \\ z_i \end{pmatrix} + s(\bar{\mathbf{r}}_i \times \bar{\mathbf{e}}_z)$$

Formal schreibt man:

$$\bar{\mathbf{r}}_i' = h^s(\bar{\mathbf{r}}_i)|_{s=0} + s \left(\frac{d}{ds} h^s(\bar{\mathbf{r}}_i) \right)_{s=0} + O(s^2)$$

$$\text{mit } \left(\frac{d}{ds} h^s(\bar{\mathbf{r}}_i) \right)_{s=0} = \bar{\mathbf{r}}_i \times \bar{\mathbf{e}}_z$$

Rotationsinvarianz der Lagrange-Funktion

$T = \frac{1}{2} \sum_i m_i \dot{\bar{\mathbf{r}}}_i^2$ ist rotationsinvariant, da nur von $|\dot{\bar{\mathbf{r}}}_i|$ abhängig und die Drehmatrix ändert die Abstände nicht.

(Drehungen sind orthogonale Transformationen).

$$L(\bar{\mathbf{r}}_i' = h^s(\bar{\mathbf{r}}_i), \dot{\bar{\mathbf{r}}}_i) = L(\bar{\mathbf{r}}_i, \dot{\bar{\mathbf{r}}}_i)$$

$$\left(\frac{\partial L}{\partial s} \right)_{s=0} = - \left(\frac{\partial V}{\partial s} \right)_{s=0} = - \sum_{i=1}^N (\nabla_{\bar{\mathbf{r}}_i} V) \left(\frac{d\bar{\mathbf{r}}_i'}{ds} \right)_{s=0} = \sum_{i=1}^N \bar{\mathbf{F}}_i (\bar{\mathbf{r}}_i \times \bar{\mathbf{e}}_z)$$

wegen:

$$(\nabla_{\vec{r}_i} V) = -\vec{F}_i$$

$$\left(\frac{d\vec{r}_i}{ds} \right)_{s=0} = \left(\frac{dh^s}{ds} \right)_{s=0}$$

Als zyklische Permutation gilt dann jedoch:

$$\left(\frac{\partial L}{\partial s} \right)_{s=0} = - \left(\frac{\partial V}{\partial s} \right)_{s=0} = \vec{e}_z \cdot \sum_i (\vec{F}_i \times \vec{r}_i) = -\vec{e}_z \cdot \sum_i (\vec{r}_i \times \vec{F}_i)$$

Mit $\sum_i (\vec{r}_i \times \vec{F}_i)$ als gesamtes Drehmoment und der Tatsache, dass die z-Komponente des äußeren resultierenden

Drehmomentes verschwindet:

$$-\vec{e}_z \cdot \sum_i (\vec{r}_i \times \vec{F}_i) = \left(\frac{\partial L}{\partial s} \right)_{s=0} = - \left(\frac{\partial V}{\partial s} \right)_{s=0} = 0$$

Interpretation nach dem Noetherschen Theorem

$$I(\vec{r}, \dot{\vec{r}}) = \sum_{i=1}^N \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}_i} \cdot \left(\frac{dh^s}{ds} \right)_{s=0} = \sum_i m_i \dot{\vec{r}}_i \cdot (\vec{r}_i \times \vec{e}_z) = -\vec{e}_z \cdot \sum_i (\vec{r}_i \times m_i \dot{\vec{r}}_i) = -\vec{e}_z \cdot \vec{l} = -l_z$$

Also: Rotationsinvarianz entspricht Drehimpulserhaltung

Andere Betrachtungsweise

Wähle $q_1 = \vec{j} = s$ als verallgemeinerte Koordinate

Trafo: $\vec{r}_i = \vec{r}_i(\vec{j}, q_2, \dots, q_f, t)$

$$\text{mit } \frac{\partial}{\partial q_1} \vec{r}_i = \left(\frac{d}{ds} h^s(\vec{r}_i) \right)_{s=0} = \vec{r}_i \times \vec{e}_z$$

Für infinitesimale Drehung um z-Achse.

Invarianz

Erhaltungssätze

$$\frac{\partial L}{\partial q_1} = 0 \Leftrightarrow \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_1} = 0 \quad \text{äquivalent zum Erhaltungssatz } p_1 = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_1} = \text{const}$$

Der Winkel ist also eine zyklische Variable.

Berechnet man den verallgemeinerten konjugierten Impuls zu $q_1 = \vec{j} = s$, so ergibt sich:

$$p_1 = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_1} = \frac{\partial L}{\partial \dot{s}} = \frac{1}{2} \sum_i m_i \frac{\partial}{\partial \dot{q}_1} \dot{\vec{r}}_i^2 = \sum_i m_i \dot{\vec{r}}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \dot{q}_1} \dot{\vec{r}}_i = \sum_i m_i \dot{\vec{r}}_i (\vec{r}_i \times \vec{e}_z) = -\vec{e}_z \cdot \sum_i (\vec{r}_i \times m_i \dot{\vec{r}}_i) = -l_z$$

wegen

$$\frac{\partial}{\partial \dot{q}_1} \dot{\vec{r}}_i = \frac{\partial}{\partial q_1} \vec{r}_i \quad \text{da} \quad \dot{\vec{r}}_i = \sum_k \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_k} \dot{q}_k + \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial t}$$

Es ergibt sich also wieder die z-Komponente des Drehimpulses als verallgemeinerter Impuls.

Nebenbedingung:

Wir betrachten hier eine passive Drehung des Koordinatensystems. Die Aktive Drehung des

Koordinatensystems ist jedoch äquivalent. Das bedeutet, wir drehen aktiv alle Massenpunkte mit $\vec{j} = -\vec{j}$.

Dazu gehören dann die konjugierten Impulse $+l_z$

Beispiel:

N Teilchen mit einer inneren Paarwechselwirkung, die nur vom Abstand abhängt:

$$V(\bar{r}_1, \dots, \bar{r}_N) = V(r_{12}, \dots, r_{ij}, \dots) \text{ mit } r_{ij} = |\bar{r}_i - \bar{r}_j|$$

Rotationsinvarianz gegen Drehung um **alle** Achsen:

$$\frac{\partial V(r_{12}, \dots, r_{ij}, \dots)}{\partial \mathbf{j}} = \sum_{i,j} \frac{\partial V}{\partial r_{ij}} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{j}} r_{ij} = 0 \text{ für beliebige Achsen, da}$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{j}} r_{ij} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{j}} [(\bar{r}_i - \bar{r}_j)(\bar{r}_i - \bar{r}_j)]^{1/2} = \frac{1}{r_{ij}} (\bar{r}_i - \bar{r}_j) \frac{\partial}{\partial \mathbf{j}} (\bar{r}_i - \bar{r}_j) = \frac{\bar{r}_i - \bar{r}_j}{r_{ij}} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{j}} \bar{r}_i - \frac{\partial}{\partial \mathbf{j}} \bar{r}_j \right)$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{j}} \bar{r}_i = \bar{r}_i \times \bar{e}_k$$

$$\Rightarrow \frac{\bar{r}_i - \bar{r}_j}{r_{ij}} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{j}} \bar{r}_i - \frac{\partial}{\partial \mathbf{j}} \bar{r}_j \right) = \frac{\bar{r}_i - \bar{r}_j}{r_{ij}} [(\bar{r}_i - \bar{r}_j) \times \bar{e}_k] = \frac{1}{r_{ij}} \bar{e}_k [(\bar{r}_i - \bar{r}_j) \times (\bar{r}_i - \bar{r}_j)] = 0$$

Also ist der resultierende Drehimpuls \bar{l} eine Erhaltungsgröße

Erzeugende der infinitesimalen Drehung um z-Achse

Die infinitesimale Drehung lässt sich schreiben als:

$$\bar{r}_i' = h^s(\bar{r}_i) = (\bar{1} - s\bar{J}_z)\bar{r}_i$$

Mit der Erzeugenden $\bar{J}_z = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$

Bei einer Drehung um den endlichen Winkel \mathbf{j} gilt:

$$\bar{r}_i' = \bar{R}_z(\mathbf{j})\bar{r}_i = \begin{pmatrix} \cos \mathbf{j} & \sin \mathbf{j} & 0 \\ -\sin \mathbf{j} & \cos \mathbf{j} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \bar{r}_i$$

Es gilt:

$$\bar{R}_z(\mathbf{j}) = \exp(-\bar{J}_z \mathbf{j})$$

mit Definition

$$\exp(-\bar{J}_z \mathbf{j}) := \bar{1} + (-\bar{J}_z \mathbf{j}) + \frac{1}{2}(-\bar{J}_z \mathbf{j})^2 + \dots + \frac{1}{k!}(-\bar{J}_z \mathbf{j})^k$$

Beweis:

Für

$$\bar{M} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \bar{M}^2 = -\bar{1}, \bar{M}^3 = -\bar{M}, \bar{M}^4 = \bar{1}$$

$$\bar{M}^{2n} = (-1)^n \bar{1}$$

$$\bar{M}^{(2n+1)} = (-1)^n \bar{M}$$

Mit Hilfe der Taylorreihen für Sinus und Cosinus folgt dann:

$$\begin{pmatrix} \cos \mathbf{j} & \sin \mathbf{j} \\ -\sin \mathbf{j} & \cos \mathbf{j} \end{pmatrix} = \overline{1} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} \mathbf{j}^{2n} - \overline{M} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} \mathbf{j}^{2n+1} \\ = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n)!} \overline{M}^{2n} \mathbf{j}^{2n} - \overline{M} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)!} \overline{M}^{2n+1} \mathbf{j}^{2n+1} \\ = \exp \left(-\overline{M} \mathbf{j} \right)$$

Analog behandelbar ist die Drehung um die x-Achse

Erzeugende:

$$\overline{\overline{J}}_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Hier gewinnen wir die Drehmatrix:

$$\overline{\overline{R}}_x(\mathbf{j}) = \exp \left(-\overline{\overline{J}}_x \mathbf{j} \right)$$

Bei der y- Achse gilt:

Erzeugende:

$$\overline{\overline{J}}_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Hier gewinnen wir die Drehmatrix:

$$\overline{\overline{R}}_y(\mathbf{j}) = \exp \left(-\overline{\overline{J}}_y \mathbf{j} \right)$$

Beliebige Drehungen um den Winkel \mathbf{j} mit der Drehachse \overline{n} :

$$\overline{\overline{R}}(\mathbf{j}) = \exp \left(-\mathbf{j} \sum_{i=1}^3 n_i \overline{\overline{J}}_i \right)$$

mit $\overline{\mathbf{j}} := \mathbf{j} \overline{n}$

Die Drehmatrizen $\overline{\overline{R}}(\mathbf{j}) = \exp \left(-\mathbf{j} \sum_{i=1}^3 n_i \overline{\overline{J}}_i \right)$ bilden nun eine 3- parametrische $(\mathbf{j}_1, \mathbf{j}_2, \mathbf{j}_3)$, stetige,

diffbare $(in \mathbf{j})$ und orthogonale Gruppe.

Eine solche Gruppe heißt Lie- Gruppe oder kontinuierliche Gruppe in drei reellen Dimensionen $SO(3)$

$$SO(3) = \left\{ \overline{\overline{R}} : R^3 \rightarrow R^3 \text{ linear} \mid \overline{\overline{R}}^t \overline{\overline{R}} = 1 \mid \det \overline{\overline{R}} = 1 \right\}$$

Mit $\overline{\overline{R}}^t \overline{\overline{R}} = 1$ als Orthogonalitätsbedingung, so dass $|\overline{\overline{R}}^t| = |\overline{\overline{R}}|$ und $\det \overline{\overline{R}} = 1$ zum Ausschluß von Raumspiegelungen.

Die Erzeugenden $\overline{\overline{J}}_i$ der Drehgruppe bilden eine Lie- Algebra mit dem Lieschen Produkt (=Kommutator):

$$[\overline{\overline{J}}_i, \overline{\overline{J}}_k] = \overline{\overline{J}}_i \overline{\overline{J}}_k - \overline{\overline{J}}_k \overline{\overline{J}}_i \quad i, k = x, y, z$$

Dabei vertauschen 2 Drehungen um unterschiedliche Achsen nicht. Das bedeutet, das Ergebnis hängt von der Reihenfolge ab !:

$$\begin{aligned} [\bar{J}_x, \bar{J}_y] &= \bar{J}_z \\ [\bar{J}_z, \bar{J}_x] &= \bar{J}_y \rightarrow \text{zyklische Permutation des Lieschen Produktes} \\ [\bar{J}_y, \bar{J}_z] &= \bar{J}_x \end{aligned}$$

Zeitliche Translationsinvarianz

Die Zeit spielt in der klassischen Mechanik im Ggatz zur relativistischen Mechanik gegenüber dem Ort eine Sonderrolle.

Deshalb ist eine direkte Anwendung des Noether- Theorems nicht möglich.

Zeitliche Translationsinvarianz ist erfüllt, falls:

1. die Zwangsbedingungen die Zeit t nicht explizit enthalten:

$$\bar{r}_i = \bar{r}_i(q_1, \dots, q_f)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{r}_i = 0 \Rightarrow \dot{\bar{r}}_i = \sum_j \frac{\partial}{\partial q_j} \bar{r}_i \dot{q}_j$$

Dabei ist $\frac{\partial}{\partial q_j} \bar{r}_i$ Funktion von $q_1 \dots q_f$

2. $\frac{\partial}{\partial t} L = 0$

3. Nebenbedingung: Aus der Existenz eines Potenzials der eingepprägten Kräfte folgt **NICHT** automatisch die Erhaltung der Energie, da die Zwangsbedingungen die Zeit enthalten könnten.

Wenn die Zwangsbedingungen die Zeit enthalten, so ist die Energie nicht erhalten.

$$\bar{r}_i = \bar{r}_i(q_1, \dots, q_f, t)$$

Kinetische Energie:

$$T = \frac{1}{2} \sum_i m_i \dot{\bar{r}}_i^2 = \frac{1}{2} \sum_{j,k} T_{jk} \dot{q}_j \dot{q}_k$$

Mit

$$T_{jk} = \sum_{i=1}^N m_i \left(\frac{\partial \bar{r}_i}{\partial q_j} \right) \left(\frac{\partial \bar{r}_i}{\partial q_k} \right) \text{ ist abhängig von den } q_1 \dots q_f \text{ im Gegensatz zum Fall der kleinen Schwingungen,}$$

der eingangs behandelt wurde.

T ist eine homogene quadratische Funktion der $\dot{q}_1 \dots \dot{q}_f$

$$\text{Also } T(\mathbf{I}\dot{q}_1, \dots, \mathbf{I}\dot{q}_f) = \mathbf{I}^2 T(\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_f)$$

Nach \mathbf{I} wird partiell abgeleitet, dann wird $\mathbf{I} = 1$ gesetzt.

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^N \left(\frac{\partial T}{\partial (\mathbf{I}\dot{q}_k)} \right) \left(\frac{\partial (\mathbf{I}\dot{q}_k)}{\partial \mathbf{I}} \right) \Big|_{\mathbf{I}=1} &= 2\mathbf{I}T \Big|_{\mathbf{I}=1} \Leftrightarrow \sum_{k=1}^N \left(\frac{\partial T}{\partial (\dot{q}_k)} \right) \dot{q}_k = 2T \\ \left(\frac{\partial (\mathbf{I}\dot{q}_k)}{\partial \mathbf{I}} \right) &= \dot{q}_k \end{aligned}$$

Obere Äquivalenz ist der sogenannte Eulersche Satz

Da V unabhängig von $\dot{q}_1 \dots \dot{q}_f$ gilt auch:

$$\sum_{k=1}^N \left(\frac{\partial L}{\partial (\dot{q}_k)} \right) \dot{q}_k = 2T$$

Zur totalen Zeitableitung von L :

$$\begin{aligned} \frac{dL}{dt} &= \sum_k \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \ddot{q}_k + \frac{\partial L}{\partial q_k} \dot{q}_k \right) + \frac{\partial L}{\partial t} \\ \frac{\partial L}{\partial q_k} &= \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \text{ und } \frac{\partial L}{\partial t} = 0 \quad \text{wegen 2. (oben)} \end{aligned}$$

Somit:

$$\frac{dL}{dt} = \sum_k \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \ddot{q}_k + \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \dot{q}_k \right) = \frac{d}{dt} \sum_k \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \dot{q}_k = 2 \frac{dT}{dt} \text{ wegen } \sum_{k=1}^N \left(\frac{\partial L}{\partial (\dot{q}_k)} \right) \dot{q}_k = 2T$$

Somit:

$$0 = \frac{d}{dt} (2T - L) = \frac{d}{dt} (T + V) \Rightarrow T + V = \text{konst}$$

Zeittranslationsinvarianz bedingt also Energieerhaltung !

Oder: Skleronome Zwangsbedingungen: $\frac{\partial L}{\partial t} = 0$ bedingen: $E = T + V = \text{constant}$

Nebenbemerkung

Die Aussage folgt auch aus dem Noether-Theorem, wenn man noch den folgenden Trick anwendet: (Scheck, Aufgabe 2.17)

Mache t zu einer q -artigen Variablen durch eine parametrisierte Darstellung: $q_k = q_k(\mathbf{t}), t = t(\mathbf{t})$

Als Lagrangefunktion muss man sich definieren:

$$\bar{L} \left(q_k, t, \frac{dq_k}{d\mathbf{t}}, \frac{dt}{d\mathbf{t}} \right) := L \left(q_k, \left(\frac{dt}{d\mathbf{t}} \right) \frac{dq_k}{d\mathbf{t}}, t, \frac{dt}{d\mathbf{t}} \right)$$

soll invariant unter Zeittranslationen sein:

$$h^s(\bar{q}, t) = (\bar{q}, t + s)$$

Dann gilt:

1. Hamiltonsches Prinzip auf \bar{L} angewandt:

$$0 = \mathbf{d} \int_{t_1}^{t_2} \bar{L} d\mathbf{t} = \mathbf{d} \int_{t_1}^{t_2} L dt \Leftrightarrow \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} - \frac{\partial L}{\partial q_k} = 0$$

2. Noethersches Theorem für \bar{L} :

Integral der Bewegung I:

$$I = \sum_{i=1}^{f+1} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \left(\frac{d}{ds} h^s(q_1, \dots, q_{f+1}) \right)_{s=0} = \frac{\partial \bar{L}}{\partial \dot{q}_{f+1}}$$

mit $\left(\frac{d}{ds} h^s(q_1, \dots, q_{f+1}) \right) = (0, \dots, 0, 1)$ f Nullen, 1 an Stelle $f+1$ mit $q_{f+1} = t$

$$\begin{aligned} I &= \frac{\partial \bar{L}}{\partial \dot{q}_{f+1}} = \frac{\partial \bar{L}}{\partial \left(\frac{dt}{d\mathbf{t}} \right)} = L + \sum_{k=1}^f \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \left(- \frac{1}{\left(\frac{dt}{d\mathbf{t}} \right)^2} \right) \frac{dq_k}{d\mathbf{t}} \frac{d\mathbf{t}}{dt} \\ &= L - \sum_{k=1}^f \left(\frac{\partial L}{\partial (\dot{q}_k)} \right) \dot{q}_k = T - V - 2T = -(T - V) \end{aligned}$$

Also Erhaltung der Energie durch zeitliche Translationsinvarianz

Physikalische Bedeutung der Ham- Funktion

- wegen $L = T - V$ bei holonomen Zwangsbed. und konservativen Kräften
- und wegen $p(d/dt q) = 2T$ folgt: $H = T + V$

Dies gilt bei zeitlicher Translationsinvarianz (skleronome Zwangsbed.):

$$\text{mit } \frac{\partial}{\partial t} \bar{r}_i(q_1, \dots, q_f) = 0 \text{ und } \frac{\partial}{\partial t} L = 0$$

Dann nämlich ist

$$\sum_{k=1}^f \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_k} \dot{q}_k = 2T \quad (\text{nach dem Eulerschen Satz: } T \text{ ist quadratische, homogene Funktion der } \dot{q}_k).$$

Somit:

$$\sum_{k=1}^f \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \dot{q}_k - L = \sum_{k=1}^f \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_k} \dot{q}_k - L = 2T - T + V = T + V$$

beschreibt die Gesamtenergie des Systems: Nur bei skleronomen Zwangsbedingungen und konservativen Kräften !

Nach dem Noether- Theorem, speziell unter dem Kapitel ZEITLICHE Translationsinvarianz

folgt dann Gesamtenergieerhaltung.

Dies läßt sich leicht nachweisen:

$$\begin{aligned} \frac{dH}{dt} &= \frac{d}{dt} \left(\sum_{k=1}^f \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \dot{q}_k - L \right) = \sum_{k=1}^f \left(\frac{\partial H}{\partial q_k} \dot{q}_k + \frac{\partial H}{\partial p_k} \dot{p}_k \right) + \frac{\partial H}{\partial t} = \sum_{k=1}^f \left(\frac{\partial H}{\partial q_k} \frac{\partial H}{\partial p_k} - \frac{\partial H}{\partial p_k} \frac{\partial H}{\partial q_k} \right) - \frac{\partial L}{\partial t} = 0 \\ &\text{wegen } \frac{\partial L}{\partial t} = 0 \end{aligned}$$

Dies gilt also nur für skleronome Zwangsbedingungen. Bei rheonomen Zwangsbed. ist im Allgemeinen H nicht $T+V$!!

Beispiel: Perle an starrem rotierendem Draht:

Eine Perle der Masse m sei auf einem starren Draht, der in der $-y$ - Ebene rotiert (Reibung durch Erdpotenzial zu vernachlässigen): Generalisierte Koordinaten q ist der Abstand der Perle vom Mittelpunkt:

$$x = q \cos \varphi, \dot{x} = \dot{q} \cos \varphi - q \varphi \sin \varphi$$

$$y = q \sin \varphi, \dot{y} = \dot{q} \sin \varphi + q \varphi \cos \varphi$$

$$L = T = \frac{m}{2} (\dot{x}^2 + \dot{y}^2) = \frac{m}{2} (\dot{q}^2 + q^2 \varphi^2)$$

$$H = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \dot{q} - L = \frac{m}{2} (\dot{q}^2 - q^2 \varphi^2) \neq T$$

Man kann sich $H=T+V$ denken. Dabei gilt das effektive Potenzial mit $V = -mq^2 \varphi^2$.

Aus $\frac{\partial L}{\partial t} = 0$ folgt dann ohnehin wieder ein Erhaltungssatz: $H=\text{const.}$

Zurück zur Quantenmechanik

Betrachten wir die Von-Neumann- Bewegungsgleichung (Heisenbergsche Bewegungsgleichung):

für einen beliebigen Operator $\hat{F}_H(t)$:

$$\frac{d}{dt} \hat{F}_H(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}_H]$$

Betrachte Ort und Impuls:

$$[F, \hat{x}_k] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial F}{\partial p_k}$$

$$[F, \hat{p}_k] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial F}{\partial x_k}$$

Somit gilt insbesondere:

$$[H, \hat{x}_k] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial H}{\partial p_k}$$

$$[H, \hat{p}_k] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial H}{\partial x_k}$$

Nun haben wir angesichts dieses Zusammenhangs erneut:

$$\frac{\partial H}{\partial x_k} = 0 \Rightarrow \dot{p}_k = 0$$

weil

$$[H, \hat{p}_k] = 0$$

Eine Symmetrie des Hamiltonoperators im Ort x bedingt also eine Erhaltung der Impulskomponente p in dieser Richtung !

Nun:

Wir können Impuls und Energie gleichzeitig scharf messen. Das ist neu als Aussage der Vertauschungsrelationen. Warum ?

Die Impulsmessung verschiebt das Teilchen in x - Richtung wegen

$$[\hat{p}_i, \hat{x}_k] = \frac{\hbar}{i} \mathbf{d}_{ik} 1$$

$$[\hat{p}_i, \hat{p}_k] = [\hat{x}_i, \hat{x}_k] = 0$$

Aber: Nach Voraussetzung ist die Energie unabhängig vom Ort, also bleibt der Impuls erhalten !
Somit haben wir eine Äquivalenz zwischen Unschärfe und Nöthertheorem und der Heisenbergschen Bewegungsgleichung.

Drehimpuls:

Es gilt:

$$[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i\hbar \epsilon_{jkl} \hat{L}_l$$

Außerdem aber :

Für alle rotationssymmetrischen Hamiltonoperatoren gilt (Theorem !):

$$[\hat{L}_j, H] = 0$$

$$[\hat{L}^2, H] = 0$$

Und der Drehimpuls ist eine Erhaltungsgröße, also

$$\dot{\vec{L}} = 0$$

Analogie in der KLASSISCHEN Mechanik:

Im Zentralpotenzial ist der Drehimpuls eine Erhaltungsgröße

Tieferer Grund: \vec{L} ist die Erzeugende infinitesimaler Drehungen

Also:

Wir nehmen an, die Energie ist isotrop, also winkelunabhängig !

Die Messung einer Drehimpulskomponente stört die Energie nicht wegen:

$$[\hat{L}_j, H] = 0 \text{ und } [\hat{L}^2, H] = 0$$

sofort ist klar (Heisenbergsche Bewegungsgleichung), dass $\dot{\vec{L}} = 0$.

Wir können nun jedoch gleich zwei neue Forderungen aufstellen, da wir den Zusammenhang zwischen diesen Bewegungsgleichungen und dem Noethertheorem kennen:

- 1) Ein Winkeloperator vertauscht im rotationssymmetrischen Potenzial mit dem Hamiltonian, da die Energie symmetrisch im Winkel ist und eine Drehimpulsmessung die Energie nicht stört:
- 2) Der Drehimpuls kann nur eine " Unschärfe" im Winkel besitzen, wegen dreier Raumwinkel ist damit sofort die Unschärfe mit den anderen Drehimpulskomponenten eine eigentliche Winkelunschärfe im rotationssymmetrischen Potenzial (Alle Aussagen gelten hier, wie gesagt, nur für rotationssymmetrische Potenziale):

Also könnte man Forderungen an einen Winkeloperator stellen, derart, dass:

$$[\hat{\mathbf{j}}, H] = 0 \quad (\text{Definition des rotationssymmetrischen Potenzials})$$

$$[\hat{L}^2, \hat{\mathbf{j}}] \neq 0$$

$$[\hat{L}_j, \hat{\mathbf{j}}_j] \neq 0$$

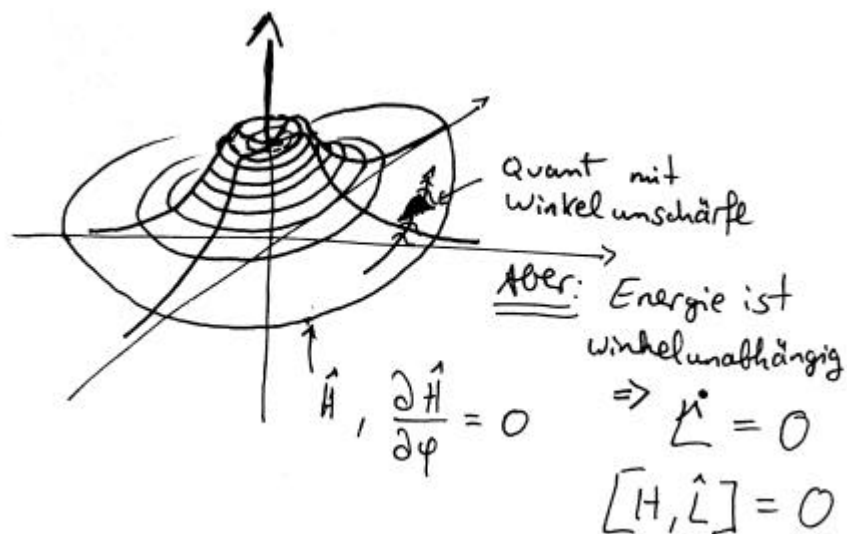
Wobei letzteres als Eulerwinkelcharakterisierung gedacht ist, also als der Drehwinkel in der Ebene, die auf die bezeichnete Drehimpulskomponente senkrecht steht:

Also:

ortsinvariante Hamiltonians erhalten den Impuls. Die Impulsunschärfe spürt keine energetische Variation, weshalb der Impuls zeitlich erhalten bleibt !

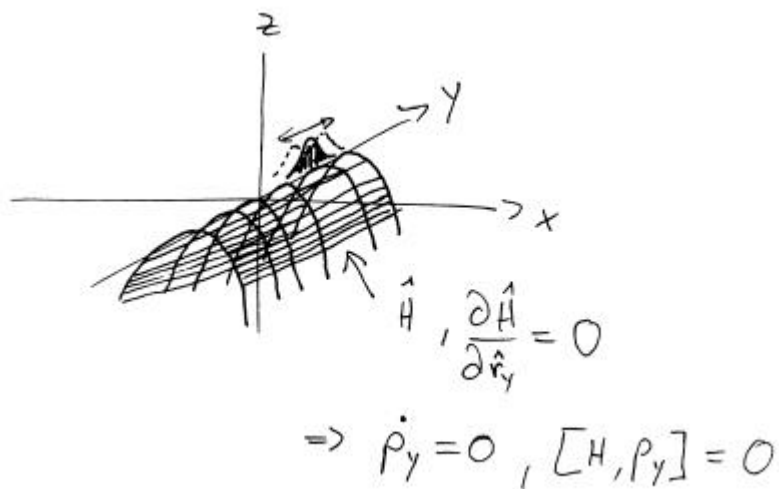
winkelinvariante Hamiltonians erhalten den Drehimpuls. Die Drehimpulsunschärfe spürt keine energetische Variation und bleibt deshalb zeitlich erhalten.

Grafisch:



Dagegen ist in diesem Modell der Hamiltonian sicherlich nicht ortsunabhängig. Demnach wird der Impuls hier nicht mit dem Hamiltonian vertauschen !

Dies würde er in einer solchen Situation, in der dann natürlich keine Drehimpulserhaltung mehr gilt:



Etwas weniger hochgestochen könnte man auch formulieren: Da die Heisenbergsche Bewegungsgleichung $\frac{d}{dt} \hat{F}_H(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}_H]$ gilt, kann man in Analogie zum klassischen Noether- Theorem sofort behaupten, dass:

$$[F, \hat{x}_k] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial F}{\partial p_k}$$

$$[F, \hat{p}_k] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial F}{\partial x_k}$$

Somit gilt insbesondere:

$$[H, \hat{x}_k] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial H}{\partial p_k}$$

$$[H, \hat{p}_k] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial H}{\partial x_k}$$

Dies könnte hilfreich sein beim Auffinden eines Zeitoperators:

Im zeitunabhängigen Potenzial gilt trivialerweise::

$$[\hat{H}, \hat{H}] = 0$$

aber wegen der Energie- Zeit- Unschärfe:

$$[H, \hat{T}] \neq 0$$

Somit kann auch im zeitunabhängigen Potenzial der Zeitoperator keine Erhaltungsgröße sein:

$$\dot{\hat{T}} \neq 0$$

Seine Eigenwerte müssten die Zeit ausgeben !

3.4 Das Wasserstoffatom

Hier wechselwirken ein Elektron $e = -e_0, m_1, \bar{r}_1$ und Proton $e = e_0, m_2 \gg m_1, \bar{r}_2$ über das Coulomb- Potenzial:

$$V(|\bar{r}_1 - \bar{r}_2|) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Reduktion des Zwei- Teilchen- Problems:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_2 + V(|\bar{r}_1 - \bar{r}_2|) - \tilde{E} \right\} \Psi(\bar{r}_1, \bar{r}_2) = 0$$

Dies ist die Schrödingergleichung für eine Zwei- Teilchen - Wellenfunktion:

$$\Psi(\bar{r}_1, \bar{r}_2) = \langle \bar{r}_1, \bar{r}_2 | \Psi \rangle$$

$$\text{Schwerpunkt- Koordinate: } \bar{R} := \frac{1}{M}(m_1 \bar{r}_1 + m_2 \bar{r}_2)$$

$$M := m_1 + m_2$$

$$\text{Relativ- Koordinate: } \bar{r} := \bar{r}_1 - \bar{r}_2$$

Damit können alle Differenziationen in Schwerpunkts- und Relativableitung zerlegt werden:

$$\nabla_1 = \frac{m_1}{M} \nabla_R + \nabla_r$$

$$\nabla_2 = \frac{m_2}{M} \nabla_R - \nabla_r$$

Damit folgt:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_2 &= -\frac{\hbar^2}{2} \left\{ \frac{m_1}{M^2}\Delta_R + \frac{2}{M}\nabla_R\nabla_r + \frac{1}{m_1}\Delta_r + \frac{m_2}{M^2}\Delta_R - \frac{2}{M}\nabla_R\nabla_r + \frac{1}{m_2}\Delta_r \right\} \\ -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_2 &= -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_R - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r \end{aligned}$$

Wobei die reduzierte Masse m eingeführt wurde:

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}$$

Zur Lösung des Problems wählen wir den Separationsansatz

$$\Psi(\bar{r}_1, \bar{r}_2) = e^{i\vec{Q}\cdot\bar{R}} \Psi(\bar{r})$$

Dies entspricht einer Abspaltung der zeitunabhängigen Schwerpunktskoordinaten mit der Wellenzahl Q des Systems (Gesamtmasse), also einer Schwerpunktswellenlänge. Dagegen steckt in den Relativkoordinaten dann eine Relativwellenlänge.

Das Q, welches hier eingeführt wird kann dann Korrekturen an die Energie bringen, die jedoch klein sein sollten (siehe unten).

Somit folgt die Schrödingergleichung

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r + V(r) - E \right\} \Psi(\vec{r}) = 0$$

mit $\tilde{E} = E + \frac{\hbar^2 Q^2}{2M}$, also der Energie E , die noch um die freie Schwerpunktsbewegung, die kinetische Energie

des freien Schwerpunktes $\frac{\hbar^2 Q^2}{2M}$ zu \tilde{E} korrigiert wird.

Somit haben wir nun ein reduziertes effektives 1- Teilchen- Problem mit einem kugelsymmetrischen Potenzial.

Separation in Kugelkoordinaten:

$$\langle \hat{r} | nlm \rangle = \Psi_{nlm}(\vec{r}) = \Psi(r, \mathbf{J}, \mathbf{j}) = R_{nl}(r) Y_l^m(\mathbf{J}, \mathbf{j}) = \frac{u_{nl}(r)}{r} Y_l^m(\mathbf{J}, \mathbf{j})$$

$$R_{nl}(r) = \frac{u_{nl}(r)}{r}$$

Ansatz der effektiven radialen Schrödingergleichung:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} (rR) + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) - |E| \right) (rR) = 0$$

Dies enteppricht

$$\left(\frac{p_{rad}^2}{2m} + V(r)_{eff} \right) \Psi = 0$$

$$\frac{p_{rad}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2}$$

Wobei die obige Gleichung leicht aus dem Laplaceoperator in Kugelkoordinaten einzusehen ist. Durch den

Separationsansatz erhält man schnell die einfachere Form $\left(\frac{p_{rad}^2}{2m} + V(r)_{eff} \right) (rR) = 0$, die nur noch von der

Radiuslänge in der Wellenfunktion abhängt.

Also:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} u_{nl}(r) + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) - E \right) u_{nl}(r) = 0$$

$$V(r) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$\Rightarrow u''_{nl}(r) - \left\{ \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{2m}{\hbar^2} |E| \right\} u_{nl}(r) = 0$$

Bei Beschränkung auf gebundene Zustände gilt: $E < 0$:

Abspaltung des asymptotischen Verhaltens:

Als Lösungsansatz wählen wir:

$$u_{nl}(r) = r^{l+1} e^{-kr} w(r)$$

$$k := \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m|E|}$$

$$r := 2kr$$

$$\text{Mit } l := \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2k} \sim \frac{1}{\sqrt{|E|}}$$

Ergibt sich:

$$u''_{nl}(r) - \left\{ \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{l}{r} + \frac{1}{4} \right\} u_{nl}(r) = 0$$

Sowie

$$w''(r) + \left\{ \frac{2(l+1)}{r} - 1 \right\} w'(r) + \frac{l-l-1}{r} w(r) = 0$$

Laguerre- Differentialgleichung

Über einen Potenzreihenansatz:

$$w(r) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n r^n$$

$$w'(r) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n n r^{n-1}$$

$$w''(r) = \sum_{n=2}^{\infty} a_n n(n-1) r^{n-2}$$

Erhält man eine Rekursionsformel für die Entwicklungskoeffizienten durch Koeffizientenvergleich:

$$a_{n+1} = a_n \frac{n+l+1-l}{(n+1)(n+2l+2)}$$

Wenn die Reihe nicht abbricht folgt für $n \rightarrow \infty$

$$\frac{a_{n+1}}{a_n} \rightarrow \frac{1}{n} \text{ also } a_{n+1} \sim \frac{1}{n!} a_0$$

Demnach folgt für $r \rightarrow \infty$:

$$w \rightarrow \sum_n \frac{1}{n!} r^{n+1} = r e^r$$

$$\Rightarrow u \sim w e^{-\frac{r}{2}}$$

Damit ist jedoch u nicht normierbar !

Die Reihe muss also abbrechen bei $n = n_{\infty} \in N_0$:

Also:

$l = n' + l + 1 \equiv n \in N$ Wobei dieses n vom obigen Laufindex verschieden ist !!! Es handelt sich in der Summe natürlich auch um in n aus den ganzen Zahlen.

Für

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m} k^2 = -\frac{me^4}{2\hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2} \frac{1}{l^2}$$

$$\frac{me^4}{2\hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2} := R_H = 13,6 \text{ eV}$$

Folgen nun die Energie- Eigenwerte:

$$E_n = -R_H \frac{1}{n^2}$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

n heißt auch Hauptquantenzahl !

Entartungsgrad

Zu festem n ist $l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$ die Drehimpulsquantenzahl und $m = -l, \dots, +l$ (insgesamt $2l+1$ Werte) möglich:

Das bedeutet: Jedes feste n ist $\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 2 \frac{n(n-1)}{2} + n = n^2$ - fach entartet.

Es liegt n^2 fache Entartung für jedes n vor. Das bedeutet: Es gibt zu jedem n n^2 Wellenfunktionen mit der zugehörigen Energie.

Nebenbemerkung:

Die Energieentartung bzgl. 1 ist eine Besonderheit des $1/r$ - Potentials. Alle anderen kugelsymmetrischen Potentiale haben allgemein Energie- Eigenwerte, die von n und l abhängen, also Energie- Eigenwerte E_{nl} .

Tieferer Grund: Der Lenzsche Vektor

$$\vec{N} = \frac{1}{2m} (\vec{p} \times \vec{L} - \vec{L} \times \vec{p}) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \vec{r} \text{ ist im } \frac{1}{r} \text{ - Potenzial eine Erhaltungsgröße:}$$

$$[\vec{N}, H] = 0$$

Klassisch bedeutet dies: Es gibt keine Periheldrehung im $\frac{1}{r}$ - Potenzial.

(Die beobachtete Periheldrehung des Merkur ist Folge der Allgemeinen Relativitätstheorie).

Die Erhaltung des Lenz- Runge Vektors ist äquivalent der Aussage, dass die energieabhängige Flächengeschwindigkeit des Fahrstrahls von Objekten im $1/r$ - Potenzial zeitlich konstant ist, also das zweite Keplersche Gesetz wird hier wieder gefunden.

n	l	m	Energie- Entartung	Schalenbezeichnung
1	0 (s)	0	1	K
2	0 (s)	0	4	L
	1 (p)	0,+1,-1		
3	0 (s)	0		
	1 (p)	0,+1,-1	9	M
	2 (d)	0,+1,-1,+2,-2		
4	0 (s)	0	16	N
	1 (p)	0,+1,-1		
	2 (d)	0,+1,-1,+2,-2		
	3 (f)	0,+1,-1,+2,-2,+3,-3		

Eigenfunktionen:

Die $w(\mathbf{r})$ hängen mit den Laguerre'schen Polynomen zusammen.

Die erzeugende Funktion der Laguerre- Polynome $L_q(x)$:

$$F(x, s) := \frac{1}{1-s} \exp \left\{ -x \frac{s}{1-s} \right\} = \sum_{q=0}^{\infty} L_q(x) \frac{s^q}{q!}$$

Mit

$$L_q(x) := \left(\frac{\partial^q}{(\partial s)^q} F(x, s) \right)_{s=0} = e^x \frac{d^q}{dx^q} (e^{-x} x^q)$$

Dabei müsste das rechte Gleichheitszeichen erst noch bewiesen werden !

$L_q(x)$ ist also ein Polynom vom Grad q !

Die zugeordneten Laguerre- Polynome ergeben sich gemäß

$$L_q^p(x) := \frac{d^p}{dx^p} L_q(x)$$

Sind also Polynome vom Grad q-p mit q-p verschiedenen positiven Nullstellen.

Die zugeordneten Laguerre- Polynome erfüllen ihrerseits die Gleichung

$$x L_q^{p''} + (p+1-x) L_q^{p'} + (q-p) L_q^p = 0$$

$$(q-p) = n-l-1$$

$$p+1 = 2(l+1)$$

Also:

$$w_{nl}(\mathbf{r}) = A L_{(n+l)}^{2l+1}(\mathbf{r})$$

Normierte Eigenfunktionen:

$$\Psi_{nlm}(\bar{r}) = \left[\frac{(n-l-1)!(2k)^3}{2n((n+l)!)^3} \right]^{\frac{1}{2}} (2kr)^l e^{-kr} L_{(n+l)}^{2l+1}(2kr) Y_l^n(\mathbf{J}, \mathbf{j})$$

mit den Laguerre- Polynomen $L_{(n+l)}^{2l+1}$ und den zugeordneten Legendre-Polynomen $Y_l^n(\mathbf{J}, \mathbf{j})$:

Dabei spürt die Funktion

$$\frac{\Psi_{nlm}(\vec{r})}{Y_l^m(\mathbf{J}, \mathbf{j})} = \left[\frac{(n-l-1)!(2k)^3}{2n((n+l)!)^3} \right]^{\frac{1}{2}} (2kr)^l e^{-kr} L_{(n+l)}^{2l+1}(2kr) \quad \text{insgesamt } n-l-1 \text{ radiale Knoten}$$

$l=0$:

Kugelsymmetrische Eigenfunktionen mit $n-1$ Knotenflächen

Grundzustand:

$$\Psi_{100}(\vec{r}) = \left[\frac{1}{(a_0)^3} \right]^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}}$$

Mit dem Bohrschen Radius

$$a_0 := \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} = 0,529 \text{ Å}$$

Es gilt der interessante Zusammenhang:

$$\frac{a_0}{m} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}$$

$$\text{Es gilt: } k = \left[\frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar} \right] = \frac{1}{a_0 n}$$

$$\Psi_{n00}(\vec{r}) \sim e^{-\frac{r}{a_0 n}} L_n^1(2kr)$$

Für $l = n-1$: Zustände mit maximalem Bahndrehimpuls (entspricht einer klassischen Kreisbahn)

$$\Psi_{n,n-1,m}(\vec{r}) \sim r^{n-1} e^{-\frac{r}{a_0 n}}$$

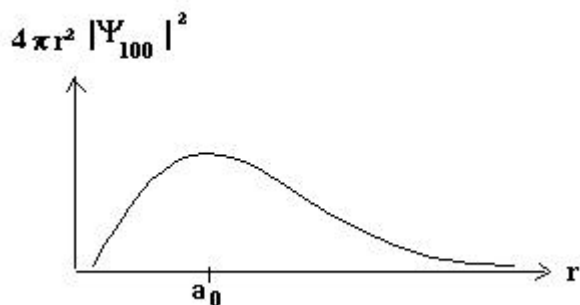
$$\lim_{r \rightarrow 0} \Psi_{n,n-1,m} = 0, \quad l \neq 0$$

Berechnung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit auf einer Kugelschale mit Radius r und Breite dr :

$$\int d\Omega r^2 |\Psi_{nlm}|^2 dr = |u_{nl}|^2 dr$$

$$Y_l^m \quad \text{normiert}$$

z.B.:



Magnetisches Moment und Zeeman- Effekt

Hamilton- Operator mit äußerem Magnetfeld:

$$H = \frac{1}{2m_0} (\vec{p} - e\vec{A})^2 + V(r) \quad \text{mit kugelsymmetrischem Potenzial}$$

Durch den kinetischen Impulsoperator: $(\vec{p} - e\vec{A})$ ist der Einfluss von äußeren Feldern auf den Bahndrehimpuls schon in der Gleichungen enthalten. Es folgt bereits der Zeemann Effekt aus dem gemachten Ansatz. Würde man dagegen auf Effekte hoffen, die erst angesichts des Spins von Elektronen auftreten, so wäre dies vergebens. Effekte des Spins sind in die Gleichung noch nicht eingebaut !

$$H = \frac{1}{2m_0} (\vec{p}^2 - 2e\vec{A}\vec{p} + e^2 \vec{A}^2) + V(r)$$

Verwende: Coulombbeziehung: $\nabla \cdot \vec{A} = 0 \rightarrow \vec{A}\vec{p} = \vec{p}\vec{A}$ für Operatoren

$e^2 \vec{A}^2$ sei für Atome vernachlässigbar, falls $\langle L_3 \rangle \neq 0$, falls $B < 10^5 \text{ G}$ vergl. Schwabl S. 128

Homogenes Magnetfeld: $\vec{A} = \frac{1}{2} (\vec{B} \times \vec{r})$ wegen $\vec{B} = \nabla \times \vec{A} = \frac{1}{2} (\vec{B} (\nabla \cdot \vec{r})) - \frac{1}{2} (\vec{B} \cdot \nabla) \vec{r} = \frac{1}{2} (\nabla \times (\vec{B} \times \vec{r})) = \vec{B}$

Da ja $(\nabla \cdot \vec{r}) = 3, (\vec{B} \cdot \nabla) \vec{r} = \vec{B}$

Somit:

$$\frac{\hbar}{i} (\vec{A} \cdot \nabla \Psi) = \frac{\hbar}{2i} (\vec{B} \times \vec{r}) \cdot \nabla \Psi = \frac{\hbar}{2i} \vec{B} \cdot (\vec{r} \times \nabla) \Psi = \frac{1}{2} (\vec{B} \cdot \vec{L}) \Psi$$

Sei

$$\vec{B} = (0, 0, B) \Rightarrow \vec{B} \cdot \vec{L} = BL_3$$

Schrödinger- Gleichung:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta \Psi + \left(V - E - \frac{e}{2m_0} BL_3 \right) \Psi = 0$$

$$L_3 \Psi = \hbar m \Psi$$

Wobei

$$L_3 \Psi = \hbar m \Psi \quad \text{für Drehimpuls- Eigenzustände}$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta \Psi + \left(V(r) - E - \frac{e}{2m_0} \hbar m B \right) \Psi = 0$$

mit

$$\frac{e}{2m_0} \hbar m := \mathbf{m}_B \quad (\text{magnetisches Moment})$$

Klassisch:

$$\overline{\mathbf{m}} = -\frac{\partial H}{\partial \overline{\mathbf{B}}} = \frac{e}{2m_0} \overline{\mathbf{L}}$$

Der Term im Hamiltonian der magnetischen Wechselwirkung.

$$H_{mag.} = \mathbf{m}_B \overline{\mathbf{B}} = \frac{e \overline{\mathbf{B}} \cdot \overline{\mathbf{L}}}{2m_0} = \frac{e B L_3}{2m_0}$$

$$\mathbf{m}_B = \frac{\hbar e}{2m_0}$$

Normaler Zeeman- Effekt:

Atom im homogenen Magnetfeld:

$$(H_0 - E - \mathbf{m}_B B) \Psi = 0 \quad H_0: \text{Hamiltonoperator ohne B- Feld}$$

$$\frac{e}{2m_0} \hbar m := \mathbf{m}_B$$

$$\frac{e \hbar}{2m_0} := \mathbf{m}_B \quad \text{Bohrsches Magneton: } e < 0$$

$$H_0 \Psi_{nlm} = E_{nl} \Psi_{nlm}$$

$$\Rightarrow E = E_{nl} - \frac{\hbar e B}{2m_0} m \rightarrow \text{Die m- Entartung wird vollständig aufgehoben}$$

Das heißt: für jedes m ergibt sich eine eigene Energie !

$$m = -l, \dots, +l$$

-> Aufspaltung in $2l + 1$ - Niveaus (Multipletts) mit m = magnetische Quantenzahl

Achtung ! Die l- Entartung wird keineswegs aufgehoben. Allerdings ist natürlich m abhängig von l

Nebenbemerkung: Anomaler Zeeman- Effekt -> Effekt des Spins (vergl. nächstes Kapitel)

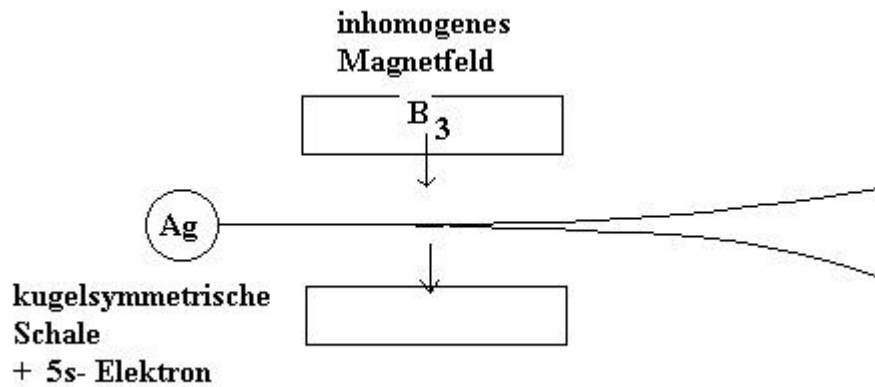
H- Atom: l- Entartung

Atome mit ungerader Kernladungszahl: Spin- Bahn - Zustände !

4. Spin und Systeme identischer Teilchen

4.1 Spin- Operatoren und Zustände

Stern- Gerlach Experiment: 1922:



Für das inhomogene Magnetfeld gilt: $\nabla B_3 \perp \text{Strahl}$

Die Kraft auf das magnetische Moment ergibt sich gemäß

$$\vec{F} = \nabla(\vec{m}_3 B_3) = \vec{m}_3 \nabla B_3$$

Somit: Ablenkung parallel zu μ_3 !!

Bahndrehimpuls l ergäbe $2l + 1$ - fache Strahlaufspaltung (also in jedem Fall ungeradzahlige Strahlaufspaltung) beobachtet wurde zweifache Aufspaltung !!

$\Rightarrow \vec{m} \sim \vec{S}$ Eigendrehimpuls (Spin) des Elektrons !

$$S_3 = m_s \hbar$$

$$m_s = \pm \frac{1}{2}$$

$$l \equiv s = \frac{1}{2}$$

Klassische Vorstellung: Rotation eines geladenen Körpers um seine eigene Achse:

$$\Rightarrow \vec{m} = \frac{+e}{2m_0} \vec{S} \quad e < 0$$

$$\Rightarrow \vec{m}_3 = \frac{+e}{2m_0} S_3 = \pm \frac{+e\hbar}{4m_0}$$

Dies ist jedoch falsch ! Vielmehr wurde experimentell der folgende Wert ermittelt:

$$\vec{m}_3 = +g \frac{+e}{2m_0} S_3 \quad \text{mit } g=2,0023, \quad g \text{ sogenannter Lande'- Faktor (gyromagnetischer Faktor)}$$

Mit relativistischen Korrekturen kommt man zu der Abweichung von der genauen 2 !!!

Spin als Freiheitsgrad des Elektrons

Spin- Eigenzustände: $|m_s\rangle \in H_S$ Spin- Hilbertraum (zweidimensional !)

Notation:

$$\left| +\frac{1}{2} \right\rangle = |\uparrow\rangle \text{ Spin up !}$$

$$\left| -\frac{1}{2} \right\rangle = |\downarrow\rangle \text{ Spin down !}$$

Dimensionsloser Spinoperator

$$\hat{\mathbf{S}} := \frac{2}{\hbar} \hat{\mathbf{S}}$$

$$\hat{\mathbf{S}} := \frac{\hbar}{2} \hat{\mathbf{S}}$$

Mit Eigenwerten und Spinzuständen als Eigenzustände:

$$\hat{S}_3 |\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle \Rightarrow \hat{\mathbf{S}} |\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle$$

$$\hat{S}_3 |\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle \Rightarrow \hat{\mathbf{S}} |\downarrow\rangle = -|\downarrow\rangle$$

\hat{S}_3 ist hermitesch

Eigenwerte: ± 1

Orthonormierung:

$$\langle \uparrow | \uparrow \rangle = \langle \downarrow | \downarrow \rangle = 1$$

$$\langle \uparrow | \downarrow \rangle = 0$$

Vollständigkeit: $|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow| = 1$

Das heißt, jeder beliebige, auch zeitabhängige Spinzustand kann entwickelt werden als

$$|a(t)\rangle = |\uparrow\rangle\langle\uparrow|a(t)\rangle + |\downarrow\rangle\langle\downarrow|a(t)\rangle$$

$$\langle\uparrow|a(t)\rangle := a_1(t)$$

$$\langle\downarrow|a(t)\rangle := a_2(t)$$

Aus:

$$\hat{\mathbf{S}} \times \hat{\mathbf{S}} = i\hbar \hat{\mathbf{S}} \quad (\text{ ganz allgemeine Drehimpuls- Vertausch- Relation})$$

(Operatoren, die dieser Relation genügen sind als Drehimpulse definiert !)

folgt:

$$\hat{\mathbf{S}} \times \hat{\mathbf{S}} = 2i\hat{\mathbf{S}}$$

$$[\hat{S}_j, \hat{S}_k] = 2i\epsilon_{jkl} \hat{S}_l$$

$$\hat{S}^2 |\uparrow\rangle = \hbar^2 s(s+1) |\uparrow\rangle \Rightarrow s = \frac{1}{2} \Rightarrow \hat{\mathbf{S}}^2 |\uparrow\rangle = 3 |\uparrow\rangle$$

$$\hat{S}^2 |\downarrow\rangle = \hbar^2 s(s+1) |\downarrow\rangle \Rightarrow s = \frac{1}{2} \Rightarrow \hat{\mathbf{S}}^2 |\downarrow\rangle = 3 |\downarrow\rangle$$

Spin- leiteroperatoren::

$$\hat{\mathbf{S}}_{\pm} := \hat{\mathbf{S}}_1 \pm i\hat{\mathbf{S}}_2$$

$$\hat{\mathbf{S}}_+ |\uparrow\rangle = \hat{\mathbf{S}}_- |\downarrow\rangle = 0$$

Somit folgt:

$$\Rightarrow \hat{\mathbf{S}}_1 |\uparrow\rangle = -i\hat{\mathbf{S}}_2 |\uparrow\rangle$$

$$\hat{\mathbf{S}}_1 |\downarrow\rangle = i\hat{\mathbf{S}}_2 |\downarrow\rangle$$

Andererseits gilt:

$$\hat{\mathbf{S}}_+ |\downarrow\rangle = \mathbf{a} |\uparrow\rangle$$

$$\hat{\mathbf{S}}_- |\uparrow\rangle = \mathbf{b} |\downarrow\rangle$$

Beliebige Koeffizienten als Ansatz setzen !

Berechnung der Koeffizienten \mathbf{a}, \mathbf{b} :

$$\mathbf{a}^* \mathbf{a} = \langle \downarrow | \hat{\mathbf{S}}_+^\dagger \hat{\mathbf{S}}_+ | \downarrow \rangle = \langle \downarrow | (\hat{\mathbf{S}}_1 - i\hat{\mathbf{S}}_2)(\hat{\mathbf{S}}_1 + i\hat{\mathbf{S}}_2) | \downarrow \rangle$$

$$= \langle \downarrow | \hat{\mathbf{S}}_1^2 + \hat{\mathbf{S}}_2^2 + i[\hat{\mathbf{S}}_1, \hat{\mathbf{S}}_2] | \downarrow \rangle$$

$$[\hat{\mathbf{S}}_1, \hat{\mathbf{S}}_2] = 2i\hat{\mathbf{S}}_3$$

$$\hat{\mathbf{S}}_1^2 + \hat{\mathbf{S}}_2^2 = \hat{\mathbf{S}}^2 - \hat{\mathbf{S}}_3^2$$

$$\Rightarrow \mathbf{a}^* \mathbf{a} = \langle \downarrow | \hat{\mathbf{S}}^2 - \hat{\mathbf{S}}_3^2 - 2\hat{\mathbf{S}}_3 | \downarrow \rangle = \langle \downarrow | 3 - 1 + 2 | \downarrow \rangle = 4$$

$$\Rightarrow |\mathbf{a}| = 2$$

Weiter:

$$\langle \uparrow | \hat{\mathbf{S}}_+ | \downarrow \rangle = \mathbf{a} \langle \uparrow | \uparrow \rangle = \mathbf{a}$$

Aber gleichzeitig, wenn man den Operator gekreuzt nach links wirken läßt:

$$\langle \uparrow | \hat{\mathbf{S}}_+ | \downarrow \rangle = \langle \uparrow | \hat{\mathbf{S}}_-^\dagger | \downarrow \rangle = \mathbf{b}^* \langle \downarrow | \downarrow \rangle = \mathbf{b}^*$$

$$\rightarrow \mathbf{a} = \mathbf{b}^*$$

O.B. d. A.: wähle

$$\mathbf{a} = \mathbf{b} = 2$$

Auch hier gewinnt man wieder Bestimmungsgleichungen für die Eigenwerte bzw. die Koeffizienten, wir haben ja keine Eigenwerte hier, indem man die gesuchten Operatoren durch bekannte ausdrückt !

So folgt:

$$(\hat{\mathbf{S}}_1 + i\hat{\mathbf{S}}_2) |\downarrow\rangle = (\hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_1) |\downarrow\rangle = 2 |\uparrow\rangle$$

$$(\hat{\mathbf{S}}_1 - i\hat{\mathbf{S}}_2) |\uparrow\rangle = (\hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_1) |\uparrow\rangle = 2 |\downarrow\rangle$$

$$\Rightarrow \hat{\mathbf{S}}_1 |\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle$$

$$\hat{\mathbf{S}}_1 |\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle$$

Außerdem:

$$\begin{aligned}(\hat{\mathbf{S}}_1 + i\hat{\mathbf{S}}_2)|\downarrow\rangle &= (i\hat{\mathbf{S}}_2 + i\hat{\mathbf{S}}_2)|\downarrow\rangle = 2|\uparrow\rangle \\(\hat{\mathbf{S}}_1 - i\hat{\mathbf{S}}_2)|\uparrow\rangle &= -(i\hat{\mathbf{S}}_2 + i\hat{\mathbf{S}}_2)|\uparrow\rangle = 2|\downarrow\rangle \\ \Rightarrow \hat{\mathbf{S}}_2|\downarrow\rangle &= -i|\uparrow\rangle \\ \hat{\mathbf{S}}_2|\uparrow\rangle &= i|\downarrow\rangle\end{aligned}$$

Zusammenfassung:

	$ \uparrow\rangle$	$ \downarrow\rangle$
$\hat{\mathbf{S}}_1$	$ \downarrow\rangle$	$ \uparrow\rangle$
$\hat{\mathbf{S}}_2$	$i \downarrow\rangle$	$-i \uparrow\rangle$
$\hat{\mathbf{S}}_3$	$ \uparrow\rangle$	$ \downarrow\rangle$

Die Spin- Operatoren lassen sich in diesem Sinne durch 2x2 Matrizen darstellen:

(Im zweidimensionalen Spin- Eigenraum):

$$(\hat{\mathbf{S}}_i)_{ab} = \begin{pmatrix} \langle\uparrow|\hat{\mathbf{S}}_i|\uparrow\rangle & \langle\uparrow|\hat{\mathbf{S}}_i|\downarrow\rangle \\ \langle\downarrow|\hat{\mathbf{S}}_i|\uparrow\rangle & \langle\downarrow|\hat{\mathbf{S}}_i|\downarrow\rangle \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{a}, \mathbf{b} = 1, 2$$

$$i = 1, 2, 3$$

Die Matrizen lassen sich ausschreiben : Paulische Spinmatrizen:

$$(\hat{\mathbf{S}}_1)_{ab} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$(\hat{\mathbf{S}}_2)_{ab} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$(\hat{\mathbf{S}}_3)_{ab} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{\vec{S}} = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \frac{\hbar}{2} \\ \frac{\hbar}{2} & 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 0 & -i\frac{\hbar}{2} \\ \frac{\hbar}{2} & 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} \frac{\hbar}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar}{2} \end{pmatrix} \end{pmatrix}$$

Was den bekannten Relationen genügt:

$$\hat{\vec{S}}_1 \hat{\vec{S}}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} = i \hat{\vec{S}}_3$$

$$\hat{\vec{S}}_2 \hat{\vec{S}}_1 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = -i \hat{\vec{S}}_3$$

$$\Rightarrow [\hat{\vec{S}}_1, \hat{\vec{S}}_2] = 2i \hat{\vec{S}}_3$$

erfüllt, usw...

S3- Darstellung der Zustände:

$$\begin{pmatrix} \langle \mathbf{a} | \uparrow \rangle = \mathbf{d}_{a1} \\ \langle \mathbf{a} | \downarrow \rangle = \mathbf{d}_{a2} \end{pmatrix}$$

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

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

Dabei kennzeichnen $|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ die Basis- Spinoren (Spaltenvektoren)

$$\langle \uparrow | = (1, 0)$$

$$\langle \downarrow | = (0, 1) \quad \text{Zeilenvektoren (transponiert)}$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ was äquivalent ist zu } \hat{\mathbf{S}}_1 |\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle$$

4.2 Dynamik des 2- Zustands- Systems

Die potenzielle Energie des magnetischen Moments des Elektronen- Spins $\bar{\mathbf{m}}$ im äußeren Magnetfeld $\bar{\mathbf{B}} = B\bar{\mathbf{e}}_3$ beträgt:

$$V = -\bar{\mathbf{m}} \cdot \bar{\mathbf{B}}$$

$$\text{mit } \bar{\mathbf{m}} = +g \frac{e}{2m_0} \hat{\mathbf{S}} = +\frac{e\hbar}{2m_0} \hat{\mathbf{S}}$$

mit $g \sim 2$ und $e < 0$

Somit:

$$\hat{V} = -\frac{e\hbar}{2m_0} \hat{\mathbf{S}} \cdot \bar{\mathbf{B}} = -\frac{e\hbar B}{2m_0} \hat{\mathbf{S}}_3 = \hbar \mathbf{w}_l \hat{\mathbf{S}}_3$$

$$\text{Mit der Larmor- Frequenz } \mathbf{w}_l := \frac{|e| \hbar B}{2m_0}$$

Wenn der Spin an keine weitere Variable ankoppelt, so ist $\hat{H} = \hat{V}$ der Hamiltonoperator der Spinvariable (im Spin-Hilbertraum).

Die Dynamik eines Spins im Magnetfeld ergibt sich über den Zeitableitungsoperator:

$$\hat{\mathbf{S}}^\circ = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\mathbf{S}}] = i \mathbf{w}_l [\hat{\mathbf{S}}_3, \hat{\mathbf{S}}]$$

Berechnung der Erwartungswerte mit $[\hat{\mathbf{S}}_j, \hat{\mathbf{S}}_k] = 2i \mathbf{e}_{jkl} \hat{\mathbf{S}}_l$:

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{\mathbf{S}}_1 \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{\mathbf{S}}_1] \rangle = i \mathbf{w}_l \langle [\hat{\mathbf{S}}_3, \hat{\mathbf{S}}_1] \rangle = -2 \mathbf{w}_l \langle \hat{\mathbf{S}}_2 \rangle$$

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{\mathbf{S}}_2 \rangle = -2 \mathbf{w}_l \langle \hat{\mathbf{S}}_1 \rangle$$

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{\mathbf{S}}_3 \rangle = 2 \mathbf{w}_l \langle \hat{\mathbf{S}}_1 \rangle$$

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{\mathbf{S}}_3 \rangle = 0$$

Dies läßt sich reduzieren:

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle \hat{\mathbf{S}}_1 \rangle + (2 \mathbf{w}_l)^2 \langle \hat{\mathbf{S}}_1 \rangle = 0 \text{ Die Dynamik der Spins bildet also einen Oszillator in der x-y- Ebene.}$$

Die zeitliche Unabhängigkeit der Spin3- Komponente liegt dabei alleine an der Wahl des Koordinatensystems, bzw. der Basis ! Wir haben diese gerade so gewählt, dass die 3- Komponente zeitlich unabhängig wird.

Die Lösung der Diffgleichung liefert:

$$\langle \hat{\mathbf{S}}_1 \rangle_t = \langle \hat{\mathbf{S}}_2 \rangle_0 \sin(2\omega_L t) + \langle \hat{\mathbf{S}}_1 \rangle_0 \cos(2\omega_L t)$$

$$\langle \hat{\mathbf{S}}_2 \rangle_t = \langle \hat{\mathbf{S}}_2 \rangle_0 \cos(2\omega_L t) - \langle \hat{\mathbf{S}}_1 \rangle_0 \sin(2\omega_L t)$$

$$\langle \hat{\mathbf{S}}_3 \rangle_t = \langle \hat{\mathbf{S}}_3 \rangle_0$$

Die Anfangsbedingungen können ebenfalls durch Wahl des Koordinatensystems (feste x-y- Ebene) beeinflusst werden.

Wähle:

o.B. d.A.:

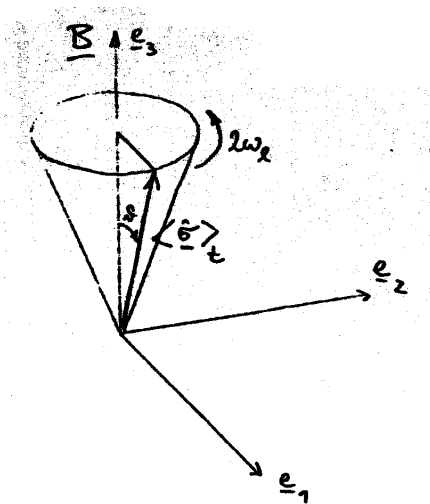
$$\langle \hat{\mathbf{S}}_2 \rangle_0 = 0$$

Wir können uns den Betrag des Erwartungswertes des gesamten Spinvektors ansehen und es zeigt sich :

$$\left| \langle \hat{\mathbf{S}} \rangle_t \right|^2 = \langle \hat{\mathbf{S}}_1 \rangle_t^2 + \langle \hat{\mathbf{S}}_2 \rangle_t^2 + \langle \hat{\mathbf{S}}_3 \rangle_t^2 = \langle \hat{\mathbf{S}}_1 \rangle_0^2 \left[\cos^2(2\omega_L t) + \sin^2(2\omega_L t) \right] + \langle \hat{\mathbf{S}}_3 \rangle_0^2 = \langle \hat{\mathbf{S}}_1 \rangle_0^2 + \langle \hat{\mathbf{S}}_3 \rangle_0^2$$

Mit anderen Worten:

$$\left| \langle \hat{\mathbf{S}} \rangle_t \right|^2 = \left| \langle \hat{\mathbf{S}} \rangle_0 \right|^2 = \text{const} , \text{ der Betrag des Spins ändert sich zeitlich nicht !}$$



Der Erwartungswert des Spins präzediert also mit der Frequenz $2\omega_L$ um das Magnetfeld.

Schrödingergleichung für die Spinzustände (Pauli- Gleichungen)

$$\hbar \omega_L \hat{\mathbf{S}}_3 |a(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |a(t)\rangle \text{ Achtung ! Nur Spin- Hamiltonian !}$$

Dabei muss der Zustand $|a(t)\rangle$ in der Spinbasis entwickelbar sein:

$$|a(t)\rangle = a_1(t) |\uparrow\rangle + a_2(t) |\downarrow\rangle$$

Matrix- Darstellung:

$$\hbar \mathbf{w}_l \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \end{pmatrix} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{aligned} -i\mathbf{w}_l a_1 &= \dot{a}_1 \\ i\mathbf{w}_l a_2 &= \dot{a}_2 \end{aligned}$$

Die Lösung lautet:

$$a_1(t) = a_{10} e^{-i\mathbf{w}_l t}$$

$$a_2(t) = a_{20} e^{i\mathbf{w}_l t}$$

$$|a(t)\rangle = a_{10} e^{-i\mathbf{w}_l t} |\uparrow\rangle + a_{20} e^{i\mathbf{w}_l t} |\downarrow\rangle$$

Nebenbemerkung: Hieraus gewinnt man $\langle \hat{\mathbf{S}}_j \rangle_t$, also die Spinpräzession wie oben !

4.3 Zustände mit Bahn- und Spinvariablen

Sei nun $|nlmm_s\rangle$ ein Zustand, der Bahn- und Spinfreiheitsgrade beschreibt:

$$|nlmm_s\rangle = |nlm\rangle |m_s\rangle \in H_B \times H_S$$

$$|nlm\rangle \in H_B$$

$$|m_s\rangle \in H_S$$

Der Bahnzustand ist Element des Bahn- Hilbertraumes und der Spinzustand Element des Spin- Hilbertraumes. Der Gesamtzustand erfordert einen Raum, der sich als DIREKTES PRODUKT der beiden Hilberträume zeigt.

Allgemein gilt für separable oder Produktzustände $|n_1 n_2\rangle = |n_1\rangle |n_2\rangle$ (äquivalente Sprechweise):

$$\langle m_1 m_2 | n_1 n_2 \rangle = \langle m_1 m_2 | n_1 \rangle \langle m_1 m_2 | n_2 \rangle = \langle m_1 | n_1 \rangle \langle m_2 | n_2 \rangle$$

Ein beliebiger Zustand kann nach Spin- Basis Zuständen $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ zerlegt werden:

$$|\Psi\rangle_t = |\Psi_1\rangle_t |\uparrow\rangle + |\Psi_2\rangle_t |\downarrow\rangle$$

mit

$$|\Psi_a\rangle_t = \int d^3 r |\vec{r}\rangle \langle \vec{r} | \Psi_a \rangle_t \quad \text{In der Ortsraum- Basis mit dem Bahn- Zustand } \mathbf{a} = 1, 2$$

In der Matrix- Darstellung des Spinraumes ergibt dies:

$$|\Psi\rangle_t = \begin{pmatrix} |\Psi_1\rangle_t \\ |\Psi_2\rangle_t \end{pmatrix} = \int d^3 r |\vec{r}\rangle \begin{pmatrix} \langle \vec{r} | \Psi_1 \rangle_t \\ \langle \vec{r} | \Psi_2 \rangle_t \end{pmatrix}$$

Mit

$$\begin{pmatrix} |\Psi_1\rangle_t \\ |\Psi_2\rangle_t \end{pmatrix} \text{ entsprechend 2 Spinkomponenten, also entsprechend } |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$$

$$\text{Die Vollständigkeit der Zustände } |\vec{r} \uparrow\rangle = |\vec{r}\rangle |\uparrow\rangle, |\vec{r} \downarrow\rangle = |\vec{r}\rangle |\downarrow\rangle$$

folgt aus:

$$\int d^3r \left\{ \langle \bar{r} \uparrow | \langle \bar{r} \uparrow | + | \bar{r} \downarrow \rangle \langle \bar{r} \downarrow | \right\} = 1 \quad \in H_B \times H_S$$

Weiter:

$$\langle \bar{r} \uparrow | \Psi \rangle_t = \langle \bar{r} | \Psi_1 \rangle_t \quad \text{Also die Komponenten von } |\Psi\rangle_t \text{ am Ort } \bar{r}, \text{ einmal die Komponente mit Spin } \uparrow \text{ und}$$

$$\langle \bar{r} \downarrow | \Psi \rangle_t = \langle \bar{r} | \Psi_2 \rangle_t$$

einmal die Komponente mit Spin \downarrow . Dabei gilt:

$$|\langle \bar{r} \uparrow | \Psi \rangle_t|^2 = |\langle \bar{r} | \Psi_1 \rangle_t|^2 \quad \text{entspricht der Wahrscheinlichkeit, das Elektron zur Zeit t bei } \bar{r} \text{ mit Spin } \uparrow \text{ bzw.}$$

$$|\langle \bar{r} \downarrow | \Psi \rangle_t|^2 = |\langle \bar{r} | \Psi_2 \rangle_t|^2$$

Spin \downarrow zu finden.

Schrödingergleichung im Spin- Bahn- Raum

Hamilton- Operator für Bahn:

$$\hat{H}_B = \frac{1}{2m_0} (\vec{p} - e\vec{A})^2 + V(r) \quad \text{Elektron mit Ladung } e < 0$$

Wirkt alleine im Hilbertraum H_B

Hamilton- Operator für Spin:

$$\hat{H}_S = -\hbar \mathbf{w}_l \hat{\mathbf{S}}_3$$

$$\mathbf{w}_l = \frac{|e|B}{2m_0}$$

\hat{H}_S wirkt dabei nur im Hilbertraum H_S

Ohne Berücksichtigung von \hat{H}_S :

$$\hat{H}_B |\Psi_a\rangle_t = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_a\rangle_t$$

$$\mathbf{a} = 1, 2$$

Also haben wir je nach Spinzustand schon 2 Schrödingergleichungen in H_B :

Es gilt (äquivalente Darstellung):

$$\hat{H}_B |\Psi_a\rangle_t = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_a\rangle_t \Leftrightarrow (\hat{H}_B \times 1) |\Psi\rangle_t = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle_t$$

$$\mathbf{a} = 1, 2$$

Dabei

1 = Einsoperator im Spinraum -> Spin bleibt unberücksichtigt. Einheitsmatrix für beliebigen Vorgang im

$$\text{Spinraum: } 1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

MIT Berücksichtigung von \hat{H}_S :

$$(\hat{H}_B \times 1 + \hat{H}_S) |\Psi\rangle_t = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle_t$$

In Matrix- Darstellung:

$$\begin{pmatrix} \hat{H}_B + \hbar \mathbf{w}_l & 0 \\ 0 & \hat{H}_B - \hbar \mathbf{w}_l \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\Psi_1\rangle_t \\ |\Psi_2\rangle_t \end{pmatrix} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} |\Psi_1\rangle_t \\ |\Psi_2\rangle_t \end{pmatrix}$$

$$\Leftrightarrow (\hat{H}_B + \hbar \mathbf{w}_l) |\Psi_1\rangle_t = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_1\rangle_t \quad \text{PAULI- GLEICHUNG}$$

$$(\hat{H}_B - \hbar \mathbf{w}_l) |\Psi_2\rangle_t = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_2\rangle_t$$

Anwendung

- einfacher Zeeman- Effekt mit Spin. 1 Elektron im kugelsymmetrischen Potenzial (Kern (H) oder Atomrumpf (Na)) und homogenen Magnetfeld $\vec{B} = B\vec{e}_3$

$$\hat{H} = \hat{H}_B \times 1 + H_S = \left[\frac{1}{2m_0} (\vec{p} - e\vec{A})^2 + V(r) \right] \times 1 - \frac{|e|\hbar B}{2m_0} \hat{\mathbf{S}}_3$$

Dabei wird durch $\hat{H}_B \times 1$ der Bahndrehimpuls Hamiltonian durch den Spinraum erweitert.

$$\hat{H} = \hat{H}_B \times 1 + H_S = \left[\frac{1}{2m_0} (\vec{p} - e\vec{A})^2 + V(r) \right] \times 1 - \frac{|e|\hbar B}{2m_0} \hat{\mathbf{S}}_3$$

$$\hat{H} \cong \left[\frac{\vec{p}^2}{2m_0} + V(r) \right] \times 1 - \frac{|e|B}{2m_0} (\hat{L}_3 \times 1 + \hbar \hat{\mathbf{S}}_3)$$

$$\frac{\vec{p}^2}{2m_0} + V(r) = H_0$$

$$H_0 |nlm\rangle = E_{nl} |nlm\rangle$$

Wie man sieht bekommt man durch den Korrekturterm $\frac{|e|B}{2m_0} (\hat{L}_3 \times 1 + \hbar \hat{\mathbf{S}}_3)$ eine Korrektur an die Energie.

Für B=0 -> Eigenzustände mit Spin

$$(H_0 \times 1) |nlmm_s\rangle = E_{nl} |nlmm_s\rangle$$

Insgesamt $2(2l+1)$ fach entartet. Beim H- Atom: zusätzliche l- Entartung

$$B \neq 0$$

$$\hat{H}|nlmm_s\rangle = H_0|nlm\rangle|m_s\rangle - \frac{|e|\hbar B}{2m_0} \left\{ \langle \hat{L}_3 | nlm \rangle |m_s\rangle + \hbar \langle \hat{S}_3 | m_s \rangle |nlm\rangle \right\}$$

$$\hat{L}_3|nlm\rangle = \hbar m|nlm\rangle$$

$$\hat{S}_3|m_s\rangle = \hbar m_s|m_s\rangle$$

$$H_0|nlm\rangle|m_s\rangle - \frac{|e|\hbar B}{2m_0} \left\{ \langle \hat{L}_3 | nlm \rangle |m_s\rangle + \hbar \langle \hat{S}_3 | m_s \rangle |nlm\rangle \right\} = \left[E_{nl} - \frac{|e|\hbar B}{2m_0} (m + 2m_s) \right] |nlmm_s\rangle$$

Das bedeutet:

teilweise Aufhebung der $2(2l+1)$ - fachen Entartung

(sogenannter Anomaler Zeemann- Effekt !)

$$E = E_{nl} - \mu_B B (m + 2m_s)$$

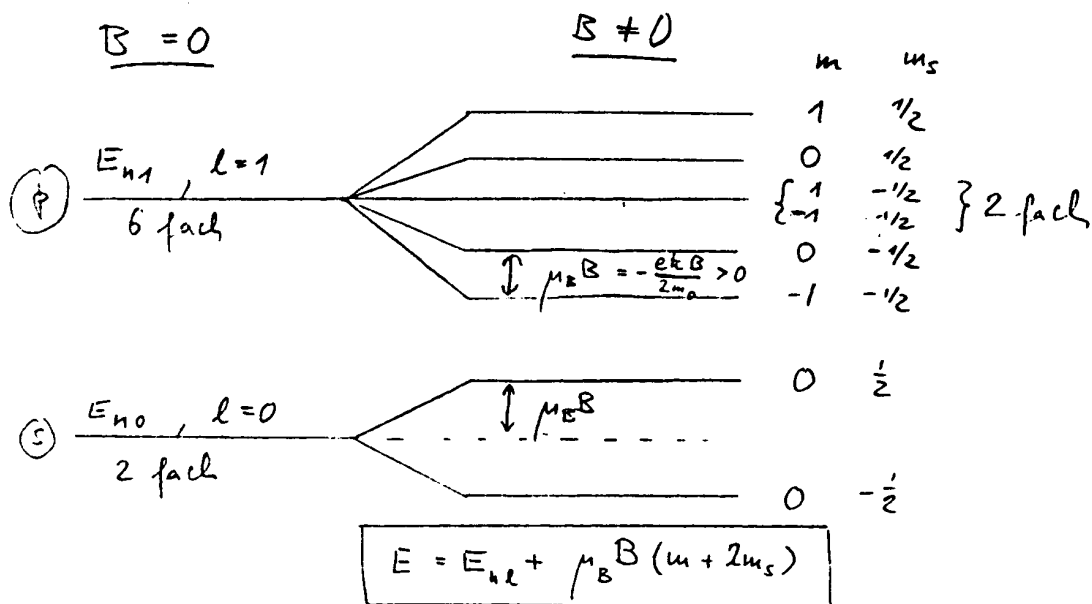
Dies gilt für PARAMAGNETISCHE Atome mit magnetischem Moment

$$\mu_B = \mu_B (m + 2m_s)$$

Dabei entspricht

2 vor m_s dem gyromagnetischen Verhältnis, kommt also wegen dem Landé- Faktor $g=2$, auch wenn dieser leicht von 2 verschieden ist ! (Siehe oben).

Für dieses Beispiel wird die Energieverschiebung linear zu B am besten in Einheiten von μ_B angegeben. s und p - Orbital lassen sich folgendermaßen in einem sogenannten Termschema skizzieren (für den anomalen Zeemann- Effekt):



Das heißt: die m- Entartung, die ohne Spin vollständig aufgehoben wurde, ist jetzt nur noch teilweise aufgehoben ! Da die Aufhebung der Spin- Entartung die Energiezustände wieder so " weiterrückt", dass vorher getrennte wieder zusammenfallen !

Tabelle: Landé- Faktoren

Teilchen	s	g	Q
Elektron	1/2	2	-e
Proton	1/2	5,59	e
Neutron	1/2	-3,83	0
Neutrino	1/2	0	0
Photon	1	0	0

4.3.a) Addition von Drehimpulsen(Vergl. Schwabl)

Der Gesamtdrehimpuls kann folgendermaßen dargestellt werden:

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$$

Die Vertauschungsrelationen:

$[\hat{L}_j, \hat{S}_k] = 0$ Beide Operatoren wirken in verschiedenen Räumen. Wäre der Operator nicht Null, so wären die zugehörigen Eigenzustände nicht separabel.

$$\Rightarrow [\hat{J}_j, \hat{J}_k] = [\hat{L}_j, \hat{L}_k] + [\hat{S}_j, \hat{S}_k]$$

$$[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i\hbar \mathbf{e}_{jkl} \hat{L}_l$$

$$[\hat{S}_j, \hat{S}_k] = i\hbar \mathbf{e}_{jkl} \hat{S}_l$$

$$\Rightarrow [\hat{J}_j, \hat{J}_k] = i\hbar \mathbf{e}_{jkl} \hat{J}_l$$

Drehimpuls Vertauschungsrelationen !

$$[\hat{J}^2, \hat{L}_3] = [\hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}, \hat{L}_3] = 2\hat{S}_j [\hat{L}_j, \hat{L}_3] = 2i\hbar (\hat{S}_2 \hat{L}_1 - \hat{S}_1 \hat{L}_2) \neq 0$$

Ebenso:

$$[\hat{J}^2, \hat{S}_3] \neq 0$$

Also:

Die $2(2l+1)$ Produktzustände $|lmm_s\rangle = |lm\rangle |m_s\rangle$ sind Eigenzustände zu $\hat{L}^2, \hat{L}_3, \hat{S}^2, \hat{S}_3$ aber nicht zu \hat{J}^2 , da

$$[\hat{J}^2, \hat{L}_3] \neq 0 \text{ bzw. } [\hat{J}^2, \hat{S}_3] \neq 0$$

Ziel: Suche gemeinsame Eigenzustände zu $\hat{J}^2, \hat{J}_3, \hat{L}^2, \hat{S}^2$.

Dies muss möglich sein, da

$$[\hat{J}^2, \hat{L}^2] = [\hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{L} \cdot \hat{S}, \hat{L}^2] = 0$$

$$[\hat{J}^2, \hat{S}^2] = [\hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{L} \cdot \hat{S}, \hat{S}^2] = 0$$

$$[\hat{J}_3, \hat{L}^2] = [\hat{L}_3 + \hat{S}_3, \hat{L}^2] = 0$$

$$[\hat{J}_3, \hat{S}^2] = [\hat{L}_3 + \hat{S}_3, \hat{S}^2] = 0$$

Die Eigenwertgleichungen lauten:

$$\hat{J}^2 |jm_jls\rangle = \hbar^2 (j(j+1)) |jm_jls\rangle$$

$$\hat{J}_3 |jm_jls\rangle = \hbar m_j |jm_jls\rangle$$

$$\hat{L}^2 |jm_jls\rangle = \hbar^2 (l(l+1)) |jm_jls\rangle$$

$$\hat{S}^2 |jm_jls\rangle = \hbar^2 (s(s+1)) |jm_jls\rangle$$

Durch Einschub eines Vollständigen Satzes orthonormierter Eigenfunktionen, durch Einschub eines Projektors auf diesen vollständigen Satz, also durch Einschub einer "1" kann der neue Eigenzustand $|jm_jls\rangle$ bezüglich des alten Zustandes $|lmsm_s\rangle$ entwickelt werden:

$$|jm_jls\rangle = \sum_{\substack{m \\ m_s = m_j - m}} |lmsm_s\rangle \langle lmsm_s | jm_jls\rangle$$

Zu beachten ist: Es wird ausschließlich über die Komponenten der alten Basis summiert, die sich von der neuen Basis unterscheiden (das heißt: Nur dieser Teil der Basis wird transformiert) !

Dabei heißen die Entwicklungskoeffizienten der neuen Basis bezüglich der alten Basisvektoren, also die Koordinaten der neuen Basis in der alten Basis

Clebsch- Gordan- Koeffizienten !

$$\langle lmsm_s | jm_jls\rangle$$

Dabei gilt:

$s = \frac{1}{2}$	$m_s = \frac{1}{2}$	$m_s = -\frac{1}{2}$
$j = l + \frac{1}{2}$	$\left(\frac{l + m_j + \frac{1}{2}}{2l + 1} \right)^{\frac{1}{2}}$	$\left(\frac{l - m_j + \frac{1}{2}}{2l + 1} \right)^{\frac{1}{2}}$
$j = l - \frac{1}{2}$	$-\left(\frac{l - m_j + \frac{1}{2}}{2l + 1} \right)^{\frac{1}{2}}$	$\left(\frac{l + m_j + \frac{1}{2}}{2l + 1} \right)^{\frac{1}{2}}$

Wobei:

$$j = l \pm \frac{1}{2}$$

$$m_j = m + m_s$$

$$m = -l, \dots, +l$$

$$m_s = -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$$

4.4: Identische Teilchen: Spin und Statistik

Betrachte: Systeme identischer Teilchen

Beispiel: N Elektronen im äußeren Potenzial V mit Coulomb- Wechselwirkung $W(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$

$$\text{Hamiltonoperator: } \hat{H} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\hat{p}_i^2}{2m} + V(\hat{r}_i) \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} W(|\hat{r}_i - \hat{r}_j|)$$

Dabei beschreibt $\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} W(|\hat{r}_i - \hat{r}_j|)$ die Wechselwirkungsenergie der Elektronen !

N- Elektronen - Zustand: $|a_1, a_2, a_3, \dots, a_N\rangle \in H \times H \times H \times \dots \times H \doteq H^{\times N}$

mit a_i = Satz von Quantenzahlen, z.B. $|j_i m_{j_i} l_i s_i\rangle, |n_i, l_i, m_i, m_{s_i}\rangle$ oder auch $|\vec{r}_i, m_{s_i}\rangle$

Die Nummer des Teilchen bestimmt dabei die Stellung in $|a_1, a_2, a_3, \dots, a_N\rangle \in H \times H \times H \times \dots \times H \doteq H^{\times N}$

Schrödingergleichung:

$$\hat{H}|a_1, a_2, a_3, \dots, a_N\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |a_1, a_2, a_3, \dots, a_N\rangle$$

Ortsdarstellung

$$\hat{H}|q_1, q_2, q_3, \dots, q_N; t\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |q_1, q_2, q_3, \dots, q_N; t\rangle$$

$$q_i \equiv (\vec{r}_i, m_{s_i})$$

In den verallgemeinerten Koordinaten werden also Ort UND Spin der Teilchen zusammengefasst.

Dabei ist $q_i \equiv (\vec{r}_i, m_{s_i})$ ein verallgemeinerter Ausdruck für einen vollständigen Satz Quantenzahlen!

Mikroskopische Teilchen mit gleichen Quantenzahlen sind ununterscheidbar.

Oder: Zwei durch jeweils eine einzige Wellenfunktion beschriebene Mehrteilchensysteme, in denen die mikroskopischen Teilchen i und j gegeneinander ausgetauscht sind, sind ununterscheidbar.

Definiere: Permutationsoperator: $\hat{P}_{(ij)}$, der i-tes und j-tes Teilchen tauscht:

$$\hat{P}_{(ij)}|a_1, a_2, a_3, \dots, a_i, \dots, a_j, a_N\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |a_1, a_2, a_3, \dots, a_j, \dots, a_i, \dots, a_N\rangle$$

$\hat{P}_{(ij)}$ ist unitär und hermitsch.

Dabei werden streng genommen die ZUSTÄNDE der Teilchen Nr. i und j vertauscht.

Man könnte sich vorstellen, dass die beiden Zustände jeweils auf das entsprechende andere Teilchen "teleportiert" werden.

Wegen der Ununterscheidbarkeit müssen ALLE Observablen mit $\hat{p}_{(ij)}$ vertauschen:

(Schließlich darf sich eine Wahrscheinlichkeit von Messwerten durch die Vertauschung nicht ändern. Es darf keine Unschärfe geben. Das bedeutet: Die Vertauschung ist nicht festzustellen !

$$[\hat{F}, \hat{p}_{(ij)}] = 0$$

Insbesondere

$$[\hat{H}, \hat{p}_{(ij)}] = 0$$

$\hat{p}_{(ij)}$ ist also eine Erhaltungsgröße und es existieren gemeinsame Eigenzustände zu JEDEM Operator und dem Permutationsoperator $\hat{p}_{(ij)}$

Wie beim Paritätsoperator gilt:

$$[\hat{p}_{(ij)}]^2 = 1$$

$$\hat{p}_{(ij)}|\Psi\rangle = \mathbf{I}_{ij}|\Psi\rangle$$

$$\mathbf{I}_{ij}^2 = 1$$

Die Forderung $[\hat{p}_{(ij)}]^2 = 1$ folgt aus der Ununterscheidbarkeit der Teilchen, aus $[\hat{p}_{(ij)}]^2 = 1$ folgt jedoch

$$|\hat{p}_{(ij)}\Psi(q_1, q_2, \dots, q_N, t)|^2 = |\Psi(q_1, q_2, \dots, q_N, t)|^2 = 1 = |\mathbf{I}_{ij}\Psi(q_1, q_2, \dots, q_N, t)|^2$$

$$\Rightarrow |\mathbf{I}_{ij}|^2 = 1$$

$$\Rightarrow \mathbf{I}_{ij} = \pm 1$$

Dieser Eigenwert ist ein "ewiges" Charakteristikum des Zustandes !

Speziell: 2- Teilchensystem

Sei $|a, b\rangle = |a\rangle_1 |a\rangle_2$ ein Zweiteilchenzustand $\in H \times H$.

$$\text{Dann ist } |a, b\rangle_s := \frac{1}{2}(1 + \hat{P}_{(12)})|a, b\rangle$$

Eigenzustand von $\hat{P}_{(12)}$ zum Eigenwert +1

Dieser Zustand ist symmetrisch, denn:

$$\hat{P}_{(12)}|a, b\rangle_s = \frac{1}{2}(\hat{P}_{(12)} + \hat{P}_{(12)}^2)|a, b\rangle = \frac{1}{2}(\hat{P}_{(12)} + 1)|a, b\rangle = |a, b\rangle_s$$

Außerdem ist $|a, b\rangle_a := \frac{1}{2}(1 - \hat{P}_{(12)})|a, b\rangle$ Eigenzustand von $\hat{P}_{(12)}$ zum Eigenwert -1 und ist antisymmetrisch,

denn:

$$\hat{P}_{(12)}|a, b\rangle_a = \frac{1}{2}(\hat{P}_{(12)} - 1)|a, b\rangle = -|a, b\rangle_a$$

N- Teilchensystem:

Alle $\hat{P}_{(ij)}$ kommutieren mit H, im Allgemeinen jedoch NICHT untereinander !

$$\hat{P}_{(12)}\hat{P}_{(23)}|a,b,c\rangle = \hat{P}_{(12)}|a,c,b\rangle = |c,a,b\rangle$$

$$\hat{P}_{(23)}\hat{P}_{(12)}|a,b,c\rangle = \hat{P}_{(23)}|b,a,c\rangle = |b,c,a\rangle$$

Daher sind komplizierte Symmetrieeigenschaften denkbar. Nicht nur symmetrisch und/ oder antisymmetrisch !

Dennoch sind in der Natur jedoch nur Zustände realisiert, die bei Vertauschung zweier BELIEBIGER ununterscheidbarer Teilchen symmetrisch $I_{(ij)} = +1$ oder antisymmetrisch $I_{(ij)} = -1$ sind.

Dies ist zu verstehen als die REDUKTION des Hilbertraumes $H \times H \times H \times \dots H (Nmal)$ auf einen symmetrischen H_N^+ und einen antisymmetrischen H_N^- Teilraum ERLAUBTER Zustände.

Symmetrie oder Antisymmetrie ist ein Charakteristikum der Teilchensorte und bleibt zeitlich erhalten wegen $[\hat{H}, \hat{P}_{(ij)}] = 0$:

Bosonen

sind Teilchen mit symmetrischem Zustand, alle Teilchen mit ganzzahligem Spin ($s=0,1,2,\dots$)

z.B. \mathbf{p} – oder K- Meson, Photon, Phonon, \mathbf{a} - Teilchen, Wasserstoffmolekül,...

➔ Bose- Einstein- Statistik

Fermionen

sind Teilchen mit antisymmetrischem Zustand. Dies sind alle Teilchen mit HALBZAHLIGEM Spin $s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$

z.B. Elektron, Proton, Neutron, Neutrino, Myon,...

➔ Fermi- Dirac- Statistik

An sich eine Erfahrungstatsache. der Beweis folgte jedoch aus der relativistischen Quantenfeldtheorie: Pauli, 1940

Pauli- Prinzip für Fermionen:

Die Wellenfunktionen sind total antisymmetrisch.

➔ 2 identische Fermionen können sich nicht in gleichen Einteilchenzuständen a befinden (Pauli- Verbot):

Denn:

$$|a,a\rangle_a = \frac{1}{2}(1 - \hat{P}_{(12)})|a,a\rangle = \frac{1}{2}(|a,a\rangle - |a,a\rangle) = 0$$

Beispiel:

$$|a\rangle = |n, l, m, m_s\rangle$$

Anwendung auf die Ortsdarstellung

Die Wahrscheinlichkeit, 2 identische Fermionen am gleichen Ort $|\vec{r}\rangle$ mit gleichem Spin m_s zu finden, ist identisch NULL. Das Pauli- Prinzip ist Grundlage für den Aufbau des Periodensystems der Elemente. Gilt natürlich NICHT für Bosonen !

Antisymmetrisierungs- Operator

$$\text{Im 2- Teilchen Raum: } \hat{A} := \frac{1}{2} (1 - \hat{P}_{(12)})$$

$$\text{Im N- Teilchen- Raum } \hat{A} := \frac{1}{N!} \sum_{r=1}^{N!} (-1)^P \hat{P}_{(r)}$$

Dabei stellt $\hat{P}_{(r)}$ die r-te Permutation von (1,2,3,4,...,N) her.

Es gibt insgesamt N! Permutationen (inklusive r=1 -> Identität).

P, also der Exponent an -1 ist die Zahl der Vertauschung von je 2 Teilchen, also:

$$(-1)^P = \pm 1 \text{ für gerade bzw. ungerade Permutation.}$$

Mit Hilfe von $\hat{A} := \frac{1}{N!} \sum_{r=1}^{N!} (-1)^P \hat{P}_{(r)}$ lassen sich quantenmechanische Zustände antisymmetrisieren. Dabei gilt:

$$|a_1, a_2, \dots, a_N\rangle_a := \hat{A} |a_1, a_2, \dots, a_N\rangle$$

Beispiel für N=3:

$$|a, b, c\rangle_a = \frac{1}{6} \{ |abc\rangle + |bca\rangle + |cab\rangle - |bac\rangle - |cba\rangle - |acb\rangle \}$$

Dieser Zustand ist antisymmetrisch bei der Vertauschung von jeweils 2 Teilchen !

Symmetrisierungsoperator

$$\hat{S} := \frac{1}{N!} \sum_{r=1}^{N!} \hat{P}_{(r)}$$

$$|a_1, a_2, \dots, a_N\rangle_S := \hat{S} |a_1, a_2, \dots, a_N\rangle$$

Der Operator erzeugt einen Zustand der symmetrisch ist bei der Vertauschung von je 2 Teilchen.

\hat{A} und \hat{S} sind hermitesch und idempotent: $\hat{A} = \hat{A}^2$; $\hat{S}^2 = \hat{S}$. Das bedeutet: Sie sind Projektoren. Sie projizieren einen Zustand auf den SYMMETRISCHEN oder den ANTISYMMETRISCHEN Anteil.

N=2:

$$\hat{S} + \hat{A} = 1. \text{ Dies entspricht einer Vollständigkeitsrelation.}$$

Nun können wir deutlich sehen, was eine solche VOLLSTÄNDIGKEIT eigentlich bedeutet. Hier: der Operator symmetrisiert oder antisymmetrisiert. Dies ist genau dann vollständig, wenn JEDE 2- Teilchen- Funktion entweder symmetrisch oder antisymmetrisch ist.

\hat{S} projiziert auf den symmetrischen Unterraum des Hilbertraumes $H \times H$. \hat{A} dagegen projiziert auf den antisymmetrischen Unterraum des Hilbertraumes $H \times H$.

Für N>2 (Siehe oben, kompliziertere Symmetrien denkbar) projizieren $\hat{S} + \hat{A}$ auf einen echten Teilraum des Hilbertraumes $H \times H$.

$\sum_{r=1}^{N!} (-1)^P \hat{P}_{(r)}$ oder $\sum_{r=1}^{N!} \hat{P}_{(r)}$ würden insgesamt, als Gesamtzustand gesehen, einen nichtnormierten Zustand

erzeugen, der nämlich aus N! normierten Zuständen besteht. Durch den Vorfaktor $\frac{1}{N!}$ wird die Normierung garantiert !

Wechselwirkungsfreie, identische Teilchen

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \hat{H}_i$$

$$\hat{H}_i = \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + V(\vec{r}_i)$$

Schrödingergleichung: $\hat{H}|a_1, \dots, a_N\rangle = E|a_1, \dots, a_N\rangle$ lässt sich separieren (keine Wechselwirkung, für jedes neue Teilchen wird der Hilbertraum einfach erweitert):

$$|a_1, \dots, a_N\rangle = |a_1\rangle_1 |a_2\rangle_2 \dots |a_N\rangle_N$$

$|a_j\rangle_k$ ist dabei der j. Satz Quantenzahlen, der dem k. Teilchen zugeordnet wird. Natürlich nummeriert man die Quantenzahlensätze nach den Teilchen, auf denen sie sitzen. Um aber den Effekt vom Tauschen von Quantenzahlen zu analysieren macht man hypothetisch den Schritt, dass ein Satz Quantenzahlen, der dem 3. Teilchen gehört, nun auf dem 4. Teilchen sitzt. Also würde man schreiben $|a_3\rangle_4$

Dabei bezeichnet der innere Index den Quantenzahlensatz und der äußere Index die Teilchen- Nummer.

Jedes Element der Schrödingergleichung wirkt dann separat auf den ihm zugeordneten Zustand:

$$\hat{H}_i |a_i\rangle_i = E_i |a_i\rangle_i$$

$$E = \sum_i E_i$$

Fermionen : Antisymmetrisierung

$$|a_1, \dots, a_N\rangle_a = \hat{A}(|a_1\rangle_1 |a_2\rangle_2 \dots |a_N\rangle_N) = \frac{1}{N!} \begin{vmatrix} |a_1\rangle_1 & |a_1\rangle_2 & \dots & |a_1\rangle_N \\ |a_2\rangle_1 & |a_2\rangle_2 & \dots & |a_2\rangle_N \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ |a_N\rangle_1 & |a_N\rangle_2 & \dots & |a_N\rangle_N \end{vmatrix}$$

Der Antisymmetrisierte Zustand ergibt sich als normierte Determinante einer Matrix, der die Teilchen Spaltenweise und ihre Quantenzahlen als separierte Einzelzustände zeilenweise aufgedröselt sind.

Diese Determinante heißt auch Slater- Determinante.

Auf der Diagonalen sitzen die Teilchen mit denen ihnen natürlicherweise zugeordneten Quantenzahlensätzen.

Außerhalb der Diagonale treten die systematisiert abgeklapperten hypothetischen Vertauschungen von Quantenzahlen auf.

Die Determinante verschwindet, wenn 2 Zeilen gleich sind, also 2 Teilchen den gleichen Satz Quantenzahlen haben ! Nur dann können zwei Zeilen gleich werden. Oder aber, wenn 2 Spalten gleich sind, was man so verstehen könnte, dass man sich zwei Teilchen, denen man die Nummern 1 und 2 geben sollte, als gleich definiert und ihnen beiden die Nummer 1 zuordnet !, also alle Quantenzahlen für 2 beliebige Teilchen gleich sind. Ein solcher Zustand existiert einfach nicht -> Pauli- Prinzip !!

Bosonen: Symmetrisierung

$$|a_1, \dots, a_N\rangle_S = \hat{S}(|a_1\rangle_1 |a_2\rangle_2 \dots |a_N\rangle_N)$$

Normierung

für orthonogonale und normierte 1- Teilchen- Zustände:

$$\begin{aligned} f_n^2 \langle a_1, \dots, a_N | a_1, \dots, a_N \rangle_a &= f_n^2 ({}_1\langle a_1 | \dots {}_N\langle a_N |) \hat{A} \hat{A} (|a_1\rangle_1 \dots |a_N\rangle_N) \\ &= f_n^2 ({}_1\langle a_1 | \dots {}_N\langle a_N |) \hat{A} (|a_1\rangle_1 \dots |a_N\rangle_N) = f_n^2 ({}_1\langle a_1 | \dots {}_N\langle a_N |) \frac{1}{N!} \begin{vmatrix} |a_1\rangle_1 & |a_1\rangle_2 & \dots & |a_1\rangle_N \\ |a_2\rangle_1 & |a_2\rangle_2 & \dots & |a_2\rangle_N \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ |a_N\rangle_1 & |a_N\rangle_2 & \dots & |a_N\rangle_N \end{vmatrix} \\ &= f_n^2 \frac{1}{N!} \begin{vmatrix} {}_1\langle a_1 | a_1 \rangle_1 & {}_2\langle a_2 | a_1 \rangle_2 & \dots & {}_N\langle a_N | a_1 \rangle_N \\ {}_1\langle a_1 | a_2 \rangle_1 & {}_2\langle a_2 | a_2 \rangle_2 & \dots & {}_N\langle a_N | a_2 \rangle_N \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ {}_1\langle a_1 | a_N \rangle_1 & {}_2\langle a_2 | a_N \rangle_2 & \dots & {}_N\langle a_N | a_N \rangle_N \end{vmatrix} \\ {}_1\langle a_1 | a_1 \rangle_1 &= 1 \\ {}_1\langle a_i | a_j \rangle_1 &= 0 \quad i \neq j \\ \Rightarrow f_n^2 \frac{1}{N!} \begin{vmatrix} {}_1\langle a_1 | a_1 \rangle_1 & {}_2\langle a_2 | a_1 \rangle_2 & \dots & {}_N\langle a_N | a_1 \rangle_N \\ {}_1\langle a_1 | a_2 \rangle_1 & {}_2\langle a_2 | a_2 \rangle_2 & \dots & {}_N\langle a_N | a_2 \rangle_N \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ {}_1\langle a_1 | a_N \rangle_1 & {}_2\langle a_2 | a_N \rangle_2 & \dots & {}_N\langle a_N | a_N \rangle_N \end{vmatrix} &= f_n^2 \frac{1}{N!} \begin{vmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{vmatrix} = f_n^2 \frac{1}{N!} \equiv 1! \\ \Rightarrow f_n &= \sqrt{N!} \end{aligned}$$

Normierte Antisymmetrische Zustände

$$|a_1, \dots, a_N\rangle_a^- = \sqrt{N!} \hat{A} (|a_1\rangle_1 \dots |a_N\rangle_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} |a_1\rangle_1 & |a_1\rangle_2 & \dots & |a_1\rangle_N \\ |a_2\rangle_1 & |a_2\rangle_2 & \dots & |a_2\rangle_N \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ |a_N\rangle_1 & |a_N\rangle_2 & \dots & |a_N\rangle_N \end{vmatrix}$$

Ortsdarstellung

$$\langle \bar{r}_1 \dots \bar{r}_N \| a_1, \dots, a_N \rangle_a^- = \Psi^-(\bar{r}_1, \dots, \bar{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \Psi_{a_1}(\bar{r}_1) & \Psi_{a_1}(\bar{r}_2) & \dots & \Psi_{a_1}(\bar{r}_N) \\ \Psi_{a_2}(\bar{r}_1) & \Psi_{a_2}(\bar{r}_2) & \dots & \Psi_{a_2}(\bar{r}_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \Psi_{a_N}(\bar{r}_1) & \Psi_{a_N}(\bar{r}_2) & \dots & \Psi_{a_N}(\bar{r}_N) \end{vmatrix}$$

Unterschiede zur klassischen Statistik unterscheidbarer Teilchen (N=2)

$$|\Psi_{ab}(\bar{r}_1, \bar{r}_2)|^2 = |\langle \bar{r}_1 \bar{r}_2 \| ab \rangle|^2 = \left| {}_1\langle \bar{r}_1 \| a \rangle {}_2\langle \bar{r}_2 \| b \rangle \right|^2 = |\Psi_a(\bar{r}_1)|^2 |\Psi_b(\bar{r}_2)|^2$$

Klassisch.

Dies stimmt jedoch in der Quantenmechanik nicht mehr. Vollständig wird die Relation, wenn man den resultierenden Mehrteilchenzustand und seine Wahrscheinlichkeitsverteilung

$|\langle \bar{r}_1 \bar{r}_2 \| ab \rangle|^2$ symmetrisiert, bzw. antisymmetrisiert:

$$|\langle \bar{r}_1 \bar{r}_2 \| ab \rangle_{s,a}|^2$$

Es folgt:

$$\begin{aligned} |\Psi_{ab}(\bar{r}_1, \bar{r}_2)|^2 &= |\langle \bar{r}_1 \bar{r}_2 \| ab \rangle_{s,a}|^2 = \frac{1}{2} \left| {}_1\langle \bar{r}_1 \| a \rangle {}_2\langle \bar{r}_2 \| b \rangle \pm {}_1\langle \bar{r}_1 \| a \rangle {}_2\langle \bar{r}_2 \| b \rangle \right|^2 \\ &= \frac{1}{2} |\Psi_a(\bar{r}_1) \Psi_b(\bar{r}_2) \pm \Psi_b(\bar{r}_1) \Psi_a(\bar{r}_2)|^2 \end{aligned}$$

Mit dem Austauschterm $\Psi_b(\bar{r}_1) \Psi_a(\bar{r}_2) \rightarrow$ Grundlagen der quantenmechanischen Korrelation, Entanglement.

Spezialfall: $\bar{r}_1 = \bar{r}_2 = \bar{r}$

Damit ergibt sich für Bosonen:

$$\begin{aligned} |\Psi_{ab}(\bar{r}, \bar{r})|^2 &= |\langle \bar{r} \bar{r} \| ab \rangle_s|^2 = \frac{1}{2} \left| {}_1\langle \bar{r} \| a \rangle {}_2\langle \bar{r} \| b \rangle + {}_1\langle \bar{r} \| a \rangle {}_2\langle \bar{r} \| b \rangle \right|^2 \\ &= \frac{1}{2} |\Psi_a(\bar{r}) \Psi_b(\bar{r}) + \Psi_b(\bar{r}) \Psi_a(\bar{r})|^2 = 2 |\Psi_a(\bar{r})|^2 |\Psi_b(\bar{r})|^2 \end{aligned}$$

Dieser Zustand ist der Zustand der Bose- Einstein Kondensation (superfluides Helium beispielsweise).

Für Fermionen:

$$\begin{aligned} |\Psi_{ab}(\bar{r}, \bar{r})|^2 &= |\langle \bar{r} \bar{r} \| ab \rangle_a|^2 = \frac{1}{2} \left| {}_1\langle \bar{r} \| a \rangle {}_2\langle \bar{r} \| b \rangle - {}_1\langle \bar{r} \| a \rangle {}_2\langle \bar{r} \| b \rangle \right|^2 \\ &= \frac{1}{2} |\Psi_a(\bar{r}) \Psi_b(\bar{r}) - \Psi_b(\bar{r}) \Psi_a(\bar{r})|^2 = 0 \end{aligned}$$

Für Fermionen beträgt die Wahrscheinlichkeitsamplitude für identische Teilchen am gleichen Ort also Null.

Beispiel: ebene Wellen:

$$\Psi_a(\vec{r}) = e^{ikx}$$

$$\Psi_b(\vec{r}) = e^{-ikx}$$

Klassisch folgt:

$$|\Psi_{ab}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2 = 1$$

Also: beide Teilchen befinden sich irgendwo, aber diese Wahrscheinlichkeit ist konstant, ortsunabhängig !

In der Quantenmechanik dagegen ergeben sich je nach räumlichem Abstand der Ereignisse oszillierende Wahrscheinlichkeitsamplituden:

Bose:

$$|\Psi_{ab}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2 = \left| e^{ik(x_1 - x_2)} + e^{-ik(x_1 - x_2)} \right|^2 = 2 \cos^2 k(x_1 - x_2)$$

Das bedeutet, Bosonen haben einen räumlichen Abstand derart, dass die Phasen bevorzugt 0 oder 180 ° verschoben sind. An diesen Abständen interferieren sie konstruktiv und erscheinen uns als phänomenologische Teilchen.

Fermi:

$$|\Psi_{ab}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2 = \left| e^{ik(x_1 - x_2)} - e^{-ik(x_1 - x_2)} \right|^2 = 2 \sin^2 k(x_1 - x_2)$$

Fermionen interferieren gerade an den Stellen konstruktiv und treten dementsprechend dort in Erscheinung, wo die Wellenfunktionen um Vielfache von 90° phasenverschoben sind und somit den Sinus maximieren !

5. Näherungsmethoden

5.1 Zeitabhängige Störungsrechnung (Dirac)

Es soll die zeitliche Entwicklung eines Zustandes $|\Psi\rangle_t$ aus der Schrödingergleichung

$$\hat{H}|\Psi\rangle_t = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle_t$$

berechnet werden, wobei

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1(t)$$

durch den ungestörten Hamilton- Operator mit einer kleinen Störung repräsentiert wird.

Die Störung lasse sich als Potenzialstörung darstellen, die mittels des von Null verschiedenen jedoch kleinen Parameters ϵ

linear entwickelt werden kann:

$$\hat{H}_1(t) = \epsilon \hat{V} \quad (\text{dabei kann die Störung natürlich explizit zeitabhängig sein !})$$

Die Eigenzustände und Eigenwerte von H_0 seien bekannt:

$$\hat{H}_0|n\rangle = E_n|n\rangle$$

(ungestörte Problem)

Dabei gilt natürlich weiterhin die Orthonormierung und Vollständigkeit des Basissystems:

$$\langle n'|n\rangle = \delta_{n'n}$$

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = 1 \quad \text{Annahme: diskretes Spektrum}$$

Die Entwicklung von $|\Psi\rangle_t$ nach den Eigenzuständen des ungestörten Systems liefert:

$$\sum_n |n\rangle\langle n|\Psi\rangle_t = \sum_n c_n(t)|n\rangle$$

$$\langle n|\Psi\rangle_t := c_n(t)$$

Die Anfangsbedingung sei ein noch ungestörter Zustand $|n_0\rangle$

$$|\Psi\rangle_{t=0} = |n_0\rangle$$

Damit:

$$\langle n|n_0\rangle := c_n(0) = \delta_{nn_0}$$

Die Zeitentwicklung unter dem Einfluß der Störung lautet (Einsetzen von $\sum_n |n\rangle\langle n|\Psi\rangle_t = \sum_n c_n(t)|n\rangle$ in die

$$\langle n|\Psi\rangle_t := c_n(t)$$

Schrödingergleichung: :

$$\hat{H}|\Psi\rangle_t = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle_t$$

$$\Rightarrow \sum_n c_n(t) \hat{H}|n\rangle = i\hbar \sum_n \frac{d}{dt} c_n(t) |n\rangle = \sum_n c_n(t) (\hat{H}_0 + \hat{H}^1(t)) |n\rangle = \sum_n c_n(t) (E_n + \hat{H}^1(t)) |n\rangle$$

Charakteristisch für diese entwickelten Probleme ist das Auftreten der Summe, wie hier zu sehen. Diese kann man beseitigen, indem von links mit einem zweiten Zustand "herausprojiziert" wird):

$$\begin{aligned} i\hbar \sum_n \frac{d}{dt} c_n(t) \langle m|n\rangle &= \sum_n c_n(t) \langle m|(\hat{H}_0 + \hat{H}^1(t))|n\rangle = \sum_n c_n(t) \langle m|(E_n + \hat{H}^1(t))|n\rangle \\ &= \sum_n c_n(t) (\langle m|E_n|n\rangle + \langle m|\hat{H}^1(t)|n\rangle) = \sum_n c_n(t) E_n \delta_{mn} + \sum_n c_n(t) \langle m|\hat{H}^1(t)|n\rangle \\ &\Rightarrow i\hbar \sum_n \frac{d}{dt} c_n(t) \langle m|n\rangle = c_m(t) E_m + \sum_n c_n(t) \langle m|\hat{H}^1(t)|n\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} c_m(t) \end{aligned}$$

Hilfreich ist die Definition eines

$$c_n(t) := e^{-\left(i \frac{E_n t}{\hbar}\right)} g_n(t)$$

mit Hilfe der Eigenwerte des Zeitentwicklungsoperators für die ungestörten Zustände:

$$e^{-\left(i \frac{E_n t}{\hbar}\right)}$$

Man schreibt also eine Zeitentwicklung für die Entwicklungskoeffizienten auf !

Somit kann die Differenzialgleichung für die Entwicklungskoeffizienten umgeschrieben werden:

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_m(t) = c_m(t) E_m + \sum_n c_n(t) \langle m|\hat{H}^1(t)|n\rangle$$

mit

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_m(t) = c_m(t) E_m + e^{-\left(i \frac{E_m t}{\hbar}\right)} i\hbar \frac{d}{dt} g_m(t)$$

Setzt man dies ein, so folgt:

$$c_m(t) E_m + e^{-\left(i \frac{E_m t}{\hbar}\right)} i\hbar \frac{d}{dt} g_m(t) = c_m(t) E_m + \sum_n c_n(t) \langle m|\hat{H}^1(t)|n\rangle$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{d}{dt} g_m(t) = e^{\left(i \frac{E_m t}{\hbar}\right)} \sum_n c_n(t) \langle m|\hat{H}^1(t)|n\rangle$$

und wegen

$$c_n(t) := e^{-\left(i \frac{E_n t}{\hbar}\right)} g_n(t)$$

also:

$$i\hbar \frac{d}{dt} g_m(t) = \sum_n e^{\left(i \frac{(E_m - E_n) t}{\hbar}\right)} \langle m|\hat{H}^1(t)|n\rangle g_n(t)$$

Die eigentliche Störungsrechnung kommt erst jetzt:
Wir machen eine Störungsentwicklung für kleines \mathbf{e} :

$$\hat{H}_1(t) = \mathbf{e}\hat{V} \quad (\text{dabei kann die Störung natürlich explizit zeitabhängig sein !})$$

Man motiviert dass bei kleinen Potenzialstörungen höhere Ordnungen von $\langle m | \hat{H}^1(t) | n \rangle$ polynomial in \mathbf{e} fallen, was für die Entwicklungskoeffizienten bedeutet:

$$g_n(t) = g_n^{(0)}(t) + \mathbf{e}g_n^{(1)}(t) + \mathbf{e}^2 g_n^{(2)}(t) + \dots$$

Merke: Der entscheidende Schritt der zeitabhängigen Störungsrechnung ist hier: die Taylorentwicklung der Entwicklungskoeffizienten, in denen der Zustand entwickelt wurde.

Dabei gilt:

$$\sum_n |n\rangle \langle n | \Psi \rangle_t = \sum_n c_n(t) |n\rangle$$

$$\langle n | \Psi \rangle_t := c_n(t)$$

$$c_n(t) := e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} g_n(t)$$

Da aber die Differenzialgleichung für unsere $g_m(t)$

$$i\hbar \frac{d}{dt} g_m(t) = \sum_n e^{i\frac{(E_m - E_n)t}{\hbar}} \langle m | \hat{H}^1(t) | n \rangle g_n(t)$$

ebenso beidseitig entwickelt werden kann:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} (g_m^{(0)}(t) + \mathbf{e}g_m^{(1)}(t) + \mathbf{e}^2 g_m^{(2)}(t) + \dots) \\ = \sum_n e^{i\frac{(E_m - E_n)t}{\hbar}} \langle m | \hat{H}^1(t) | n \rangle (g_n^{(0)}(t) + \mathbf{e}g_n^{(1)}(t) + \mathbf{e}^2 g_n^{(2)}(t) + \dots) \end{aligned}$$

und dies für beliebige \mathbf{e} gilt, kann an der Gleichung ein Koeffizientenvergleich in der Ordnung \mathbf{e}^k durchgeführt werden und es folgt: $k = 0$:

$$i\hbar \frac{d}{dt} g_m^{(0)}(t) = 0$$

$$\Rightarrow g_m^{(0)}(t) = \text{const} =: \mathbf{d}_{mn_0}$$

Exakte Lösung für $\mathbf{e} = 0$:

$$c_m^{(0)}(t) = e^{-i\frac{E_m t}{\hbar}} \mathbf{d}_{mn_0}$$

Für k=1

$$i\hbar \frac{d}{dt} g_m^{(1)}(t) = \sum_n e^{i\frac{(E_m - E_n)t}{\hbar}} \langle m | \hat{V} | n \rangle g_n^{(0)}$$

Dabei wurde $\mathbf{e}^k = \mathbf{e}^1$ bereits beidseitig gekürzt.

Beim Vergleich der Ordnungen von \mathbf{e} muss man aufpassen.

Links ist die Ordnung des Entwicklungskoeffizienten gleich der Ordnung von \mathbf{e} . Rechts dagegen hat man eine Ordnung von \mathbf{e} , die noch um eines größer ist als die Ordnung des Entwicklungskoeffizienten, da ja noch

$\hat{H}_1(t) = \mathbf{e}\hat{V}$. Also hat man formal in erster Ordnung von \mathbf{e} :

$$i\hbar \frac{d}{dt} \mathbf{e} g_m^{(1)}(t) = \sum_n e^{\left(i \frac{(E_m - E_n)t}{\hbar}\right)} \langle m | \mathbf{e}\hat{V} | n \rangle g_n^{(0)} \Rightarrow i\hbar \frac{d}{dt} g_m^{(1)}(t) = \sum_n e^{\left(i \frac{(E_m - E_n)t}{\hbar}\right)} \langle m | \hat{V} | n \rangle g_n^{(0)}$$

Wir wissen: $g_m^{(0)}(t) = \text{const} \neq \mathbf{d}_{mn_0}$

Somit:

$$i\hbar \frac{d}{dt} g_m^{(1)}(t) = \sum_n e^{\left(i \frac{(E_m - E_n)t}{\hbar}\right)} \langle m | \hat{V} | n \rangle g_n^{(0)}$$

also:

$$i\hbar \frac{d}{dt} g_m^{(1)}(t) = e^{\left(i \frac{(E_m - E_{n_0})t}{\hbar}\right)} \langle m | \hat{V} | n_0 \rangle$$

und mit der Anfangsbedingung $g_n^{(1)}(0) = 0$ kann formal integriert werden:

$$g_m^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt e^{\left(i \frac{(E_m - E_{n_0})t}{\hbar}\right)} \langle m | \hat{V} | n_0 \rangle$$

Übergangswahrscheinlichkeit

Per Definition die Wahrscheinlichkeit, zur Zeit t den Zustand $|n\rangle$ zu finden, wenn zu $t=0$ der Zustand $|n_0\rangle$ vorliegt.

$$\left| \langle n | \Psi \rangle_t \right|^2 = \left| \sum_{n'} c_{n'}(t) \langle n | n' \rangle \right|^2 = |c_n(t)|^2 = |g_n(t)|^2$$

Als Näherung wird nur die niedrigste, nichtverschwindende Ordnung betrachtet:

$$g_n(t) = g_n^{(0)} = \mathbf{d}_{nn_0} = 1 \quad \text{für } n=n_0$$

und

$$g_n(t) = \mathbf{e} g_n^{(1)} \quad \text{für } n \neq n_0:$$

Zeitunabhängige Störung: $\hat{V} = \text{const.}$:

$$g_n^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt e^{i \frac{(E_n - E_{n0})t}{\hbar}} \langle n | \hat{V} | n_0 \rangle = -\langle n | \hat{V} | n_0 \rangle \frac{e^{i \frac{(E_n - E_{n0})t}{\hbar}} - 1}{E_n - E_{n0}}$$

$$\left| g_n^{(1)}(t) \right|^2 = \left| \langle n | \hat{V} | n_0 \rangle \right|^2 \left\{ \frac{e^{-i \frac{(E_n - E_{n0})t}{\hbar}} - 1}{E_n - E_{n0}} \right\} \left\{ \frac{e^{i \frac{(E_n - E_{n0})t}{\hbar}} - 1}{E_n - E_{n0}} \right\} := \left| \langle n | \hat{V} | n_0 \rangle \right|^2 \left\{ \frac{(e^{-i\Omega t} - 1)(e^{i\Omega t} - 1)}{\Omega^2 \hbar^2} \right\}$$

$$\Omega := \frac{(E_n - E_{n0})}{\hbar}$$

$$\Rightarrow \left| g_n^{(1)}(t) \right|^2 = \left| \langle n | \hat{V} | n_0 \rangle \right|^2 \frac{2(1 - \cos \Omega t)}{\Omega^2 \hbar^2} = \left| \langle n | \hat{V} | n_0 \rangle \right|^2 \frac{4 \sin^2 \frac{\Omega}{2} t}{\Omega^2 \hbar^2}$$

$$\frac{4 \sin^2 \frac{\Omega}{2} t}{\Omega^2 \hbar^2} := D_t(E_n - E_{n0})$$

$$\Rightarrow \left| g_n^{(1)}(t) \right|^2 = \left| \langle n | \hat{V} | n_0 \rangle \right|^2 D_t(E_n - E_{n0})$$

Die Größe $\Omega := \frac{(E_n - E_{n0})}{\hbar}$ heißt Übergangsfrequenz. Und bezieht sich auf den Übergang von $|n_0\rangle$ auf $|n\rangle$:

Für die Darstellung der Übergangswahrscheinlichkeit um die optimale Energie gilt (grafisch):

$$D_t(0) = \left(\frac{t}{\hbar} \right)^2$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} (D_t(0)) = \infty$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} D_t(E) = \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{4 \sin^2 \left(\frac{Et}{2\hbar} \right)}{E^2} = \frac{2t}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{x} \frac{\sin^2 \mathbf{x}}{\mathbf{x}^2}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{x} \frac{\sin^2 \mathbf{x}}{\mathbf{x}^2} = \mathbf{p}$$

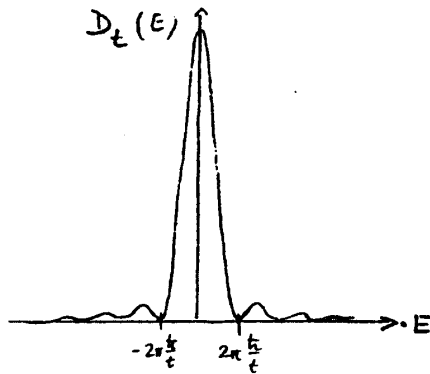
$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} D_t(E) = \frac{2\mathbf{p}}{\hbar} t$$

Also:

$$D_t(E) =: \frac{2\mathbf{p}}{\hbar} t \mathbf{d}_t(E)$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} D_t(E) = \frac{2\mathbf{p}}{\hbar} t \mathbf{d}(E)$$

Grafisch



$$\Rightarrow \left| \langle n | \Psi \rangle_t \right|^2 = |g_n(t)|^2 = \frac{2\mathbf{p}}{\hbar} \left| \langle n | \hat{H}^1 | n_0 \rangle \right|^2 \cdot t \cdot \mathbf{d}_t(E_n - E_{n_0})$$

Für $t \rightarrow \infty$ Energieerhaltung: $E_n - E_{n_0} = 0$

Für $t < \infty$ hat $D_t(E) =: \frac{2\mathbf{p}}{\hbar} t \mathbf{d}_t(E)$ die Breite $\Delta E \cong \frac{4\mathbf{p}\hbar}{t}$

Damit folgt die Energie- Zeit Unschärferelation:

$$\Delta E t \cong 4\mathbf{p}\hbar$$

Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit (von $|n_0\rangle$ auf $|n\rangle$):

$$W_{nn0} = \frac{d}{dt} \left| \langle n | \Psi \rangle_t \right|^2 = \frac{2\mathbf{p}}{\hbar} \left| \langle n | \hat{H}^1 | n_0 \rangle \right|^2 \mathbf{d}_t(E_n - E_{n_0})$$

Mit dem Übergangsmatrixelement

$$\langle n | \hat{H}^1 | n_0 \rangle$$

und einer quadratischen Sinc- Funktion, $\mathbf{d}_t(E_n - E_{n_0})$ (siehe obige Definitionen) die die

Übergangswahrscheinlichkeit auf absorbierte Quanten mit einer Energie $E_n - E_{n_0}$ beschränkt, so lange deren

Abweichung von $E_n - E_{n_0}$ noch der Unschärfe genügt (Die Wahrscheinlichkeit sinkt dann entlang einer Sinc²-

Funktion um $E_n - E_{n_0}$ ab, für Quantenenergien, die von $E_n - E_{n_0}$ verschieden sind. Diese "Distribution" wird

für unendlich lange Lebensdauern zur Delta- Funktion !

Dies ist Fermis Goldene Regel, abgeleitet aus der Störungstheorie 1. Ordnung.

Dabei gilt:

$$\mathbf{d}_t \rightarrow \mathbf{d}$$

für $t \rightarrow \infty$

Harmonische zeitabhängige Störung

$$\hat{H}^1(t) = \hat{F}e^{-i\omega t} + \hat{F}^+e^{i\omega t} \quad \text{hermitesch !}$$

Es folgt:

$$g_n(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\mathbf{t} e^{i\frac{(E_n - E_{n0} - \hbar\omega)t}{\hbar}} \langle n | \hat{F} | n_0 \rangle - \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\mathbf{t} e^{i\frac{(E_n - E_{n0} + \hbar\omega)t}{\hbar}} \langle n | \hat{F}^+ | n_0 \rangle$$

$$\Rightarrow g_n(t) = -\langle n | \hat{F} | n_0 \rangle \left[\frac{e^{i\frac{(E_n - E_{n0} - \hbar\omega)t}{\hbar}} - 1}{E_n - E_{n0} - \hbar\omega} \right] - \langle n | \hat{F}^+ | n_0 \rangle \left[\frac{e^{i\frac{(E_n - E_{n0} + \hbar\omega)t}{\hbar}} - 1}{E_n - E_{n0} + \hbar\omega} \right]$$

Somit folgt für die Übergangswahrscheinlichkeit von $|n_0\rangle$ auf $|n\rangle$:

$$\begin{aligned} |\langle n | \Psi \rangle_t|^2 &= |g_n|^2 = \frac{2\mathbf{p}}{\hbar} \left| \langle n | \hat{F} | n_0 \rangle \right|^2 t \mathbf{d}(E_n - E_{n0} - \hbar\omega) \\ &+ \frac{2\mathbf{p}}{\hbar} \left| \langle n | \hat{F}^+ | n_0 \rangle \right|^2 t \mathbf{d}(E_n - E_{n0} + \hbar\omega) + \langle n | \hat{F} | n_0 \rangle^* \langle n | \hat{F}^+ | n_0 \rangle \left[\frac{e^{i\frac{(E_n - E_{n0} - \hbar\omega)t}{\hbar}} - 1}{E_n - E_{n0} - \hbar\omega} \right] \left[\frac{e^{i\frac{(E_n - E_{n0} + \hbar\omega)t}{\hbar}} - 1}{E_n - E_{n0} + \hbar\omega} \right] \\ &+ \langle n | \hat{F}^+ | n_0 \rangle^* \langle n | \hat{F} | n_0 \rangle \left[\frac{e^{-i\frac{(E_n - E_{n0} + \hbar\omega)t}{\hbar}} - 1}{E_n - E_{n0} + \hbar\omega} \right] \left[\frac{e^{i\frac{(E_n - E_{n0} - \hbar\omega)t}{\hbar}} - 1}{E_n - E_{n0} - \hbar\omega} \right] \\ \Omega^\pm &:= \Omega \pm \omega = \frac{(E_n - E_{n0} \pm \hbar\omega)}{\hbar} \\ \Rightarrow |\langle n | \Psi \rangle_t|^2 &= |g_n|^2 = \frac{2\mathbf{p}}{\hbar} \left| \langle n | \hat{F} | n_0 \rangle \right|^2 t \mathbf{d}(E_n - E_{n0} - \hbar\omega) \\ &+ \frac{2\mathbf{p}}{\hbar} \left| \langle n | \hat{F}^+ | n_0 \rangle \right|^2 t \mathbf{d}(E_n - E_{n0} + \hbar\omega) + \langle n | \hat{F} | n_0 \rangle^* \langle n | \hat{F}^+ | n_0 \rangle \left[\frac{(e^{-i\Omega^- t} - 1)(e^{i\Omega^+ t} - 1)}{\hbar^2 \Omega^+ \Omega^-} \right] \\ &+ \langle n | \hat{F}^+ | n_0 \rangle^* \langle n | \hat{F} | n_0 \rangle \left[\frac{(e^{-i\Omega^+ t} - 1)(e^{i\Omega^- t} - 1)}{\hbar^2 \Omega^+ \Omega^-} \right] \\ \langle n | \hat{F} | n_0 \rangle^* \langle n | \hat{F}^+ | n_0 \rangle &:= A e^{-i\mathbf{g}} \\ \langle n | \hat{F}^+ | n_0 \rangle^* \langle n | \hat{F} | n_0 \rangle &:= A e^{i\mathbf{g}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow |\langle n | \Psi \rangle_t|^2 &= |g_n|^2 = \frac{2\mathbf{p}}{\hbar} |\langle n | \hat{F} | n_0 \rangle|^2 t \mathbf{d}(E_n - E_{n_0} - \hbar \mathbf{w}) \\ &+ \frac{2\mathbf{p}}{\hbar} |\langle n | \hat{F}^+ | n_0 \rangle|^2 t \mathbf{d}(E_n - E_{n_0} + \hbar \mathbf{w}) + A e^{-i\mathbf{g}} \left\{ \frac{(e^{(-i\Omega^- t)} - 1)(e^{(i\Omega^+ t)} - 1)}{\hbar^2 \Omega^+ \Omega^-} \right\} \\ &+ A e^{i\mathbf{g}} \left\{ \frac{(e^{(-i\Omega^+ t)} - 1)(e^{(i\Omega^- t)} - 1)}{\hbar^2 \Omega^+ \Omega^-} \right\} \end{aligned}$$

Weiter gilt

$$A e^{-i\mathbf{g}} \left\{ \frac{(e^{(-i\Omega^- t)} - 1)(e^{(i\Omega^+ t)} - 1)}{\hbar^2 \Omega^+ \Omega^-} \right\} + A e^{i\mathbf{g}} \left\{ \frac{(e^{(-i\Omega^+ t)} - 1)(e^{(i\Omega^- t)} - 1)}{\hbar^2 \Omega^+ \Omega^-} \right\} = \frac{4A}{\hbar^2 \Omega^+ \Omega^-} \cos(\mathbf{w}t - \mathbf{g}) [\cos(\mathbf{w}t) - \cos(\Omega t)]$$

Für $\mathbf{w} \neq 0, \Omega \neq 0$ sind diese Terme jedoch rein oszillierend. Für $t \rightarrow \infty$ sind diese jedoch vernachlässigbar gegen

Termen $\sim t \mathbf{d}(E_n - E_{n_0} \pm \hbar \mathbf{w}) = t \mathbf{d}(\hbar \Omega^\pm)$

Somit folgt für $t \rightarrow \infty$:

$$|\langle n | \Psi \rangle_t|^2 = |g_n|^2 = \frac{2\mathbf{p}}{\hbar} |\langle n | \hat{F} | n_0 \rangle|^2 t \mathbf{d}(E_n - E_{n_0} - \hbar \mathbf{w}) + \frac{2\mathbf{p}}{\hbar} |\langle n | \hat{F}^+ | n_0 \rangle|^2 t \mathbf{d}(E_n - E_{n_0} + \hbar \mathbf{w})$$

Für Zeit gegen unendlich kann man dann leicht die Übergangswahrscheinlichkeit zwischen $|n_0\rangle$ und $|n\rangle$ pro Zeiteinheit, durch Ableitung nach der Zeit erhalten:

$$W_{nn_0} = \frac{d}{dt} |\langle n | \Psi \rangle_t|^2 = \frac{2\mathbf{p}}{\hbar} |\langle n | \hat{F} | n_0 \rangle|^2 \mathbf{d}(E_n - E_{n_0} - \hbar \mathbf{w}) + \frac{2\mathbf{p}}{\hbar} |\langle n_0 | \hat{F} | n \rangle|^2 \mathbf{d}(E_n - E_{n_0} + \hbar \mathbf{w})$$

Die Terme lassen sich identifizieren:

$\frac{2\mathbf{p}}{\hbar} |\langle n | \hat{F} | n_0 \rangle|^2 \mathbf{d}(E_n - E_{n_0} - \hbar \mathbf{w})$ steht für die Absorption eines Quants der Energie $\hbar \mathbf{w}$ bei gleichzeitiger

Anregung des Übergangs von $|n_0\rangle$ auf $|n\rangle$, was einem Energiesprung von $E_n - E_{n_0}$ entspricht.

Das Quant wird also von Niveau $|n_0\rangle$ auf $|n\rangle$ gehievt

$\frac{2\mathbf{p}}{\hbar} |\langle n_0 | \hat{F}^+ | n \rangle|^2 \mathbf{d}(E_n - E_{n_0} + \hbar \mathbf{w})$ steht für die Emission eines Quants der Energie $\hbar \mathbf{w}$ bei gleichzeitiger

Anregung des Übergangs von $|n\rangle$ auf $|n_0\rangle$, was einer Energieabgabe von $E_{n_0} - E_n$ entspricht.

Das Quant fällt dabei vom diesmal höheren Niveau $|n_0\rangle$ auf das Niveau $|n\rangle$ herunter.

Zusammenhang mit dem Wechselwirkungsbild

Für $t=0$ stimmen Schrödinger- und Wechselwirkungsbild überein (Siehe oben, S. 63)

Im Wechselwirkungsbild gilt:

$$\hat{H}_W^{-1}(t) = e^{\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t\right)} \hat{H}_S^{-1} e^{\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t\right)}$$

Im Wechselwirkungsbild wird die Zeitentwicklung der Operatoren mit \hat{H}_0 gewonnen, während die Zustände mit $\hat{H}_W^{-1}(t)$ evolutionieren:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi\rangle_W = \hat{H}_W^{-1}(t) |\Psi\rangle_W$$

Die formale Integration führt auf eine Integralgleichung:

$$|\Psi\rangle_W(t) = |\Psi\rangle_W(t=0) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\mathbf{t} \left(\hat{H}_W^{-1}(\mathbf{t}) |\Psi\rangle_W(\mathbf{t}) \right)$$
$$|\Psi\rangle_W(t=0) = |n_0\rangle$$

Für kleine \hat{H}_W^{-1} liefert eine Iteration:

$$|\Psi\rangle_W(t) = |\Psi\rangle_W(t=0) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\mathbf{t} \left(\hat{H}_W^{-1}(\mathbf{t}) |\Psi\rangle_W(\mathbf{t}) \right) \approx \left(1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\mathbf{t} \hat{H}_W^{-1}(\mathbf{t}) \right) |n_0\rangle$$
$$|\Psi\rangle_W(t) \approx \left(1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\mathbf{t} \hat{H}_W^{-1}(\mathbf{t}) \right) |n_0\rangle = \left(1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\mathbf{t} e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 \mathbf{t}} \hat{H}_S^{-1} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 \mathbf{t}} \right) |n_0\rangle$$

Mit

$$|\Psi\rangle_S(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} |\Psi\rangle_W(t) \approx e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} \left(1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\mathbf{t} e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 \mathbf{t}} \hat{H}_S^{-1} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 \mathbf{t}} \right) |n_0\rangle$$

und

$$e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} \left(1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\mathbf{t} e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 \mathbf{t}} \hat{H}_S^{-1} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 \mathbf{t}} \right) := U(t,0) \text{ Zeitentwicklungsoperator im Schrödingerbild}$$

Übergangsamplitude im Schrödinger- Bild:

$$c_n(t) = \langle n | \Psi \rangle = \langle n | U(t,0) | n_0 \rangle = \langle n | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} \left(1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} \hat{H}_S^1 e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} \right) | n_0 \rangle$$

$$\Rightarrow c_n(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_{n_0} t} \left(d_{nn_0} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt e^{\frac{i}{\hbar} E_{n_0} t} \langle n | \hat{H}_S^1 | n_0 \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_{n_0} t} \right)$$

$$d_{nn_0} = g_n^{(0)}$$

$$-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt e^{\frac{i}{\hbar} E_{n_0} t} \langle n | \hat{H}_S^1 | n_0 \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_{n_0} t} = g_n^{(1)}$$

$$c_n(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_{n_0} t} \left(d_{nn_0} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt e^{\frac{i}{\hbar} E_{n_0} t} \langle n | \hat{H}_S^1 | n_0 \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_{n_0} t} \right) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_{n_0} t} g_n(t)$$

In Übereinstimmung mit unserem Ergebnis von Seite 113 !

5.2 Induzierte Emission und Absorption von Lichtquanten in Atomen

Ein Elektron im kugelsymmetrischen Coulomb- Potenzial $V(r)$ eines Atomrumpfes hat den ungestörten Hamiltonian:

$$\hat{H}^0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r)$$

Es soll untersucht werden, wie sich dieses Elektron unter dem Einfluss einer elektromagnetischen Welle mit

$$\bar{A}(\vec{r}, t) = \bar{A}_0 \cos(\vec{k}\vec{r} - \omega t)$$

$\vec{w} = c|\vec{k}|$ und es gilt Coulomb- Eichung:

$$\nabla \cdot \bar{A}(\vec{r}, t) = 0$$

So wird:

$$\bar{E}(\vec{r}, t) = -\frac{\partial}{\partial t} \bar{A}(\vec{r}, t) = -\omega \bar{A}_0 \sin(\vec{k}\vec{r} - \omega t)$$

$$-\omega \bar{A}_0 := \bar{E}_0$$

$$\bar{B}(\vec{r}, t) = \nabla \times \bar{A}(\vec{r}, t) = -\vec{k} \times \bar{A}_0 \sin(\vec{k}\vec{r} - \omega t)$$

Analog zu S. 92 haben wir den Hamiltonoperator (vergl. Magnetisches Moment und Zeeman- Effekt):

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{e}{m} \bar{A} \cdot \hat{p} = \hat{H}_0 + \hat{H}^1$$

$$\hat{H}^1 := -\frac{e}{m} \cos(\vec{k}\vec{r} - \omega t) \bar{A}_0 \hat{p} = -\frac{e}{2m} e^{i\vec{k}\vec{r}} \bar{A}_0 \hat{p} e^{-i\omega t} - \frac{e}{2m} e^{-i\vec{k}\vec{r}} \bar{A}_0 \hat{p} e^{i\omega t}$$

$$-\frac{e}{2m} e^{i\vec{k}\vec{r}} \bar{A}_0 \hat{p} := \hat{F}$$

$$-\frac{e}{2m} e^{-i\vec{k}\vec{r}} \bar{A}_0 \hat{p} := \hat{F}^+$$

$$\hat{H}^1 = \hat{F} e^{-i\omega t} + \hat{F}^+ e^{i\omega t}$$

Gemäß S. 116 haben wir die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit (Differentiation der Übergangswahrscheinlichkeit):

$$W_{nn0} = \frac{2\mathbf{p}}{\hbar} \left| \langle n | \hat{F} | n_0 \rangle \right|^2 \mathbf{d}(E_n - E_{n0} - \hbar \mathbf{w}) + \frac{2\mathbf{p}}{\hbar} \left| \langle n_0 | \hat{F}^+ | n \rangle \right|^2 \mathbf{d}(E_n - E_{n0} + \hbar \mathbf{w})$$

$$W_{nn0} = \frac{2\mathbf{p}}{\hbar} \left(\frac{e}{2m} \right)^2 \left\{ \left| \langle n | e^{i\vec{k}\vec{r}} \bar{A}_0 \hat{p} | n_0 \rangle \right|^2 \mathbf{d}(E_n - E_{n0} - \hbar \mathbf{w}) + \left| \langle n_0 | e^{-i\vec{k}\vec{r}} \bar{A}_0 \hat{p} | n \rangle \right|^2 \mathbf{d}(E_n - E_{n0} + \hbar \mathbf{w}) \right\}$$

Dipolnäherung:

Annahme: Die Wellenlänge (einige tausend Angström) ist deutlich größer als der Atomdurchmesser (einige Angström)

$$\vec{k}\vec{r} \ll 1$$

$$\rightarrow e^{\mp i\vec{k}\vec{r}} = 1 + O(\vec{k}\vec{r})$$

Außerdem: $[\hat{H}_0, \hat{r}] = \frac{\hbar}{i} \frac{\hat{p}}{m}$ und $e\hat{r}$ = Operator des elektrischen Dipolmoments

Damit wird das Matricelement des Störoperators

$$-\frac{e}{m} \langle n | e^{i\vec{k}\vec{r}} \bar{A}_0 \hat{p} | n_0 \rangle \cong -\frac{i}{\hbar} \frac{em}{2m} \bar{A}_0 \langle n | \hat{H}_0 \hat{r} - \hat{r} \hat{H}_0 | n_0 \rangle = -\frac{i}{2\hbar} (E_n - E_{n0}) \bar{A}_0 e \langle n | \hat{r} | n_0 \rangle$$

$$\bar{A}_0 = -\frac{\bar{E}_0}{\mathbf{w}}$$

$$e \langle n | \hat{r} | n_0 \rangle := \bar{d}_{nn0}$$

Mit den elektrischen Dipol- Matricelementen $e \langle n | \hat{r} | n_0 \rangle := \bar{d}_{nn0}$

Die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit ergibt sich gemäß

$$W_{nn0} = \frac{2\mathbf{p}}{\hbar} \frac{(E_n - E_{n0})^2}{4(\hbar \mathbf{w})^2} (\bar{E}_0 \cdot \bar{d}_{nn0})^2 \{ \mathbf{d}(E_n - E_{n0} - \hbar \mathbf{w}) + \mathbf{d}(E_n - E_{n0} + \hbar \mathbf{w}) \}$$

Kontinuierliches Einstrahlungsspektrum:

$$\bar{E}(\vec{r}, t) = \int_0^\infty d\mathbf{w} \bar{E}_0(\mathbf{w}) \sin(\vec{k}\vec{r} - \mathbf{w}t)$$

$$\Rightarrow W_{nn0} = \frac{\mathbf{p}}{2\hbar^2} \int_0^\infty d(\hbar \mathbf{w}) (\bar{E}_0(\mathbf{w}) \cdot \bar{d}_{nn0})^2 \{ \mathbf{d}(E_n - E_{n0} - \hbar \mathbf{w}) + \mathbf{d}(E_n - E_{n0} + \hbar \mathbf{w}) \}$$

Dabei liefert

$\mathbf{d}(E_n - E_{n0} - \hbar \mathbf{w})$ einen Beitrag für $E_n > E_{n0}$ (Absorption) und

$\mathbf{d}(E_n - E_{n0} + \hbar \mathbf{w})$ einen Beitrag für $E_n < E_{n0}$ als induzierte Emission. Die Wahrscheinlichkeit ist $\sim \bar{E}_0(\mathbf{w})^2$ also proportional zur Energiedichte der elektromagnetischen Welle.

Die Ausführung der Integration liefert:

$$W_{nn0} = \frac{\mathbf{p}}{2\hbar^2} \int_0^\infty d(\hbar\omega) \left(\bar{E}_0(\mathbf{w}) \cdot \bar{d}_{nn0} \right)^2 \{ \mathbf{d}(E_n - E_{n0} - \hbar\omega) + \mathbf{d}(E_n - E_{n0} + \hbar\omega) \}$$

$$\Rightarrow W_{nn0} = \frac{\mathbf{p}}{2\hbar^2} \left(\bar{E}_0 \left(\frac{|E_n - E_{n0}|}{\hbar} \right) \cdot \bar{d}_{nn0} \right)^2$$

$$\bar{d}_{nn0} = e \langle n | \hat{r} | n_0 \rangle$$

Bemerkungen

- 1) Spontane Emission kann in der semiklassischen Theorie (Atom wird quantenmechanisch beschrieben, das Strahlungsfeld jedoch klassisch) nicht beschrieben werden ! Hierzu ist die Quantisierung des Strahlungsfeldes nötig (Quantenfeldtheorie).
- 2) Die Auswahlregeln für erlaubte elektrische Dipolübergänge sind durch das Dipolmatrixelement $\bar{d}_{nn0} = e \langle n | \hat{r} | n_0 \rangle$ gegeben. Für $e \langle n | \hat{r} | n_0 \rangle = 0$ können erlaubte Multipolübergänge (magnetischer Dipol, elektrischer Quadrupol etc...) durch die Entwicklung von $e^{\pm i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ in höherer Ordnung berechnet werden.

Diskussion der Dipolmatrixelemente:

Wir begeben uns wieder in den Ortsraum der Kugelkoordinatendarstellung:

Die ungestörte Wellenfunktion:

$$\Psi_{nlm}(\vec{r}) = \frac{u_{nl}(r)}{r} Y_l^m(\mathbf{J}, \mathbf{j}) \sim P_l^m(\cos \mathbf{J}) e^{im\mathbf{j}}$$

$$|n\rangle = |n\ell m\rangle$$

$$|n_0\rangle = |nlm\rangle$$

Kugelkoordinaten

$$\Psi_{nlm}(\vec{r}) = \frac{u_{nl}(r)}{r} Y_l^m(\mathbf{J}, \mathbf{j}) \sim P_l^m(\cos \mathbf{J}) e^{im\mathbf{j}}$$

$$x_1 = r \sin \mathbf{J} \cos \mathbf{j}$$

$$x_2 = r \sin \mathbf{J} \sin \mathbf{j}$$

$$x_3 = r \cos \mathbf{J}$$

betrachte

$$\mathbf{x} = x_1 + ix_2 = r \sin \mathbf{J} e^{i\mathbf{j}}$$

$$\mathbf{x}^* = x_1 - ix_2 = r \sin \mathbf{J} e^{-i\mathbf{j}}$$

Einsetzen liefert:

$$\begin{aligned}\Psi_{nlm}(\vec{r}) &= \frac{u_{nl}(r)}{r} Y_l^m(\mathbf{J}, \mathbf{j}) \sim P_l^m(\cos J) e^{imj} \\ \langle n'l'm' | \hat{\mathbf{x}} | nlm \rangle &\sim \int_0^P dJ \sin^2(J) P_{l'}^{m'}(\cos J) P_l^m(\cos J) \int_0^{2P} dj e^{i(m-m'+1)j} \\ \int_0^{2P} dj e^{i(m-m'+1)j} &\sim \mathbf{d}_{m', m+1} \\ \Rightarrow \langle n'l'm' | \hat{\mathbf{x}} | nlm \rangle &\sim \int_0^P dJ \sin^2(J) P_{l'}^{m+1}(\cos J) P_l^m(\cos J) \\ \int_0^P dJ \sin^2(J) P_{l'}^{m+1}(\cos J) P_l^m(\cos J) &\sim \mathbf{d}_{l', l \pm 1} \\ \Rightarrow \langle n'l'm' | \hat{\mathbf{x}} | nlm \rangle &\sim \mathbf{d}_{m', m+1} \mathbf{d}_{l', l \pm 1}\end{aligned}$$

Analog kann man ausrechnen:

$$\begin{aligned}\langle n'l'm' | \hat{\mathbf{x}} * | nlm \rangle &\sim \mathbf{d}_{m', m-1} \mathbf{d}_{l', l \pm 1} \\ \langle n'l'm' | \hat{x}_3 | nlm \rangle &\sim \mathbf{d}_{m', m} \mathbf{d}_{l', l \pm 1}\end{aligned}$$

Also gewinnen wir die Auswahlregeln für Dipol- erlaubte Übergänge:

$$\Delta l = \pm 1$$

$$\Delta m = 0, \pm 1$$

5.3 Zeitunabhängige Störungsrechnung ohne Entartung (Schrödinger)

Betrachte zeitunabhängige Schrödingergleichung:

$$\hat{H} |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle$$

muss berechnet werden, wobei

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}^1$$

durch den ungestörten Hamilton- Operator mit einer kleinen Störung repräsentiert wird.

Die Störung lasse sich als Potenzialstörung darstellen, die mittels des von Null verschiedenen jedoch kleinen Parameters \mathbf{e}

linear entwickelt werden kann:

$$\hat{H}_1 = \mathbf{e} \hat{V} \text{ (dabei soll die Störung zeitunabhängig sein !)}$$

Das ungestörte Problem schreibt sich:

$$\hat{H}_0 |n\rangle = E_n^{(0)} |n\rangle$$

Für kleine \mathbf{e} sollten sich Eigenwerte und Eigenzustände von \hat{H} entwickeln lassen:

$$\begin{aligned}E_k &= E_k^{(0)} + \mathbf{e} E_k^{(1)} + \mathbf{e}^2 E_k^{(2)} + \dots \\ |\Psi_k\rangle &= |\Psi_k^{(0)}\rangle + \mathbf{e} |\Psi_k^{(1)}\rangle + \mathbf{e}^2 |\Psi_k^{(2)}\rangle + \dots\end{aligned}$$

Merke: Die Eigenzustände und die Energieeigenwerte sollten sich entwickeln lassen !

Also:

$$\left(\hat{H}_0 + \mathbf{e}\hat{V} \right) \left| \Psi_k^{(0)} \right\rangle + \mathbf{e} \left| \Psi_k^{(1)} \right\rangle + \mathbf{e}^2 \left| \Psi_k^{(2)} \right\rangle + \dots = \left(E_k^{(0)} + \mathbf{e} E_k^{(1)} + \mathbf{e}^2 E_k^{(2)} + \dots \right) \left| \Psi_k^{(0)} \right\rangle + \mathbf{e} \left| \Psi_k^{(1)} \right\rangle + \dots$$

Die Koeffizienten lassen sich dann in der Ordnung \mathbf{e}^f vergleichen:

f=0

$$\hat{H}_0 \left| \Psi_k^{(0)} \right\rangle = E_k^{(0)} \left| \Psi_k^{(0)} \right\rangle \quad \text{ungestörtes Problem}$$

f=1

$$\left(\hat{H}_0 - E_k^{(0)} \right) \left| \Psi_k^{(1)} \right\rangle = \left(E_k^{(1)} - \hat{V} \right) \left| \Psi_k^{(0)} \right\rangle \quad \text{1. Näherung}$$

f=2

$$\left(\hat{H}_0 - E_k^{(0)} \right) \left| \Psi_k^{(2)} \right\rangle = \left(E_k^{(1)} - \hat{V} \right) \left| \Psi_k^{(1)} \right\rangle + E_k^{(2)} \left| \Psi_k^{(0)} \right\rangle$$

... -> **Rekursionsformeln**

Die Bestimmung der Energieeigenwerte und Eigenzustände kann erfolgen....

Aus **f=0**: $\left| \Psi_k^{(0)} \right\rangle = |k\rangle$

Aus **f=1**: **Störungsrechnung erster Ordnung möglich:**

Wir entwickeln nach der ungestörten Basis $\left| \Psi_k^{(1)} \right\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n| \left| \Psi_k^{(1)} \right\rangle$ und setzen dies in

$$\left(\hat{H}_0 - E_k^{(0)} \right) \left| \Psi_k^{(1)} \right\rangle = \left(E_k^{(1)} - \hat{V} \right) \left| \Psi_k^{(0)} \right\rangle \quad \text{ein:}$$

$$\sum_n \left(\hat{H}_0 - E_k^{(0)} \right) |n\rangle \langle n| \left| \Psi_k^{(1)} \right\rangle = \left(E_k^{(1)} - \hat{V} \right) |k\rangle$$

$$\left(\hat{H}_0 - E_k^{(0)} \right) |n\rangle = \left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)} \right) |n\rangle$$

Skalarprodukt mit $\langle l| \rightarrow \langle l|n\rangle = \mathbf{d}_{ln}$ "projiziert" wieder die Korrektur des l-ten Zustand (seines Eigenwertes und seines zugehörigen Zustandes) heraus:

$$\left(E_l^{(0)} - E_k^{(0)} \right) \langle l| \left| \Psi_k^{(1)} \right\rangle = \left(E_k^{(1)} - \hat{V} \right) \mathbf{d}_{lk} - \langle l| \hat{V} |k\rangle$$

Somit haben wir für l=k

die erste Korrektur zum Energieeigenwert gefunden:

$$E_k^{(1)} = \langle k| \hat{V} |k\rangle$$

und für $l \neq k$ ergibt sich die 1. Korrektur zum Eigenvektor:

$$\langle l | \Psi_k^{(1)} \rangle = \frac{\langle l | \hat{V} | k \rangle}{E_k^{(0)} - E_l^{(0)}}$$

$\langle k | \Psi_k^{(1)} \rangle$ wird durch Normierung festgelegt:

$$1 = \langle \Psi_k | \Psi_k \rangle = \langle \Psi_k^{(0)} | \Psi_k^{(0)} \rangle + \mathbf{e} \left(\langle \Psi_k^{(0)} | \Psi_k^{(1)} \rangle + \langle \Psi_k^{(1)} | \Psi_k^{(0)} \rangle \right) + \mathbf{e}^2 (\dots)$$

$$\langle \Psi_k^{(0)} | \Psi_k^{(0)} \rangle = 1$$

Da die Summe rechts aber für beliebige Epsilon Null werden muss folgt:

$$\left(\langle \Psi_k^{(0)} | \Psi_k^{(1)} \rangle + \langle \Psi_k^{(1)} | \Psi_k^{(0)} \rangle \right) = 0 \quad \text{usw.. für jede Klammer nach einer bestimmten, festen Ordnung von } \mathbf{e}:$$

$$(\dots = 0$$

Also für die erste Ordnung:

$$\langle \Psi_k^{(0)} | \Psi_k^{(1)} \rangle = - \langle \Psi_k^{(1)} | \Psi_k^{(0)} \rangle$$

$$\langle k | \Psi_k^{(1)} \rangle = - \langle \Psi_k^{(1)} | k \rangle \equiv - \langle k | \Psi_k^{(1)} \rangle^*$$

Fazit:

$$\langle k | \Psi_k^{(1)} \rangle = i\mathbf{g} \quad \text{mit } \mathbf{g} \in \mathbb{R}$$

Wegen

$$e^{i\mathbf{eg}} \approx 1 + i\mathbf{eg} + O(\mathbf{e}^2) \quad \text{ändert der Term } \sim \mathbf{g} \text{ die Phase von } |\Psi_k\rangle \text{ relativ zu } |k\rangle$$

$$\text{in der Entwicklung } |\Psi_k\rangle = |k\rangle (1 + i\mathbf{eg}) + \mathbf{e} \sum_{n \neq k} |n\rangle \langle n | \Psi_k^{(1)} \rangle + O(\mathbf{e}^2).$$

Die Festlegung erfolgt durch die Forderung :

$$\langle k | \Psi_k \rangle = 1$$

$$\Rightarrow \mathbf{g} = 0$$

Im entartungsfreien Fall (keine Entartung) folgt dann:

$$|\Psi_k^{(1)}\rangle = \sum_{n \neq k} |n\rangle \frac{\langle n | \hat{V} | k \rangle}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}}$$

Voraussetzung: $E_k^{(0)} \neq E_n^{(0)}$ (keine Entartung)

5.4 Zeitunabhängige Störungsrechnung bei Entartung

Betrachte zeitunabhängige Schrödingergleichung:

$$\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$$

soll berechnet werden, wobei

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}^1$$

durch den ungestörten Hamilton- Operator mit einer kleinen Störung repräsentiert wird.

Die Störung lasse sich als Potenzialstörung darstellen, die mittels des von Null verschiedenen jedoch kleinen Parameters \mathbf{e}

linear entwickelt werden kann:

$$\hat{H}_1 = \mathbf{e}\hat{V} \quad (\text{dabei soll die Störung zeitunabhängig sein !})$$

Wenn wir nun annehmen, dass zur Energie $E_n^{(0)}$ mehrere (orthonormal) entartete Zustände gehören, so müssen wir das Problem anpassen:

Das ungestörte Problem schreibt sich dann:

$$\hat{H}_0|n, \mathbf{a}\rangle = E_n^{(0)}|n, \mathbf{a}\rangle \quad \mathbf{a} = 1, \dots, s$$

Damit bezeichnet $\mathbf{a} = 1, \dots, s$ die Nummerierung der entarteten Zustände beim Entartungsgrad s . Bei diesem Beispiel wäre der N . Eigenzustand s - fach entartet !

Durch $\hat{H}_1 = \mathbf{e}\hat{V}$ wird die Entartung jedoch im Allgemeinen aufgehoben:

$$\hat{H}|\Psi_k\rangle = E_k|\Psi_k\rangle$$

Die Störungsreihe/ Störungsentwicklung

$$|\Psi_k\rangle = |\Psi_k^{(0)}\rangle + \mathbf{e}|\Psi_k^{(1)}\rangle + \mathbf{e}^2|\Psi_k^{(2)}\rangle + \dots$$

ist unter diesen Bedingungen nur für ein bestimmtes, geeignetes

$$|\Psi_k^{(0)}\rangle = \sum_{\mathbf{a}} c_{\mathbf{a}}|k, \mathbf{a}\rangle \quad \text{möglich:}$$

Wähle nun $|\Psi_k^{(0)}\rangle$ im ungestörten Eigenraum so, dass für $\lim_{\mathbf{e} \rightarrow 0} |\Psi_k\rangle = |\Psi_k^{(0)}\rangle$ (eindeutig bestimmt).

Das Einsetzen in die Entwicklung der Ordnung \mathbf{e}^f liefert:

$\mathbf{f}=1$

$$(\hat{H}_0 - E_k^{(0)})|\Psi_k^{(1)}\rangle = (E_k^{(1)} - \hat{V}) \sum_{\mathbf{a}} c_{\mathbf{a}}|k, \mathbf{a}\rangle \quad \text{1. Näherung}$$

Das Skalarprodukt mit $\langle k, \mathbf{b} | \rightarrow \langle k, \mathbf{b} | k, \mathbf{a} \rangle = \mathbf{d}_{ab}$ "projiziert" wieder die Korrektur des jeweils entarteten Terms der Nummer \mathbf{b} heraus:

$$\langle k, \mathbf{b} | (\hat{H}^{(0)} - E_k^{(0)}) \Psi_k^{(1)} \rangle = \sum_{\mathbf{a}} c_{\mathbf{a}} (\langle k, \mathbf{b} | k, \mathbf{a} \rangle E_k^{(1)} - \langle k, \mathbf{b} | \hat{V} | k, \mathbf{a} \rangle)$$

$$\langle k, \mathbf{b} | (\hat{H}^{(0)} - E_k^{(0)}) \Psi_k^{(1)} \rangle = 0$$

$$\langle k, \mathbf{b} | k, \mathbf{a} \rangle = \mathbf{d}_{ba}$$

$$\langle k, \mathbf{b} | \hat{V} | k, \mathbf{a} \rangle = \hat{V}_{ba}$$

Somit folgt:

$$0 = \sum_{\mathbf{a}} (\hat{V}_{ba} - E_k^{(1)} \mathbf{d}_{ba}) c_{\mathbf{a}}$$

Dies ist aber gerade eine Eigenwertgleichung für die sogenannte Störmatrix \hat{V}_{ba} :

$$0 = \sum_{\mathbf{a}} (\hat{V}_{ba} - E_k^{(1)} \mathbf{d}_{ba}) c_{\mathbf{a}} = (\hat{V} - E_k^{(1)} \mathbf{1}) \vec{c}$$

$$\vec{c} \in C^s$$

$$\hat{V} \in C^s \times C^s$$

Die Gleichung heißt auch "Säkulargleichung" zur Berechnung von Eigenwerten und bildet ein homogenes, lineares Gleichungssystem.

Die Bezeichnung folgt in Anlehnung an die früheren Anwendungen: Berechnung der astronomischen säkularen Störungen.

Nichttriviale Lösungen existieren genau dann, wenn die Determinante $\det(\hat{V} - E_k^{(1)} \mathbf{1})$, die sogenannte Säkulardeterminante, verschwindet, also $\det(\hat{V} - E_k^{(1)} \mathbf{1}) = 0$ also:

$$\begin{vmatrix} \hat{V}_{11} - E_k^{(1)} & \hat{V}_{12} & \dots & \hat{V}_{1s} \\ \hat{V}_{21} & \hat{V}_{22} - E_k^{(1)} & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \hat{V}_{s1} & \dots & \dots & \hat{V}_{ss} - E_k^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

Für den Fall \hat{V} hermitesch folgt $\hat{V}_{ba} = \hat{V}_{ab}^*$

Dann existieren reelle Eigenwerte $E_k^{(1)}$ und die Eigenvektoren zu $E_k^{(1)} \neq E_l^{(1)}$ sind orthogonal !

Bemerkung: Die Entartung muss NICHT vollständig aufgehoben werden !

Beispiel: 2 entartete Zustände

Säkular determinante

$$\begin{vmatrix} \hat{V}_{11} - E_k^{(1)} & \hat{V}_{12} \\ \hat{V}_{21} & \hat{V}_{22} - E_k^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

$$(E_k^{(1)})^2 - (\hat{V}_{11} + \hat{V}_{22})E_k^{(1)} + (\hat{V}_{11}\hat{V}_{22} - \hat{V}_{12}\hat{V}_{21}) = 0$$

$$\hat{V}_{12}\hat{V}_{21} = |\hat{V}_{12}|^2$$

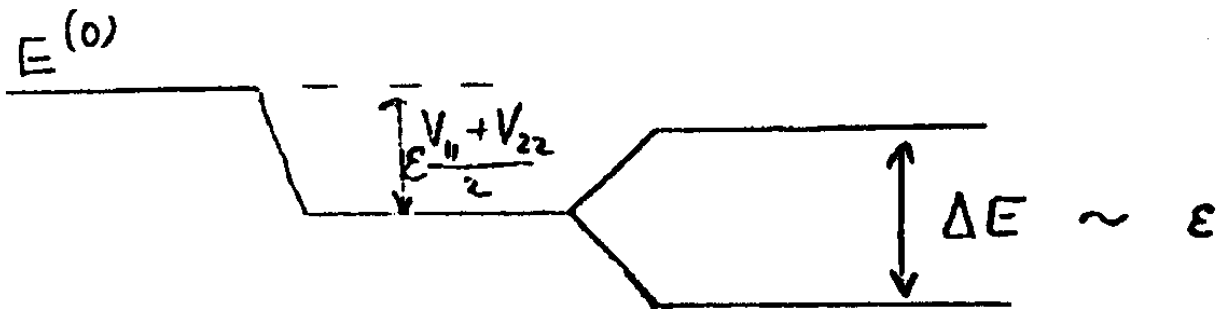
$$\Rightarrow E_k^{(1)} = \frac{1}{2} \left[(\hat{V}_{11} + \hat{V}_{22}) \pm \sqrt{(\hat{V}_{11} - \hat{V}_{22})^2 + 4|\hat{V}_{12}|^2} \right]$$

Dies als Korrekturterm. Somit folgt für ein Energieniveau der Energie E:

$$E = E^{(0)} + \epsilon E_k^{(1)} = E^{(0)} + \frac{\epsilon}{2} \left[(\hat{V}_{11} + \hat{V}_{22}) \pm \sqrt{(\hat{V}_{11} - \hat{V}_{22})^2 + 4|\hat{V}_{12}|^2} \right]$$

Dabei gibt $\sqrt{(\hat{V}_{11} - \hat{V}_{22})^2 + 4|\hat{V}_{12}|^2}$ die Energieaufspaltung an.

E ist, wie angegeben die gesamte Energie in 1. Störungstheoretischer Ordnung. Die Aufspaltung erfolgt linear in ϵ , also linear zur Störung:



5.5 Stark Effekt im H- Atom

Anwendung der Störungsrechnung bei Entartung. Das H- Atom befinde sich dabei in einem homogenen äußeren elektrischen Feld \vec{E} .

Für den Hamiltonian gilt:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hat{r}} - e\vec{E}\hat{r}$$

$$-e\vec{E}\hat{r} = \hat{H}^{(1)}$$

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hat{r}} = \hat{H}^{(0)}$$

Sei das elektrische Feld parallel zur z- Achse:

$$-eE\hat{x}_3 = \hat{H}^{(1)}$$

Eigenwerte und - zustände von $\hat{H}^{(0)}$:

$$\hat{H}^{(0)}|n, l, m\rangle = E_n^{(0)}|n, l, m\rangle$$

$$E_n^{(0)} = -R_H \frac{1}{n^2}$$

Die Energie ist im Bahndrehimpuls insgesamt $n^2 = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1)$ entartet. (zu jedem n gibt es n-1 mögliche

verschiedene Bahndrehimpulszustände, die jeweils 2l+1 mögliche Einstellungen bezüglich der z- Achse einnehmen

können (magnetische Quantenzahl m). Mit dem Spin ist die Entartung sogar $2n^2 = \sum_{l=0}^{n-1} 2(2l+1)$ - fach. Dies ist

leicht zu verstehen: Durch den Spin wird der bestehende Hilbertraum um einen zusätzlichen zweidimensionalen Hilbertraum erweitert. Dadurch können alle vorherigen Zustände noch einen Spinzustand aus dem neuen Hilbertraum mit beinhalten ohne dass sie ihre Eigenschaft, Eigenzustände zu sein, verlieren können.

Die Zahl der möglichen Eigenzustände zu einem Energieeigenwert verdoppelt sich also !

Beispiel: n=2 (4fache Entartung)

mögliche Zustände:

$$|2,0,0\rangle, |2,1,-1\rangle, |2,1,0\rangle, |2,1,+1\rangle$$

$$\langle \vec{r} || nlm \rangle = \frac{u_{nl}(r)}{r} Y_l^m(\mathbf{J}, \mathbf{j})$$

Keine Knotenlinie

$$Y_0^0 = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$$



Eine Knotenlinie

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$$



$$Y_1^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi}$$



$$\frac{u_{20}(r)}{r} = \frac{2}{(2a_0)^{\frac{3}{2}}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

$$\frac{u_{21}(r)}{r} = \frac{1}{\sqrt{3}(2a_0)^{\frac{3}{2}} a_0} r e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

Mit dem Bohr- Radius $a_0 = \frac{\hbar^2 4\pi\epsilon_0}{me^2}$

Matrizelemente des elektrischen Dipolmoments $\hat{d} = e\hat{x}_3$ mit $\langle n'l'm'|\hat{x}_3|nlm\rangle \sim d_{l'l\pm 1} d_{mm'}$

Vergleiche Seite 121:

n=n'=2	l=0, m=0	l=1, m=1	l=1, m=0	l=1, m=-1	a
l'=0, m'=0	0	0	d_{13}	0	1
l'=1, m'=1	0	0	0	0	2
l'=1, m'=0	d_{13}^*	0	0	0	3
l'=1, m'=-1	0	0	0	0	4

Der Störoperator:

$$\hat{H}^{(1)} = -|E|\hat{d}$$

Wir haben also mit d_{13} das einzige nichtverschwindende Matrizelement:

$$d_{13} = \langle 200|e\hat{x}_3|210\rangle$$

$$\hat{x}_3 = r \cos \theta$$

$$\begin{aligned}
d_{13} &= \langle 200 | e\hat{x}_3 | 210 \rangle \\
&= e \int_0^\infty dr r^2 \frac{2}{(2a_0)^{\frac{3}{2}}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}} r \frac{1}{\sqrt{3}(2a_0)^{\frac{3}{2}} a_0} r e^{-\frac{r}{2a_0}} \int_0^{2p} d\mathbf{j} \int_0^p d\mathbf{J} \sin \mathbf{J} \sqrt{\frac{1}{4p}} \cos \mathbf{J} \sqrt{\frac{3}{4p}} \cos \mathbf{J} \\
\frac{u_{20}(r)}{r} &= \frac{2}{(2a_0)^{\frac{3}{2}}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}} \\
\frac{u_{21}(r)}{r} &= \frac{1}{\sqrt{3}(2a_0)^{\frac{3}{2}} a_0} r e^{-\frac{r}{2a_0}} \\
\sqrt{\frac{1}{4p}} &= Y_0^0 \\
\sqrt{\frac{3}{4p}} \cos \mathbf{J} &= Y_1^0 \\
\int_0^{2p} d\mathbf{j} \int_0^p d\mathbf{J} \sin \mathbf{J} \sqrt{\frac{1}{4p}} \cos \mathbf{J} \sqrt{\frac{3}{4p}} \cos \mathbf{J} &= \frac{1}{\sqrt{3}} \\
\Rightarrow d_{13} = \langle 200 | e\hat{x}_3 | 210 \rangle &= \frac{e}{\sqrt{3}} \int_0^\infty dr r^2 \frac{2}{(2a_0)^{\frac{3}{2}}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}} r \frac{1}{\sqrt{3}(2a_0)^{\frac{3}{2}} a_0} r e^{-\frac{r}{2a_0}} = -3ea_0
\end{aligned}$$

Somit existiert ein Erwartungswert des Dipolmomentes

$$d_{13} = \langle 200 | e\hat{x}_3 | 210 \rangle = -3ea_0$$

Dies entspricht einem PERMANENTEN Dipolmoment des H-Atoms, welches Konsequenz der l-Entartung ist !
Die charakteristische Größenordnung dieses Dipolmomentes ist a_0 , also die Ausdehnung der Wellenfunktion !

Störungsrechnung: Aufspaltung des Energieniveaus $n=2$ im elektrischen Feld

\overline{E} :

$$\text{Säkulargleichung: } \sum_{\mathbf{a}=1}^4 \left(-|\overline{E}| d_{\mathbf{a}\mathbf{b}} - E d_{\mathbf{a}\mathbf{b}} \right) c_{\mathbf{a}} = 0$$

Säkulardeterminante:

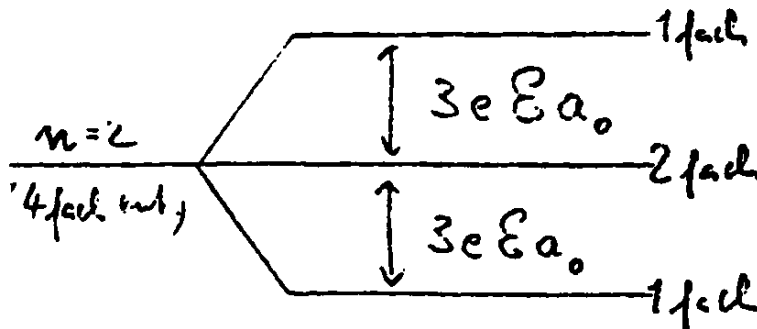
$$\begin{vmatrix}
-E & 0 & -|\overline{E}|d_{13} & 0 \\
0 & -E & 0 & 0 \\
-|\overline{E}|d_{13} & 0 & -E & 0 \\
0 & 0 & 0 & -E
\end{vmatrix} = 0 = E^2 \left[E^2 - (|\overline{E}|d_{13})^2 \right]$$

$$\Rightarrow E = 0 \text{ als zweifach entartetes Niveau und } E = \pm |\overline{E}|d_{13} = \mp 3e|\overline{E}|a_0$$

Der Stark- Effekt ist also proportional zur eingeschalteten Feldstärke. Man spricht deshalb auch vom linearen Stark- Effekt.

Daneben gibt es noch den quadratischen Stark- Effekt in allgemeinen kugelsymmetrischen Potenzialen $V \neq \frac{1}{r}$, also ohne l - Entartung. Also existiert in diesem Fall gar kein permanentes Dipolmoment und Störungsrechnung 2. Ordnung wird nötig.

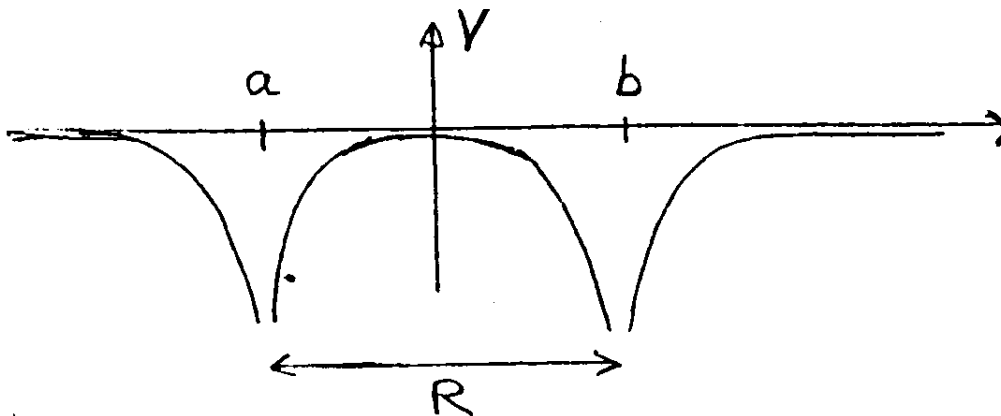
Ausgehend vom Niveau $E_2^{(0)}$ (4- fach entartet) erhalten wir das folgende Bild:



5.6 Homöopolare chemische Bindung des Wasserstoffmoleküls

Hier haben wir eine Anwendung der entarteten Störungsrechnung auf ein Zwei- Teilchen- Problem. Dies wurde 1927 durchgeführt von Heitler und London:

Das Potenzial der Atomkerne, wenn diese als fest angenommen werden ist:



Dabei bezeichnen a und b die festen Atomkerne und 1,2 die bewegten Elektronen. Der Kernabstand R ist ein fester Parameter.

Ungestörtes System (ohne Spin):

2 nicht wechselwirkende H- Atome:

$$\hat{H}_{a1}|a\rangle_1 = E_a|a\rangle_1 \quad \text{Elektron 1 am Kern a}$$

$$\hat{H}_{b2}|b\rangle_2 = E_b|b\rangle_2 \quad \text{Elektron 2 am Kern b}$$

mit den Hamilton- Operatoren

$$\hat{H}_{a1} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{a1}}$$

$$\hat{H}_{b2} = \frac{\hat{p}_2^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{b2}}$$

$$r_{a1} = |\vec{r}_1 - \vec{R}_a|$$

$$r_{b2} = |\vec{r}_2 - \vec{R}_b|$$

Die Schrödingergleichung, wir erinnern uns, für dieses Problem, ist exakt lösbar. Sie liefert ein Produkt aus Laguerre und zugeordneten Legendrepolyomen als Lösung für die Eigenfunktionen !

Eigenzustände von $\hat{H}_{\mathbf{a}}^{(0)} = \hat{H}_{a1} + \hat{H}_{b2}$ bzw. $\hat{H}_{\mathbf{b}}^{(0)} = \hat{H}_{a2} + \hat{H}_{b1}$ zu $E^{(0)} = E_a + E_b$:

$$|\Psi_{\mathbf{a}}\rangle = |a\rangle_1 |b\rangle_2$$

$$|\Psi_{\mathbf{b}}\rangle = |a\rangle_2 |b\rangle_1$$

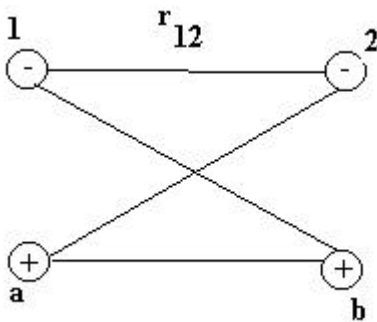
Es muss diese beiden Zustände als Lösung geben, da die Ansätze aus dem Austausch der Teilchen leben. (Zweiter Ansatz ist gleich dem ersten nur mit vertauschten Elektronen. Nach der quantenmechanischen Ununterscheidbarkeit muss dies jedoch ein erlaubter Schritt sein, ohne dass sich die Physik ändert.

Man spricht in diesem Fall von Austauschentartung der Energie $E^{(0)}$

Die Entartung ist in diesem Fall zweifach. Zu beiden Varianten gehört die Energie $E^{(0)}$:

$$\hat{H}_{\mathbf{a},\mathbf{b}} |\Psi_{\mathbf{a},\mathbf{b}}\rangle = E^{(0)} |\Psi_{\mathbf{a},\mathbf{b}}\rangle$$

Eine Störung dieses Systems sind nun alle denkbaren weiteren Wechselwirkungen:



$$\hat{H}_{\mathbf{a}}^{(1)} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_{a2}} + \frac{1}{r_{b1}} - \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{R} \right)$$

Mit dem Kernabstand R !

Merke: Die Störung sind alle zum exakt lösbaeren Problem hinzukommenden zusätzlichen elektromagnetischen Wechselwirkungen, die auftreten können und demnach auch auftreten !

Genau genommen haben wir dann den Hamiltonian

$$\hat{H}_{\mathbf{a},\mathbf{b}} = \hat{H}_{\mathbf{a},\mathbf{b}}^{(0)} + \hat{H}_{\mathbf{a},\mathbf{b}}^{(1)} \quad \text{kurz:} \quad \hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}^{(1)}$$

Die Störungsrechnung 1. Ordnung liefert

$$E \approx E^{(0)} + E^{(1)}$$

$$|\Psi\rangle \approx |\Psi^{(0)}\rangle + |\Psi^{(1)}\rangle$$

mit

$$|\Psi^{(0)}\rangle = c_a |\Psi_a\rangle + c_b |\Psi_b\rangle = c_a |a\rangle_1 |b\rangle_2 + c_b |a\rangle_2 |b\rangle_1$$

Bemerkung:

Da sich $|a\rangle$ und $|b\rangle$ auf verschiedene Koordinaten beziehen, sind $|\Psi_a\rangle$ und $|\Psi_b\rangle$ nicht orthogonal (Nur für R \rightarrow unendlich!, also Trennung der Kerne).

$$\langle \Psi_a | \Psi_b \rangle = \langle a | b \rangle_1 \langle a | b \rangle_2 = TT^* \neq 0$$

mit dem **Überlapp- Integral**

$$T := \langle a | b \rangle_1 = \int \Psi_a^*(\vec{r}_1) \Psi_b^*(\vec{r}_1) d^3 r_1$$

$$\Rightarrow T = \int d^3 r_1 R_{nl}^*(r_{a1}) Y_l^{m*}(\mathbf{J}_a, \mathbf{j}_a) R_{n'l'}(r_{b1}) Y_l^{m'}(\mathbf{J}_b, \mathbf{j}_b)$$

Daher erhält man aus der Störungsentwicklung

$$(\hat{H}^{(0)}_{a,b} - E^{(0)}) \begin{pmatrix} |\Psi^{(1)}\rangle \end{pmatrix} = (E^{(1)} - \hat{H}^{(1)}) \begin{pmatrix} c_a |\Psi_a\rangle + c_b |\Psi_b\rangle \end{pmatrix}$$

dann die Säkulargleichung, wenn man mit $\langle \Psi_{a,b} |$ multipliziert:

$$0 = (\hat{H}^{(1)}_{a,a} - E^{(1)}) c_a + (\hat{H}^{(1)}_{a,b} - E^{(1)} |T|^2) c_b$$

$$0 = (\hat{H}^{(1)}_{ba} - E^{(1)} |T|^2) c_a + (\hat{H}^{(1)}_{bb} - E^{(1)}) c_b$$

Mit

$$\hat{H}^{(1)}_{a,a} = \langle \Psi_a | \hat{H}^{(1)} | \Psi_a \rangle = \langle a |_2 \langle b | \hat{H}^{(1)} | b \rangle_2 | a \rangle_1$$

$$\Rightarrow \hat{H}^{(1)}_{a,a} = \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 |\Psi_a(\vec{r}_1)|^2 |\Psi_b(\vec{r}_2)|^2 \hat{H}^{(1)} = \hat{H}^{(1)}_{bb}$$

Dies sieht man an der Möglichkeit, die Elektronen 1 \leftrightarrow 2 in

$\hat{H}^{(1)}$ zu tauschen.

$\hat{H}^{(1)}_{a,a} = \hat{H}^{(1)}_{bb} =: D$ sogenannte "direkt Coulombenergie" (klassische Energie einer Ladungsverteilung)

Weiter:

$$\hat{H}^{(1)}_{ab} = \langle \Psi_a | \hat{H}^{(1)} | \Psi_b \rangle = \langle a |_2 \langle b | \hat{H}^{(1)} | a \rangle_2 | b \rangle_1$$

$$\Rightarrow \hat{H}^{(1)}_{ab} = \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \Psi_a^*(\vec{r}_1) \Psi_b(\vec{r}_1) \Psi_b^*(\vec{r}_2) \Psi_a(\vec{r}_2) \hat{H}^{(1)} = \hat{H}^{(1)}_{ba} =: A$$

A als sogenannte "Austauschenergie" (nichtklassisch).

Säkular determinante:

$$\begin{vmatrix} D - E^{(1)} & A - E^{(1)} |T|^2 \\ A - E^{(1)} |T|^2 & D - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$
$$(D - E^{(1)})^2 - (A - E^{(1)} |T|^2)^2 = 0 = E^{(1)2} (1 - |T|^4) - 2E^{(1)} (D - |T|^2) + D^2 - A^2$$

Damit kann die Energieaufspaltung angegeben werden und es erfolgt:

$$E^{(1)} = \frac{D \pm A}{1 \pm |T|^2}$$

Die Energieaufspaltung hier steht für die Aufhebung der Austauschentartung.

Ein Punkt hierbei ist, dass Zustände von Natur aus möglicherweise sogar unendlich oft entartet sind. (Man kann ja neue Unterscheidungen finden...) Man kann das Niveau jedoch so weit einschränken (kein Spin, kein 2. Atom, etc...), dass es nur einen Eigenzustand im gegebenen, beschränkten Hilbertraum gibt, der Eigenzustand zum Energieeigenwert ist. Jede zusätzliche Störung von außen aber, die auf die vernachlässigten Parameter wirkt, wie den Spin, kann dann unterschiedlich auf unterschiedliche Eigenschaften der Elektronen wirken und demnach zu einem Energieniveau verschiedene Zustände zu lassen, die dann aber mit der äußeren Wechselwirkung auch leicht verschobene Energieniveaus bilden können. Es wird also eine "Entartung" aufgehoben. Sprich: Auf der einen Stufe der Energie waren ohne die Störung verschiedene mögliche Zustände vereinheitlicht, weil die energetisch differenten Merkmale erst durch eine Wechselwirkung hervortraten, diese Wechselwirkung vorher jedoch gar nicht vorhanden war.

Dadurch bekommt ein bisschen ein Bild davon, wie durch die Aufhebung der Entartung quasi neue Energieniveaus geschaffen werden.

Für die Gesamtenergie des Niveaus gilt dann:

$$E_{\pm} \approx E^{(0)} + E^{(1)} = E_a + E_b + \frac{D \pm A}{1 \pm |T|^2}$$

Die zugehörigen Eigenzustände sind zwei der Art, ein zwischen $|a\rangle|b\rangle$ symmetrisierter und entsprechend der antisymmetrisierte Zustand:

$$\Psi_{\pm}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2(1 \pm |T|^2)}} (|a\rangle_1 |b\rangle_2 \pm |a\rangle_2 |b\rangle_1)$$

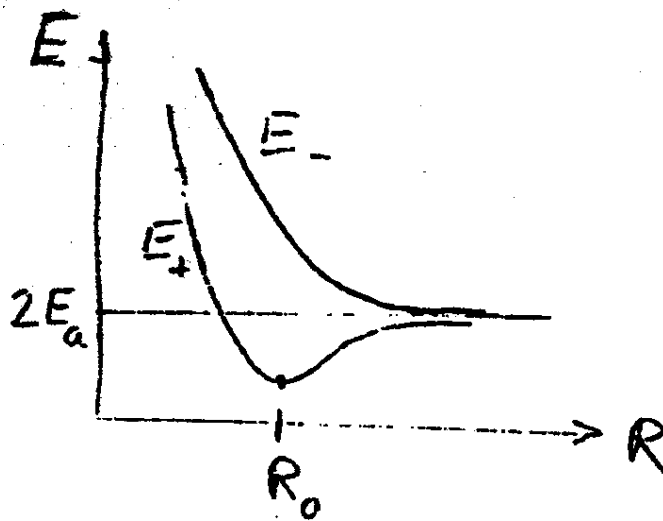
$$|a\rangle_1 |b\rangle_2 = \Psi_a$$

$$|a\rangle_2 |b\rangle_1 = \Psi_b$$

Wie man sieht, hängt E_{\pm} parametrisch vom Kernabstand R ab:

Man wähle $|a\rangle, |b\rangle$ als Grundzustand der H-Atome.

Es ergibt sich für E_+ bzw. E_- der folgende Verlauf der Energie:



Die obige Energie gehört zu einem grundsätzlich antibindenden Orbital (Zustand), die untere zum bindenden Orbital. Im ersten Fall wirkt das Elektron immer abstoßend, im zweiten Fall gibt es ein attraktives Minimum! Das Energieniveau $E_-(R)$ wirkt dabei abstoßend, während $E_+(R)$ ein attraktives Minimum besitzt. Es kommt zur homöopolaren Bindung (kovalent), einer sogenannten AUSTAUSCHBINDUNG, denn die Grundlage für die Existenz dieses Niveaus ist die Austauschentartung, die aufgehoben wird. Dadurch kann ein Zustand entstehen, der niedriger ist als jeder der einzelnen Wasserstoffzustände für sich!

Die Bindung an sich ist nur quantenmechanisch zu verstehen, wie aber ja auch schon der gebundene Zustand eines Elektrons am Kern.

Berücksichtigung des Spin

Der gesamte 2- Elektronenzustand

$|\Psi\rangle = |Ort\rangle |Spin\rangle$ muss antisymmetrisch sein bei Permutation von Spin und Bahn, da die Elektronen Fermionen sind.

das heißt, es muss einer der beiden Produktbildenden Zustände $|Ort\rangle, |Spin\rangle$ antisymmetrisch sein und der andere symmetrisch.

2 Möglichkeiten:

1) der Spin- Anteil ist symmetrisch und der Bahn Anteil antisymmetrisch:

$$S = s_1 + s_2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1 \quad \text{ein Triplett- Zustand also!}$$

$$m_s = 0, \pm 1$$

Merke: Multipllett- Zustände sind multi- fach entartet in dem Sinn, dass die charakterisierenden Eigenschaften der Wellenfunktion gegeben sind und daraus die bestehende Entartung multi- fach ist.

Das bedeutet. Bei Spin und Bahndrehimpuls ist das n. Energieniveau ein $2n^2$ - pllett, wenn keine Wechselwirkung mit äußeren Feldern stattfindet. (In Wahrheit sind jedoch auch diese Zustände nicht mehr vollständig entartet, da schon das magnetische Moment des Elektronenspins mit dem des Bahndrehimpuls wechselwirkt und die Entartung teilweise aufhebt.

Im Fall 1) wäre nun der Bahn- Anteil antisymmetrisch:

$\Psi_-^{(0)}, E_-$. Dieser Potenzialverlauf ist jedoch grundsätzlich abstoßend. Es kann nicht zur Bindung kommen. Das Orbital ist antibindend.

2) der Spin- Anteil ist antisymmetrisch und der Bahn- Anteil symmetrisch:

$S = s_1 + s_2 = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0$ Die beiden Spins stehen also antiparallel und der Zustand ist bindend. Es kommt zur $m_s = 0$ Bindung.

Denn: Der Bahn- Anteil ist symmetrisch:

$\Psi_+^{(0)}, E_+$

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen zwischen den Kernen ist erhöht.

5.7 Variationsverfahren

Diese Näherungsmethode von W. Ritz ist nützlich, falls der Hamiltonoperator NICHT in einen ungestörten Anteil und eine KLEINE Störung zerlegbar ist, was den Abbruch der Störungsreihe rechtfertigt.

Die zeitunabhängige Schrödingergleichung:

$$\hat{H}|\Psi_k\rangle = E_k|\Psi_k\rangle$$

$\langle\Psi_n|\Psi_k\rangle = \delta_{nk}$ bilden ein vollständiges Orthonormalsystem

Dies sind die nötigen Voraussetzungen zur Durchführung des Variationsprinzips:

Weiter seien die Energie- Eigenwert der Größe nach geordnet:

$$E_0 \leq E_1 \leq E_2 \leq E_3 \dots$$

Dann gilt für einen beliebigen Zustand $|\Psi\rangle$, im Allgemeinen kein Eigenzustand:

$$\langle\Psi|\hat{H}|\Psi\rangle = \sum_n \langle\Psi|\hat{H}|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|\Psi\rangle = \sum_n E_n \langle\Psi|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|\Psi\rangle$$

$$E_n \geq E_0$$

$$\Rightarrow \sum_n E_n \langle\Psi|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|\Psi\rangle \geq E_0 \sum_n \langle\Psi|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|\Psi\rangle = E_0 \langle\Psi|\Psi\rangle$$

Wodurch uns die Ungleichung geben ist:

$$\frac{\sum_n E_n \langle\Psi|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} \geq E_0$$

Also:

$$\frac{\langle\Psi|\hat{H}|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} \geq E_0 \quad \text{als Extremal- Prinzip}$$

Näherung für den Grundzustand:

- 1) Mache einen geeigneten Ansatz für eine Testfunktion $|\Psi\rangle$ mit verschiedenen Parametern, also $\Psi(\bar{r}, \mathbf{a}, \mathbf{b}, \dots)$.
- 2) Dabei sollten Symmetrien und Asymptotik beachtet werden.
- 3) Variiere dann die Parameter, bis $\frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = E$ minimal wird:

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{a}} E = \frac{\partial}{\partial \mathbf{b}} E = \dots = 0$$

$$\Rightarrow \mathbf{a}_0, \mathbf{b}_0, \dots$$

Damit ist eine Näherung für die Grundzustandsenergie $E_0 \approx E(\mathbf{a}_0, \mathbf{b}_0, \dots)$.

Die Parameter in der Testfunktion setzen dann gleichzeitig eine Näherung für den Grundzustands- Eigenzustand

$$\Psi_0 \approx \Psi(\bar{r}, \mathbf{a}_0, \mathbf{b}_0, \dots)$$

Bemerkung

Die Näherung von $E_0 \approx E(\mathbf{a}_0, \mathbf{b}_0, \dots)$ ist besser als die Näherung $\Psi_0 \approx \Psi(\bar{r}, \mathbf{a}_0, \mathbf{b}_0, \dots)$ in folgendem Sinn:

$$\Psi(\bar{r}, \mathbf{a}_0, \mathbf{b}_0, \dots) = \Psi_0 + I\mathbf{j}$$

Wobei die genäherte Funktion $\Psi(\bar{r}, \mathbf{a}_0, \mathbf{b}_0, \dots)$ die exakte, also Ψ_0 um den Term $I\mathbf{j}$ verfehlt:

Mit

$$\langle \mathbf{j} | \Psi_0 \rangle = 0 \quad \text{Für kleine } |\mathbf{I}| \text{ gilt, da } E \text{ bei } E_0 \text{ ein Minimum hat:}$$

$$E(\mathbf{a}_0, \mathbf{b}_0, \dots) = E_0 + I^2 A + \dots$$

Der Fehler geht also nur quadratisch ein. Die Energie ist besser genähert.

Näherung für angeregte Zustände:

$E_0 \approx E(\mathbf{a}_0, \mathbf{b}_0, \dots)$ und $\Psi_0 \approx \Psi(\bar{r}, \mathbf{a}_0, \mathbf{b}_0, \dots)$ sind also näherungsweise bekannt.

Nun wähle man eine Testfunktion $\Psi(\bar{r}, \mathbf{a}, \mathbf{b}, \dots)$ mit $\langle \Psi(\bar{r}, \mathbf{a}, \mathbf{b}, \dots) | \Psi_0 \rangle = 0$. Dies muss natürlich für beliebige Belegung der Parameter gelten !

Also: Man wähle einen neuen, beliebigen Zustand, der nur orthogonal zum bestehenden sein muss ! (und zwar für beliebige Parameterbelegungen !)

Nun kann man die Parameter erneut variieren, bis $\frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = E$ minimal wird.

Dann hat man eine Näherung $E_1 \approx E$ und $\Psi_1 \approx \Psi(\bar{r}, \mathbf{a}_1, \mathbf{b}_1, \dots)$

Beweis:

$$\begin{aligned}
 \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle &= \sum_n \langle \Psi | \hat{H} | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \Psi \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} E_n \langle \Psi | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \Psi \rangle \\
 \langle \Psi | \Psi_n \rangle &= 0, \text{ für } n = 0 \\
 \Rightarrow \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle &= \sum_{n=1}^{\infty} E_n \langle \Psi | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \Psi \rangle \\
 \Rightarrow E_n &\geq E_1 \\
 \Rightarrow \sum_{n=1}^{\infty} E_n \langle \Psi | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \Psi \rangle &\geq E_1 \sum_{n=1}^{\infty} \langle \Psi | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \Psi \rangle \\
 \Rightarrow \sum_{n=1}^{\infty} E_n \langle \Psi | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \Psi \rangle &\geq E_1 \langle \Psi | \Psi \rangle \Rightarrow E_1 \leq \frac{\sum_{n=1}^{\infty} E_n \langle \Psi | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \\
 \Rightarrow E_1 &\leq \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}
 \end{aligned}$$

Weitere Näherungsmethoden

- beispielsweise WKB- Näherung (, Wentzel, Kramer, Brillouin (1926)
- sogenannte "quasiklassische Näherung":

Gut, falls die De- Broglie Wellenlänge viel kleiner ist als die Länge, auf der sich das Potenzial wesentlich ändert.

Fließbach, S. 155 ff.

6. Streutheorie

6.1 Lippmann- Schwinger- Gleichung

Man betrachte Teilchen, die in Wechselwirkung stehen, jedoch keine gebundenen Zustände miteinander einnehmen:

Der Hamiltonoperator kann geschrieben werden als:

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}^{(1)}$$

Dabei bezeichne

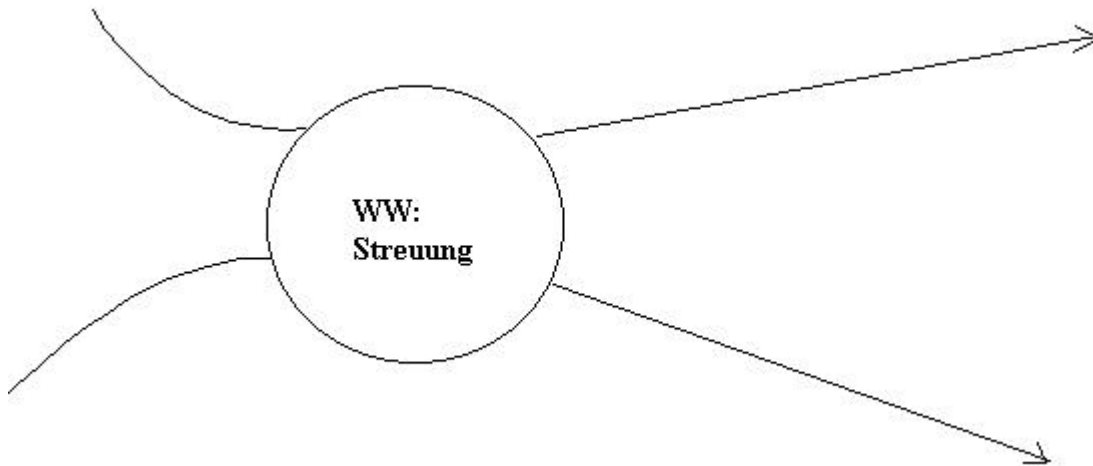
$\hat{H}^{(0)}$ die kinetische Energie

und

$\hat{H}^{(1)}$ die Wechselwirkungsenergie.

Im Falle stationärer Streuung erhalten wir:

$\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$. $|\Psi\rangle$ beschreibt ein am Anfang einlaufendes Teilchen (ohne Wechselwirkung), die anschließende Streuung und schließlich wieder auseinanderlaufende Teilchen:



Stationär bedeutet hier: Das Gleichgewicht hat sich bereits eingeregelt. Der Prozess ist zeitlich stationär, weil jede Veränderung an einem Teilchenzustand 1 durch ein nachrückendes Teilchen, dessen Zustand sich in den des ersten (Zustand 1) begibt, aufgefüllt wird.

Die Schrödingergleichung lautet:

$$(E - \hat{H}_0)|\Psi\rangle = \hat{H}^{(1)}|\Psi\rangle$$

Erster Schritt bei derartigen Problemen: Isolation der Störung !

Die formale Lösung kann angegeben werden mittels:

$$|\Psi\rangle = |\Phi\rangle + \frac{1}{(E - \hat{H}_0)} \hat{H}^{(1)}|\Psi\rangle$$

$$\frac{1}{(E - \hat{H}_0)} \equiv (E - \hat{H}_0)^{-1}$$

Die Division zwischen 1 und dem Operator der linken Seite ist dabei als Ausführung der inversen Operation zu verstehen !

$|\Phi\rangle$ ist eine beliebige Lösung der wechselwirkungsfreien Gleichung

$$(\hat{H}_0 - E)|\Phi\rangle = 0$$

Beweis:

$$(E - \hat{H}_0)|\Psi\rangle = (E - \hat{H}_0)|\Phi\rangle + (E - \hat{H}_0)\frac{1}{(E - \hat{H}_0)}\hat{H}^{(1)}|\Psi\rangle$$

$$(E - \hat{H}_0)\frac{1}{(E - \hat{H}_0)} := 1$$

$$\Rightarrow (E - \hat{H}_0)|\Psi\rangle = \hat{H}^{(1)}|\Psi\rangle \Leftrightarrow (E - \hat{H}_0)|\Phi\rangle = 0$$

Die Gleichung $|\Psi\rangle = |\Phi\rangle + \frac{1}{(E - \hat{H}_0)}\hat{H}^{(1)}|\Psi\rangle$ ist dabei eine Integralgleichung, beispielsweise in der Ortsdarstellung:

$$\langle \vec{r} | \Psi \rangle = \langle \vec{r} | \Phi \rangle + \int \int \langle \vec{r} | \frac{1}{(E - \hat{H}_0)} | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | \hat{H}^{(1)} | \vec{r}'' \rangle \langle \vec{r}'' | \Psi \rangle d^3 r'' d^3 r'$$

Berechnung des inversen Operators $\frac{1}{(E - \hat{H}_0)}$ Hier: Greenscher Operator, sogenannte RESOLVENTE

(auch: Residuum !) der Schrödingergleichung.

Methode: Transformation auf Impulsdarstellung (Fourier- Transformation) und komplexe Integration.
Aber: die Lösung ist nicht eindeutig, je nach Wahl des Integrationsweges ergeben sich unterschiedliche Ergebnisse (Integrationsweg in der komplexen Ebene). Dementsprechend ergeben sich verschiedene Randbedingungen

Die Festlegung erfolgt durch Addition eines kleinen komplexen Terms $i\epsilon$. Am Schluss kann man dann $\epsilon \rightarrow 0$ gehen lassen.

Damit ergibt sich als **LIPPMANN- Schwinger- Gleichung**

$$|\Psi^{(+)}\rangle = |\Phi\rangle + \frac{1}{(E - \hat{H}_0 + i\epsilon)}\hat{H}^{(1)}|\Psi^{(+)}\rangle$$

Wesentlicher Vorteil zur Schrödingergleichung: Die Lippmann- Schwinger- Gleichung ist die im Vergleich zur Schrödingergleichung komplexe Erweiterung mit reeller Polstellenfreiheit !

Mit auslaufender Welle $|\Psi^{(+)}\rangle$

Streuwelle $\frac{1}{(E - \hat{H}_0 + i\epsilon)}\hat{H}^{(1)}|\Psi^{(+)}\rangle$

und einlaufender Welle $|\Phi\rangle$ (Lösung des ungestörten Problems)

Die auslaufende Welle $|\Psi^{(+)}\rangle$ ist die Summe aus einlaufender Welle und Streuwelle !

Greensche Funktion des freien Teilchens (= Ortsdarstellung des Greenschen Operators)

$$G_+(\vec{r}, \vec{r}') := \frac{\hbar}{2m} \langle \vec{r} | \frac{1}{(E - \hat{H}_0 + i\epsilon)} | \vec{r}' \rangle$$

Dabei werden zwei "Einsen" eingeschoben und wir gewinnen:

$$G_+(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{\hbar}{2m} \int d^3q \int d^3q' \langle \vec{r} | \vec{q} \rangle \langle \vec{q} | \frac{1}{(E - \hat{H}_0 + i\epsilon)} | \vec{q}' \rangle \langle \vec{q}' | \vec{r}' \rangle$$

Also: Das Problem wird nach der auslaufenden Welle aufgelöst. Zur Polstellenfreiheit erweitert man komplex. Dann isoliert man den Greenschen Operator und führt mit diesem eine Fouriertransformation durch!

Der obige Einschub einer Basis ist noch KEINE Fouriertransformation. Wir befinden uns dann immer noch im Ortsraum!

Dabei bezeichnen \vec{q}, \vec{q}' die Wellenvektoren mit der entsprechenden Impulsdarstellung $\hbar\vec{q}$.

Für ein freies Teilchen, für das der Hamiltonian direkt angegeben werden kann: $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ gilt:

$$\langle \vec{q} | \hat{H}_0 | \vec{q}' \rangle = \frac{\hbar^2 \vec{q}^2}{2m} \mathbf{d}(\vec{q} - \vec{q}')$$

Somit also

$$\langle \vec{q} | \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} | \vec{q}' \rangle = \frac{\mathbf{d}(\vec{q} - \vec{q}')}{E - \frac{\hbar^2 \vec{q}^2}{2m} + i\epsilon}$$

Asymptotisch gelte für das einlaufende Teilchen als Anfangsbedingung sozusagen

$$\vec{p} = \hbar\vec{k} \Rightarrow E = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}$$

$$\Rightarrow \langle \vec{q} | \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} | \vec{q}' \rangle = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{\mathbf{d}(\vec{q} - \vec{q}')}{\vec{k}^2 - \vec{q}^2 + i\hbar} =: \frac{2m}{\hbar^2} \tilde{G}_+(\vec{q}) \mathbf{d}(\vec{q} - \vec{q}')$$

$$\hbar = \frac{2m}{\hbar^2} \epsilon$$

$$\langle \vec{r} | \vec{q} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{q}\vec{r}}$$

Damit folgt dann als angekündigte Fouriertrafo:

$$G_+(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q \tilde{G}_+(\vec{q}) e^{i\vec{q}(\vec{r} - \vec{r}')}$$

$$\tilde{G}_+(\vec{q}) = \frac{1}{\vec{k}^2 - \vec{q}^2 + i\hbar}$$

Also: Wir führen die Fouriertransformation durch und gewinnen als Fouriertransformierte

$$\tilde{G}_+(\vec{q}) = \frac{1}{\vec{k}^2 - \vec{q}^2 + i\hbar}$$

Die Rücktransformation liefert die gesuchte Greensfunktion $G_+(\vec{r}, \vec{r}')$, die mittels Residuensatz aus der

bekannten $\tilde{G}_+(\vec{q}) = \frac{1}{\vec{k}^2 - \vec{q}^2 + i\hbar}$ durch Fouriertrafo gewonnen werden kann!

$G_+(\vec{r}, \vec{r}')$ hängt also nur von $(\vec{r} - \vec{r}')$ ab!

Berechnung von $G_+(\vec{r} - \vec{r}') := G_+(\vec{R})$ in Polarkoordinaten \vec{q} erfolgt mittels Residuensatz

$$G_+(\bar{R}) = \frac{1}{(2\mathbf{p})^3} \int d^3 q \frac{1}{\bar{k}^2 - \bar{q}^2 + i\mathbf{h}} e^{i\bar{q}\bar{R}}$$

Dabei lege man

$\bar{R} = \bar{r} - \bar{r}'$ entlang der z- Achse, so dass zwischen \bar{R} und \bar{q} gerade der Winkel \mathbf{J} liegt:

$$G_+(\bar{R}) = \frac{1}{(2\mathbf{p})^3} \int_0^\infty dq \int_{-1}^1 d \cos \mathbf{J} \int_0^{2\mathbf{p}} d\mathbf{j} \frac{q^2}{\bar{k}^2 - \bar{q}^2 + i\mathbf{h}} e^{iqR \cos \mathbf{J}}$$

$$G_+(\bar{R}) = \frac{1}{4\mathbf{p}^2 i q R} \int_0^\infty dq q^2 \frac{e^{iqR} - e^{-iqR}}{q(\bar{k}^2 - \bar{q}^2 + i\mathbf{h})}$$

Dies kann man leicht weiter zusammenfassen, indem im zweiten Term einfach q durch -q ersetzt wird:

$$G_+(\bar{R}) = \frac{1}{4\mathbf{p}^2 i R} \int_{-\infty}^\infty dq q \frac{e^{iqR}}{\bar{k}^2 - \bar{q}^2 + i\mathbf{h}}$$

Die Integration erfolgt mittels Residuensatz in der komplexen q- Ebene:

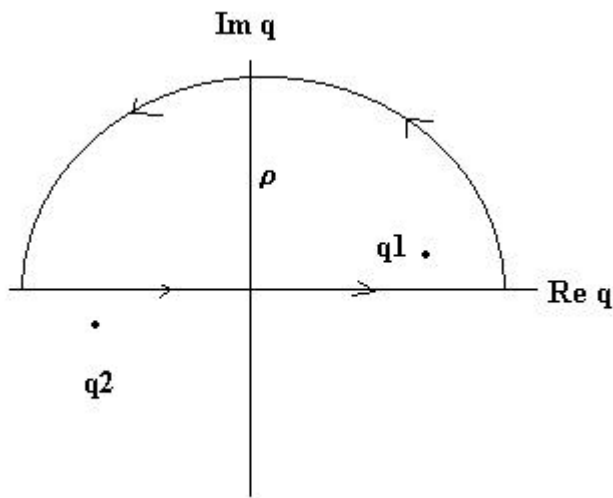
Dazu ist es nötig, die komplexe Zahl q in Polarkoordinaten umzuschreiben:

$$q = \mathbf{r} \cdot e^{i\Phi}$$

$$0 \leq \Phi \leq \mathbf{p}$$

$$dq = \mathbf{r} \cdot e^{i\Phi} i d\Phi$$

Skizzenhaft:



Da die Integration im Unendlichen (Halbkreisbogen) verschwindet kann man das Integral von Minus bis Plus Unendlich auch gleich als Ringintegral schreiben. Wesentlich ist dann: dass es nur Beiträge aus den Polstellen der Funktion gibt. demnach müssen diese gesucht werden:

Die Pole des Integranden:

$$\frac{1}{\bar{k}^2 - \bar{q}^2 + i\mathbf{h}}$$

$$q_{1/2} = \pm \sqrt{\bar{k}^2 + i\mathbf{h}} \approx \left(k + \frac{i\mathbf{h}}{2k} \right)$$

Genau genommen muss noch gezeigt werden, dass das Integral über den Kreisbogen für Radius gegen Unendlich verschwindet:

$$\lim_{\mathbf{r} \rightarrow \infty} \oint d\mathbf{q} q \frac{e^{iqR}}{\bar{k}^2 - \bar{q}^2 + i\mathbf{h}} = \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{q} q \frac{e^{iqR}}{\bar{k}^2 - \bar{q}^2 + i\mathbf{h}} + \lim_{\mathbf{r} \rightarrow \infty} \int_0^{\mathbf{p}} d\Phi i e^{2i\Phi} \frac{\mathbf{r}^2 e^{i\mathbf{r}R \cos \Phi} e^{-\mathbf{r}R \sin \Phi}}{\bar{k}^2 - \mathbf{r}^2 e^{2i\Phi} + i\mathbf{h}}$$

Aber:

$$\lim_{\mathbf{r} \rightarrow \infty} \int_0^{\mathbf{p}} d\Phi i e^{2i\Phi} \frac{\mathbf{r}^2 e^{i\mathbf{r}R \cos \Phi} e^{-\mathbf{r}R \sin \Phi}}{\bar{k}^2 - \mathbf{r}^2 e^{2i\Phi} + i\mathbf{h}} = 0$$

da

$$\lim_{\mathbf{r} \rightarrow \infty} e^{-\mathbf{r}R \sin \Phi} = 0$$

$$\Rightarrow \lim_{\mathbf{r} \rightarrow \infty} \oint d\mathbf{q} q \frac{e^{iqR}}{\bar{k}^2 - \bar{q}^2 + i\mathbf{h}} = \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{q} q \frac{e^{iqR}}{\bar{k}^2 - \bar{q}^2 + i\mathbf{h}}$$

Mittels Residuensatz ergibt sich dann

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{q} q \frac{e^{iqR}}{\bar{k}^2 - \bar{q}^2 + i\mathbf{h}} = 2\mathbf{p} i \left(\text{RES} \left(\frac{q e^{iqR}}{\bar{k}^2 - \bar{q}^2 + i\mathbf{h}} \right) \right)_{q=q_1}$$

Dies ist der Beitrag vom oberen Integrationsweg, weshalb das Residuum an $q=q_1$ ausgewertet werden muss. Ebenso hätte man den unteren Integrationsweg nehmen können. Dann wäre das Residuum eben an $q=q_2$ auszuwerten gewesen.

Da wir die Polstellen des Arguments des Residuums gefunden haben können wir umschreiben:

$$\text{RES} \frac{q e^{iqR}}{\bar{k}^2 - \bar{q}^2 + i\mathbf{h}} \Big|_{q=q_1} = \text{RES} \frac{q e^{iqR}}{\left(\sqrt{\bar{k}^2 + i\mathbf{h}} - q \right) \left(\sqrt{\bar{k}^2 + i\mathbf{h}} + q \right)} \Big|_{q_1 \equiv \sqrt{\bar{k}^2 + i\mathbf{h}}}$$

$$\sqrt{\bar{k}^2 + i\mathbf{h}} = q_1 = -q_2$$

$$\text{RES} \frac{q e^{iqR}}{\left(\sqrt{\bar{k}^2 + i\mathbf{h}} - q \right) \left(\sqrt{\bar{k}^2 + i\mathbf{h}} + q \right)} \Big|_{q_1 \equiv \sqrt{\bar{k}^2 + i\mathbf{h}}} = \lim_{q \rightarrow q_1} \frac{(q - q_1) q e^{iqR}}{(q_1 - q)(q - q_2)} = \frac{q_1 e^{iq_1 R}}{(q_1 - q_2)}$$

$$= - \frac{e^{i\sqrt{\bar{k}^2 + i\mathbf{h}} R}}{2}$$

$$\lim_{\mathbf{h} \rightarrow 0} - \frac{e^{i\sqrt{\bar{k}^2 + i\mathbf{h}} R}}{2} = - \frac{e^{ikR}}{2}$$

Also hat man ein Ergebnis für $G_+(\bar{R}) = \frac{1}{4\mathbf{p}^2 i R} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{q} q \frac{e^{iqR}}{\bar{k}^2 - \bar{q}^2 + i\mathbf{h}}$, man erhält

$$G_+(\bar{R}) = \frac{1}{4\mathbf{p}^2 i R} 2\mathbf{p} i \text{RES} \Big|_{q_1} = \frac{-e^{ikR}}{4\mathbf{p} R}$$

Wesentlich: $G_+(\bar{R}) = G_+(\bar{r} - \bar{r}')$ erfüllt die Differenzialgleichung für die Greensche Funktion:

$$\left(\Delta + k^2 \right) G_+(\bar{r} - \bar{r}') = \mathbf{d}(\bar{r} - \bar{r}')$$

Denn:

$$\begin{aligned}\mathbf{d}(\bar{r} - \bar{r}') &= \langle \bar{r} | \bar{r}' \rangle = G_+(\bar{r}, \bar{r}') = \langle \bar{r} | (E - \hat{H}_0 + i\epsilon) \frac{1}{(E - \hat{H}_0 + i\epsilon)} | \bar{r}' \rangle \\ &\equiv \langle \bar{r} | \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{\hat{p}^2}{2m} \right) \frac{1}{(E - \hat{H}_0 + i\epsilon)} | \bar{r}' \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} (k^2 + \Delta) \langle \bar{r} | \frac{1}{(E - \hat{H}_0 + i\epsilon)} | \bar{r}' \rangle\end{aligned}$$

Ortsdarstellung der Lippmann- Schwinger- Gleichung

$$\begin{aligned}\langle \bar{r} | \Psi^{(+)} \rangle &= \langle \bar{r} | \Phi \rangle + \int d^3 r' \langle \bar{r} | \frac{1}{(E - \hat{H}_0 + i\epsilon)} | \bar{r}' \rangle \langle \bar{r}' | \hat{H}^1 | \Psi^{(+)} \rangle \\ &= \langle \bar{r} | \Phi \rangle + \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3 r' G_+(\bar{r} - \bar{r}') \langle \bar{r}' | \hat{H}^1 | \Psi^{(+)} \rangle = e^{i\vec{k}\bar{r}} + \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3 r' \frac{e^{ik|\bar{r}-\bar{r}'|}}{4\mathbf{p}|\bar{r}-\bar{r}'|} \langle \bar{r}' | \hat{H}^1 | \Psi^{(+)} \rangle\end{aligned}$$

Mit der durchlaufenden freien Welle $\langle \bar{r} | \Phi \rangle = e^{i\vec{k}\bar{r}}$

$$\text{und der Streuwelle } \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3 r' G_+(\bar{r} - \bar{r}') \langle \bar{r}' | \hat{H}^1 | \Psi^{(+)} \rangle = + \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3 r' \frac{e^{ik|\bar{r}-\bar{r}'|}}{4\mathbf{p}|\bar{r}-\bar{r}'|} \langle \bar{r}' | \hat{H}^1 | \Psi^{(+)} \rangle$$

Zusammenfassung

Aus der Schrödingergleichung

Die Schrödingergleichung lautet:

$$(E - \hat{H}_0) |\Psi\rangle = \hat{H}^{(1)} |\Psi\rangle$$

Mit dem linearen Differentialoperator $(E - \hat{H}_0) |\Psi\rangle$ und der Inhomogenität $\hat{H}^{(1)} |\Psi\rangle$ kann man formal lösen:

$$\begin{aligned}|\Psi^{(+)}\rangle &= |\Phi\rangle + \frac{1}{(E - \hat{H}_0 + i\epsilon)} \hat{H}^{(1)} |\Psi^{(+)}\rangle \\ \frac{1}{(E - \hat{H}_0)} &:= (E - \hat{H}_0)^{-1}\end{aligned}$$

eine Form der Lippmann- Schwinger- Gleichung mit auslaufender Welle $|\Psi^{(+)}\rangle$ Greenschen Operator (auch sogenannte RESOLVENTE) $\frac{1}{(E - \hat{H}_0 + i\epsilon)}$ und durchlaufender Welle (freie einlaufende Lösung) $|\Phi\rangle$

Die Berechnung der Greenschen Funktion des freien Teilchens:

$$\text{Als Operator: } \hat{G}_+ := \frac{1}{(E - \hat{H}_0 + i\epsilon)} \text{ erfüllt } (E - \hat{H}_0) \hat{G}_+ = 1$$

Übergang in die Impulsdarstellung:

$$\langle \bar{q} | \hat{G}_+ | \bar{q}' \rangle = \frac{2m}{\hbar} \hat{G}_+(\bar{q}) \mathbf{d}(\bar{q} - \bar{q}')$$

Mit

$$\hat{G}_+(\bar{q}) := \frac{1}{k^2 - q^2 + i\hbar}$$

➔ Mittels Fouriertrafo erfolgt der Übergang in die Ortsdarstellung:

$$\hat{G}_+(\vec{r} - \vec{r}') := \frac{\hbar^2}{2m} \langle \vec{r} | \hat{G}_+(\vec{q}) | \vec{r}' \rangle = - \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{4\mathbf{p}|\vec{r}-\vec{r}'|}$$

Dieser erfüllt dann eine Relation des Impulsoperators in Ortsdarstellung (Orts- Differentiationsrelation):

$$(\Delta + k^2) \hat{G}_+(\vec{r} - \vec{r}') = \mathbf{d}(\vec{r} - \vec{r}')$$

(dies ist die skalare Helmholtzgleichung !)

Potenzialstreuungen

$\hat{H}^{(1)}$ sei ein Potenzial, das die Wechselwirkung mit einem schweren Teilchen als STREUZENTRUM (Target) beschreibt. Allgemein: Beschreibung im Schwerpunktsystem

Hier kann man als Schwerpunktsystem näherungsweise den Schwerpunkt des schweren Teilchen annehmen

In Ortsdarstellung schreiben wir:

$$\begin{aligned} \langle \vec{r}' | \hat{H}^{(1)} | \Psi^{(+)} \rangle &= V(\vec{r}') \Psi^{(+)}(\vec{r}') \\ \Rightarrow \Psi^{(+)}(\vec{r}) &= e^{i\vec{k}\vec{r}} - \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3 r' \frac{e^{i\vec{k}|\vec{r}-\vec{r}'|}}{4\mathbf{p}|\vec{r}-\vec{r}'|} V(\vec{r}') \Psi^{(+)}(\vec{r}') \end{aligned}$$

Dies ist die Lippmann Schwingergleichung für eine Potenzialstreuung.

Diese Gleichung ist völlig äquivalent zur Schrödingergleichung mit Randbedingungen.

Als Randbedingungen sind in der Streutheorie prinzipiell die asymptotischen Wege für r gegen Plus oder Minus UNENDLICH zu verstehen .

6.2 Streuamplitude und Streuquerschnitt

Voraussetzung $\lim_{r' \rightarrow \infty} V(\vec{r}') = 0$ HINREICHEND RASCH !

Ansonsten versagen die Näherungsmethoden, die hier gemacht werden.

das Potenzial muss also eine endliche Reichweite haben.

Zum Integral der Lippmann- Schwinger Gleichung trägt dann für r-> unendlich der Integrand nur mit $r' \ll r$ bei.

r' kennzeichnet das Gebiet des Potenzials. Wenn dieses viel kleiner ist und man sich vor allem für die Fernfeldlösungen interessiert, so kann der Integrand in diesem Fall geschickt genähert werden, was die Integrale lösbar macht. !

Wir können also

$$\hat{G}_+(\vec{r} - \vec{r}') = - \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{4\mathbf{p}|\vec{r}-\vec{r}'|} \text{ für } r \gg r' \text{ entwickeln:}$$

$$|\vec{r} - \vec{r}'| = \sqrt{(\vec{r} - \vec{r}')^2} = \sqrt{\vec{r}^2 - 2\vec{r}\vec{r}' + \vec{r}'^2} = r \sqrt{\left(1 - 2\frac{\vec{r}\vec{r}'}{r^2} + \left(\frac{r'}{r}\right)^2\right)} \approx r \sqrt{\left(1 - 2\frac{\vec{r}\vec{r}'}{r^2}\right)} \approx r - \vec{r}'\vec{e}_r$$

$$\vec{e}_r = \frac{\vec{r}}{r}$$

Somit

$$\hat{G}_+(\vec{r} - \vec{r}') \cong - \frac{e^{ik(r - \vec{r}'\vec{e}_r)}}{4\mathbf{p}r}$$

Dabei bezeichnet $e^{ik(r-\bar{r}\bar{e}_r)}$ die Streuphase, die uns die Information über die Richtungsverteilung des Streuprozess liefert !

$\frac{1}{4\mathbf{p}}$ ist die Streuamplitude, die sich wie eine Kugelwellenamplitude verhält !

Dabei wird in der Amplitude der Greenschen Funktion stärker genähert als in der Phase. Dies ist gerechtfertigt, das uns die Streurichtung mehr interessiert als die Streuamplitude !

$$\hat{G}_+(\bar{\mathbf{r}} - \bar{\mathbf{r}}') \cong -\frac{e^{ikr}}{4\mathbf{p}} e^{-ik\bar{\mathbf{r}}\bar{\mathbf{e}}_r}$$

Dies ist der für große Abstände genäherte Greensche Operator ! (Da es sich bei dieser Art der " Greenschen Funktion" eigentlich um einen Operator handelt, ist es besser, von einem Greenschen Operator zu sprechen ! Das Asymptotische Verhalten der Lippmann- Schwinger- Gleichung für $r \rightarrow \infty$ kann also angegeben werden:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \Psi^{(+)}(\bar{\mathbf{r}}) = e^{ik\bar{\mathbf{r}}} - \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{4\mathbf{p}} \int d^3r' e^{-ik\bar{\mathbf{r}}\bar{\mathbf{e}}_r} V(\bar{\mathbf{r}}') \Psi^{(+)}(\bar{\mathbf{r}}')$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \Psi^{(+)}(\bar{\mathbf{r}}) = e^{ik\bar{\mathbf{r}}} + f(\bar{\mathbf{e}}_r) \frac{e^{ikr}}{r}$$

Dies ist im Limes für $r \rightarrow \infty$ eine exakte Lösung !

$e^{ik\bar{\mathbf{r}}}$ als durchlaufende Welle

$\frac{e^{ikr}}{4\mathbf{p}}$ als auslaufende Kugelwelle

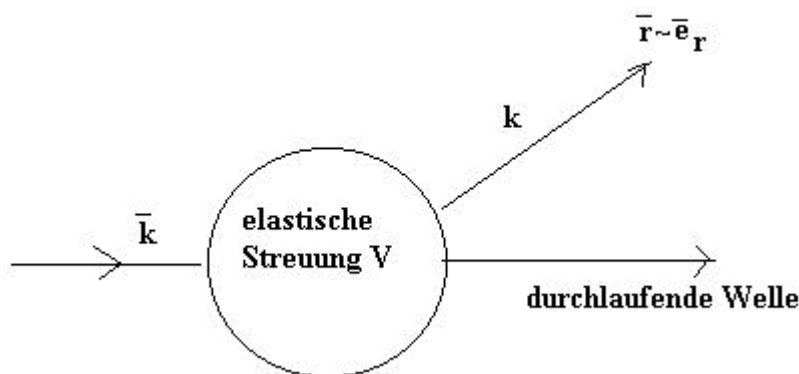
Dabei besitzt die auslaufende Kugelwelle die Streuamplitude

$$f(\bar{\mathbf{e}}_r) = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\mathbf{p}} \int d^3r' e^{-ik\bar{\mathbf{r}}\bar{\mathbf{e}}_r} V(\bar{\mathbf{r}}') \Psi^{(+)}(\bar{\mathbf{r}}')$$

Man sieht, dass die Amplitude dieser Streuwelle, eine Kugelwelle, von der Beobachtungsrichtung

$\bar{\mathbf{e}}_r = \frac{\bar{\mathbf{r}}}{r}$ abhängt:

Die Streuung ist elastisch !



Wirkungsquerschnitt

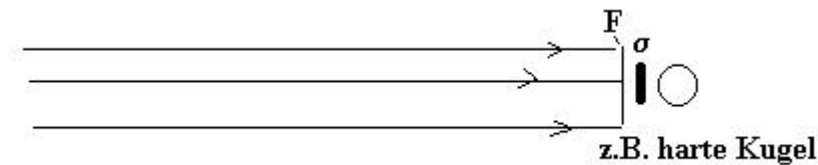
Macht Sinn als Definition entsprechend einer Streuung eines Teilchenstrahls an einem undurchdringlichen Streuzentrum.

Dabei ist definiert:

$$\frac{\text{Zahl}(\text{gestreut})/\text{sec.}}{\text{Zahl}(\text{ein-fallend})/\text{sec.}} = \frac{\mathbf{S}}{\text{Strahlfläche}}$$

Strahlfläche:= Fläche, auf die der Strahl trifft

\mathbf{S} : streuende Fläche



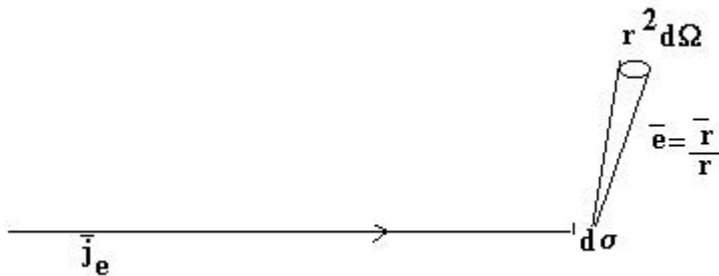
Die Definition läßt sich verallgemeinern auf weiche Streuzentren:

Mn spricht dann vom Wirkungsquerschnitt (wie vom Streuquerschnitt) \mathbf{S}

$$\mathbf{S} := \frac{\text{Zahl}(\text{gestreut})/\text{sec.}}{\text{Zahl}(\text{ein-fallend})/\text{sec.}/\text{cm}^2} = \frac{\text{Zahl}(\text{gestreut})/\text{sec.}}{\text{Zahl}(\text{ein-fallend})/\text{sec.}} \text{cm}^2$$

Man muss aber, um Probleme behandeln zu können, den differentiellen Wirkungsquerschnitt betrachten

$$\frac{d\mathbf{S}}{d\Omega} = \frac{\text{Zahl}(\text{gestreut})\text{in } d\Omega(\bar{e}_r)/\text{sec.}}{\text{Zahl}(\text{ein-fallend})/\text{sec.}/\text{cm}^2} = \frac{\text{Zahl}(\text{gestreut})\text{in } d\Omega(\bar{e}_r)/\text{sec.}}{\text{Zahl}(\text{ein-fallend})/\text{sec.}} \text{cm}^2$$



$$d\mathbf{S} = \frac{(\bar{j}_s)_r r^2 d\Omega}{|\bar{j}_e|}$$

$$d\Omega = \sin \theta d\theta d\phi$$

Zur einlaufenden Welle:

$\Psi_e(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}}$ gehört, wie bereits abgeleitet wurde, die Stromdichte:

$$\bar{j}_e = \frac{\hbar}{2im} (\Psi_e^* \nabla \Psi_e - \Psi_e \nabla \Psi_e^*) = \frac{\hbar \vec{k}}{m} \Psi_e \Psi_e^* = \frac{\hbar \vec{k}}{m} |\Psi|^2$$

Zur Streuwelle in Richtung $\vec{e}_r = \frac{\vec{r}}{r}$

also: $\Psi_S(\vec{r}) = f(\vec{e}_r) \frac{e^{ikr}}{r}$

gehört die Radialkomponente der Stromdichte:

$$(\vec{j}_s)_r = \frac{\hbar}{2im} \left(\Psi_S^* \frac{\partial}{\partial r} \Psi_S - \Psi_S \frac{\partial}{\partial r} \Psi_S^* \right) = \frac{\hbar}{2im} |f(\vec{e}_r)|^2 \left(\frac{e^{-ikr}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{ikr}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \frac{e^{-ikr}}{r} \right)$$

$$\Rightarrow (\vec{j}_s)_r = \frac{\hbar}{2im} |f(\vec{e}_r)|^2 \left(\frac{e^{-ikr}}{r} \left(\frac{ik}{r} - \frac{1}{r^2} \right) e^{ikr} - \frac{e^{ikr}}{r} \left(-\frac{ik}{r} - \frac{1}{r^2} \right) e^{-ikr} \right) = \frac{\hbar k}{mr^2} |f(\vec{e}_r)|^2$$

Somit ergibt sich die einfache Form des differentiellen Wirkungsquerschnitts:

$$\frac{dS}{d\Omega} = |f(\vec{e}_r)|^2$$

Und der totale Wirkungsquerschnitt folgt zu

$$S_{tot.} = \int d\Omega |f(\vec{e}_r)|^2$$

Mit der Streuamplitude

$$f(\vec{e}_r) = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi} \int d^3r' e^{-ik\vec{r}'\vec{e}_r} V(\vec{r}') \Psi^{(+)}(\vec{r}')$$

Bornsche Näherung

Die Bornsche Näherung ist eine störungstheoretische Näherung für große Einfallsennergien

$$\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \gg V(\vec{r})$$

In diesem Fall kann $H^{(1)}(\vec{r})$ als kleine Störung betrachtet werden

Für die erste Ordnung Störungsrechnung der Lippmann- Schwinger - Gleichung setzt man an:

$$|\Psi^{(+)}\rangle = |\Phi\rangle + G_+ \hat{H}^{(1)} |\Phi\rangle$$

Das heißt, man nimmt an, dass das Streupotenzial auf die freie einlaufende Lösung wirkt !

Man nennt den Schritt

$$|\Psi^{(+)}\rangle = |\Phi\rangle + G_+ \hat{H}^{(1)} |\Phi\rangle \quad \text{auch ERSTE BORNSCHE NÄHERUNG}$$

In Ortsdarstellung schreibt sich dann:

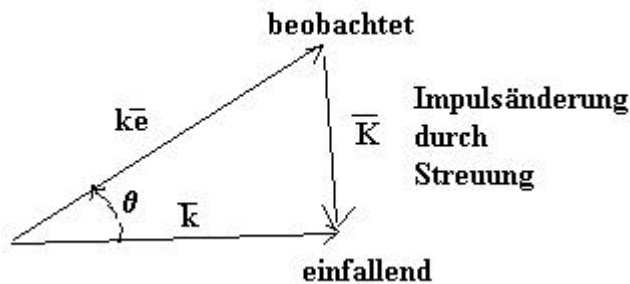
$$\Psi^{(+)}(\vec{r}) = \Psi_e(\vec{r}) + \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3r' G_+(\vec{r} - \vec{r}') V(\vec{r}') \Psi_e(\vec{r}')$$

$$\Psi_e(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

Es folgt für die Streuamplitude in erster Bornscher Näherung

$$f(\bar{e}_r) = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\mathbf{p}} \int d^3r V(\vec{r}) e^{i\bar{K}\vec{r}'}$$

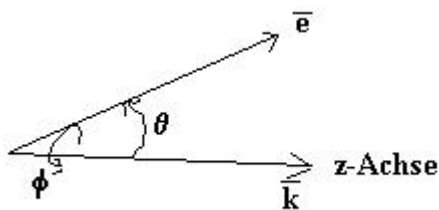
$$\bar{K} := \bar{k} - \bar{k}\bar{e}_r$$



Das heißt, in erster Bornscher Näherung ist die Streuamplitude proportional zur Fouriertransformierten des Potentials $V(\vec{r})$

Das Problem kann für Kugelsymmetrische Potenzial wieder gut durch den Übergang in Kugelkoordinaten gelöst werden: $V=V(r)$

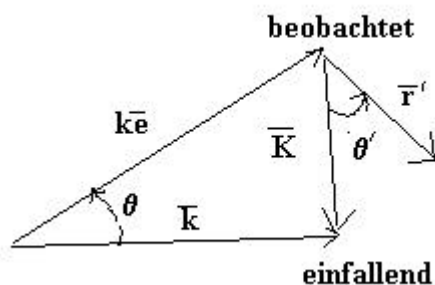
Dann kann wieder \bar{e}_r durch $\mathbf{J}\mathbf{j}$ parametrisiert werden !



$$K = |\bar{k} - \bar{k}\bar{e}_r| = \sqrt{k^2 + k^2 - 2k^2 \cos \mathbf{J}} = 2k \sin \frac{\mathbf{J}}{2}$$

Die Integration $\int d^3r V(\vec{r}) e^{i\bar{K}\vec{r}'}$ erfolgt in Kugelkoordinaten um die \bar{K} - Achse:

$$\bar{K}\vec{r}' = Kr' \cos \mathbf{J}$$



Aus Symmetriegründen hängt $f(\bar{e}_r)$ nicht von \mathbf{j} ab:

$$f(\mathbf{J}) = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\mathbf{p}} \int_0^\infty r'^2 dr' V(\vec{r}') \int_{-1}^1 d(\cos \mathbf{J}) e^{iKr' \cos \mathbf{J}} \int_0^{2\pi} d\mathbf{j}'$$

$$\int_{-1}^1 d(\cos \mathbf{J}) e^{iKr' \cos \mathbf{J}} = \frac{1}{iKr'} (e^{iKr'} - e^{-iKr'}) = \frac{2 \sin Kr'}{Kr'}$$

Somit:

$$f(\mathbf{J}) = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty r'^2 dr' V(\bar{r}') \frac{\sin Kr'}{Kr'} = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{K} \int_0^\infty r' dr' V(\bar{r}') \sin Kr'$$

$$K = 2k \sin \frac{\mathbf{J}}{2}$$

Somit können die Wirkungsquerschnitte angegeben werden:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{S}}{d\Omega} &= |f(\mathbf{J})|^2 \\ \rightarrow \mathbf{S} &= \int d\Omega \left| \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{K} \int_0^\infty r' dr' V(\bar{r}') \sin Kr' \right|^2 \\ &= \int_{-1}^1 d(\cos \mathbf{J}) \int_0^{2\pi} d\mathbf{j} \left| \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{K} \int_0^\infty r' dr' V(\bar{r}') \sin Kr' \right|^2 \end{aligned}$$

Anwendungsbeispiel ist die Rutherford- Streuung.

Dies ist die Streuung eines Z1- fach geladenen Teilchens an einem Z2- fach geladenen. Das Potenzial schreibt sich also gemäß

$$V(r) = -\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi \epsilon_0 r}$$

Mit diesem Potenzial bekommt man allerdings Konvergenz- Schwierigkeiten.

Einige Lösung ist das

YUKAWA- Potenzial

$$V(r) = \lim_{\mathbf{k} \rightarrow 0} \frac{a}{r} e^{-\mathbf{k}r}$$

$$\text{Als } \frac{d\mathbf{S}}{d\Omega} = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{8\pi \epsilon_0 m v^2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \left(\frac{\mathbf{J}}{2} \right)}$$

ergibt sich dann die entsprechende Formel aus der klassischen Mechanik.

Rutherford hatte hier Glück, dass sich durch die klassische Rechnung in diesem Potenzial zwei Fehler gegen die Quantenmechanik gegenseitig annullieren. Somit erhält man die quantenmechanisch korrekte Lösung schon aus der ERSTEN BPORNSCHEN NÄHERUNG !!

Nebenbemerkung:

Für $\mathbf{J} \rightarrow 0$ divergiert $\frac{d\mathbf{S}}{d\Omega}$ wegen der unendlichen Reichweite von $V(r)$

Auch \mathbf{S} divergiert in diesem Fall.

Systematische Störungsentwicklung

- Man kann eine Bornsche Reihe bilden. Dies ist die Iteration der Lippmann - Schwinger Gleichung:

$$\begin{aligned} |\Psi^{(+)}\rangle &= |\Phi\rangle + \hat{R}|\Psi^{(+)}\rangle \\ \hat{R} &:= \hat{G}_+ \hat{H}^1 \end{aligned}$$

Es ergibt sich:

$$\begin{aligned} |\Psi^{(1)}\rangle &= |\Phi\rangle + \hat{R}|\Phi\rangle = (1 + \hat{R})|\Phi\rangle \quad \text{Erste Bornsche Näherung} \\ \hat{R} &:= \hat{G}_+ \hat{H}^1 \end{aligned}$$

$$|\Psi^{(2)}\rangle = |\Phi\rangle + \hat{R}|\Psi^{(1)}\rangle = (1 + \hat{R} + \hat{R}\hat{R})|\Phi\rangle \quad \text{Zweite Bornsche Näherung}$$

... usw.....

$$|\Psi\rangle = (1 + \hat{R} + \hat{R}^2 + \hat{R}^3 + \dots)|\Phi\rangle \quad \text{Bornsche Reihe}$$

Die Bornsche Reihe konvergiert für kleine V

6.4 Drehimpulsdarstellung und Streuphasen (Schwabel)

Annahme: Kugelsymmetrisches Streupotenzial $V(r)$

Erforderlich ist die Umrechnung der Impulsdarstellung $|\vec{k}\rangle$ in die Drehimpulsdarstellung $|lm\rangle$ freier Teilchen.

Ziel:

Entwicklung nach Kugelflächenfunktionen mit kleinem l als Näherung für KLEINE Energien

$$E = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \quad \text{klein}$$

Die auslaufende Welle schreibt sich dann entwickelt:

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{r} u_l(r) P_l(\cos \theta) \quad (\text{Mit den Legendre- Polynomen } P_l(\cos \theta))$$

Es können die Kugelflächenfunktionen genommen werden, die von m , also \vec{j} unabhängig sind wegen des kugelsymmetrischen Potenzials -> es treten nur Drehimpulseigenfunktionen mit $m=0$ auf !

Einlaufende ebene Welle

$$\Psi_e(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} = e^{ikr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{r} u_l(r) P_l(\cos \theta) \quad \text{die einlaufende Welle ist also ein Legendre- Polynom}$$

vom Grad l

$$\text{Es gilt die Orthogonalität: } \int_{-1}^1 dx P_l(x) P_{l'}(x) = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}$$

Dabei taucht der Entartungsgrad $2l+1$ als inverser Normierungsfaktor auf. (Der Betrag der Legendre- Polynome ist also indirekt proportional zum Entartungsgrad !)

Aus der Orthogonalitätsrelation erhält man mit Multiplikation mit $P_l(\cos \mathbf{J})$ und Integration $d\mathbf{x}$ dass:

$$\frac{2l+1}{2} \int_{-1}^1 d\mathbf{x} e^{ik\mathbf{x}} P_l(\mathbf{x}) = \frac{1}{r} u_l(r)$$

$$e^{ik\mathbf{x}} := u'$$

$$P_l(\mathbf{x}) := v$$

im asymptotischen Verhalten $r \rightarrow \infty$ gewinnt man (Striche eingespart) durch Wiederholtes Anwenden der partiellen Integration:

$$\frac{1}{r} u_l(r) = \frac{2l+1}{2} \left\{ \frac{1}{ikr} \left[e^{ik\mathbf{x}} P_l(\mathbf{x}) \right]_{-1}^{+1} - \frac{1}{(ikr)^2} \left[e^{ik\mathbf{x}} P_l'(\mathbf{x}) \right]_{-1}^{+1} + \frac{1}{(ikr)^3} \left[e^{ik\mathbf{x}} P_l''(\mathbf{x}) \right]_{-1}^{+1} + \dots \right\}$$

Mit

$$P_l(1) = 1$$

$$P_l(-1) = (-1)^l$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \frac{1}{r} u_l(r) = \frac{2l+1}{2} \frac{1}{ikr} \left\{ e^{ikr} - (-1)^l e^{-ikr} \right\} = \frac{2l+1}{2} \frac{1}{ikr} i^l \left\{ e^{i \left(kr - l \frac{p}{2} \right)} - e^{-i \left(kr - l \frac{p}{2} \right)} \right\}$$

$$\Rightarrow \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{1}{r} u_l(r) = (2l+1) \frac{i^l}{kr} \sin \left(kr - l \frac{p}{2} \right)$$

Zusammenhang mit der freien Schrödingergleichung

$$\Psi_e(\vec{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{r} u_l(r) P_l(\cos \mathbf{J}) \text{ ist Lösung der freien Schrödingergleichung}$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - E \right) \Psi_e = 0$$

$$\text{Mit } E = \frac{\hbar^2 \bar{k}^2}{2m}$$

Separation in Kugelkoordinaten erlaubt:

$$\hat{L}^2 Y_l^{m=0} = \hbar^2 l(l+1) Y_l^{m=0}$$

$$Y_l^{m=0} \sim P_l(\cos \mathbf{J})$$

Es folgt die Bestimmungsgleichung für die radialen Funktionen:

$$u_l''(r) + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u_l(r) = 0$$

mit

Vergl. S. 84, §3.3

$$u_l(0) = 0$$

Voraussetzung ist die REGULARITÄT: $\langle V \rangle < \infty$

Die Lösung nach Schwabel , Seite 278 lautet:

$$\frac{1}{r} u_l(r) = \frac{2l+1}{(-i)^l} j_l(kr) \quad \text{Also die sphärischen Besselfunktionen !}$$

➔ Die radialen Lösungen für das Streuproblem (Entwicklungsterme für die einfallende Welle) sind die sphärischen Besselfunktionen

Asymptotische Streuphasen

Wieder entwickeln wir in Kugelflächenfunktionen. Diesmal jedoch die asymptotische Streuwelle:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \Psi_S(\vec{r}) = f(\mathbf{J}) \frac{e^{ikr}}{r}$$

Es folgt:

$$f(\mathbf{J}) = \sum_{l=0}^{\infty} f_l P_l(\cos \mathbf{J})$$

Setzen wir dies in den Wirkungsquerschnitt ein, so folgt für den totalen Wirkungsquerschnitt

$$\mathbf{s}_{tot.} = \int d\Omega |f(\mathbf{J})|^2$$

außerdem

$$\int_{-1}^1 d\mathbf{x} P_l(\mathbf{x}) P_{l'}(\mathbf{x}) = \frac{2}{2l+1} \mathbf{d}_{ll'}$$

$$\Rightarrow \mathbf{s}_{tot.} = \int d\Omega |f(\mathbf{J})|^2 = 2\mathbf{p} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2}{2l+1} |f_l|^2 =: \sum_{l=0}^{\infty} \mathbf{s}_l$$

Man spricht in diesem Fall von einer Entwicklung nach PARTIALWELLEN , $l=0,1,2,3,\dots$

$$\mathbf{s}_l = \frac{4\mathbf{p}}{2l+1} |f_l|^2$$

Die f_l müssen dabei noch bestimmt werden:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \Psi(\vec{r}) = e^{ikr \cos \mathbf{J}} + f(\mathbf{J}) \frac{e^{ikr}}{r}$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \sum_l \frac{u_l}{r} P_l(\mathbf{x}) = \sum_l \left\{ (2l+1) \frac{i^l}{kr} \sin \left(kr - l \frac{\mathbf{p}}{2} \right) + f_l \frac{e^{ikr}}{r} \right\} P_l(\mathbf{x})$$

Dieser asymptotische Verlauf muss sich jedoch auch in der Form

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \sum_l \frac{u_l}{r} P_l(\mathbf{x}) = C_l \sin \left(kr - l \frac{\mathbf{p}}{2} + \mathbf{d}_l \right)$$

darstellen lassen. Dabei findet sich in $\sin \left(kr - l \frac{\mathbf{p}}{2} + \mathbf{d}_l \right)$ die sogenannte asymptotische Phasenverschiebung

\mathbf{d}_l der auslaufenden (freien) Partialwelle gegenüber der einlaufenden freien Partialwelle.

Der Koeffizient C_l muss durch Koeffizientenvergleich bestimmt werden:

$$\frac{C_l}{2i} \left\{ e^{i \left(kr - l \frac{\mathbf{p}}{2} + \mathbf{d}_l \right)} - e^{-i \left(kr - l \frac{\mathbf{p}}{2} + \mathbf{d}_l \right)} \right\} = \left\{ \frac{(2l+1)}{2i} \frac{i^l}{k} \left[e^{i \left(kr - l \frac{\mathbf{p}}{2} \right)} - e^{-i \left(kr - l \frac{\mathbf{p}}{2} \right)} \right] + f_l e^{ikr} \right\}$$

Der Koeffizientenvergleich erfolgt über den separierten Vergleich der Terme mit $e^{\pm ikr}$:

$$e^{-ikr} : C_l = \frac{(2l+1)}{k} i^l e^{i\mathbf{d}_l}$$

$$e^{ikr} : \frac{1}{2i} C_l e^{-i \frac{\mathbf{p}}{2}} e^{i\mathbf{d}_l} = \frac{(2l+1)}{2i} \frac{i^l}{k} e^{-i \frac{\mathbf{p}}{2}} + f_l$$

Damit folgt:

$$f_l = \frac{2l+1}{2ik} i^l e^{-i \frac{\mathbf{p}}{2}} (e^{i2\mathbf{d}_l} - 1) = \frac{2l+1}{2ik} (e^{i2\mathbf{d}_l} - 1)$$

$$\Rightarrow f_l = \frac{2l+1}{k} e^{i\mathbf{d}_l} \sin \mathbf{d}_l$$

Mit der Streuamplitude f_l und der Streuphase \mathbf{d}_l der l-ten Partialwelle

Es folgt:

$$\Rightarrow \mathbf{s}_l = \frac{4\mathbf{p}}{k^2} (2l+1) \sin^2 \mathbf{d}_l$$

Spezialfall für $l=0$ ist die sogenannte s- Welle.

Diese ist isotrop wegen $P_0(\mathbf{x}) = 1$ und damit nicht mehr von \mathbf{J} abhängig.

Ihr Streuquerschnitt lautet

$$\mathbf{s}_0 = \frac{4\mathbf{p}}{k^2} \sin^2 \mathbf{d}_0$$

Im Prinzip wird \mathbf{d}_l aus der Schrödingergleichung mit dem Potenzial $V(r)$ bestimmt.

Bemerkung

Bei genügend kleinen Energien $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ werden nur die niedrigsten Partialwellen (für kleine l) gestreut.

Denn:

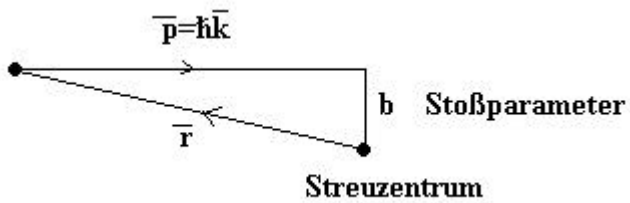
in

$$\mathbf{s} = \sum_l \mathbf{s}_l = \sum_l \frac{4\mathbf{p}}{k^2} (2l+1) \sin^2 \mathbf{d}_l$$

tragen nur die l mit $l \leq ka$ bei.

Dabei ist a die Reichweite des Potenzials !

Grund (aus semiklassischer Betrachtung):



Es falle ein Teilchen mit $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ ein:

Dabei:

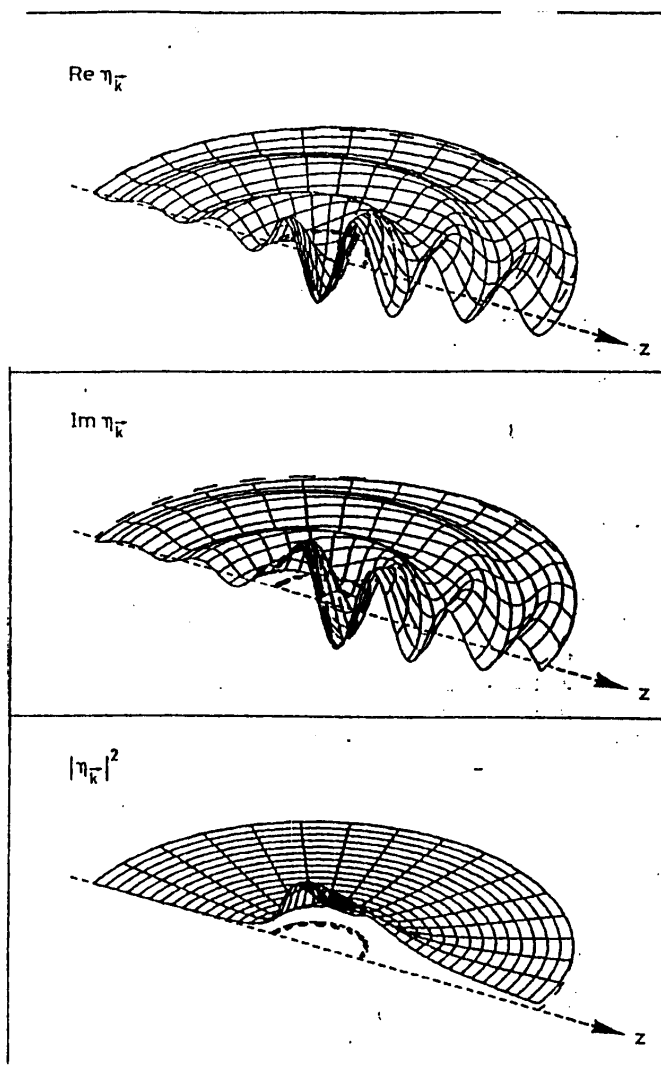
$$|\vec{L}| = |\vec{r} \times \vec{p}| = b p = \hbar k b = \hbar \sqrt{l(l+1)}$$

Dies impliziert jedoch:

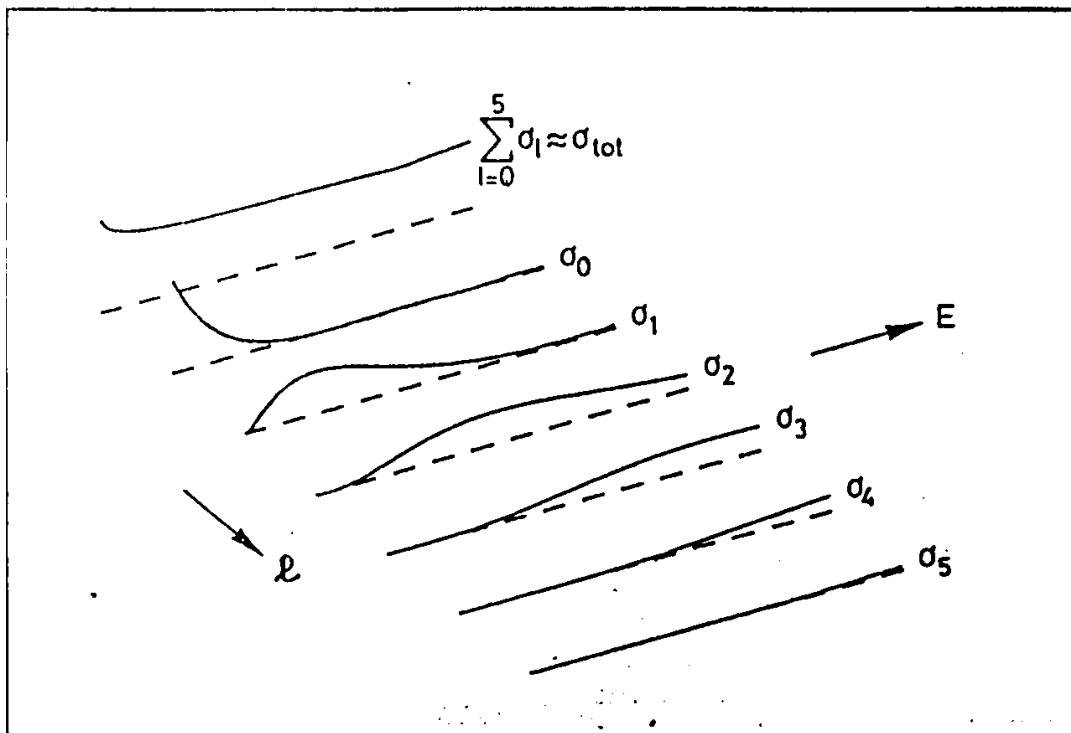
$$\text{Stoßparameter } b = \frac{\sqrt{l(l+1)}}{k} \leq a \Rightarrow l \approx \sqrt{l(l+1)} \leq ka$$

Die Beziehungen gelten jedoch nur näherungsweise !

Das folgende Bild zeigt die Streuwelle $\Psi_S(\vec{r}) = f(\vec{J}) \frac{e^{ikr}}{r}$ für die Streuung einer ebenen Welle e^{ikz} an einem abstoßenden Potenzial.



Hier ist der Verlauf der Streuquerschnitte σ_l der jeweils l-ten Partialwelle zu sehen:



7. Relativistische Quantentheorie

Vergl: Messiah, Band II

Bisher:

Schrödingergleichung mit Hamiltonoperator ausgedrückt. Dies ist nach dem Korrespondenzprinzip aus dem Hamiltonformalismus abgeleitet. Der Hamiltonformalismus hier ist jedoch der der klassischen, nichtrelativistischen Mechanik.

Die Gleichungen sind Galilei- Invariant:

$$\vec{r}' = \vec{r} - \vec{v}t$$

$$t' = t$$

Dies gilt nat. nur für geringe Geschwindigkeiten

Nicht erfasst sind alle Probleme der Wechselwirkung zwischen Licht und Materie, die im Rahmen der Quantentheorie natürlich auch streutheoretisch behandelbar sein müssen !

Jetzt: **Lorentz- Invariante** Quantentheorie

Schwierigkeit: Die Äquivalenz von Energie und Masse $E = mc^2$ kann die Teilchenzahlerhaltung VERLETZEN.

Die Teilchenzahlerhaltung gilt nicht mehr !

- ➔ es ist eine relativistische Quantentheorie erforderlich !
- ➔ Hier wird jedoch nur die Quantentheorie eines relativistischen Teilchens in einem ansonsten klassischen elektromagnetischen Feld behandelt.

Dabei gilt:

Haben die relativistischen Teilchen im klassischen Feld den Spin Null:

So gilt die Klein Gordon - Gleichung

Haben sie

Spin 1/2:

So gilt die Dirac- Gleichung

7.1 Kovariante Schreibweise der Relativitätstheorie

Grundpostulat der speziellen Relativitätstheorie:

kein Inertialsystem ist gegenüber einem anderen ausgezeichnet (es existiert kein Ruhezustand)

Einstein, 1904

- ➔ Eine Bewegung ist vom Ruhezustand nicht zu unterscheiden, so lange sie nicht zu einer anderen Bewegung in Relation gesetzt wird !

Die Lichtgeschwindigkeit c ist in jedem Inertialsystem gleich !!

$$\text{Also: } \vec{r}^2 - c^2 t^2 = \vec{r}'^2 - c^2 t'^2$$

Kugelwellen mit der Ausbreitungsgeschwindigkeit c sind Lorentz- invariant !

Formalisierung

Der raumzeitliche Abstand

$(ds)^2 := (cdt)^2 - (d\vec{r})^2$ ist in jedem Bezugssystem gleich, bleibt also invariant bei Transformationen zwischen Inertialsystemen (Lorentz-Transformationen !)

Man kann $(ds)^2$ als Skalarprodukt von Vierervektoren mit 3 Orts- und einer Zeitkomponente schreiben.

Diese Vektoren leben im Minkowski-Raum V (Spannen diesen auf).

V ist natürlich nicht euklidisch. Sonst würde ja Pythagoras gelten !

Dann benutze man den Formalismus der LINEAREN ORTHOGONALEN Transformationen, unter denen das Skalarprodukt invariant ist:

Def.: Als kontravariante Komponenten des 4-Zeit-Orts-Vektors (Vierervektors) bezeichnet man:

$$x^0 := ct$$

$$x^a, a=1,2,3$$

Zeitkomponente und kartesische Komponenten des Ortsvektors \vec{r}

es schreibt sich

$$(ds)^2 = (dx^0)^2 - (dx^1)^2 - (dx^2)^2 - (dx^3)^2$$

Def.: als kovariante Komponenten des 4-Zeit-Orts-Vektors (Vierervektors) bezeichnet man:

$$x_0 := x^0$$

$$x_a := -x^a, a=1,2,3$$

Der kovariante Vektor ist Element des dualen Vektorraums \tilde{V}

\tilde{V} ist der Raum der linearen Funktionale l , die V auf \mathbb{R} abbilden:

$$\tilde{V} = \{\text{lineare Funktionale } l : V \rightarrow \mathbb{R}\}$$

es schreibt sich

$$(ds)^2 = dx^0 dx_0 + dx^1 dx_1 + dx^2 dx_2 + dx^3 dx_3 = dx^i dx_i$$

Natürlich mit Summenkonvention über $i=0,1,2,3,\dots$

Wenn ein Index oben (kontravariant) und ein Index unten (kovariant) steht.

Verallgemeinerung

Für beliebige 4-Vektoren a^i gilt:

$$a_0 = a^0$$

$$a_a = -a^a, a=1,2,3$$

Lorentz- Invariante lassen sich als Skalarprodukt $a_i a^i$ schreiben:

Der d'Alembert-Operator

$$\# := \Delta - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} = - \frac{\partial}{\partial x^i} \frac{\partial}{\partial x_i}$$

Mit

$$\frac{\partial}{\partial x^i} = \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \frac{\partial}{\partial x^a} \right) =: \partial_i \text{ kovariant}$$

➔ Die Eigenschaft der Kovarianz wird später aus dem Transformationsverhalten begründet !

$$\frac{\partial}{\partial x_i} = \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, - \frac{\partial}{\partial x^a} \right) =: \partial^i \text{ kontravariant}$$

➔ -> Die Eigenschaft der Kontravarianz wird später aus dem Transformationsverhalten begründet !

Also:

$$\Rightarrow \# = -\partial_i \partial^i$$

Vierergeschwindigkeit

$$u^i := \frac{dx^i}{ds}$$

$$ds = \left(dx^i dx_i \right)^{\frac{1}{2}} = \left(c^2 dt^2 - (d\vec{r})^2 \right)^{\frac{1}{2}} = c \left[1 - \left(\frac{1}{c} \frac{d\vec{r}}{dt} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} dt$$

$$ds := \left(1 - \mathbf{b}^2 \right)^{\frac{1}{2}} dt = \frac{c}{\mathbf{g}} dt$$

Dabei gilt:

$$\mathbf{b} := \frac{v}{c} = \frac{1}{c} \left| \frac{d\vec{r}}{dt} \right|$$

$$\mathbf{g} := \frac{1}{\sqrt{1 - \mathbf{b}^2}}$$

Also:

$$u^0 = \mathbf{g}$$

$$u^a = \frac{\mathbf{g}}{c} v^a = \frac{1}{c} \frac{dx^a}{dt}$$

Mit der Eigenzeit

$$d\mathbf{t} = \frac{dt}{\mathbf{g}} \text{ Die Eigenzeit ist als die Zeit im momentanen Ruhesystem zu verstehen !}$$

$$u^i u_i = \frac{dx^i dx_i}{ds^2} = 1 \text{ ist nicht vom Bezugssystem abhängig, also invariant !}$$

Viererimpuls

$$p^i := m_0 c u^i$$

$$\Rightarrow p^i p_i = m_0^2 c^2 u^i u_i = m_0^2 c^2$$

$$p^0 = \frac{m_0 c}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}} = m(v) c = p_0$$

$$p^a = \frac{m_0 v^a}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}} = m(v) v^a = -p_a$$

Physikalische Bedeutung von p^0 :

Mit der 4-er Kraft: $k^i := \frac{d}{d\mathbf{t}} p^i$ folgt die Leistungsbilanz:

$$k^i u_i = \left[\frac{d}{d\mathbf{t}} (m_0 c u^i) \right] u_i$$

Mit Hilfe des Energiesatz kann dies umgewandelt werden zu

$$k^i u_i = \frac{m_0 c}{2} \frac{d}{d\mathbf{t}} (u^i u_i) = 0 \quad \text{also lorentzinvariant !}$$

$$u^i u_i = 1$$

Außerdem gilt:

$$k^i u_i = \frac{d}{d\mathbf{t}} (p^0) u_0 + k^a u_a = \mathbf{g} \frac{d}{d\mathbf{t}} (p^0) + \frac{\mathbf{g}}{c} k^a v_a = \frac{\mathbf{g}}{c} \left[\frac{d}{d\mathbf{t}} (c p^0) - \bar{k} \bar{v} \right] = 0$$

$$(c p^0) = \text{Energie}$$

$$\bar{k} \bar{v} = \text{Leistung}$$

Somit jedoch folgt eine Bestimmungsgleichung an $(p^0) = \frac{E}{c}$, also $E = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \mathbf{b}^2}}$ als Energie eines

relativistischen Teilchens.

$$p^i p_i = \frac{E^2}{c^2} - \bar{p}^2 = m_0^2 c^2$$

Das Skalarprodukt des Viererimpulses liefert lorentzinvariant

$$\bar{p} = \frac{m_0 \bar{v}}{\sqrt{1 - \mathbf{b}^2}}$$

Also folgt an die Energie:

$$E^2 = m_0^2 c^4 + c^2 \bar{p}^2$$

Dies ist die relativistische Energie- Impuls- Beziehung

Mathematischer Formalismus zur Tensorrechnung:

Für Tensoren zweiter Stufe gilt:

$$\begin{array}{l} A^{ik} \\ \text{Möglich ist: } A^i_k \\ A_i^k \\ A_{ik} \end{array}$$

Es gilt:

$$A^{00} = A^0_0 = A_0^0 = A_{00}$$

$$A^{10} = A^1_0 = -A_1^0 = -A_{10}$$

$$A^{11} = -A^1_1 = -A_1^1 = A_{11}$$

usw...

Die Spur eines Tensors ist dagegen wieder allgemein:

$$spA = A^i_i = A_i^i$$

4-er Einheitstensor

$\mathbf{d}^k_i = \mathbf{d}^k_i$ wie beim Kronecker-Symbol 1 für $i=k$ und sonst Null, also symmetrisch

$$\mathbf{d}^k_i a^k = a^i$$

$$\mathbf{d}^k_i a^{kl} = a^{il} \quad \text{usw..}$$

Der metrische Tensor

$$g^{ik} := \mathbf{d}^{ik} = \mathbf{d}^i_k \quad \text{für } k=0$$

$$g^{ik} := \mathbf{d}^{ik} = -\mathbf{d}^i_k \quad \text{für } k=1,2,3$$

$$g^{ik} := \mathbf{d}^{ik} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix} = g_{ik}$$

$$g^{ik} a_k = \mathbf{d}^{ik} a_k = a_i \quad \text{für } i=0 \Rightarrow a_i = a^i$$

$$g^{ik} a_k = \mathbf{d}^{ik} a_k = -a_i \quad \text{für } i=1,2,3 \Rightarrow -a_i = a^i$$

Also:

$$g^{ik} a_k = \mathbf{d}^{ik} a_k = a^i \quad \text{für } i=0,1,2,3$$

Man spricht auch vom Heben und Senken der Indices durch die Metrik !

Lorentz- Transformationen (linear, homogen) $\Sigma \rightarrow \Sigma'$

$$x'^i = U^i_k x^k$$

$$U^i_k = \begin{pmatrix} \mathbf{g} & -\mathbf{bg} & 0 & 0 \\ -\mathbf{bg} & \mathbf{g} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

für $v \parallel x^1$

Somit:

$$U^k_i = \begin{pmatrix} \mathbf{g} & \mathbf{bg} & 0 & 0 \\ \mathbf{bg} & \mathbf{g} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Wobei $\mathbf{g}^2 = \frac{1}{1 - \mathbf{b}^2}$

Damit läßt sich die Invarianz des Skalaprodukts leicht zeigen:

$$a'^i = U^i_k a^k$$

$$b'^i = U^i_k b^k \Rightarrow b'_i = U_{ik} b^k = U_i^k b_k$$

$$a'^i b'_i = U^i_k U_i^l a^k b_l \stackrel{!}{=} a^k b_k$$

also \Rightarrow :

$$U^i_k U_i^l = \mathbf{d}_k^l$$

U ist also eine orthogonale Trafo

Umkehr- Transformation:

$$a^i = U_k^i a'^k$$

$$a_i = U^k_i a'_k$$

Denn:

$$U_k^i U^k_l a^l = \mathbf{d}^i_l a^l = a^i$$

In Matrizenschreibweise:

$$U^i_k = \begin{pmatrix} \mathbf{g} & -\mathbf{bg} & 0 & 0 \\ -\mathbf{bg} & \mathbf{g} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad U^k_l = \begin{pmatrix} \mathbf{g} & \mathbf{bg} & 0 & 0 \\ \mathbf{bg} & \mathbf{g} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$U^i_k U^k_l = \begin{pmatrix} \mathbf{g}^2 - \mathbf{b}^2 \mathbf{g}^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\mathbf{b}^2 \mathbf{g}^2 + \mathbf{g}^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbf{d}^i_l$$

Transformationsverhalten des Vierergradienten

$$\frac{\partial}{\partial x^i} := \partial_i = \frac{\partial}{\partial x'^k} \frac{\partial x'^k}{\partial x^i} = U^k_i \frac{\partial}{\partial x'^k} = U^k_i \partial'_k$$

Mit der Identität

$$\frac{\partial x'^k}{\partial x^i} = U^k_i$$

Das heißt jedoch

$$\frac{\partial}{\partial x^i} \text{ transformiert sich wie } a_i, \text{ also kovariant}$$

Analog kann gezeigt werden:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} := \partial^i = \frac{\partial}{\partial x'_k} \frac{\partial x'_k}{\partial x_i} = U_k^i \frac{\partial}{\partial x'_k}$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \text{ transformiert sich wie } a^i, \text{ also kontravariant. (PRÜFEN !)}$$

7.2 Klein- Gordon- Gleichung

Die nichtrelativistische Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = H\Psi$$

folgt aus der nicht relativistischen Energie- Impuls- Beziehung

$$H = \frac{(\vec{p} - e\vec{A})^2}{2m} + V$$

über die Ersetzung $p \rightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla$ in der Ortsdarstellung

Forderungen an eine relativistische Formulierung in der Ortsdarstellung:

1) Die Beschreibung der Zustände geschieht durch Wellenfunktionen

$\Psi(q, t)$ wobei q Bahn- und Spinvariable enthält

2) $|\Psi(q, t)|^2$ ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit zur Zeit t

3) die Dynamik ist linear: $L\Psi(q, t) = 0$ wegen des Superpositionsprinzips. Das heißt, wenn Ψ_1, Ψ_2 Lösung der SGL, dann auch $a_1\Psi_1 + a_2\Psi_2$ für beliebige komplexe Koeffizienten a_1, a_2

4) Die Differenzialgleichung ist erster Ordnung, damit $\Psi(q, t)$ eindeutig aus der Anfangsbedingung

$\Psi(q, 0)$ über $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = H\Psi$ bestimmt ist.

5) Die Physikalischen Observablen werden durch hermitesche Operatoren repräsentiert.

6) Die Messwerte sind die Eigenwerte dieser Operatoren: $A|a\rangle = a|a\rangle$

7) Der Erwartungswert repräsentiert den Mittelwert der Messungen:

$$\langle \Psi | A | \Psi \rangle$$

8) Es gibt vollständige Sätze vertauschbarer Operatoren \hat{A}_i mit gemeinsamen Eigenzuständen $|a_1 a_2, \dots\rangle$

Also:

$$\hat{A}_i |a_1 a_2, \dots\rangle = a_i |a_1 a_2, \dots\rangle$$

Mit Orthonormierung:

$$\langle a_1', a_2', \dots | a_1 a_2, \dots \rangle = \delta_{a_1 a_1'} \delta_{a_2 a_2'}$$

Mit Vollständigkeit:

$$\sum_{a_1, a_2, \dots} |a_1 a_2, \dots\rangle \langle a_1 a_2, \dots| = 1$$

Mit Entwickelbarkeit beliebiger Zustände:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{a_1, a_2, \dots} c(a_1 a_2, \dots, t) |a_1 a_2, \dots\rangle$$

Die Wahrscheinlichkeit, im Zustand $|\Psi(t)\rangle$ die Messwerte a_1, a_2, \dots zu messen ergibt sich durch das Betragsquadrat der Entwicklungskoeffizienten des jeweils zugehörigen Basiszustands:

$$|c(a_1 a_2, \dots, t)|^2 = |\langle a_1 a_2, \dots | \Psi(t) \rangle|^2$$

Die Relativistische Energie- Impuls- Beziehung:

$$E = \sqrt{m_0^2 c^4 + c^2 \vec{p}^2} \text{ liefert mit } E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \text{ und } p \rightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \sqrt{m_0^2 c^4 - \hbar^2 c^2 \Delta} |\Psi(t)\rangle$$

Das bedeutet:

Heuristisches Vorgehen: Ersetze alle Variablen, die im relativistischen Ausdruck für die Gesamtenergie vorkommen durch die nötigen Operatoren und behandle diesen Ausdruck als neuen Hamiltonian:

$$\hat{H} = \hat{E}$$

Dies ist jedoch nicht akzeptabel, da $\sqrt{m_0^2 c^4 - \hbar^2 c^2 \Delta}$ eine nicht analytische Funktion eines Operators ist !

Ausweg:

$$E^2 = m_0^2 c^4 + c^2 \vec{p}^2$$

liefert

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right)^2 |\Psi(t)\rangle = (m_0^2 c^4 - \hbar^2 c^2 \Delta) |\Psi(t)\rangle$$

Also:

$$\left(\Delta - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \Psi(t) = \left(\frac{m_0 c}{\hbar} \right)^2 \Psi$$

Klein- Gordon- Gleichung

Ist Lorentz- Invariant, falls Ψ ein Lorentz- Skalar ist.

Dies liegt einfach daran, dass $\# = \partial_i \partial^i$ Lorentz- invariant ist (Skalarprodukt eines Vierervektors)

Einwände gegen die Klein- Gordon- Gleichung:

- 1) der Spin (der in dieser Gleichung noch nicht enthalten ist !) kann nicht berücksichtigt werden ! Denn: Der Zusatz $\hat{H} \rightarrow \hat{H} - \hat{\mathbf{n}}\mathbf{B}$ ist nicht mehr Lorentz- invariant !
- 2) Klar ! $\hat{\mathbf{n}}\mathbf{B}$ läßt sich nicht als Skalarprodukt eines Vierervektors darstellen !

Durch die schwierige Interpretation von $\sqrt{m_0^2 c^4 - \hbar^2 c^2 \Delta}$ ist die Klein- Gordon- Gleichung dann

$$\Psi(\vec{r}, 0)$$

letztendlich eine DGL zweiter Ordnung. Das bedeutet jedoch, Es sind die Anfangsbedingungen $\frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, 0)$

nötig! an muss also schon zu Beginn etwas über die Dynamik der Wellenfunktion kennen !

- 3) Am schwersten wiegt jedoch, dass die Klein- Gordon- Gleichung eine Stromdichte als räumliche Wahrscheinlichkeitsdichte produziert, die nicht mehr als sinnvolle Wahrscheinlichkeitsdichte interpretiert werden kann, da das Ergebnis nicht mehr strikt positiv ist !:

Die Lorentz- Invariante Form der Kontinuitätsgleichung (Wahrscheinlichkeitsdichteerhaltung) lautet:

$$\partial_i J^i = 0$$

Mit der Vierersstromdichte J^i

$$\begin{aligned} \partial_0 &= \frac{\partial}{\partial x^0} = \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \\ \text{Mittels} \quad \partial_a &= \frac{\partial}{\partial x^a} \quad \text{schreibt sich:} \end{aligned}$$

$$\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} J^0 + \partial_a J^a = 0$$

$$\partial_a J^a = \text{div} \vec{J}$$

Dadurch ist jedoch $\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} J^0 + \partial_a J^a = 0$ eine Kontinuitätsgleichung. Also hat J^0 die Bedeutung einer räumlichen Wahrscheinlichkeitsdichte !!

Aus der Klein- Gordon- Gleichung dagegen:

$$\partial^i \partial_i \Psi = - \left(\frac{m_0 c}{\hbar} \right)^2 \Psi$$

folgt durch c.c.:

$$\partial^i \partial_i \Psi^* = - \left(\frac{m_0 c}{\hbar} \right)^2 \Psi^*$$

Dabei kann man $\partial^i \partial_i \Psi = -\left(\frac{m_0 c}{\hbar}\right)^2 \Psi$ mit Ψ^* und $\partial^i \partial_i \Psi^* = -\left(\frac{m_0 c}{\hbar}\right)^2 \Psi^*$ mit Ψ multipliziert werden.

Nun subtrahiere man die beiden Gleichungen und man erhält:

$$\Psi^* \partial^i \partial_i \Psi - \Psi \partial^i \partial_i \Psi^* = -\left(\frac{m_0 c}{\hbar}\right)^2 (\Psi^* \Psi - \Psi \Psi^*) = 0$$

Somit kann man folgern:

$$\partial_i (\Psi^* \partial^i \Psi - \Psi \partial^i \Psi^*) = 0$$

Also ist zulässig:

$$(\Psi^* \partial^i \Psi - \Psi \partial^i \Psi^*) = J^i \rightarrow \partial_i (\Psi^* \partial^i \Psi - \Psi \partial^i \Psi^*) = \partial_i J^i = 0$$

Also

$$(\Psi^* \partial^0 \Psi - \Psi \partial^0 \Psi^*) = J^0 = \frac{1}{c} (\Psi^* \dot{\Psi} - \Psi \dot{\Psi}^*)$$

Aber $\frac{1}{c} (\Psi^* \dot{\Psi} - \Psi \dot{\Psi}^*)$ kann nicht als eine räumliche Wahrscheinlichkeitsdichte interpretiert werden, da

J^0 negativ werden kann !

Statt dessen kann man, bzw. muss man J^0 als eine Ladungsdichte ansehen !

Lösung der Klein- Gordon- Gleichung für freie Teilchen !

Ansatz: ebene Welle:

$$\Psi = \Psi_0 \exp i\{\bar{k}\bar{r} - \mathbf{w}\}$$

In Viererschreibweise:

$$\bar{k}\bar{r} - \mathbf{w} = -\left(\frac{\mathbf{w}}{c} ct - \bar{k}\bar{r}\right) = -k_j x^j = -k^j x_j$$

$$\text{mit } k^0 = \frac{\mathbf{w}}{c} = k_0$$

$$k^a = -k_a$$

Wenn man derart die ebene Welle in die Klein- Gordon- Gleichung einsetzt, so ergibt sich:

$$\Psi = \Psi_0 \exp i\{\bar{k}\bar{r} - \mathbf{w}\} = \Psi_0 \exp \{-ik^j x_j\}$$

eingesetzt in

$$-\partial^i \partial_i \Psi = \left(\frac{m_0 c}{\hbar}\right)^2 \Psi = ik^j \partial^i \Psi_0 \exp \{-ik^j x_j\} = k^j k_j \Psi = \left(\frac{m_0 c}{\hbar}\right)^2 \Psi$$

$$\Rightarrow k^j k_j \equiv \left(\frac{\mathbf{w}}{c}\right)^2 - \bar{k}^2 = \left(\frac{m_0 c}{\hbar}\right)^2$$

$$\Rightarrow \mathbf{w}^2 = c^2 \left[\left(\frac{m_0 c}{\hbar}\right)^2 + \bar{k}^2 \right]$$

Also kann man die Energie (Eigenwert) angeben zu

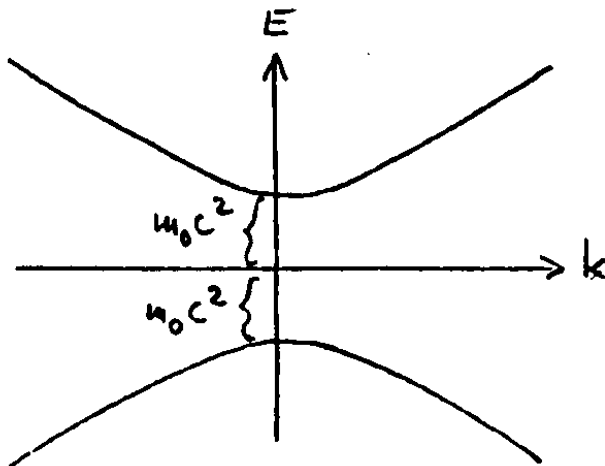
$$E = \hbar \mathbf{w} = \pm c \sqrt{m_0^2 c^2 + (\hbar \bar{k})^2}$$

Der nichtrelativistische Grenzfall kann leicht durch Entwicklung der Wurzel für kleine Impulse angegeben werden:

$$E = \pm m_0 c^2 \sqrt{1 + \left(\frac{\hbar \vec{k}}{m_0 c} \right)^2} \approx \pm m_0 c^2 \left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar \vec{k}}{m_0 c} \right)^2 \right] = \pm \left[m_0 c^2 + \frac{(\hbar \vec{k})^2}{2m_0} \right]$$

Gute Näherung für $\hbar k \ll m_0 c$

Grafisch:



$E > 0$ entspricht einem Teilchen der Ruheenergie $m_0 c^2$

$E < 0$ dagegen einem Teilchen mit der Ruheenergie $-m_0 c^2$. Dies entspricht jedoch einer negativen Masse !

Dies wurde von Dirac derart interpretiert, dass alle Zustände mit $E < 0$ im Grundzustand besetzt sind. Der Raum, dessen Zustände mit negativer Energie alle besetzt sind, erscheint uns als Vakuum !

Die Einstrahlung einer Energie $E > 2m_0 c^2$ ermöglicht dann die Teilchen - Antiteilchen- Erzeugung !
Aus dem Vakuum !

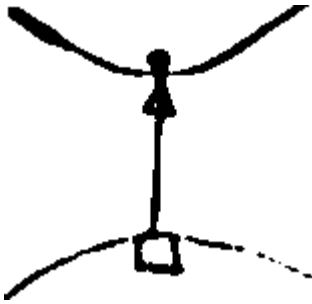
Durch diese Einstrahlung erzeugt man einen Lochzustand im unteren Bereich ! Es erscheint ein Teilchen aus dem Nichts. Denn: es wurde aus dem Zustand negativer Energie angehoben, hat dann positive Energie und erscheint uns in diesem Moment als positives, reelles Teilchen. Außerdem ist für uns nicht der vollbesetzte untere Zustand zu erkennen, sondern nur das Loch. Dieses Loch im Vakuum ist nun ein freier Zustand mit negativer Energie, der uns als Antiteilchen erscheint. Ein Loch im Vakuum. Also: Löcher in den Zuständen negativer Energie äußern sich als Antimaterie !

Antimaterie ist also das fehlen von Teilchen im vollbesetzten Grundzustand des Vakuums !

Das Loch entspricht dem Fehlen eines Teilchens mit $m < 0$ und der Ladung q .

Demnach äußert es sich uns als Antiteilchen mit der Masse $m > 0$ und der Ladung $-q$:

Anregung eines Lochs im Vakuum- Teilchensee



reicht die Energie nicht aus, also $E < 2m_0c^2$, so kommt es gemäß der Energie- Zeit- Unschärfe zu spontanen Anregungen virtueller Teilchen, die im Rahmen einer Zeit, die die Unschärfe erfüllt, wieder zerfallen. Dies kann in diesem Fall betrachtet werden als eine " Boltzmannverteilung" der Zustände negativer Energie. Durch die Fluktuationen bei niedriger Temperatur, die aber zweifelsohne vorhanden sind, kommt es zum Boltzmann- Springen der Teilchen zwischen negativen, vollbesetzten Zuständen und kurzzeitig besetzten positiven Energiezuständen. Die positiven Energiezustände zerfallen jedoch gemäß der Rekombinationsgeschwindigkeit (Rate der spontanen/ induzierten Emission !) und man bekommt als Wahrscheinlichkeit der Vakuumpolarisation die Boltzmannverteilung !

7.3 Dirac- Gleichung für Elektronen

Die zeitliche Entwicklung soll durch den Anfangszustand $\Psi(\vec{r},0)$ eindeutig festgelegt sein.

Man benötigt also eine DGL 1. Ordnung in der zeit:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = H\Psi$$

Aufgrund der Lorentz- Invarianz(Auch Lorentz- Kovarianz), der Symmetrie der Raumzeit, muss jedoch die Gleichung auch 1. Ordnung in $\frac{\partial}{\partial x}$ sein, da die Asymmetrische Auszeichnung der Zeit sonst inakzeptabel ist.

Dies motiviert das Konzept

$$\hat{H} = c\vec{a}\vec{p} + m_0c^2\vec{b} = \frac{\hbar}{i}c\vec{a}\vec{\nabla} + m_0c^2\vec{b}$$

Also folgt als verallgemeinerte Diracgleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \left(\frac{\hbar}{i}c\vec{a} \cdot \vec{\nabla} + m_0c^2\vec{b} \right) \Psi$$

mit

$$\vec{a} \cdot \vec{\nabla} = \vec{a}^1 \partial_1 + \vec{a}^2 \partial_2 + \vec{a}^3 \partial_3 = \vec{a}^m \partial_m$$

$$i\hbar \partial_0 \Psi = \left(\frac{\hbar}{i}c\vec{a}^m \partial_m + m_0c^2\vec{b} \right) \Psi$$

Aufgrund der Isotropie des Raumes können $\vec{a}^1, \vec{a}^2, \vec{a}^3$ keine Zahlen sein. Ansonsten ist H nicht dreihinvariant.

Statt dessen sind $\vec{a}^1, \vec{a}^2, \vec{a}^3$ Matrizen (Operatoren !) und somit ist auch \vec{b} eine Matrix

Wegen der Lorentz- Kovarianz können \vec{a} und \vec{b} nicht auf die Bahnvariable \vec{r} einwirken.

Sie müssen auf einen zusätzlichen Freiheitsgrad wirken. Dies motiviert, sie als Spin- Operatoren zu verstehen !

Es gilt:

$$\Psi \in H = H_B \otimes H_S$$

Die Wellenfunktionen leben also als Produktzustände im aus Spin- und Bahn- Hilbertraum zusammengesetzten Hilbertraum !

Die Darstellung des Spin- Freiheitsgrades erfolgt durch einen n-dimensionalen Spaltenvektor.

Dies ist der sogenannte SPINOR !!

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \dots \\ \Psi_n \end{pmatrix}$$

$\mathbf{a}^1, \mathbf{a}^2, \mathbf{a}^3$ und somit auch \mathbf{b} sind also nxn Matrizen !

Dabei vertauschen die $\mathbf{a}^1, \mathbf{a}^2, \mathbf{a}^3$ mit dem Impuls:

$$[\bar{\mathbf{a}}, \bar{p}] = 0$$

Fazit:

Da die gefundene Gleichung Lorentz- Kovariant sein soll, müssen die sogenannten "Spinoren" eingeführt

werden: $\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \dots \\ \Psi_n \end{pmatrix}$

Hermitizität

\hat{H}, \hat{p} sind hermitesch

$$\hat{H}^+ = c\bar{p}^+ \bar{\mathbf{a}}^+ + m_0 c^2 \mathbf{b}^+ = c\bar{p} \bar{\mathbf{a}} + m_0 c^2 \mathbf{b} = c \bar{\mathbf{a}}^+ \bar{p} + m_0 c^2 \mathbf{b}^+ = H$$

Somit sind auch $\mathbf{a}^1, \mathbf{a}^2, \mathbf{a}^3$ und somit auch \mathbf{b} hermitesch:

$$\bar{\mathbf{a}}^+ = \bar{\mathbf{a}}$$

$$\mathbf{b}^+ = \mathbf{b}$$

Die Diracgleichung löst durch den genialen Ansatz das Problem des unverständlichen Operators

$\sqrt{m_0^2 c^4 - \hbar^2 c^2 \Delta}$. Iteriert man die Dirac- Gleichung nun, so kann man die Eigenschaften von $\bar{\mathbf{a}}, \mathbf{b}$ durch

Vergleich mit der Klein-Gordon- Gleichung erkennen:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = (c \bar{\mathbf{a}} p + m_0 c^2 \mathbf{b}) \Psi$$

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi = (c \bar{\mathbf{a}} p + m_0 c^2 \mathbf{b}) (c \bar{\mathbf{a}} p + m_0 c^2 \mathbf{b}) \Psi$$

$$\Rightarrow -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi = (c^2 (\bar{\mathbf{a}} p)(\bar{\mathbf{a}} p) + m_0 c^3 (\bar{\mathbf{a}} p \mathbf{b} + \mathbf{b} \bar{\mathbf{a}} p) + m_0^2 c^4 \mathbf{b}^2) \Psi$$

$$\Rightarrow -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi = \left(c^2 \sum_{mn=1}^3 (\mathbf{a}^m \mathbf{a}^n p^m p^n) + m_0 c^3 \sum_{m=1}^3 (\mathbf{a}^m \mathbf{b} + \mathbf{b} \mathbf{a}^m) p^m + m_0^2 c^4 \mathbf{b}^2 \right) \Psi$$

Außerdem weiß man aus der Klein- Gordon- Gleichung, dass:

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi = [c^2 p^2 + m_0^2 c^4] \Psi$$

$$\Rightarrow \left(c^2 \sum_{m,n=1}^3 (\mathbf{a}^m \mathbf{a}^n p^m p^n) + m_0 c^3 \sum_{m=1}^3 (\mathbf{a}^m \mathbf{b} + \mathbf{b} \mathbf{a}^m) p^m + m_0^2 c^4 \mathbf{b}^2 \right) \Psi = [c^2 p^2 + m_0^2 c^4] \Psi$$

Diese Gleichung kann aber nur allgemein übereinstimmen, wenn:

$$\sum_{m,n=1}^3 (\mathbf{a}^m \mathbf{a}^n p^m p^n) = p^2$$

$$\Rightarrow (\mathbf{a}^m)^2 = 1$$

$$\mathbf{a}^m \mathbf{a}^n + \mathbf{a}^n \mathbf{a}^m = 0 \text{ für } n \neq m$$

$$\mathbf{a}^m \mathbf{b} + \mathbf{b} \mathbf{a}^m = 0$$

$$\mathbf{b}^2 = 1$$

Dabei gilt insbesondere obige Relation $\mathbf{a}^m \mathbf{b} + \mathbf{b} \mathbf{a}^m = 0$ und $\mathbf{a}^m \mathbf{a}^n + \mathbf{a}^n \mathbf{a}^m = 0$ für $n \neq m$ ohne Summation.

Aus dem Vergleich der iterierten Dirac- Gleichung mit der Klein- Gordon - Gleichung ersieht man also, dass man für fermionische Quanten unter Berücksichtigung relativistisch korrekter Beschreibung im Quantenformalismus Antikommutatoren einführen muss.

Sowohl die verschiedenen Komponenten von \mathbf{a} , also \mathbf{a}^m und \mathbf{a}^n antikommutieren, wie auch \mathbf{a}^m und \mathbf{b} :

$$\{\mathbf{a}^m, \mathbf{a}^n\} = 0$$

$$\{\mathbf{a}^m, \mathbf{b}\} = 0$$

Matrizendarstellung von \mathbf{a}^m und \mathbf{b} als nxn- Matrix

Eigenschaften

Die Eigenwerte von \mathbf{a}^m und \mathbf{b} sind ± 1

$v^m = c \mathbf{a}^m$ ist zu interpretieren als "Zitterbewegung" des Elektrons

Beweis: Die Eigenwerte von \mathbf{a}^m und \mathbf{b} sind ± 1 :

$$\mathbf{a}^m v = \mathbf{I} v \text{ mit } \mathbf{I} \in R$$

$$(\mathbf{a}^m)^2 v = \mathbf{I}^2 v$$

$$(\mathbf{a}^m)^2 = 1 \Rightarrow \mathbf{I}^2 = 1$$

$$\Rightarrow \mathbf{I} = \pm 1$$

$$\text{Weiter gilt: } tr(\mathbf{a}^m) = tr(\mathbf{b}) = 0$$

Beweis:

$$\text{tr}(\mathbf{a}^m) = \text{tr}(\mathbf{b}^2 \mathbf{a}^m) = \text{tr}(\mathbf{b} \mathbf{a}^m \mathbf{b}) \text{ wegen zyklischer Vertauschbarkeit.}$$

Durch die Antikommutatorrelationen gilt jedoch auch:

$$\text{tr}(\mathbf{b} \mathbf{a}^m \mathbf{b}) = \text{tr}(\mathbf{b}(-\mathbf{b} \mathbf{a}^m)) = -\text{tr}(\mathbf{b}^2 \mathbf{a}^m) = \text{tr}(\mathbf{b}^2 \mathbf{a}^m) = -\text{tr}(\mathbf{a}^m) = \text{tr}(\mathbf{a}^m) = 0$$

Weitere Einschränkungen:

$$\text{tr}(\mathbf{a}^m) = \sum_{i=1}^n \mathbf{I}_i = 0$$

$$\mathbf{I}_i = \pm 1$$

Dies bedeutet jedoch, dass n gerade ist.

Diskussion: n=2:

Ist nicht möglich, da es nicht, wie erforderlich, 4, sondern leider nur 3 hermitesche, antikommutierende und spurlose 2x2- Matrizen gibt !

$$\mathbf{s}^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{s}^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{s}^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\text{tr} \mathbf{s}^m = 0$$

Dies sind gerade die Pauli- Spinmatrizen ! Zusammen mit der Einheitsmatrix bilden die 4 Matrizen eine Basis im $R^2 \otimes R^2$

n=4

Ist also die minimal erforderliche Größe der Darstellung. Eine mögliche spezielle Wahl in Blockmatrix-Darstellung wäre:

$$\mathbf{a}^m = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{s}^m \\ \mathbf{s}^m & 0 \end{pmatrix} \in M(4 \times 4)$$

$$\mathbf{b} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \in M(4 \times 4)$$

Also schreibt sich der Zustand

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix} = \sum_{s=1}^4 \Psi_s(\vec{r}, t) \bar{e}_s$$

$$\bar{e}_s = \begin{pmatrix} 0 \\ \dots \\ 1 \\ \dots \end{pmatrix} \leftarrow 1 \text{ an } s\text{-ter Stelle}$$

Bemerkung:

In der nichtrelativistischen Quantentheorie genügt ein zweikomponentiger Spinor !

Erst die Lorentz- Invarianz erzwingt einen 4- komponentigen Spinor.

Dadurch dann entstehen weitere Freiheitsgrade, wie die Wahl von Teilchen und Antiteilchen !

Kontinuitätsgleichung

$$i\hbar\dot{\Psi} = -i\hbar c \mathbf{a}^m \partial_m \Psi + m_0 c^2 \mathbf{b} \Psi$$

$$-i\hbar\dot{\Psi}^+ = i\hbar c (\mathbf{a}^m \partial_m \Psi)^+ + m_0 c^2 (\mathbf{b} \Psi)^+$$

$$(\mathbf{b} \Psi)^+ = \Psi^+ \mathbf{b}$$

$$(\mathbf{a}^m \partial_m \Psi)^+ = (\partial_m \Psi^+) \mathbf{a}^m$$

Durch Linksmultiplikation mit Ψ^+ bzw. Rechtsmultiplikation mit Ψ gewinnt man :

$$i\hbar\Psi^+\dot{\Psi} = -i\hbar c \Psi^+ \mathbf{a}^m \partial_m \Psi + m_0 c^2 \Psi^+ \mathbf{b} \Psi$$

$$-i\hbar\dot{\Psi}^+\Psi = i\hbar c (\mathbf{a}^m \partial_m \Psi)^+ \Psi + m_0 c^2 (\mathbf{b} \Psi)^+ \Psi$$

Und durch Subtraktion der Gleichungen:

$$i\hbar(\Psi^+\dot{\Psi} + \dot{\Psi}^+\Psi) = -i\hbar c (\Psi^+ \mathbf{a}^m (\partial_m \Psi) + (\partial_m \Psi^+) \mathbf{a}^m \Psi)$$

$$(\Psi^+\dot{\Psi} + \dot{\Psi}^+\Psi) = \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^+ \Psi)$$

$$(\Psi^+ \mathbf{a}^m (\partial_m \Psi) + (\partial_m \Psi^+) \mathbf{a}^m \Psi) = \partial_m (\Psi^+ \mathbf{a}^m \Psi)$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^+ \Psi) + c \partial_m (\Psi^+ \mathbf{a}^m \Psi) = 0$$

$$\Rightarrow (\Psi^+ \Psi) = \mathbf{r}$$

$$\Rightarrow (\Psi^+ \mathbf{a}^m \Psi) = \frac{j^m}{c}$$

Dies ist eine Kontinuitätsgleichung mit der zu interpretierenden

Wahrscheinlichkeitsdichte $\mathbf{r} = (\Psi^+ \Psi) = \sum_{s=1}^4 \Psi_S^* \Psi_S \geq 0$ (glücklicherweise positiv definit)

und der Wahrscheinlichkeitsstromdichte $j^m = c (\Psi^+ \mathbf{a}^m \Psi) \quad m=1,2,3$

In Viererschreibweise einfach als Kontinuitätsgleichung

$$\partial_k j^k = 0 \quad \text{mit}$$

$$j^0 = c \Psi^+ \Psi = c \sum_{s=1}^4 \Psi_S^* \Psi_S = c \mathbf{r}$$

$$j^m = c (\Psi^+ \mathbf{a}^m \Psi) = c \sum_{s,s'} \Psi_S^* \mathbf{a}_{ss'}^m \Psi_{s'} \quad m=1,2,3$$

7.4. Der nichtrelativistische Grenzfall

a) Lösung der Diracgleichung im Ruhesystem:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = m_0 c^2 \mathbf{b} \Psi \quad \text{nur Ruheenergie}$$

$$H = m_0 c^2 \mathbf{b} = m_0 c^2 \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix}$$

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix} \Rightarrow \mathbf{b} \Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ -\Psi_3 \\ -\Psi_4 \end{pmatrix}$$

Also lassen sich die folgenden Differentialgleichungen ableiten:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = m_0 c^2 \mathbf{b} \Psi$$

$$\Rightarrow i\hbar \dot{\Psi}_{1,2} = m_0 c^2 \Psi_{1,2}$$

$$\Rightarrow i\hbar \dot{\Psi}_{3,4} = -m_0 c^2 \Psi_{3,4}$$

Die Richtung der Vektoren ist dabei leicht lösbar:

$$\Psi_{1,2} \propto e^{-\frac{i}{\hbar} m_0 c^2 t}$$

$$\Psi_{3,4} \propto e^{\frac{i}{\hbar} m_0 c^2 t}$$

Das heißt, es lassen sich 4 unabhängige Lösungen angeben, die die folgenden Eigenschaften aufweisen:

$$\Psi_1 = e^{-\frac{i}{\hbar} m_0 c^2 t} e_1 \quad \text{Spin} : \uparrow \quad \text{Ruheenergie} > 0$$

$$\Psi_2 = e^{-\frac{i}{\hbar} m_0 c^2 t} e_2 \quad \text{Spin} : \downarrow \quad \text{Ruheenergie} > 0$$

$$\Psi_3 = e^{\frac{i}{\hbar} m_0 c^2 t} e_3 \quad \text{Spin} : \uparrow \quad \text{Ruheenergie} < 0$$

$$\Psi_4 = e^{\frac{i}{\hbar} m_0 c^2 t} e_4 \quad \text{Spin} : \downarrow \quad \text{Ruheenergie} < 0$$

b) Ankopplung an das elektromagnetische Feld:

Die Ankopplung erfolgt über die Potenziale \bar{A}, Φ über die Ladung e

Klassisch wissen wir:

$$\bar{p} \rightarrow \bar{p} - e\bar{A}$$

$$H \rightarrow H + e\Phi$$

In der Diracgleichung können wir nun so einfach die bereits angegebene Energie, den Hamiltonoperator erweitern und angeben:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \left(c\bar{\alpha}(\bar{p} - e\bar{A}) + m_0^2 c^2 \beta + e\Phi \right) \Psi$$

Dabei setzen wir für

$$\bar{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla \text{ den kanonischen Impuls}$$

und führen den kinetischen Impuls ein gemäß

$$\bar{\mathbf{p}} = p_{kin} = \bar{p} - e\bar{A}$$

Als Lösungsansatz wählen wir

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_a \\ \Psi_b \end{pmatrix}$$

Wobei Ψ_a zwei Komponenten haben sollte und ein Teilchen mit $E \geq 0$ bezeichnet.

Auch Ψ_b besitzt 2 Komponenten für die "Antiteilchen" mit $E \leq 0$:

$$\bar{\alpha} \bar{\mathbf{p}} \Psi = \sum_{m=1}^3 \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{s}^m \\ \mathbf{s}^m & 0 \end{pmatrix} \bar{\mathbf{p}}^m \begin{pmatrix} \Psi_a \\ \Psi_b \end{pmatrix} = \sum_{m=1}^3 \begin{pmatrix} \mathbf{s}^m \bar{\mathbf{p}}^m \Psi_b \\ \mathbf{s}^m \bar{\mathbf{p}}^m \Psi_a \end{pmatrix}$$

$$\beta \Psi = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_a \\ \Psi_b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Psi_a \\ -\Psi_b \end{pmatrix}$$

Damit zerfällt die Dirac- Gleichung in zwei gekoppelte und jeweils zweikomponentige Gleichungen:

$$i\hbar \dot{\Psi}_a = c \sum_{m=1}^3 \mathbf{s}^m \bar{\mathbf{p}}^m \Psi_b + (m_0 c^2 + e\Phi) \Psi_a$$

$$i\hbar \dot{\Psi}_b = c \sum_{m=1}^3 \mathbf{s}^m \bar{\mathbf{p}}^m \Psi_a + (-m_0 c^2 + e\Phi) \Psi_b$$

Als Ansatz wählen wir

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_a \\ \Psi_b \end{pmatrix} = e^{-im_0 c^2 \frac{t}{\hbar}} \begin{pmatrix} \mathbf{j}_a \\ \mathbf{j}_b \end{pmatrix} \text{ für } E \geq 0$$

Also Zerlegung in

$$e^{-im_0 c^2 \frac{t}{\hbar}} \text{ als schnelle zeitliche Oszillation und}$$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{j}_a \\ \mathbf{j}_b \end{pmatrix} \text{ als langsam zeitabhängige Funktion !}$$

Es folgt:

$$i\hbar \mathbf{j}_a = c \sum_{m=1}^3 \mathbf{s}^m \mathbf{p}^m \mathbf{j}_b + e\Phi \mathbf{j}_a$$

$$i\hbar \mathbf{j}_b = c \sum_{m=1}^3 \mathbf{s}^m \mathbf{p}^m \mathbf{j}_a - 2m_0 c^2 \mathbf{j}_b + e\Phi \mathbf{j}_b$$

Nichtrelativistische Näherung:

$$E - m_0 c^2 \ll m_0 c^2 \Rightarrow \mathbf{j}_b \approx 0$$

$$e\Phi \ll m_0 c^2 \Rightarrow e\Phi \mathbf{j}_b \approx 0$$

$$\mathbf{j}_b \approx 0$$

$$e\Phi \mathbf{j}_b \approx 0$$

$$\Rightarrow c \sum_{m=1}^3 \mathbf{s}^m \mathbf{p}^m \mathbf{j}_a - 2m_0 c^2 \mathbf{j}_b \approx 0$$

$$\mathbf{j}_b \approx \frac{1}{2m_0 c} (\overline{\mathbf{s}\mathbf{p}}) \mathbf{j}_a$$

eingesetzt in

$$i\hbar \mathbf{j}_a = \frac{1}{2m_0} (\overline{\mathbf{s}\mathbf{p}}) (\overline{\mathbf{s}\mathbf{p}}) \mathbf{j}_a + e\Phi \mathbf{j}_a$$

Man kann zeigen:

$$(\overline{\mathbf{s}\mathbf{p}}) (\overline{\mathbf{s}\mathbf{p}}) = \overline{\mathbf{p}}^2 + i\overline{\mathbf{s}} (\overline{\mathbf{p}} \times \overline{\mathbf{p}})$$

$$\Rightarrow i\hbar \mathbf{j}_a = \left[\frac{1}{2m_0} (\overline{\mathbf{p}}^2 + i\overline{\mathbf{s}} (\overline{\mathbf{p}} \times \overline{\mathbf{p}})) + e\Phi \right] \mathbf{j}_a$$

Remember:

$$(\overline{\mathbf{p}} \times \overline{\mathbf{p}}) \mathbf{j}_a = (\overline{\mathbf{p}} - e\overline{\mathbf{A}}) \times (\overline{\mathbf{p}} - e\overline{\mathbf{A}}) \mathbf{j}_a$$

$$= \overline{\mathbf{p}} \times (\overline{\mathbf{p}} \mathbf{j}_a) - e[\overline{\mathbf{p}} \times (\overline{\mathbf{A}} \mathbf{j}_a) + \overline{\mathbf{A}} \times \overline{\mathbf{p}} \mathbf{j}_a] + e^2 (\overline{\mathbf{A}} \times \overline{\mathbf{A}}) \mathbf{j}_a$$

$$\overline{\mathbf{p}} \times (\overline{\mathbf{p}} \mathbf{j}_a) = 0$$

$$e^2 (\overline{\mathbf{A}} \times \overline{\mathbf{A}}) \mathbf{j}_a = 0$$

$$e[\overline{\mathbf{p}} \times (\overline{\mathbf{A}} \mathbf{j}_a) + \overline{\mathbf{A}} \times \overline{\mathbf{p}} \mathbf{j}_a] = \frac{e\hbar}{i} \overline{\mathbf{B}} \mathbf{j}_a$$

$$\Rightarrow (\overline{\mathbf{s}\mathbf{p}}) (\overline{\mathbf{s}\mathbf{p}}) = \overline{\mathbf{p}}^2 + i\overline{\mathbf{s}} (\overline{\mathbf{p}} \times \overline{\mathbf{p}}) = (\overline{\mathbf{p}} - e\overline{\mathbf{A}})^2 - e\hbar \overline{\mathbf{s}} \overline{\mathbf{B}}$$

Die verwendeten Identitäten sind dabei natürlich zu zeigen (Übungsaufgabe !)

Also folgt die Bewegungsgleichung für \mathbf{j}_a :

$$i\hbar \mathbf{j}_a = \left[\frac{1}{2m_0} (\bar{\mathbf{p}}^2 + i\bar{\mathbf{S}}(\bar{\mathbf{p}} \times \bar{\mathbf{p}})) + e\Phi \right] \mathbf{j}_a = \left[\frac{1}{2m_0} (\bar{\mathbf{p}} - e\bar{\mathbf{A}})^2 - \frac{1}{2m_0} e\hbar \bar{\mathbf{S}}\bar{\mathbf{B}} + e\Phi \right] \mathbf{j}_a$$

dies ist die nichtrelativistische Pauli- Gleichung für Spin $\pm \frac{\hbar}{2}$ (vergl. S. 102, Kapitel 4.3) mit dem richtigen gyromagnetischen Verhältnis $g=2$:

$$\frac{1}{2m_0} e\hbar \bar{\mathbf{S}} = \frac{e}{m_0} \frac{\hbar}{2} \bar{\mathbf{S}} = g \frac{e}{m_0} \bar{\mathbf{S}} \quad \text{Vergl. S. 94}$$

Interpretation des vierkomponentigen Spinors:

Teilchen- Freiheitsgrad: $\Psi_a = \begin{pmatrix} \Psi_{a\uparrow}(\bar{\mathbf{r}}, t) \\ \Psi_{a\downarrow}(\bar{\mathbf{r}}, t) \end{pmatrix}$

Antiteilchen Freiheitsgrad: $\Psi_b = \begin{pmatrix} \Psi_{b\uparrow}(\bar{\mathbf{r}}, t) \\ \Psi_{b\downarrow}(\bar{\mathbf{r}}, t) \end{pmatrix}$

Spin- Eigenwertproblem in 2x2- Matrixdarstellung

$$\mathbf{s}_3 \Psi_a = \mathbf{s}_3 \begin{pmatrix} \Psi_{a\uparrow}(\bar{\mathbf{r}}, t) \\ \Psi_{a\downarrow}(\bar{\mathbf{r}}, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_{a\uparrow}(\bar{\mathbf{r}}, t) \\ \Psi_{a\downarrow}(\bar{\mathbf{r}}, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Psi_{a\uparrow}(\bar{\mathbf{r}}, t) \\ -\Psi_{a\downarrow}(\bar{\mathbf{r}}, t) \end{pmatrix}$$

Spin- Operator in 4x4 Block- Matrix- Darstellung

$$\tilde{\mathbf{S}} = \begin{pmatrix} \bar{\mathbf{S}} & 0 \\ 0 & \bar{\mathbf{S}} \end{pmatrix}$$

$$\tilde{\mathbf{S}}\Psi = \begin{pmatrix} \bar{\mathbf{S}} & 0 \\ 0 & \bar{\mathbf{S}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_a \\ \Psi_b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{\mathbf{S}}\Psi_a \\ \bar{\mathbf{S}}\Psi_b \end{pmatrix}$$

Ableitung der Spin- Bahn- Kopplung für $\bar{\mathbf{A}} = 0$ und symmetrisches $V(\mathbf{r})$:

Bahn- Drehimpuls:

$$\bar{\mathbf{L}} = \bar{\mathbf{r}} \times \bar{\mathbf{p}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Mit $\bar{\mathbf{r}} \times \bar{\mathbf{p}}$ aus dem Bahn- Raum und $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ aus dem Spinor- Raum

Gesamt- Drehimpuls

$$\bar{\mathbf{J}} := \bar{\mathbf{L}} + \frac{\hbar}{2} \tilde{\mathbf{S}} = \bar{\mathbf{r}} \times \bar{\mathbf{p}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{\hbar}{2} \tilde{\mathbf{S}}$$

$$\bar{\mathbf{r}} \times \bar{\mathbf{p}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \bar{\mathbf{r}} \times \bar{\mathbf{p}} \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$

Dabei ist

$$\bar{J} := \bar{L} + \frac{\hbar}{2} \tilde{\mathbf{S}} = \bar{r} \times \bar{p} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{\hbar}{2} \tilde{\mathbf{S}} \text{ eine Erhaltungsgröße. Denn es kann gezeigt werden:}$$

$$[\bar{J}, H] = [\bar{L}, H] + \frac{\hbar}{2} [\tilde{\mathbf{S}}, H] = 0$$

$$[\bar{L}, H] = i\hbar c \bar{\mathbf{a}} \times \bar{p}$$

$$[\tilde{\mathbf{S}}, H] = -2c \bar{\mathbf{a}} \times \bar{p}$$

→ Dies ist leicht zu zeigen !

→ Wichtig: \bar{L}^m ist keine Konstante der Bewegung

Entwicklung der Dirac- Gleichung für $E \geq 0$ bis zur ersten Ordnung in $\frac{\mathbf{e}-V}{2m_0c^2}$ mit $\mathbf{e} := E - m_0c^2$

$$\text{liefert mit } \begin{pmatrix} \Psi_a \\ \Psi_b \end{pmatrix} = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \begin{pmatrix} \mathbf{J}_a \\ \mathbf{J}_b \end{pmatrix}:$$

(Vergl. Schwabl Seite 215 ff.)

$$\mathbf{eJ}_a = \left(\frac{p^2}{2m_0} + V(r) - \frac{p^4}{8m_0^3c^2} + \frac{\hbar^2}{4m_0^2c^2} \frac{dV}{dr} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} \frac{dV}{dr} \frac{1}{r} \bar{\mathbf{S}} \cdot \bar{\mathbf{L}} \right) \mathbf{J}_a$$

Also eine Spin- Bahn- Kopplung von

$$H_{SB} = \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} \frac{dV}{dr} \frac{1}{r} \bar{\mathbf{S}} \cdot \bar{\mathbf{L}}$$

Das Wasserstoffatom

In einem rotationssymmetrischen Potenzial haben wir als Dirac- Hamiltonian:

$$H = (c\bar{\mathbf{a}}\bar{p} + m_0c^2\mathbf{b} + V(r))$$

$$p_r := \frac{1}{r}(\bar{r}\bar{p} - i\hbar)$$

$$\mathbf{a}_r := \frac{1}{r}\bar{\mathbf{a}}r$$

$$\hbar Q := \mathbf{b}(\tilde{\mathbf{S}}\bar{\mathbf{L}} + \hbar)$$

Dabei sind $p_r, \mathbf{a}_r, \hbar Q$ hermitesche Operatoren

Man kann den Hamilton- Operator schreiben als:

$$H = \left(c\mathbf{a}_r p_r + \frac{ic}{r} \mathbf{a}_r \mathbf{b} \hbar Q + m_0c^2\mathbf{b} + V(r) \right)$$

Beweis:

$$\begin{aligned}
\mathbf{a}_r p_r + \frac{i}{r} \mathbf{a}_r \hbar Q &= \mathbf{a}_r \left[\frac{1}{r} (\overline{rp} - i\hbar) + \frac{i}{r} \mathbf{b}^2 (\widetilde{\mathbf{S}}\overline{L} + \hbar) \right] \\
\mathbf{b}^2 &= 1 \\
&= \frac{\mathbf{a}_r}{r} (\overline{rp} + i\widetilde{\mathbf{S}}\overline{L}) = \frac{1}{r^2} [(\overline{\mathbf{a}r})(\overline{rp}) + i(\overline{\mathbf{a}r})(\widetilde{\mathbf{S}}\overline{L})] \\
i(\overline{\mathbf{a}r})(\widetilde{\mathbf{S}}\overline{L}) &= i(\overline{\mathbf{a}r})(\overline{rp}) - ir^2(\overline{\mathbf{a}p}) \\
\Rightarrow \mathbf{a}_r p_r + \frac{i}{r} \mathbf{a}_r \hbar Q &= \frac{1}{r^2} [(\overline{\mathbf{a}r})(\overline{rp}) + i(\overline{\mathbf{a}r})(\widetilde{\mathbf{S}}\overline{L})] = \overline{\mathbf{a}p}
\end{aligned}$$

Es gilt weiter:

$[\hbar Q, H] = 0$. Somit existieren gemeinsame Eigenzustände zu H und $\hbar Q$

Eigenwerte von $\hbar Q$:

$$\begin{aligned}
(\hbar Q)^2 &= \mathbf{b}(\widetilde{\mathbf{S}}\overline{L} + \hbar)\mathbf{b}(\widetilde{\mathbf{S}}\overline{L} + \hbar) = \mathbf{b}^2(\widetilde{\mathbf{S}}\overline{L} + \hbar)^2 \\
[\mathbf{b}, \widetilde{\mathbf{S}}] &= 0 = \begin{pmatrix} [1, \widetilde{\mathbf{S}}] \\ -[1, \widetilde{\mathbf{S}}] \end{pmatrix} \\
\mathbf{b}^2 &= 1 \\
\Rightarrow (\hbar Q)^2 &= (\widetilde{\mathbf{S}}\overline{L})(\widetilde{\mathbf{S}}\overline{L}) + 2\hbar(\widetilde{\mathbf{S}}\overline{L}) + \hbar^2 \\
(\widetilde{\mathbf{S}}\overline{L})(\widetilde{\mathbf{S}}\overline{L}) &= L^2 + i\widetilde{\mathbf{S}}(\overline{L} \times \overline{L}) \\
(\overline{L} \times \overline{L}) &= i\hbar \overline{L} \\
\Rightarrow (\widetilde{\mathbf{S}}\overline{L})(\widetilde{\mathbf{S}}\overline{L}) &= L^2 - \hbar \widetilde{\mathbf{S}}(\overline{L})
\end{aligned}$$

Somit:

$$\begin{aligned}
(\hbar Q)^2 &= L^2 + \hbar \widetilde{\mathbf{S}}\overline{L} + \hbar^2 = \left(\overline{L} + \frac{\hbar}{2} \widetilde{\mathbf{S}} \right)^2 + \frac{\hbar^2}{4} \\
\text{mit } \left(\overline{L} + \frac{\hbar}{2} \widetilde{\mathbf{S}} \right)^2 &= L^2 + \hbar \widetilde{\mathbf{S}}\overline{L} + \frac{\hbar^2}{4} \widetilde{\mathbf{S}}^2 \\
\widetilde{\mathbf{S}}^2 &= 3 \\
\left(\overline{L} + \frac{\hbar}{2} \widetilde{\mathbf{S}} \right) &= \overline{J}
\end{aligned}$$

Schließlich also

$$(\hbar Q)^2 = \overline{J}^2 + \frac{\hbar^2}{4}$$

Die Eigenwerte von \bar{J}^2 sind jedoch bekannt, nämlich $\hbar j(j+1)$ mit $j = l \pm s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$

$$(\hbar Q)^2 |j\rangle = \left(\hbar^2 j(j+1) + \frac{\hbar^2}{4} \right) |j\rangle = \hbar^2 \left(j + \frac{1}{2} \right)^2 |j\rangle$$

$$\left(j + \frac{1}{2} \right)^2 = q^2$$

Somit:

$$(\hbar Q) |j\rangle = (\hbar q) |j\rangle$$

$$q = \pm 1, \pm 2, \dots$$

Es bleibt das radiale Eigenwertproblem für

$$H = \left(c \mathbf{a}_r p_r + \frac{ic}{r} \mathbf{a}_r \hbar q \mathbf{b} + m_0 c^2 \mathbf{b} + V(r) \right)$$

Geeignete Darstellung für \mathbf{a}_r :

$$(\mathbf{a}_r)^2 = \frac{1}{r^2} (\bar{\mathbf{a}}_r)(\bar{\mathbf{a}}_r) = \frac{1}{r^2} \mathbf{a}^m \mathbf{a}^n x^m x^n = \frac{1}{2r^2} (\mathbf{a}^m \mathbf{a}^n + \mathbf{a}^n \mathbf{a}^m) x^m x^n$$

$$(\mathbf{a}^m \mathbf{a}^n + \mathbf{a}^n \mathbf{a}^m) = 2d^{mn}$$

$$\frac{1}{2r^2} 2x^m x^m = \frac{r^2}{r^2} = 1$$

$$\mathbf{a}_r \mathbf{b} + \mathbf{b} \mathbf{a}_r = \frac{1}{r} (\bar{\mathbf{a}} \mathbf{b} + \mathbf{b} \bar{\mathbf{a}}) \bar{r}$$

$$(\bar{\mathbf{a}} \mathbf{b} + \mathbf{b} \bar{\mathbf{a}}) = 0 \Rightarrow \frac{1}{r} (\bar{\mathbf{a}} \mathbf{b} + \mathbf{b} \bar{\mathbf{a}}) \bar{r} = 0$$

Für

$$\mathbf{b} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \text{ kann dies durch die Darstellung } \mathbf{a}_r = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \text{ mit } \mathbf{a}_r = \mathbf{a}_r^+ \text{ erfüllt werden:}$$

$$\mathbf{a}_r \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{b} \mathbf{a}_r = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{pmatrix}$$

Es gilt:

$$p_r = \frac{1}{r} (\bar{r} p - i\hbar)$$

$$\bar{r} p = \frac{\hbar}{i} r \frac{\partial}{\partial r}$$

$$p_r = \frac{1}{r} \left(\frac{\hbar}{i} r \frac{\partial}{\partial r} - i\hbar \right) = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right)$$

Also

$$H = \hbar c \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) - \frac{c\hbar q}{r} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + m_0 c^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + V \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Ansatz für den Radialanteil

$$\begin{pmatrix} \mathbf{J}_a \\ \mathbf{J}_b \end{pmatrix} \sim \frac{1}{r} \begin{pmatrix} F(r) \\ G(r) \end{pmatrix}$$

Eingesetzt in die Eigenwertgleichung für H:

$$H \begin{pmatrix} F/r \\ G/r \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} F/r \\ G/r \end{pmatrix}$$

folgt:

$$-\frac{\hbar c}{r} \frac{dG}{dr} - \frac{c\hbar q}{r^2} G + \frac{m_0 c^2}{r} F + \frac{V}{r} F = E \frac{F}{r}$$

$$\frac{\hbar c}{r} \frac{dF}{dr} - \frac{c\hbar q}{r^2} F - \frac{m_0 c^2}{r} G + \frac{V}{r} G = E \frac{G}{r}$$

$$V = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$$

Also:

$$(E - m_0 c^2 - V)F + \hbar c \frac{dG}{dr} + \frac{c\hbar q}{r} G = 0$$

$$(E + m_0 c^2 - V)G - \hbar c \frac{dF}{dr} + \frac{c\hbar q}{r} F = 0$$

$$V = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$$

Skalentransformation:

$$a_1 = \frac{m_0 c^2 + E}{\hbar c}$$

$$a_2 = \frac{m_0 c^2 - E}{\hbar c}$$

$$a = \sqrt{a_1 a_2} = \frac{\sqrt{m_0^2 c^4 - E^2}}{\hbar c}$$

Führt man das weiteren ein:

$$\mathbf{r} := a \mathbf{r}$$

$$\mathbf{g} := \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \approx \frac{1}{137}$$

Also einen skalierten Radius und die Feinstrukturkonstante,

wodurch sich auch das Potenzial vereinfacht zu:

$$\frac{V}{\hbar c a} = -\frac{\mathbf{g}}{\mathbf{r}};$$

$$\left(\frac{d}{d\mathbf{r}} + \frac{q}{\mathbf{r}}\right)G - \left(\frac{a_2}{a} - \frac{\mathbf{g}}{\mathbf{r}}\right)F = 0$$

$$\left(\frac{d}{d\mathbf{r}} - \frac{q}{\mathbf{r}}\right)F - \left(\frac{a_1}{a} + \frac{\mathbf{g}}{\mathbf{r}}\right)G = 0$$

Randbedingung:

$F(\mathbf{r}), G(\mathbf{r})$ regulär bei $\mathbf{r} \rightarrow 0$

$F(\mathbf{r}), G(\mathbf{r}) \rightarrow 0$ für $\mathbf{r} \rightarrow \infty$

Betrachte $|E| < m_0 c^2 \Rightarrow a_1, a_2 > 0$ also gebundene Zustände
 $a \in R$

Asymptotisches Verhalten:

$\mathbf{r} \rightarrow \infty$

$$\Rightarrow G' = \frac{a_2}{a} F \quad F' = \frac{a_1}{a} G$$

$$\Rightarrow G'' = G, \quad F'' = F$$

$$\Rightarrow G = e^{-\mathbf{r}} = F = G = e^{-\mathbf{r}}$$

Weil $e^{+\mathbf{r}}$ divergiert !

$\mathbf{r} \rightarrow 0$

$$\Rightarrow G' + \frac{q}{\mathbf{r}} G + \frac{\mathbf{g}}{\mathbf{r}} F = 0$$

$$F' - \frac{q}{\mathbf{r}} F - \frac{\mathbf{g}}{\mathbf{r}} G = 0$$

Ansatz:

$$F(\mathbf{r}) = f_0 \mathbf{r}^l$$

$$G(\mathbf{r}) = g_0 \mathbf{r}^l$$

$$\Rightarrow (\mathbf{l} + q)g_0 + \mathbf{g}_0 = 0$$

$$(\mathbf{l} - q)f_0 - \mathbf{g}_0 = 0$$

Es existieren nichttriviale Lösungen f_0, g_0 , falls $(\mathbf{l} + q)(\mathbf{l} - q) + \mathbf{g}^2 = \mathbf{l}^2 - q^2 + \mathbf{g}^2 = 0$

Also $\mathbf{l} = \pm \sqrt{q^2 - \mathbf{g}^2} > 0$ und regulär bei $\mathbf{r} \rightarrow 0$

Ansatz:

$$F(\mathbf{r}) = \mathbf{r}^{\mathbf{l}} e^{-\mathbf{r}} f(\mathbf{r})$$

$$G(\mathbf{r}) = \mathbf{r}^{\mathbf{l}} e^{-\mathbf{r}} g(\mathbf{r})$$

$$\Rightarrow g' - g + \frac{\mathbf{l} + \mathbf{q}}{\mathbf{r}} g - \left(\frac{a_2}{a} - \frac{\mathbf{g}}{\mathbf{r}} \right) f = 0$$

$$f' - f + \frac{\mathbf{l} - \mathbf{q}}{\mathbf{r}} f - \left(\frac{a_1}{a} + \frac{\mathbf{g}}{\mathbf{r}} \right) g = 0$$

Die Lösung erfolgt über einen Potenzreihenansatz:

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{k=0}^{\infty} f_k \mathbf{r}^k \Rightarrow f'(\mathbf{r}) = \sum_{k=1}^{\infty} k f_k \mathbf{r}^{k-1} = \sum_{k=0}^{\infty} (k+1) f_{k+1} \mathbf{r}^k$$

$$g(\mathbf{r}) = \sum_{k=0}^{\infty} g_k \mathbf{r}^k \Rightarrow g'(\mathbf{r}) = \sum_{k=1}^{\infty} k g_k \mathbf{r}^{k-1}$$

$$\frac{f(\mathbf{r})}{\mathbf{r}} = \sum_{k=0}^{\infty} f_k \mathbf{r}^{k-1} = \frac{f_0}{\mathbf{r}} + \sum_{k=0}^{\infty} f_{k+1} \mathbf{r}^k$$

usw... wird dies ebenfalls für $g'(\mathbf{r}), \frac{g(\mathbf{r})}{\mathbf{r}}$ aufgestellt

Koeffizientenvergleich liefert:

$$O\left(\frac{1}{\mathbf{r}}\right): (\mathbf{l} + \mathbf{q})g_0 + \mathbf{g}_0 = 0 \quad (\mathbf{l} - \mathbf{q})f_0 - \mathbf{g}_0 = 0$$

$$\Rightarrow f_0, g_0$$

bis auf Normfaktor

$$O(\mathbf{r}^k): (\mathbf{l} + \mathbf{q} + k + 1)g_{k+1} - g_k + \mathbf{g}_{k+1} - \frac{a_2}{a} f_k = 0$$

$$(\mathbf{l} - \mathbf{q} + k + 1)f_{k+1} - f_k + \mathbf{g}_{k+1} - \frac{a_1}{a} g_k = 0$$

k=0,1,2,... Rekursionsformel !!

$$a \left[(\mathbf{l} + \mathbf{q} + k + 1)g_{k+1} - g_k + \mathbf{g}_{k+1} - \frac{a_2}{a} f_k \right] - a_2 \left[(\mathbf{l} - \mathbf{q} + k + 1)f_{k+1} - f_k + \mathbf{g}_{k+1} - \frac{a_1}{a} g_k \right] = 0$$

$$\Rightarrow [a(\mathbf{l} + \mathbf{q} + k + 1) + a_2 \mathbf{g}]g_{k+1} = [a_2(\mathbf{l} - \mathbf{q} + k + 1) - a \mathbf{g}]f_{k+1}$$

Verhalten für große k:

$$a k g_{k+1} \approx a_2 k f_{k+1} \Rightarrow f_k \approx \frac{a}{a_2} g_k$$

Dies kann man einsetzen in

$$(\mathbf{l} + \mathbf{q} + k + 1)g_{k+1} - g_k + \mathbf{g}_{k+1} - \frac{a_2}{a} f_k = 0$$

und es folgt:

$$(k+1)g_{k+1} \approx 2g_k$$

$$\Rightarrow \frac{g_{k+1}}{g_k} \approx \frac{2}{k+1} \Rightarrow g_{k+1} \approx \frac{2^{k+1}}{(k+1)!} g_0$$

$$\Rightarrow g(\mathbf{r}) \sim e^{2\mathbf{r}}$$

$$\Rightarrow f(\mathbf{r}) \sim e^{2\mathbf{r}}$$

Falls die Potenzreihen

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{k=0}^{\infty} f_k \mathbf{r}^k, g(\mathbf{r}) = \sum_{k=0}^{\infty} g_k \mathbf{r}^k \text{ nicht abbrechen, so divergiert} \quad \begin{matrix} F(\mathbf{r}) = \mathbf{r}^{\mathbf{I}} e^{-\mathbf{r}} f(\mathbf{r}) \\ G(\mathbf{r}) = \mathbf{r}^{\mathbf{I}} e^{-\mathbf{r}} g(\mathbf{r}) \end{matrix} \text{ exponentiell}$$

$$\text{für } \mathbf{r} \rightarrow \infty \Rightarrow F(\mathbf{r}), G(\mathbf{r}) \sim e^{\mathbf{r}}$$

Dies ist jedoch ein Widerspruch zu den gesetzten Randbedingungen !

Also muss es einen Abbruch bei $k = n' \in N$ geben:

$$f_{n'+1} = g_{n'+1} = 0$$

Setzt man dies in die Rekursionsformel ein, so folgt:

$$-g_{n'} - \frac{a_2}{a} f_{n'} = 0 \Rightarrow a_2 f_{n'} = -a g_{n'}$$

$$-f_{n'} - \frac{a_1}{a} g_{n'} = 0 \Rightarrow a f_{n'} = -a_1 g_{n'}$$

Diese beiden Gleichungen stimmen jedoch für alle f,g überein, da

$$\frac{a_2}{a} = \frac{a}{a_1}$$

Setzt man $a_2 f_{n'} = -a g_{n'}$ in $[a(\mathbf{I} + q + k + 1) + a_2 \mathbf{g}] g_{k+1} = [a_2(\mathbf{I} - q + k + 1) - a \mathbf{g}] f_{k+1}$ ein, so folgt mit $k + 1 = n'$:

$$\frac{a(\mathbf{I} + q + n') + a_2 \mathbf{g}}{a} = - \frac{[a_2(\mathbf{I} - q + n') - a \mathbf{g}]}{a_2}$$

$$\mathbf{I} + q + n' + \frac{a_2}{a} \mathbf{g} + \mathbf{I} - q + n' + \frac{a}{a_2} \mathbf{g} = 0$$

$$2a(\mathbf{I} + n') = \left(\frac{a^2}{a_2} - a_2 \right) \mathbf{g} = \frac{2E}{\hbar c} \mathbf{g}$$

$$\frac{a^2}{a_2} = a_1$$

$$a^2(\mathbf{I} + n')^2 = \frac{E^2}{\hbar^2 c^2} \mathbf{g}^2$$

Weiter gilt:

$$a^2 = \frac{m_0^2 c^4 - E^2}{\hbar^2 c^2}$$

$$\Rightarrow (m_0^2 c^4 - E^2)(\mathbf{I} + n')^2 = E^2 \mathbf{g}^2$$

Löst man dies nach den exakten Energieeigenwerten, die sich damit ergeben, also nach E auf, so erhält man die Feinstrukturformel:

$$E = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 + \left(\frac{\mathbf{g}}{\mathbf{l} + n'} \right)^2}}$$

Mit der Feinstrukturkonstanten

$$\mathbf{g} \approx \frac{1}{137}$$

$$\mathbf{l} = \sqrt{q^2 - \mathbf{g}^2} = \sqrt{\left(j + \frac{1}{2} \right)^2 - \mathbf{g}^2}$$

$$j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots, n' \in N_0$$

$$j = l \pm s$$

entwickelt man die Energieeigenwerte nach der Feinstrukturkonstanten bis $O(\mathbf{g}^4)$, so folgt:

$$E = m_0 c^2 \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{\mathbf{g}}{\mathbf{l} + n'} \right)^2 + \frac{3}{8} \left(\frac{\mathbf{g}}{\mathbf{l} + n'} \right)^4 + O(\mathbf{g}^6) \right]$$

mit

$$\mathbf{l}(\mathbf{g}) = |q| \sqrt{1 - \left(\frac{\mathbf{g}}{q} \right)^2} = |q| \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{\mathbf{g}}{q} \right)^2 \right] + O(\mathbf{g}^4)$$

$$\left(\frac{1}{\mathbf{l} + n'} \right)^2 = \frac{1}{\left[n' + |q| - \frac{1}{2} \left(\frac{\mathbf{g}^2}{|q|} \right) \right]^2} + O(\mathbf{g}^4)$$

$$n = n' + |q|$$

$$n' = 0, 1, 2, \dots$$

$$|q| = j + \frac{1}{2} = 1, 2, \dots$$

$$\left(\frac{1}{\mathbf{l} + n'} \right)^2 = \frac{1}{n^2} \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{\mathbf{g}^2}{|q|n} \right) \right]^{-2} + O(\mathbf{g}^4) = \frac{1}{n^2} \left[1 + \left(\frac{\mathbf{g}^2}{|q|n} \right) \right] + O(\mathbf{g}^4) = \frac{1}{n^2} + \left(\frac{\mathbf{g}^2}{|q|n^3} \right) + O(\mathbf{g}^4)$$

$$|q| = j + \frac{1}{2} = l \pm s + \frac{1}{2}$$

Setzt man dies in die exakten Energieeigenwerte E ein , so folgt:

$$E = m_0 c^2 \left[1 - \left(\frac{\mathbf{g}^2}{2n^2} \right) - \left(\frac{\mathbf{g}^4}{2n^3} \right) \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) + O(\mathbf{g}^6) \right]$$

$$n = 1, 2, 3$$

$$j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots, n - \frac{1}{2}, \text{ wegen } n = n' + j + \frac{1}{2}$$

$$j = l \pm s$$

Diskussion

$$O(\mathbf{g}^0): E = m_0 c^2 \text{ Ruheenergie}$$

$$O(\mathbf{g}^2): \Delta E^{(2)} = -m_0 c^2 \left(\frac{\mathbf{g}^2}{2n^2} \right) = -\frac{R_H}{n^2} \text{ nicht relativistisches, entartetes Energiespektrum}$$

$$O(\mathbf{g}^4): \Delta E^{(4)} = -m_0 c^2 \left(\frac{\mathbf{g}^4}{2n^3} \right) \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \text{ Feinstruktur- Aufspaltung. Eine Aufhebung der j-}$$

Entartung durch Spin- Bahn- Kopplung.

Dabei bleibt die Freiheit der Ausrichtung der Achse des magnetischen Moments, also die $2(2j+1)$ - fache m_j - Entartung+ Parität !

Spektroskopische Beziehung der Feinstrukturterme: nl_j :

$$n = 1: \quad j = \frac{1}{2}: 1s_{\frac{1}{2}} \quad n'=0$$

$$n = 2: \quad j = \frac{1}{2}: 2s_{\frac{1}{2}} \quad 2p_{\frac{1}{2}} \quad n'=1$$

$$j = \frac{3}{2}: \quad 2p_{\frac{3}{2}} \quad n'=0$$

....