

1 Historische Anfänge

1.1 Das Plank'sche Strahlungsgesetz

Betrachte einen Würfel aus Materie der Seitenlänge L mit Temperatur T . Dieses sei im Gleichgewicht mit elektrischer Strahlung. Die Lösung der Maxwellgleichungen im Inneren des Kubus liefert:

$$\square \vec{E} = 0, \quad \square = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta, \quad \text{div}(\vec{E}) = 0, \quad \vec{E}_{\parallel} = 0, \quad \frac{\partial \vec{E}_{\perp}}{\partial n} = 0$$

Ansatz $\vec{E}(x, t) = f(t) \cdot \vec{E}(x)$. Dann

$$f(t) = e^{i\omega t}, \quad \Delta E = -\frac{\omega^2}{c^2} \vec{E}(x)$$

Für Kubus der Seitenlänge L folgt:

$$E_i(\vec{x}) = E_i \cos(k_i x_i) \sin(k_{i+1} x_{i+1}) \sin(k_{i+2} x_{i+2}), \quad k_i = \frac{\pi}{L} n_i, \quad n_i \in \mathbb{N}$$

Weiter muss gelten $\vec{E} \cdot \vec{k} = 0$. Somit gibt es zu jedem \vec{k} zwei linear unabhängige Eigenschwingungen mit Eigenfrequenz $\omega = c \cdot |\vec{k}|$. Die Zahl der Eigenschwingungen $\leq \omega$ ist für grosse ω :

$$N(\omega) = \frac{V}{\pi^2 c^3} \cdot \frac{\omega^3}{3} \Rightarrow \frac{dN}{d\omega} = V \frac{\omega^3}{\pi^2 c^3}, \quad V = L^3$$

Man stelle sich die Materie als aus Oszillatoren aller Frequenzen ω_0 bestehend vor. Ein harmonischer Oszillator in einer Dimension wird beschrieben durch den folgenden Hamiltonian.

$$(1) \quad H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 q^2$$

Die Wahrscheinlichkeit $w(p, q)$, ein System mit Phasenkoordinaten p, q bei der Temperatur T in $dp dq$ zu finden ist

$$w(p, q) dp dq = \frac{e^{-\beta H(p, q)}}{Z(\beta)} dp dq, \quad Z(\beta) = \int dp dq e^{-\beta H(p, q)}$$

wobei $\beta = \frac{1}{k_B T}$. Die mittlere Energie ist:

$$\bar{E} = \int dp dq H(p, q) w(p, q) = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log(Z(\beta))$$

Für H aus (1) folgt:

$$Z(\beta) = \frac{2\pi}{\beta \omega_0} \Rightarrow \bar{E} = \frac{\partial}{\partial \beta} \log(\beta) = k_B T$$

Umgekehrt trägt das Elektromagnetische Feld der Frequenz ω die Energie $k_B T$. Es folgt die folgende Energiedichte pro Volumen:

$$u(\omega, T) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} k_B T \Rightarrow \int_0^\infty d\omega u(\omega, T) = \infty$$

Dies ist die 'Ultraviolett Katastrophe'. Extrapolation mit experimentellen Daten führte zu der folgenden Formel für die Energiedichte:

$$u(\omega, T) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{\hbar \omega}{e^{\frac{\hbar \omega}{k_B T}} - 1}, \quad Z(\beta) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta \hbar \omega n}$$

Die Konsequenz ist, dass der Resonator nicht alle Energien E annehmen kann und dass diese Energien quantisiert sind als $E_n = n \hbar \omega_0$ für $n \in \mathbb{N}$. Somit:

$$\omega_n = \frac{e^{-\beta \hbar \omega_0}}{Z(\beta)}, \quad Z(\beta) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta \hbar \omega_0 n} = \frac{1}{1 - e^{-\beta \hbar \omega_0}}, \quad \bar{E} = \frac{\hbar \omega_0}{e^{\beta \hbar \omega_0} - 1}$$

1.2 Die Bohr'sche Quantenhypothese

Atome weisen diskrete Lichtemissionsspektren auf. Für das Wasserstoff-Atom gilt nach Balmer

$$\omega_{nm} = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n > m = 1, 2, \dots$$

Bohr nimmt an, dass das Atom nur in diskreten Energiezuständen existieren kann. Strahlung der Frequenz $\omega_{nm} = \frac{1}{\hbar} (E_n - E_m)$ wird emittiert bei Übergang $n \rightarrow m$, $E_m < E_n$. Auch das Umgekehrte ist möglich, falls ein Lichtquant dieser Frequenz absorbiert wird. Für das H-Atom ergibt sich $E_n = -\text{Ry} \cdot \frac{1}{n^2}$ mit $\text{Ry} = R \cdot \hbar$ und $n \in \mathbb{N}$. Mit dem Rutherford'schen Atommodell wählt man die Quantenzustände unter den Kreisbahnen. Für diese gilt:

$$m r \omega^2 = \frac{e^2}{r^2}, \quad L = m r^2 \omega, \quad E = \frac{L^2}{2 m r^2} - \frac{e^2}{r} \\ \Rightarrow r = \frac{L^2}{m e^2}, \quad E = -\frac{m e^4}{2 L^2}, \quad \omega = \frac{m e^4}{L^3}$$

Es folgt die Quantisierungsbedingung $L_n = \hbar n$ und die folgenden Beziehungen:

$$r_n = a_0 n^2, \quad E_n = -\text{Ry} \cdot \frac{1}{n^2}, \quad \omega_n = \frac{2 \text{Ry}}{\hbar n^3}, \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{m e^2}, \quad \text{Ry} = \frac{m e^4}{2 \hbar^2}$$

Falls man die Mitbewegung des Kerns der Masse M berücksichtigt, muss man m durch die Reduzierte Masse ersetzen. Ebenso muss man die Ladung e durch Ze bei z.B. He^+ ersetzen. Es gilt:

$$\omega_{n, n-1} = \frac{\text{Ry}}{\hbar} \left(\frac{1}{(n-1)^2} - \frac{1}{n^2} \right) \approx \frac{2 \text{Ry}}{\hbar n^3} \quad (\text{für } n \rightarrow \infty)$$

1.3 Bohr-Sommerfeld Quantisierung

Betrachte eine gebundene Bahn eines Hamilton'schen Systems mit einem Freiheitsgrad. Die Bedingung ist, dass die Wirkung quantisiert ist.

$$\oint p dq = 2\pi n \hbar = n \hbar \quad n \in \mathbb{Z}$$

Für einen harmonischen Oszillator der Energie E , wobei $E = H$ aus (1), folgt $E_n = n \hbar \omega_0$.

Für ein System mit f Freiheitsgraden welches vollständig separabel ist, hat die zeitunabhängige H-J-Gl.

$$H\left(q_1, \dots, q_f, \frac{\partial S}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial S}{\partial q_f}\right) = E \equiv \alpha_1$$

eine vollständige Lösung der Form

$$S(q_1, \dots, q_f, \alpha_1, \dots, \alpha_f) = \sum_{k=1}^f S_k(q_k, \alpha_1, \dots, \alpha_f)$$

mit $(\alpha_1, \dots, \alpha_f) = \alpha$ Erhaltungsgrößen. Es gilt:

$$p_k = \frac{\partial S}{\partial q_k}(q, \alpha) = \frac{\partial S_k}{\partial q_k}(q_k, \alpha)$$

Im $2f$ -dimensionalen Phasenraum verläuft die Bewegung dann auf dem Schnitt von f durch α bestimmte Flächen p_k . Falls die f -dimensionalen Schnittflächen topologische Tori sind, so ist die Sommerfeld-Bedingung anwendbar. Sie zeichnet als erlaubte diejenigen Tori aus, für welche

$$W_k := \oint p_k dq_k = 2\pi n_k \hbar, \quad n \in \mathbb{Z}, \quad k = 1, \dots, f$$

Dies bestimmt $(\alpha_1, \dots, \alpha_f)$ als Funktion der n_k und insbesondere die möglichen Energien E_{n_1, \dots, n_k} . Wegen Symmetrie kann man die Sommerfeld-Bedingung nicht anwenden.

1.4 Der Photoeffekt und Comptoneffekt

Wird eine (metallische) Oberfläche durch Licht der Frequenz ω bestrahlt, so treten Elektronen aus. Die Energie T der emittierten Elektronen ist nur von der Frequenz abhängig und nicht von der Intensität der einfallenden Strahlung. Davon abhängig ist hingegen die Emissionsrate. Somit ist Licht quantisiert gemäss $E = \hbar\omega$. Ein Lichtquant $\hbar\omega$ kann dann an ein einziges Elektron übergeben werden, das aus dem Metall mit der Energie $T = \hbar\omega - W$ (W : Austrittsarbeit) entweicht. Der Impuls p^μ eines Photons mit Wellenlänge λ ist gegeben durch

$$p^\mu = (\hbar k, \hbar \vec{k}) \quad , \quad k = |\vec{k}| = \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda}$$

1.5 Teilchen als Welle (de Broglie)

Idee: Teilchen besitzen Wellencharakter. Konkret: ein Teilchen mit Impuls p einer Welle mit Wellenlänge λ und Kreisfrequenz ω entspricht.

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

2 Wellenmechanik

2.1 Die Schrödinger-Gleichung

Nach de Broglie kann man einem Teilchen mit Impuls $p^\mu = (E, \vec{p})$ eine Welle zuordnen deren Wellenlänge λ und Kreisfrequenz ω gemäss (2) gegeben sind. Eine Welle mit diesen Parametern ist die Funktion

$$\Psi(x, t) = \Psi(0, 0) e^{\frac{2\pi i}{\lambda} x} e^{-i\omega t}$$

wobei $\Psi(0, 0)$ eine Konstante ist. Es gilt:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) &= \frac{2\pi i}{\lambda} \Psi(x, t) = i \frac{p}{\hbar} \Psi(x, t) \\ \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) &= -i\omega \Psi(x, t) = -i \frac{E}{\hbar} \Psi(x, t) \end{aligned}$$

Somit auch:

$$p\Psi(x, t) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) \quad , \quad E\Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t)$$

Für ein freies Teilchen mit Energie E und Impuls p gilt $E = \frac{p^2}{2m}$. Es folgt:

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

Falls das Teilchen nicht frei ist, sondern sich im Einfluss des Potentials $V(x, t)$ bewegt, folgt die (zeit-abhängige) Schrödinger-Gleichung:

$$(3) \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) \right) \Psi(x, t) \equiv H\Psi(x, t)$$

H ist der Hamiltonoperator. $\Psi(x, t)$ ist eine komplexe Funktion von (x, t) . $|\Psi(x, t)|^2$ ist die Wahrscheinlichkeit mit der sich das Teilchen zur Zeit t am Punkt x befindet. Es gilt die Normalisierungsbedingung:

$$(4) \quad \int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi(x, t)|^2 = 1 \quad \forall t$$

Die wichtigsten Postulate im Überblick:

- (i) Die Wahrscheinlichkeit das Teilchen zur Zeit t am Ort x anzutreffen, ist durch das Normquadrat $|\Psi(x, t)|^2$ der Wellenfunktion gegeben.

- (ii) Die Wellenfunktion $\Psi(x, t)$ ist für jedes t quadrat-integrierbar in x ; insbesondere ist sie gemäss (4) normalisiert.

- (iii) Die Wellenfunktion $\Psi(x, t)$ ist eine komplexe Funktion, die der zeit-unabhängigen SG (3) genügt.

Klassische Observable werden durch Operatoren dargestellt. Sie sind im Allgemeinen nicht vertauschbar. Der Impulsoperator ist gegeben als:

$$p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

2.2 Wahrscheinlichkeitsstrom und die Kontinuitätsgleichung

Wie bereits erwähnt beschreibt $|\Psi(x, t)|^2 \equiv \rho(x, t)$ eine Wahrscheinlichkeitsdichte. Durch ableiten erhalten wir eine Kontinuitätsgleichung:

$$\frac{d}{dt} \rho(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} j(x, t) = 0$$

wobei $j(x, t)$ der Wahrscheinlichkeitsstrom ist.

$$j(x, t) = \frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t)^* - \Psi(x, t)^* \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) \right)$$

Wir integrieren die Wahrscheinlichkeitsdichte über ein kleines Intervall

$$\begin{aligned} P(x_0; \delta) &= \int_{x_0-\delta}^{x_0+\delta} dx \rho(x, t) \\ \Rightarrow \frac{d}{dt} P(x_0; \delta) &= j(x_0 - \delta, t) - j(x_0 + \delta, t) \end{aligned}$$

Insbesondere folgt wegen $j \rightarrow 0$ für $x \rightarrow \pm\infty$:

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} dx \rho(x, t) = [-j(x, t)]_{-\infty}^{\infty} = 0$$

2.3 Das Ehrenfest'sche Theorem

Der Erwartungswert einer Ortsmessung ist

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx x |\Psi(x, t)|^2$$

Mit einigem Rechenaufwand bekommt man:

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{1}{m} \langle p \rangle \quad , \quad m \frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle = -\langle \partial_x V(x, t) \rangle$$

Dies wird Ehrenfest'sches Theorem genannt.

2.4 Realität der physikalischen Observablen

Es gilt $\langle p \rangle^* = \langle p \rangle$ und $\langle H \rangle^* = \langle H \rangle$ und somit $\langle p \rangle \in \mathbb{R}$ und $\langle H \rangle \in \mathbb{R}$.

2.5 Zeit-unabhängige Schrödinger-Gleichung

Wir betrachten nun den Fall wo das Potential $V(x, t) = V(x)$ zeitunabhängig ist. In diesem Fall können wir einen Separationsansatz machen: $\Psi(x, t) = \psi(x)\chi(t)$. Die Schrödinger-Gleichung impliziert dann:

$$\begin{aligned} \psi(x) i\hbar \dot{\chi}(t) &= \chi(t) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + V(x) \psi(x) \right) \\ \Rightarrow i\hbar \frac{\dot{\chi}(t)}{\chi(t)} &= \frac{1}{\psi(x)} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + V(x) \psi(x) \right) = E \end{aligned}$$

Wobei E eine Konstante ist und der Energie entspricht. Es folgt:

$$(5) \quad i\hbar \dot{\chi}(t) = E\chi(t) \quad , \quad H\psi(x) = E\psi(x)$$

wobei H der Hamiltonoperator ist. Es folgt:

$$\chi(t) = \exp\left(-\frac{iE}{\hbar}t\right)$$

Falls $\psi(x)$ die Eigenwertgleichung in (5) erfüllt, dann löst

$$\Psi(x, t) = \psi(x) \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)$$

die (zeit-abhängige) Schrödinger-Gleichung. Die Eigenvektorgleichung

$$H\psi(x) = E\psi(x) \quad \text{mit} \quad H = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)$$

wird zeit-unabhängige Schrödinger-Gleichung genannt. Da $|\Psi(x, t)| = |\psi(x, t)|$ muss gelten:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 = 1$$

Benutze die zeit-unabhängige Hamilton-Jakobi Gleichung und den folgenden Ansatz für 3 Dimensionen:

$$\Psi(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x})e^{-i\frac{E}{\hbar}t}, \quad \psi(\vec{x}) = A(\vec{x})e^{i\frac{S(\vec{x})}{\hbar}}$$

wobei $A(\vec{x})$ und $S(\vec{x})$ reelle Funktionen sind. Die 3D zeit-unabhängige SG lautet:

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

Wenn wir nach Real- und Imaginärteil zerlegen, erhalten wir:

$$\frac{(\vec{\nabla}S)^2}{2m} + (V(\vec{x}) - E) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta A}{A}, \quad (\vec{\nabla}A) \cdot (\vec{\nabla}S) + \frac{A}{2} \Delta S = 0$$

Im klassischen Limes, wo $\hbar \rightarrow 0$ wird aus der ersten Gleichung:

$$\frac{(\vec{\nabla}S)^2}{2m} + V(\vec{x}) = E$$

was gerade die zeit-unabhängige HJ-Gl. ist. Die Phase der Welle Ψ kann mit der Größe S/\hbar identifiziert werden wobei S die erzeugende Funktion der kanonischen Transformation ist. Ausserdem gilt: $\vec{p} = m\dot{\vec{x}} = \vec{\nabla}S$. Die physikalische Bahn ist also immer Senkrecht zu der Fläche $S = \text{const.}$ Diese Flächen sind jedoch gerade die Wellenfronten der Welle Ψ , da S die Phase der Welle ist.

2.6 Energie Eigenzustände

Bezeichne mit ψ_n , $n \in \mathbb{N}$ einen vollständigen Satz normalisierter Eigenfunktionen des Hamiltonoperators mit Eigenwerten $H\psi_n = E_n\psi_n$. Nehme an, dass jede quadrat-integrierbare Funktion sich als Lin.komb dieser ψ_n schreiben lässt. Angenommen wir kennen die Wellenfunktion zur Zeit $t = 0$, $\Psi(x, 0)$. Wir wollen die Lösung $\forall t \geq 0$ bestimmen. Da die ψ_n eine Basis des VR bilden gilt:

$$\Psi(x, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \psi_n(x) \quad , \quad a_n \in \mathbb{C}$$

Somit folgt für die Zeitentwicklung die allgemeine Lösung:

$$(6) \quad \Psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \psi_n(x) \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right)$$

Dies ist eine Lösung der zeit-abhängigen SG da jeder einzelne Term eine Lsg ist.

2.7 Energiemessung

Es gelten die selben Annahmen für die ψ_n wie oben und es seien alle Eigenwerte diskret, d.h. $E_n \neq E_m$ für $n \neq m$. Es gilt:

$$(7) \quad \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_n^*(x) \psi_m(x) = \delta_{mn}$$

Denn es gilt:

$$E_m \int_{\mathbb{R}} dx \psi_n^*(x) \psi_m(x) = E_n^* \int_{\mathbb{R}} dx \psi_n^*(x) \psi_m(x)$$

Für $m = n$ folgt: $E_n = E_n^*$ und somit $E_n \in \mathbb{R}$. Und falls $n \neq m$ folgt aus $E_n - E_m \neq 0$ die Gl. (7). Wenn man die allgemeine Lösung (6) einsetzt im Integral erhält man für den Erwartungswert des Hamiltonians das folgende:

$$\langle H \rangle = \int_{\mathbb{R}} \Psi(x, t)^* H \Psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} |a_n|^2 E_n$$

Wir sehen, dass der Erwartungswert unabhängig ist von der Zeit. Dieses Resultat lässt sich wie folgt interpretieren: die möglichen Messergebnisse einer Energiemessung sind die Eigenwerte E_n , und die Wahrscheinlichkeit, mit der der Wert E_n gemessen wird, ist gleich $|a_n|^2$.

Weitere Annahmen/Postulate der Wellenmechanik im Überblick:

- (iv) Die möglichen Messergebnisse einer Energiemessung eines Systems sind die Eigenwerte des Hamilton-Operators H .
- (v) Falls die Eigenwerte alle voneinander verschieden sind, so ist die Wahrscheinlichkeit, den Eigenwert E_n zu messen, gerade

$$|a_n|^2 = \left| \int_{\mathbb{R}} dx \psi_n(x)^* \Psi(x, t) \right|^2$$

Es muss weiter gelten: $\sum_{n=0}^{\infty} |a_n|^2 = 1$. Wir sehen, dass nur diskrete Energiewerte zulässig sind. Ein weiteres Postulat ist:

- (vi) Die Energie eines Quantensystems sei zur Zeit $t = t_0$ mit dem Ergebnis E_n gemessen worden. Dann 'kollabiert' die Wellenfunktion des Systems zu der Eigenfunktion ψ_n mit $H\psi_n = E_n$, d.h. es gilt

$$\Psi(x, t) = A\psi_n(x) \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right) \quad \forall t > t_0$$

Hierbei ist A eine Konstante mit $|A| = 1$, und wir haben wiederum angenommen, dass die EW von H alle unterschiedlich sind.

Die physikalische Interpretation dieser Tatsache ist, dass es unmöglich ist, eine Messung durchzuführen, ohne dabei das System zu beeinflussen. Äquivalent: Nachdem die Energie des Systems einmal als E_n gemessen wurde, wird jede zukünftige Energiemessung immer wieder E_n finden und zwar mit Wahrscheinlichkeit 1. Hierbei ist aber nicht klar wie man eine 'Messung' präzise definieren soll.

3 Beispiele einfacher Systeme

Wir betrachten 1-dimensionale Systeme, in denen das Teilchen sich nur in einer Richtung bewegen kann.

3.1 Das Teilchen in der 'Box'

Ein Teilchen, das sich im Intervall $[0, a]$ frei bewegen kann und das Intervall nicht verlassen kann, wird durch folgendes Potential beschrieben.

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

Es folgt, dass $\psi(x) = 0$ für $x \notin [0, a]$. Für $x \in [0, a]$ muss gelten:

$$(8) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$$

Weiterhin muss ψ überall stetig sein. Falls dies nicht der Fall wäre, dann wäre $\psi'' \sim \delta'$ und somit wäre ψ nicht eine Lösung der SG. Wegen der Stetigkeit muss gelten: $\psi(0) = \psi(a) = 0$. Es folgt die allgemeine Lsg.

$$\psi(x) = \begin{cases} A \cosh\left(\sqrt{2m|E|\frac{x}{\hbar}}\right) + B \sinh\left(\sqrt{2m|E|\frac{x}{\hbar}}\right) & \text{falls } E < 0 \\ A + Bx & \text{falls } E = 0 \\ A \cos\left(\sqrt{2m|E|\frac{x}{\hbar}}\right) + B \sin\left(\sqrt{2m|E|\frac{x}{\hbar}}\right) & \text{falls } E > 0 \end{cases}$$

mit A und B Konstanten. Die Randbedingungen implizieren $A = 0$ und für $E \leq 0$ auch $B = 0$; alle Lösungen mit $E \leq 0$ sind also trivial. Für $E > 0$ gibt es nicht triviale Lösungen mit

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad , \quad \psi_n = B_n \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

wobei B_n durch die Normalisierung $1 = \int_0^a dx \psi_n^* \psi_n$ bestimmt wird. Wir sehen, dass die möglichen Energieeigenwerte diskret sind. Diese Diskretheit folgt aus den Randbedingungen. Weiterhin sind alle Energieeigenwerte positiv, und insbesondere ist $E = 0$ nicht zulässig. Dies folgt aus der Heisenbergschen Unschärferelation. Weiter hat der n -te angeregte Zustand $\psi_{n+1}(x)$ gerade n Nullstellen in $(0, a)$.

3.2 Teilchen im Topf

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

Wir interessieren uns für gebundene Zustände, d.h. $|\psi(x)| \rightarrow 0$ für $x \rightarrow \pm\infty$. Falls $x < -a$ und $x > a$, dann lautet die zeit-unabhängige SG wie in Gl. (8). Eine Allgemeine Lsg ist:

$$\psi(x) = Ae^{\kappa x} + De^{-\kappa x} \quad \text{wobei} \quad E = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} \quad , \quad \kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$$

Damit $\psi \rightarrow 0$ für $x \rightarrow \pm\infty$, muss $\kappa \in \mathbb{R}$ sein und somit $E < 0$. Im folgenden sei $\kappa > 0$. Die Lsg ist somit:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\kappa x} & \text{falls } x < -a \\ De^{-\kappa x} & \text{falls } x > a \end{cases}$$

Für $-a < x < a$ ist die zeit-unabhängige SG:

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

Die allgemeine Lsg ist von der folgenden Form:

$$\psi(x) = Be^{ikx} + Ce^{-ikx} \quad \text{wobei} \quad k = \frac{\sqrt{2m(V+E)}}{\hbar}$$

Falls $\psi(x)$ eine gerade Fkt ist, d.h. $\psi(-x) = \psi(x)$, dann ist es $H\psi(x)$ auch. Selbiges gilt für ungerade Funktionen. Wir können das EW-Problem separat für gerade und ungerade Fkt lösen. Im folgenden betrachten wir gerade Lösungen. Für diese gilt: $A = D$ und $B = C$. Somit folgt:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\kappa x} & \text{falls } x < -a \\ 2B \cos(kx) & \text{falls } -a < x < a \\ Ae^{-\kappa x} & \text{falls } x > a \end{cases}$$

Die stetigkeit von ψ und ψ' bei $x = \pm a$ folgt aus:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} (\psi'_k(a+\varepsilon) - \psi'_k(a-\varepsilon)) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} dx \psi''_k(x) \\ &= \int_{a-\varepsilon}^a dx (E+V)\psi_k(x) + \int_a^{a+\varepsilon} dx E\psi_k(x) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0 \end{aligned}$$

Es folgt dann:

$$Ae^{-\kappa a} = 2B \cos(ka) \quad \text{und} \quad \kappa Ae^{-\kappa a} = 2Bk \sin(ka) \\ \Rightarrow \kappa = k \tan(ka)$$

Weiter gilt:

$$\kappa^2 + k^2 = \frac{2mV}{\hbar^2}$$

Definiere $\eta := \kappa a$ und $\xi := ka$. Dann vereinfachen sich die Bedingungen zu:

$$\eta = \xi \tan(\xi) \quad , \quad \eta^2 + \xi^2 = \frac{2ma^2 V}{\hbar^2}$$

Die Anzahl der geraden gebundenen Lösungen ist gerade N , falls

$$(N-1)^2 \pi^2 < \frac{2ma^2 V}{\hbar^2} \leq N^2 \pi^2$$

Im Fall der ungeraden Fkt gilt $A = -D$ und $B = -C$ und somit folgt:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\kappa x} & \text{falls } x < -a \\ 2iB \sin(kx) & \text{falls } -a < x < a \\ -Ae^{-\kappa x} & \text{falls } x > a \end{cases}$$

Stetigkeitsbedingungen ergeben:

$$Ae^{-\kappa a} = -2iB \sin(ka) \quad \text{und} \quad \kappa Ae^{-\kappa a} = 2iBk \cos(ka) \\ \Rightarrow \kappa = -k \cot(ka)$$

Durch η und ξ ausgedrückt:

$$\eta = -\xi \cot(\xi) \quad , \quad \eta^2 + \xi^2 = \frac{2ma^2 V}{\hbar^2}$$

Es gibt keine ungerade gebundene Lösung, falls

$$\frac{2ma^2 V}{\hbar^2} \leq \frac{\pi^2}{4}$$

3.3 Das Stufenpotential

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{falls } x < 0 \\ V_0 & \text{falls } x \geq 0 \end{cases} \quad \text{wobei } V_0 > 0$$

Wir betrachten den Fall wo das Teilchen von links kommt und an der Stufe gestreut wird. Ziel: Wsk bestimmen mit der das Teilchen reflektiert bzw transmittiert wird.

Für $x < 0$ lautet die zeit-unabhängige SG wie folgt:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi$$

Die allgemeinste Lsg ist:

$$\psi_k(x) = Ae^{\frac{ikx}{\hbar}} + Be^{-\frac{ikx}{\hbar}}$$

mit A und B Konstanten und $k = \sqrt{2mE}$. Wir benötigen $k \in \mathbb{R}$ und somit auch $E > 0$. Der Term $Ae^{\frac{ikx}{\hbar}}$ beschreibt eine von links einlaufende Welle mit Impuls k , wohingegen der Term $Be^{-\frac{ikx}{\hbar}}$ die reflektierte Welle beschreibt, die mit entgegengesetztem Impuls von rechts nach links fliegt. Die Reflektionswahrscheinlichkeit ist dann $R = |B/A|^2$.

Für die Region $x \geq 0$ lautet die zeit-unabhängige SG wie folgt:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} \psi + V_0 \psi = E\psi \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \psi$$

Es gibt nun zwei Fälle: $E > V_0$ und $E < V_0$.

Fall 1: $E > V_0$. In diesem Fall ist die allgemeine Lsg:

$$\psi_k(x) = Ce^{\frac{ilx}{\hbar}} + De^{-\frac{ilx}{\hbar}}$$

wobei C und D Konstanten sind und $l = \sqrt{2m(E - V_0)}$. Da kein Teilchen von rechts aus dem Unendlichen kommt gilt $D = 0$. Aus der Stetigkeit folgt:

$$\begin{aligned} A + B &= C \quad \text{und} \quad (A - B)k = Cl \\ \Rightarrow 2A &= C \left(1 + \frac{l}{k}\right) \quad \text{und} \quad 2B = C \left(1 - \frac{l}{k}\right) \\ \Rightarrow \frac{C}{A} &= \frac{2}{1 + \frac{l}{k}} \quad \text{und} \quad \frac{B}{A} = \frac{1 - \frac{l}{k}}{1 + \frac{l}{k}} \end{aligned}$$

Somit folgt für die Reflexions- und Transmissionswahrscheinlichkeit

$$R = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \frac{\left(1 - \frac{l}{k}\right)^2}{\left(1 + \frac{l}{k}\right)^2}, \quad T = \frac{l}{k} \left| \frac{C}{A} \right|^2 = \frac{4 \frac{l}{k}}{\left(1 + \frac{l}{k}\right)^2}$$

Falls V_0 relativ zu E klein ist, dann ist $T \gg R$ und falls V_0 relativ zu E grösser wird, nimmt die Reflektionswahrscheinlichkeit zu.

Fall 2: $E < V_0$. Für $x < 0$ ist die Lsg wie zuvor, aber für $x > 0$ haben wir

$$\psi_k(x) = C'e^{-\frac{\kappa x}{\hbar}} + D'e^{\frac{\kappa x}{\hbar}} \quad \text{wobei } \kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)} \in \mathbb{R}_{>0}$$

Damit diese Lsg nicht explodiert für $x \rightarrow \infty$, muss $D' = 0$ gelten. Aus den Stetigkeitsbedingungen folgt:

$$\begin{aligned} A + B &= C' \quad \text{und} \quad i(A - B)k = -C'\kappa \\ \Rightarrow \frac{C'}{A} &= \frac{2}{1 + \frac{i\kappa}{k}} \quad \text{und} \quad \frac{B}{A} = \frac{1 - \frac{i\kappa}{k}}{1 + \frac{i\kappa}{k}} \end{aligned}$$

Insbesondere ist $C' \neq 0$ und somit die Wahrscheinlichkeit dass sich das Teilchen bei $x > 0$ befindet nicht gleich Null! Es ist aber $T = 0$ da der Wahrscheinlichkeitsstrom 0 ist weil die Wellenfunktionen rein reell ist.

3.4 Normierung und Wellenpaket

Streng genommen sind die obigen Wellenfunktionen nicht normierbar, da z.B. $\psi_k(x) = e^{ikx}$ nicht quadrad-integrabel ist. Dieses Problem tritt auf, falls die Menge der Lösungen der zeit-unabhängigen SG durch kontinuierliche Parameter (hier k) parametrisiert wird. Wir machen neu den folgenden Ansatz für die zeit-abhängige SG:

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} dk f(k) e^{ikx} e^{-i\frac{E_k}{\hbar}t}$$

wobei $f(k)$ die Superposition der fundamentalen Lösungen ist der zeit-unabhängigen SG. Wir suchen nun solche $f(k)$ sodass $\Psi(x, t)$ quadrad-integrabel ist. Wir erinnern uns:

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}} dx e^{ikx} &= 2\pi\delta(k) \quad , \quad f \mapsto \int_{\mathbb{R}} dx f(x)\delta(x) = f(0) \\ \int_{\mathbb{R}} f(x)\delta'(x) &= -f'(0) \end{aligned}$$

Weiter ist die Fouriertransformation und die inverse Fouriertransformation gegeben als:

$$\tilde{f}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx e^{-ipx} f(x) \quad , \quad f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dp e^{ipx} \tilde{f}(p)$$

Mit diesen tools kann man berechnen:

$$(9) \quad \int_{\mathbb{R}} dx |\Psi(x, t)|^2 = \int_{\mathbb{R}} dk |f(k)|^2 \stackrel{!}{=} 1$$

(9) ist das kontinuierliche Analogon zu $\sum_n |a_n|^2 = 1$. Des weiteren:

$$\int dx \psi_k^* \psi_{k'} = 2\pi\delta(k - k') \quad \Leftrightarrow \quad \int dx \psi_n^*(x) \psi_m(x) = \delta_{nm}$$

3.5 Teilchen im Topf: positive Energielösung

Wir betrachten wie in Kapitel 3.2 das folgende Potential:

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

aber diesmal mit positiver Energie. Klassisch erwartet man, dass das Teilchen nicht beeinflusst wird vom Potential. Wir nehmen an, dass das Teilchen von links einfliegt. Somit machen wir den folgenden Ansatz:

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + re^{-ikx} & x < -a \\ Ae^{ilx} + Be^{-ilx} & -a < x < a \\ te^{ikx} & x > a \end{cases}$$

wobei $R = |r|^2$, $T = |t|^2$ and

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} > 0 \quad , \quad l = \frac{\sqrt{2m(E + V)}}{\hbar} > 0$$

Durch die Klebebedingungen bei a und $-a$ erhalten wir:

$$\begin{aligned} A &= \frac{1}{2} e^{-i(l-k)a} t \left(1 + \frac{k}{l}\right) \quad , \quad B = \frac{1}{2} e^{i(l+k)a} t \left(1 - \frac{k}{l}\right) \\ e^{-ika} + re^{ika} &= Ae^{-ila} + Be^{ila} \quad , \quad e^{-ika} - re^{ika} = \frac{l}{k} (Ae^{-ila} - Be^{ila}) \end{aligned}$$

Somit erhalten wir:

$$(10) \quad t = \frac{e^{-2ika}}{\cos(2la) - i \frac{l^2 + k^2}{2lk} \sin(2la)}$$

Wenn wir l und k einsetzen erhalten wir:

$$T = |t|^2 = \frac{1}{1 + \frac{\sin^2(2la)V^2}{4E(E+V)}}$$

Im Allgemeinen ist $0 \leq T \leq 1$ und somit wird das Teilchen mit $E > 0$ vom Potential beeinflusst.

3.5.1 Tunneleffekt

Der Tunneleffekt tritt dann auf, falls V negativ ist (s.d. $-V > 0$) und $0 < E < -V$. Da $E + V < 0$, ist l rein imaginär und somit:

$$T = \frac{1}{1 - \frac{\sinh^2(1|l|a)V^2}{4E(E+V)}} \quad , \quad |l| = \frac{\sqrt{2m(-E - V)}}{\hbar} \in \mathbb{R}^+$$

Wir sehen dass T nicht null ist für $x > a$ aber exponentiell abfällt mit a und $-(E + V)$.

3.5.2 Resonanz

Resonanz ist der Fall der perfekten Transmission, d.h. $T = 1$. Dies tritt genau dann auf falls $\sin^2(2la) = 0$, also für $l = \frac{n\pi}{2a}$ mit $n \in \mathbb{N}$. Die zugehörigen Energien sind:

$$E_{res} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} n^2 - V = E_0(n\pi)^2 - V$$

Die resonanten Energien können selbst für $n > 0$ negativ sein. Dies ist aber nur eine formale Lösung da k imaginär ist und somit i.A. nicht die gewünschten Abfalleigenschaften aufweist. Es gibt genau so viele resonante Lösungen negativer Energie wie gebundene Zustände. Es gibt N gebundene (gerade und ungerade) Lösungen falls:

$$(N - 1)^2 \frac{\pi^2}{4} \leq \frac{2ma^2 V}{\hbar^2} \leq N^2 \frac{\pi^2}{4}$$

Die entsprechenden Resonanzen mit negativer Energie treten daher für $n = 0, 1, \dots, N-1$ auf. Gebundene Lösungen existieren genau dann, wenn t einen Pol besitzt. Die Bedingung dafür ist:

$$2 \cot(2la) = \cot(la) - \tan(la) = \frac{ik}{l} - \frac{l}{ik}$$

Diese Gleichung hat zwei Lösungen:

$$\tan(la) = -\frac{ik}{l} \quad \text{oder} \quad \cot(la) = \frac{ik}{l}$$

Diese sind gerade die Bedingungen für die Existenz von geraden, bzw. ungeraden gebundenen Lösungen. Wir haben in Kapitel 3.2 bereits k und κ definiert. Wir wollen nun die Beziehung zwischen jenen Konstanten und denen hier aufstellen: $k_{\text{dort}} = l_{\text{hier}}$ und $\kappa_{\text{dort}} = -ik_{\text{hier}}$. k_{hier} ist imaginär und somit ist κ_{dort} reell.

Wir betrachten nun noch wie sich die Lösung in der Nähe der Resonanz verhält. Es gilt:

$$e^{-2ika} \frac{1}{t} = \cos(2la) \left[1 - \frac{i}{2} \left(\frac{k}{l} + \frac{l}{k} \right) \tan(2la) \right] \approx 1$$

Bei Resonanz gilt: $E = E_n$, $\cos(2la) = 1$ und $\tan(2la) = 0$. Wir entwickeln in E und erhalten:

$$1 - \frac{i}{2} \frac{d}{dE} \left[\left(\frac{k}{l} + \frac{l}{k} \right) \tan(2la) \right]_{E_n} (E - E_n) \equiv 1 - \frac{2i}{\Gamma} (E - E_n)$$

wobei $\frac{4}{\Gamma} = \left(\frac{k}{l} + \frac{l}{k} \right) 2a \frac{dl}{dE} \Big|_{E_n}$

Als Funktion von E verhält sich also $t(E)$ in der Nähe einer Resonanz wie

$$e^{2ika} t(E) \simeq \frac{i\Gamma/2}{E - E_n + i\Gamma/2}$$

somit folgt:

$$T = |t(E)|^2 \simeq \frac{\Gamma^2/4}{(E - E_n)^2 + \Gamma^2/4}$$

Neu schreiben wir $t(E) = |t| e^{i\delta(E)}$ wobei $\delta(E)$ eine Phase ist. Jedes Mal wenn eine Resonanz durchlaufen wird, wächst diese Phase um π .

4 Der Formalismus der Quantenmechanik

Da die SG eine lineare DGL ist, gilt das Superpositionsprinzip. Somit ist der Lösungsraum ein komplexer VR. Wichtig ist, dass die Elemente des VR normierbar sind, d.h. $\langle \Psi(x, t) | \Psi(x, t) \rangle = 1 \quad \forall t$. Formal bedeutet dies, dass der komplexe VR der Lösungen ein inneres Produkt besitzen muss. Einen solchen VR nennt man Hilbertraum.

4.1 Der Hilbertraum

Sei \mathcal{H} ein komplexer VR. \mathcal{H} ist ein Hilbertraum, falls \mathcal{H} eine positiv-definite sesquilineare Form (Skalarprodukt) besitzt, bzgl. deren Norm \mathcal{H} vollständig ist. Das Skalarprodukt $\langle \cdot | \cdot \rangle$ ist eine Abbildung

$$\langle \cdot | \cdot \rangle : \mathcal{H} \times \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$$

mit den folgenden Eigenschaften für $\psi, \chi, \chi_i \in \mathcal{H}$ und $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$:

- (i) Linearität im 2. Argument: $\langle \psi | \alpha \chi_1 + \beta \chi_2 \rangle = \alpha \langle \psi | \chi_1 \rangle + \beta \langle \psi | \chi_2 \rangle$
- (ii) Komplexe Konjugation: $\overline{\langle \psi | \chi \rangle} = \langle \chi | \psi \rangle$

(iii) Anti-Linearität im 1. Argument: $\langle \chi_1 + \beta_2 \chi_2 | \psi \rangle = \alpha^* \langle \chi_1 | \psi \rangle + \beta^* \langle \chi_2 | \psi \rangle$

(iv) Positive Definitheit: $\langle \psi | \psi \rangle \geq 0$ und $\langle \psi | \psi \rangle = 0 \Rightarrow \psi = 0$.

Wir definieren die Norm $\|\psi\| = \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle}$. Es gilt:

$$|\langle \phi | \psi \rangle|^2 \leq \langle \phi | \phi \rangle \cdot \langle \psi | \psi \rangle \quad (\text{Cauchy-Schwarz Ungleichung})$$

$$\|\psi + \phi\| \leq \|\psi\| + \|\phi\| \quad (\text{Dreiecksungleichung})$$

Ein komplexer VR \mathcal{H} mit einem Skalarprodukt ist ein Hilbertraum, falls \mathcal{H} bzgl. der obigen Norm vollständig ist: dies bedeutet, dass jede Cauchy Folge von Vektoren $\phi_n \in \mathcal{H}$ zu einem Element in \mathcal{H} konvergiert: $\lim_{n \rightarrow \infty} \phi_n = \phi \in \mathcal{H}$. [Def. Cauchy-Folge: $\forall \varepsilon > 0 \exists N \in \mathbb{N} : \forall n, m > N : \|\phi_n - \phi_m\| < \varepsilon$]

4.2 Der L^2 Raum

Der Hilbertraum, der der Wellenmechanik zu Grunde liegt, ist der Raum der quadratintegrierbaren Funktionen, der L^2 Raum.

$$L^2(\mathbb{R}^f) = \left\{ f : \mathbb{R}^f \rightarrow \mathbb{C} \mid \int dx |f(x)|^2 < \infty \right\}$$

Wir definieren das Skalarprodukt durch:

$$\langle f | g \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx f^*(x) g(x)$$

Es gelten die VR-Operationen:

$$(f + g)(x) = f(x) + g(x) \quad , \quad (\lambda f)(x) = \lambda f(x)$$

4.3 Separable Hilberträume

$L^2(\mathbb{R})$ ist ein unendlich-dimensional und separabler Hilbertraum. D.h. er besitzt eine abzählbar unendliche Basis f_n . D.h. $\forall f \in L^2(\mathbb{R})$ gilt

$$f = \sum_{n=1}^{\infty} c_n f_n \quad , \quad c_n \in \mathbb{C}$$

Wann immer ein Hilbertraum eine abzählbare Basis besitzt, lässt sich eine orthonormale Basis konstruieren s.d. $\langle f_n | f_m \rangle = \delta_{mn}$. ONB kann mit Schmidt'schem Orthogonalisierungsverfahren konstruiert werden:

$$h_1 = f_1 / \|f_1\| \quad , \quad g_2 = f_2 - \langle h_1 | f_2 \rangle h_1 \quad , \quad h_2 = g_2 / \|g_2\|$$

$$g_3 = f_3 - \langle h_1 | f_3 \rangle h_1 - \langle h_2 | f_3 \rangle h_2 \quad , \quad h_3 = g_3 / \|g_3\|$$

4.4 Operatoren und Observable

Physikalische Observablen entsprechen Differentialoperatoren, die auf Wellenfunktionen wirken. Der Impuls- und Ortsoperator sind gegeben als:

$$(11) \quad \hat{p} : L^2(\mathbb{R}) \rightarrow L^2(\mathbb{R}) \quad , \quad f(x) \mapsto \hat{p}f(x) = -i\hbar \frac{\partial f(x)}{\partial x}$$

$$(12) \quad \hat{x} : L^2(\mathbb{R}) \rightarrow L^2(\mathbb{R}) \quad , \quad f(x) \mapsto \hat{x}f(x) = x \cdot f(x)$$

Beides sind lineare Operatoren, d.h. $\hat{p}(\lambda f + \mu g) = \lambda \hat{p}(f) + \mu \hat{p}(g)$.

Der Erwartungswert einer physikalischen Observablen A ist gegeben durch $\langle A \rangle_{\Psi} \equiv \langle \Psi | A \Psi \rangle = \langle A \Psi | \Psi \rangle \in \mathbb{R}$.

Für die Fälle $\Psi = \Psi_1 + \Psi_2$ und $\Psi = \Psi_1 + i\Psi_2$ gilt $\langle \Psi_1 | A \Psi_2 \rangle = \langle A \Psi_1 | \Psi_2 \rangle$. Solche Operatoren nennt man *symmetrisch*. Wir definieren den *adjungierten Operator* B^\dagger zu B durch: $\langle f | B g \rangle = \langle B^\dagger f | g \rangle \quad \forall f, g \in \mathcal{H}$. Falls A *selbst-adjungiert* ist, also $A^\dagger = A$, dann ist A auch symmetrisch. Im allgemeinen gilt die Umkehrung

nicht, da im unendlich dimensional Selbst-Adjungiertheit eine stärkere Bedingung ist als Symmetrie. Selbst-Adjungiertheit impliziert auch, dass der UR, auf dem A definiert ist, mit demjenigen übereinstimmt, auf dem A^\dagger definiert ist.

Im endlichdimensionalen Fall, d.h. $\mathcal{H} = \mathbb{C}^n$, können wir die Operatoren A durch eine Matrix $M(A)$ beschreiben. Wir wählen hierzu eine ONB. Die Matrix des adjungierten Operators A^\dagger ist dann gegeben durch: $M(A^\dagger) = \overline{M(A)}^t = M(A)^\dagger$. Die Observablen entsprechen also gerade den hermiteschen Matrizen.

4.5 Messung, Erwartungswert und Dirac Notation

Nehme an, der Hilbertraum \mathcal{H} sei endlichdimensional mit Dimension N . Jeder selbst-adjungierte Operator kann dann diagonalisiert werden; somit können wir eine Basis von \mathcal{H} aus EV von A finden. Bezeichne die EV von A mit ψ_n und die EW mit λ_n für $n = 1, \dots, N$.

$$A\psi_n = \lambda_n\psi_n$$

OBdA sind ψ_n normiert: $\langle \psi_n | \psi_n \rangle = 1$. Des weiteren müssen die EW $\lambda_n \in \mathbb{R}$ reell sein und es gilt:

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \delta_{mn}$$

Wir führen die *Dirac-Notation* ein. Die Vektoren im Hilbertraum $|\alpha\rangle \in \mathcal{H}$ werden als 'kets' bezeichnet. Entsprechend sind die 'bras' $\langle \alpha| \in \mathcal{H}^*$ Elemente des Dualsraumes. Somit ist deren Komposition, auch 'bracket' genannt $\langle \alpha | (| \beta \rangle) \equiv \langle \alpha | \beta \rangle$ eine Zahl.

Wir definieren die *Spektralprojektoren*. Betrachte

$$P_n = |\psi_n\rangle\langle\psi_n| : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$$

Da $P_n^2 = P_n$, ist P_n ein *Projektor*. Ausserdem projiziert P_n auf den Eigenraum $|\psi_n\rangle$. Des weiteren ist die Spektralzerlegung von A gegeben durch:

$$A = \sum_n \lambda_n P_n = \sum_n \lambda_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|$$

Somit ist der Erwartungswert von A in dem Zustand ψ gegeben als:

$$\langle A \rangle_\psi = \sum_n \lambda_n \langle \psi | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \psi \rangle = \sum_n \lambda_n |\langle \psi | \psi_n \rangle|^2$$

Mit dieser Erkenntnis, können wir die Postulate der QM allgemeiner formulieren zu:

- (i') Der Raum der Zustände ist der Hilbertraum \mathcal{H} , auf dem ein selbst-adjungierter Hamiltonoperator H definiert ist. Das System wird zu jeder Zeit t durch einen Strahl im Hilbertraum beschrieben; ein Strahl $\psi(t)$ ist die Äquivalenzklasse von normierten Vektoren χ mit $\langle \chi | \chi \rangle = 1$, wobei $\chi_1 \sim \chi_2$ falls $\chi_1 = e^{i\alpha} \chi_2$.
 - (ii') Die Zeitentwicklung wird durch die SG beschrieben:
- $$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) = H\psi(t)$$
- (iii') Observable werden durch selbst-adjungierte Operatoren A beschrieben.
 - (iv') Die möglichen Ergebnisse einer Messung von A sind die verschiedenen EW λ_n .
 - (v') Die Wsk., dass als Messergebnis λ auftritt ist:

$$W(\lambda) = \sum_{\lambda_m = \lambda} |\langle \psi_m | \psi \rangle|^2$$

Der Erwartungswert von A im Zustand ψ ist $\langle \psi | A | \psi \rangle$.

4.6 Verallgemeinerung auf ∞ -dimensionale Hilberträume

Das *Spektrum* $\sigma(A)$ eines selbst-adjungierten Operators $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ enthält $\lambda \in \sigma(A)$, falls $\forall \varepsilon > 0 \exists \psi_\varepsilon \in \mathcal{H}$ normierbar ($\langle \psi_\varepsilon | \psi_\varepsilon \rangle = 1$), s.d. $\|(A - \lambda)\psi_\varepsilon\| \leq \varepsilon$. Falls λ ein EW ist von A , dann ist natürlich $\lambda \in \sigma(A)$. Das Spektrum ist die Verallgemeinerung des Konzeptes der Eigenwerte für den ∞ -dim. Fall. Das Spektrum $\sigma(A)$ eines selbst-adjungierten Operators ist immer eine Teilmenge der reellen Zahlen.

Postulat: Die möglichen Resultate einer Messung der Observablen A ist das Spektrum von A .

Das Spektrum kann diskrete oder kontinuierlich sein, oder beide Teile enthalten. Beispielsweise:

Freies Teilchen: $\sigma(x) = \sigma(p) = \mathbb{R}$, $\sigma(H) = \mathbb{R}_{\geq 0}$

Potentialtopf: $\sigma(H) = \{E_1, \dots, E_N\} \cup \mathbb{R}_{\geq}$

Harmonischer Oszillator: $\sigma(H) = \{\hbar\omega(\frac{1}{2} + n) : n = 1, 2, \dots\}$

Falls das Spektrum distret ist, dann gilt:

$$f(A) := \sum_{a \in \sigma(A)} f(a) P_a$$

wobei $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ eine Funktion und $f(A) : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ ein Operator ist. Diese Zuordnung hat folgende Eigenschaften:

$$(\alpha_1 f_1 + \alpha_2 f_2)(A) = \alpha_1 f_1(A) + \alpha_2 f_2(A) \quad , \quad \alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{C}$$

$$(f_1 f_2)(A) = f_1(A) f_2(A)$$

$$\overline{f(A)} = f(A)^\dagger$$

$$f(A) = \begin{cases} \mathbb{1} & \text{für } f(x) = 1 \\ A & \text{für } f(x) = x \end{cases}$$

Der *Spektralsatz* besagt, dass es auch im ∞ -dim. Fall eine eindeutige Zuordnung $f \mapsto f(A)$ gibt die die obigen Eigenschaften erfüllt. Und falls A selbst-adjungiert ist gibt es solch eine Zuordnung auch falls das Spektrum nicht diskret ist.

Sei $I \subset \mathbb{R}$ ein Intervall und $P_I(x)$ dessen charakteristische Fkt. Dann ist $P_I(A)$ ein orthogonaler Projektor: $P_I(A) = P_I(A)^\dagger = P_I(A)^2$. Für disjunkte Intervalle I_1 und I_2 gilt: $P_{I_1 \cup I_2}(A) = P_{I_1}(A) + P_{I_2}(A)$. Für jeden Zustand $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ ist dann $W_\psi(I) = \langle \psi | P_I(A) | \psi \rangle$ ein Wahrscheinlichkeitsmass auf \mathbb{R} , d.h.

$$W_\psi(I) = \|P_I(A)\psi\|^2 \geq 0$$

$$W_\psi(I_1 \cup I_2) = W_\psi(I_1) + W_\psi(I_2) \quad \text{für } I_1 \cap I_2 = \emptyset$$

$$W_\psi(\mathbb{R}) = 1$$

Interpretation: $W_\psi(I)$ ist die Wahrscheinlichkeit, dass A im Zustand $|\psi\rangle$ einen Messwert $a \in I$ annimmt.

Weiter definieren wir den Erwartungswert von A im Zustand ψ durch:

$$\langle A \rangle_\psi = \int \lambda dW_\psi((-\infty, \lambda]) = \langle \psi | A | \psi \rangle$$

4.7 Andere Darstellung der Quantenmechanik

Im 'Ortsraum' sind die Operatoren gegeben wie in Gleichung (11) und Gleichung (12). Wir können aber auch eine Definition im 'Impulsraum' geben. Die Impulsdarstellung einer Wellenfunktion ist gegeben durch die Fourier-Transformation:

$$\tilde{\Psi}(p, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi(x, t) e^{-ipx/\hbar}$$

Hier sind Impulsoperator und Ortsoperator wie folgt gegeben:

$$\hat{p} : L^2(\mathbb{R}) \rightarrow L^2(\mathbb{R}) \quad , \quad f(q) \mapsto [\hat{p}(f)](p) = pf(p)$$

$$\hat{x} : L^2(\mathbb{R}) \rightarrow L^2(\mathbb{R}) \quad , \quad f(p) \mapsto [\hat{x}f](p) = i\hbar \frac{\partial f(p)}{\partial p}$$

Der Kommutator zweier Operatoren A und B ist gegeben als

$$[A, B] = AB - BA = i\hbar \{A, B\}$$

Wobei $\{.,.\}$ die Poissonklammer ist. Für den Fall $A = x$ und $B = p$ gilt: $[x, p] = i\hbar$.

5 Heisenberg'sche Unschärferelation

Die Heisenberg'sche Unschärferelation tritt dann auf, wenn zwei selbst-adjungierte Observablen A und B nicht vertauschen, also $[A, B] \neq 0$.

5.1 Nicht-vertauschende Observablen

Wir betrachten ein 'toy model' in 2D. Seien χ_1 und χ_2 zwei orthogonale Eigenvektoren des Hamiltonoperators s.d. $H\chi_1 = E_1\chi_1$, $H\chi_2 = E_2\chi_2$, $S\chi_1 = \chi_2$ und $S\chi_2 = \chi_1$ für eine observable S . In Matrixschreibweise:

$$H = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} \quad , \quad S = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad [H, S] = (E_1 - E_2) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

Wie nehmen an, dass der Kommutator nicht verschwindet, d.h. $E_1 - E_2 \neq 0$. Wir wollen die Wsk. einer S -Messung ausrechnen. Dazu bestimmen wir die EW und EV von S . Es ist leicht zu sehen, dass $\lambda = \pm 1$ die EW von S sind. Man findet somit die folgenden EV:

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_1 + \chi_2) \quad , \quad \psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_1 - \chi_2)$$

Wir betrachten nun das folgende Problem: Bei $t = 0$ wird S gemessen und der Wert $s = 1$ wird gefunden. Was ist die Wsk $s = 1$ zu messen zu einem späteren Zeitpunkt t ?

Die Lösung ist: Das System wird zur Zeit $t = 0$ beschrieben durch

$$\Psi(t=0) = \psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_1 + \chi_2)$$

Lösen der zeit-abhängigen SG führt für $t > 0$ auf:

$$\Psi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\chi_1 e^{-i \frac{E_1}{\hbar} t} + \chi_2 e^{-i \frac{E_2}{\hbar} t} \right)$$

Wir wollen nun zur Zeit t wiederum S bestimmen. Wir nehmen den Ansatz

$$\Psi(t) = a_1(t)\psi_1 + a_2(t)\psi_2 \quad \text{wobei} \quad a_i(t) = \langle \psi_i | \Psi(t) \rangle$$

Es ergibt sich:

$$a_1(t) = e^{-i \frac{(E_1 + E_2)t}{2\hbar}} \cos\left(\frac{(E_1 - E_2)t}{2\hbar}\right)$$

$$a_2(t) = -ie^{-i \frac{(E_1 + E_2)t}{2\hbar}} \sin\left(\frac{(E_1 - E_2)t}{2\hbar}\right)$$

Die Wsk. $S = \pm 1$ zu messen bei $t > 0$ ist dann gegeben durch

$$P(S = 1, t) = |a_1(t)|^2 = \cos^2\left(\frac{(E_1 - E_2)t}{2\hbar}\right)$$

$$P(S = -1, t) = |a_2(t)|^2 = \sin^2\left(\frac{(E_1 - E_2)t}{2\hbar}\right)$$

5.2 Die Unschärfe einer Observablen

Der Erwartungswert einer Observablen A im Zustand ψ ist $\langle A \rangle = \langle \psi | A \psi \rangle$. Die Unschärfe der Observablen A ist definiert als:

$$\Delta A = \sqrt{\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$$

Betrachte das Beispiel der eindimensionalen Box. Die Eigenfunktionen des Hamiltonoperators sind gegeben durch

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad \text{mit} \quad E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

Für dieses System ergibt sich:

$$\langle x \rangle = \frac{a}{2} \quad , \quad (\Delta x)^2 = \frac{a^2}{12} \left(1 - \frac{6}{n^2 \pi^2}\right) \quad , \quad \langle p \rangle = 0 \quad , \quad (\Delta p)^2 = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{a^2}$$

$$\Rightarrow (\Delta p)^2 (\Delta x)^2 = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{12} - \frac{\hbar^2}{2} \geq \hbar^2 \frac{\pi^2 - 6}{12} = 0.32 \hbar^2$$

Ganz allgemein gilt $(\Delta p)^2 (\Delta x)^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}$.

5.3 Die Heisenberg'sche Unschärferelation

Theorem. Seien A und B zwei Observable eines physikalischen Systems. Dann erfüllen die Unschärfen ΔA und ΔB in jedem Zustand die Ungleichung

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle i[A, B] \rangle|$$

Für $A = x$ und $B = p$ ergibt sich gerade $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$. Diese untere Schranke wird für das Gauss'sche Wellenpaket angenommen.

$$\psi(x) = \frac{\sqrt{a}}{\pi^{1/4}} e^{-\frac{a^2(x-x_0)^2}{2}}$$

6 Der harmonische Oszillator

6.1 Die Lösung

Die Hamiltonfunktion des harmonischen Oszillators ist

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{f}{2} q^2 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 q^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_q^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 q^2$$

wobei $\omega^2 = f/m$. Die zeitunabhängige SG ist $H\psi = E\psi$ wobei E eine Konstante ist. Damit die Wellenfunktion im $L^2(\mathbb{R})$ liegt, müssen wir weiterhin verlangen, dass $\lim_{q \rightarrow \pm\infty} \psi(x) = 0$. Wir führen dimensionslosen Variablen ein.

$$x = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} q \quad , \quad q = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} x \quad , \quad \partial_q = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \partial_x$$

In diesen Variablen vereinfacht sich der Hamiltonoperator und das EW-Problem zu

$$H = \frac{\hbar\omega}{2} (-\partial_x^2 + x^2) \quad \Rightarrow \quad [\partial_x^2 + \lambda - x^2] \psi = 0 \quad \text{wobei} \quad \lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

Diese Gleichung kann man auf verschiedene Weisen lösen.

6.1.1 Die konventionelle Lösung

Für $x \rightarrow \infty$ ist $x^2 \gg \lambda$ und somit lässt sich für dieses Regime die DGL schreiben als $(\partial_x^2 - x^2) \psi = 0$. Daher muss ψ asymptotisch wie $\psi \propto e^{-x^2/2}$ gehen. Wir machen also den Ansatz $\psi(x) = H(x)e^{-x^2/2}$. Wir finden dann die DGL für $H(x)$:

$$[\partial_x^2 - 2x\partial_x + (\lambda - 1)] H(x) = 0$$

Wir verwenden den Fuchs'schen Ansatz $H(x) = x^s \sum_{n \geq 0} a_n x^n$ mit $a_0 \neq 0$ und $s \geq 0$. Durch Koeffizientenvergleich findet man $s = 0$ oder $s = 1$ und $a_1 = 0$ und die Rekursionsformel:

$$(s + n + 2)(s + n + 1)a_{n+2} - (2s + 2n + 1 - \lambda)a_n = 0$$

Es ergibt sich:

- für $s = 0$ ist $H(x) = a_0 + a_2 x^2 + \dots$ gerade in x .
- für $s = 1$ ist $H(x) = x(a_0 + a_2 x^2 + \dots)$ ungerade in x .

Die Folge a_n muss irgendwann abbrechen, weil ansonst $H(x) \sim \exp(x^2)$ für $x \rightarrow \infty$ und somit die Randbedingung $\lim_{x \rightarrow \infty} \psi(x) = 0$ nicht erfüllt werden kann. Die Abbruchbedingung ist $\lambda_n = 2n + 1$ (für $s = 0$, aber für $s = 1$ analog). Dann erfüllt $H(x)$ die DGL:

$$H'' - 2xH' + 2nH = 0$$

und wird von dem n -ten Hermite Polynom $H_n(x)$ gelöst (z.B. $H_0 = 1$, $H_1 = 2x$, $H_2 = 4x^2 - 2$, ...). Wir finden also eine Folge von (normierbaren) Lösungen

$$\psi_n(x) = N_n H_n(x) e^{-\frac{x^2}{2}} \quad \text{wobei} \quad N_n = \frac{N_0}{\sqrt{2^n n!}} \quad , \quad N_0 = \frac{1}{\pi^{1/4}}$$

mit den zugehörigen Eigenwerten $\lambda_n = 2n + 1$, also

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

6.1.2 Die elegante Lösung

Wir definieren die Auf- und Absteigeoperatoren:

$$a \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (x + \partial_x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} q + \frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}} p \right)$$

$$a^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (x - \partial_x)$$

Umgekehrt ist dann:

$$x = \frac{1}{\sqrt{2}} (a + a^\dagger) \quad , \quad \partial_x = \frac{1}{\sqrt{2}} (a - a^\dagger)$$

Somit folgt für den Hamiltonoperator:

$$H = \frac{\hbar\omega}{2} (-\partial_x^2 + x^2) = \frac{\hbar\omega}{2} (a^\dagger a + a a^\dagger) = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} [a, a^\dagger] \right)$$

Da $[a, a^\dagger] = 1$ können wir weiter vereinfachen zu:

$$H = \hbar\omega \left(N + \frac{1}{2} \right)$$

Somit vereinfacht sich das EW-Problem $H\Psi = E\Psi$ zu $N|n\rangle = n|n\rangle$ wobei $|n\rangle$ der Zustand Ψ_n mit Energie E_n ist. Wir bemerken:

$$[N, a^\dagger] = a^\dagger \quad , \quad [N, a] = -a$$

Somit definieren $a^\dagger|n\rangle$ und $a|n\rangle$ Eigenvektoren zu N mit eigenwerten $n + 1$ und $n - 1$:

$$Na^\dagger|n\rangle = (n + 1)a^\dagger|n\rangle \quad , \quad Na|n\rangle = (n - 1)a|n\rangle$$

Wir nennen a^\dagger den Aufsteige- oder Erzeugungsoperator und a einen Absteige- oder Vernichtungsoperator. Mit der Bedingung Normierungsbedingung $\langle n|n\rangle = 1$ erhalten wir normierte Eigenvektoren:

$$|n - 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} a|n\rangle \quad , \quad |n + 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n + 1}} a^\dagger|n\rangle$$

Aus der Positivität des Skalarproduktes folgt, dass die EW n nicht-negative ganze Zahlen sein müssen. Weiter gilt $a|0\rangle = 0$ und somit:

$$|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle$$

Der Eigenwert bestimmt die Energie:

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

Wir merken, dass die Anwendung von a^\dagger einen zusätzlichen Energiequant $\hbar\omega$ erzeugt. Aufgrund der Heisenberg'schen Unschärferelation ist $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \neq 0$. Nach Konstruktion ist $a|0\rangle = 0$. Somit folgt in der Ortsdarstellung:

$$0 = \sqrt{2} \langle x|a|0\rangle = (x + \partial_x) \langle x|0\rangle = (x + \partial_x) \psi_0(x) = 0$$

Die Lösung dieser DGL ist:

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-x^2/2}$$

Die Zustände $\langle x|n\rangle$ folgen nun Iterativ:

$$\langle x|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n n!} \sqrt{\pi}} H_n(x) e^{-x^2/2}$$

Mit $H_n(x)$ den Hermitpolynomen. Die ersten vier sind gegeben durch:

$$H_0 = 1 \quad , \quad H_1 = 2x \quad , \quad H_2 = (2x)^2 - 2 \quad , \quad H_3 = (2x)^3 - 6(2x)$$

$$H_4 = (2x)^4 - 12(2x)^2 + 12$$

In der Variablen $q = \sqrt{\hbar/m\omega} x$:

$$\langle q|n\rangle = \sqrt{\sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \frac{1}{2^n n!}} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} q \right) e^{-\frac{(m\omega q)^2}{2\hbar}}$$

6.2 Klassischer Limes

Für grosse Energien nähert sich die QM Lsg. der klassischen Lsg. an. Die klassischen Aufenthaltswahrscheinlichkeit und Energie sind gegeben durch:

$$W_{kl} = \frac{1}{\pi q_0 \sqrt{1 - (q/q_0)^2}} \quad , \quad E_{kl} = \frac{1}{2} m\omega^2 q_0^2$$

7 Symmetrien in der Quantenmechanik

7.1 Unitäre Darstellungen

Eine unitäre Darstellung einer Gruppe G auf dem Hilbertraum \mathcal{H} ist ein (Gruppen-) Homomorphismus von G auf die Gruppe der unitären Operatoren auf \mathcal{H} . D.h. $\forall g \in G$ haben wir einen unitären Operator $U(g)$, s.d.

$$U(g_1) \cdot U(g_2) = U(g_1 \cdot g_2)$$

wobei der unitäre Operator $U(g) : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ eine lineare Abbildung ist, die das Skalarprodukt erhält: $\langle U(g)\psi | U(g)\chi \rangle = \langle \psi | \chi \rangle \quad \forall \psi, \chi \in \mathcal{H}$ und $g \in G$. Es folgt: $U(g)^\dagger = U(g)^{-1} = U(g^{-1})$.

Jede Gruppe besitzt die triviale Darstellung: $U(g) = \mathbf{1} \quad \forall g \in G$. Wir betrachten die Darstellung der Rotationsgruppe auf dem Raum der Wellenfunktionen $L^2(\mathbb{R}^3)$. Die Gruppe der Rotationen im \mathbb{R}^3 ist die spezielle orthogonale Gruppe $SO(3)$ ($\forall R \in SO(3) : R^T R = \mathbf{1}$ und $\det(R) = 1$). Eine unitäre Darstellung auf $L^2(\mathbb{R}^3)$ ist dann definiert durch

$$(U(R)\psi)(\vec{x}) = \psi(R^{-1}x)$$

Wir betrachten die Untergruppe von $O(3)$ welche nur $\pm \mathbb{1}$ enthält. Diese Gruppe wird durch den Paritätsoperator \mathcal{P} erzeugt, der zu der orthogonalen Transformation $-\mathbb{1}$ gehört. Da $\mathcal{P}^2 = 1$, folgt dass die EW des Paritätsoperators gerade ± 1 sind. Die EV erfüllen:

$$\psi(-\vec{x}) = (\mathcal{P}\psi)(\vec{x}) = \pm \psi(\vec{x})$$

D.h. sie entsprechen gerade den geraden, bzw. ungeraden Funktionen. In vielen Fällen ist der Hamiltonoperator H eine gerade Fkt. von x . D.h. die beiden Operatoren H und \mathcal{P} vertauschen miteinander. Somit lassen sich gemeinsame Eigenfunktionen zu H und \mathcal{P} finden.

7.2 Die Drehgruppe $SO(3)$ und ihre Lie Algebra.

Kontinuierliche Gruppen werden statt Gruppentransformationen durch infinitesimale Transformationen betrachtet. Eine kontinuierliche Gruppe ist eine Lie-Gruppe; die infinitesimalen Transformationen einer Lie Gruppe bilden eine Lie Algebra. Sei $R(t)$ eine differenzierbare Kurve von Rotationen in $SO(3)$ durch $R(0) = \mathbb{1}$. Die infinitesimale Rotation ist dann:

$$\Omega = \left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} R(t)$$

Die Menge dieser infinitesimalen Rotationen bilden einen (reellen) VR, da für $\alpha_i \in \mathbb{R}$

$$\alpha_1 \Omega_1 + \alpha_2 \Omega_2 = \left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} R_1(\alpha_1 t) R_2(\alpha_2 t)$$

Dieser VR ist der Lie Algebra zugrunde liegende VR, und wird mit $\mathfrak{so}(3)$ bezeichnet. Er bildet auch eine Darstellung der Lie Gruppe, da $\forall R \in SO(3)$

$$R \Omega_1 R^{-1} = \left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} R R_1(t) R^{-1} \in \mathfrak{so}(3)$$

Da die Lie Algebra $\mathfrak{so}(3)$ ein VR ist, folgt:

$$[\Omega_1, \Omega_2] = \left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} R_1(t) \Omega_2 R_1(t)^{-1} \in \mathfrak{so}(3)$$

Die Lie Algebra $\mathfrak{so}(3)$ ist somit nicht nur ein VR, sondern trägt eine Struktur, nämlich die Lie-Klammer $[\cdot, \cdot]$. Für die Matrix-Gruppe gilt:

$$[\Omega_1, \Omega_2] = \Omega_1 \Omega_2 - \Omega_2 \Omega_1$$

Die Lie-Klammer beschreibt also einfach den Kommutator, welcher anti-symmetrisch ist und die Jacobi Identität erfüllt:

$$\begin{aligned} [\Omega_1, \Omega_2] &= -[\Omega_2, \Omega_1] \\ 0 &= [\Omega_1, [\Omega_2, \Omega_3]] + [\Omega_2, [\Omega_3, \Omega_1]] + [\Omega_3, [\Omega_1, \Omega_2]] \end{aligned}$$

Für den Fall $R(t) \in SO(3)$ ist $R(t)^T R(t) = \mathbb{1}$ und es folgt

$$\Omega^T + \Omega = 0$$

Somit besteht die Lie Algebra $\mathfrak{so}(3)$ aus den anti-symmetrischen reellen 3×3 Matrizen. Jede solche Matrix ist von der Form

$$\Omega(\vec{\omega}) = \begin{pmatrix} 0 & -\omega_3 & \omega_2 \\ \omega_3 & 0 & -\omega_1 \\ -\omega_2 & \omega_1 & 0 \end{pmatrix}$$

D.h. $\Omega(\vec{\omega})\vec{x} = \vec{\omega} \wedge \vec{x}$. Somit ist $\dim_{\mathbb{R}} \mathfrak{so}(3) = 3$. Bezeichne mit $\Omega_i := \Omega(\vec{e}_i)$. Für $\vec{\omega} = \omega \vec{e}$ mit $|\vec{e}| = 1$ ist $e^{\Omega(\vec{\omega})t} = R(e, \omega t)$ gerade die Drehung um die Achse \vec{e} um den Winkel ωt . Es folgt:

$$R \Omega(\vec{\omega}) R^{-1} = \Omega(R \vec{\omega}) \quad R \in SO(3)$$

Weiter folgt:

$$[\Omega(\omega_1), \Omega(\vec{\omega}_2)] = \Omega(\vec{\omega}_1 \wedge \vec{\omega}_2) \quad , \quad [\Omega_1, \Omega_2] = \Omega_3 \quad (\text{und zyklisch})$$

Sei $U(R)$ eine unitäre Darstellung von $SO(3)$ auf einem Hilbertraum \mathcal{H} , dann erhält man daraus auch eine Darstellung der Lie Algebra $\mathfrak{so}(3)$

$$U(\Omega) = \left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} U(R(t))$$

Diese Darstellung von $\mathfrak{so}(3)$ ist auch ein VR-Homomorphismus von $\mathfrak{so}(3)$ in den VR der Operatoren \mathcal{H} die die Lie Algebra Klammer erhält:

$$U([\Omega_1, \Omega_2]) = [U(\Omega_1), U(\Omega_2)]$$

Die Bedingung dass $U(R)$ unitär ist impliziert $U(\Omega)^\dagger = -U(\Omega)$. Falls dies erfüllt ist, nennen wir eine Darstellung der Lie Algebra unitär.

Für jedes $\omega \in \mathbb{R}^3$ definieren wir den selbstadjungierten Drehimpulsoperator

$$M(\vec{\omega}) := i\Omega(\omega) = \sum_{i=1}^3 M_i \omega_i$$

wobei $M_i = M(e_i)$. Weiter gilt: $[M_1, M_2] = iM_3$

Die unitäre Darstellung der Lie Gruppe $SO(3)$ ist eindeutig durch die Darstellung ihrer Lie Algebra $\mathfrak{so}(3)$ bestimmt. Man kann die Lie Gruppe durch 'Exponenzieren' aus der Lie Algebra rekonstruieren ($\exp : \mathfrak{so}(3) \rightarrow SO(3)$, $\Omega \mapsto e^\Omega$). Weiterhin ist Ω gerade das Lie Algebra Element, das zu der Kurve $R(t) = e^{t\Omega}$ assoziiert ist. Die Produktstruktur der Lie Gruppe kann auch rekonstruiert werden:

$$\exp(\Omega_1) \cdot \exp(\Omega_2) = \exp(\Omega_1 \star \Omega_2)$$

Wobei $\Omega_1 \star \Omega_2$ durch die CBH Formel berechnet werden kann:

$$\begin{aligned} \Omega_1 \star \Omega_2 &= \Omega_1 + \Omega_2 + \frac{1}{2} [\Omega_1, \Omega_2] + \frac{1}{12} [\Omega_1, [\Omega_1, \Omega_2]] \\ &\quad + \frac{1}{12} [\Omega_2, [\Omega_2, \Omega_1]] + \dots \end{aligned}$$

7.3 Reduzible und irreduzible Darstellungen

Sei \mathcal{H} ein Hilbertraum, auf dem eine unitäre Darstellung der Gruppe G definiert ist. (D.h. $\forall g \in G \ U(g) \in V$ wobei $V \subseteq \mathcal{H}$). Wir nennen diese Darstellung reduzibel falls eine nicht triviale Unterdarstellung V existiert und irreduzibel falls die einzigen Unterräume $V \subseteq \mathcal{H}$, die unter der Wirkung von $U(g) \ \forall g \in G$ auf sich selbst abgebildet werden, $U(g)V \subseteq V$, einfach $V = \{0\}$ und $V = \mathcal{H}$ sind. Für unitäre Darstellungen kann man jede reduzible Darstellung in irreduzible Darstellungen zerlegen. Falls die Darstellung unitär ist, kann die reduzible Darstellung geschrieben werden als direkte Summe:

$$\exists V^\perp : V \oplus V^\perp = \mathcal{H} \quad , \quad V^\perp = \{\psi \in \mathcal{H} \mid \langle \chi, \psi \rangle = 0 \ \forall \chi \in V\}$$

Wegen Linearität des Skalarproduktes ist auch V^\perp ein Unterraum von \mathcal{H} . Die Unitarität von U impliziert, dass V^\perp invariant ist unter der Wirkung von G . Mit diesem Verfahren können wir also die Darstellung \mathcal{H} in kleinere Unterdarstellungen zerlegen. Jede reduzible unitäre Darstellung kann als Summe von irreduziblen Darstellungen geschrieben werden.

7.4 Irreduzible Darstellungen von $\mathfrak{so}(3)$

Die Lie Algebra von $SO(3)$ wird durch die Generatoren M_i , $i = 1, 2, 3$ aufgespannt, wobei die Kommutatoren durch

$$[M_1, M_2] = iM_3 \quad (\text{und zyklisch})$$

gegeben sind. Wir definieren nun Auf- und Absteigeoperatoren

$$M_{\pm} = M_1 \pm iM_2$$

Es folgt:

$$[M_3, M_{\pm}] = \pm M_{\pm} \quad , \quad [M_+, M_-] = 2M_3$$

Sei ψ ein EV von $U(M_3) = M_3$ (wir unterscheiden im Folgenden nicht zwischen $U(M_i)$, der Wirkung von M_i in der Darstellung, und M_i selbst)

$$M_3\psi = z\psi \quad , \quad z \in \mathbb{C} \quad \Rightarrow \quad M_3M_{\pm}\psi = (z \pm 1)M_{\pm}\psi$$

Da $\dim(\mathcal{H}) < \infty$, existiert ein EW $j \in \mathbb{C}$ mit EV ψ_j , derart dass

$$M_3\psi_j = j\psi_j \quad , \quad M_+\psi_j = 0$$

Wir setzen induktiv

$$M_-\psi_m = \psi_{m-1} \quad \text{für } m = j, j-1, \dots \quad \Rightarrow \quad M_3\psi_m = m\psi_m$$

Da auch diese Folge abbrechen muss $\exists k \in \mathbb{N}$, s.d.

$$\psi_{j-k} \neq 0 \quad , \quad M_-\psi_{j-k} = 0$$

Aus

$$\begin{aligned} M_+\psi_m &= \mu_0\psi_{m+1} \\ \Rightarrow M_+\psi_{m-1} &= (2m + \mu_m)\psi_m \equiv \mu_{m-1}\psi_m \end{aligned}$$

folgt

$$\mu_m = (j-m)(j+m+1) \quad , \quad j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}$$

Jede irreduzible Darstellung entspricht damit ein solches j . Aus folgender Zusammenfassung folgt, dass die M_3, M_{\pm} eine Darstellung \mathcal{D}_j der $\mathfrak{so}(3)$ liefern.

$$M_3\psi_m = m\psi_m \quad , \quad M_+\psi_m = \mu_m\psi_{m+1} \quad , \quad M_-\psi_m = \psi_{m-1}$$

Die Darstellung kann auch durch den Wert des Casimiroperators charakterisiert werden.

$$\begin{aligned} C &= \vec{M}^2 = M_1^2 + M_2^2 + M_3^2 = M_3^2 + \frac{1}{2}(M_+M_- + M_-M_+) \\ [M_i, C] &= 0 \quad \forall M_i \in \mathfrak{so}(3) \\ \vec{M}^2\psi_j &= j(j+1)\psi_j \quad , \quad C\psi = j(j+1)\psi \quad \forall \psi \in \mathcal{D}_j \end{aligned}$$

Letzteres gilt weil C mit allen M_i vertauscht. Da dies auch für ψ_{j-k} gelten muss, folgt:

$$j(j+1) = (j-k)(j-k-1) \quad \Rightarrow \quad k = -1 \text{ oder } k = 2j$$

Die erste Lösung macht keinen Sinn da k positiv sein muss. Aus der zweiten Lösung erhalten wir wieder $j = \frac{k}{2}$ für $k \in \mathbb{N}$. Es gilt $\dim(\mathcal{D}_j) = 2j+1$, $M_i = M_i^{\dagger}$ und $M_{\pm}^{\dagger} = M_{\mp}$. So ist eine ONB von \mathcal{D}_j gegeben durch

$$\{|j, m\rangle\}_{m=-j}^j \quad , \quad |j, j\rangle := \frac{\psi_j}{\|\psi_j\|} \quad , \quad \sqrt{\mu_m}|j, m\rangle := M_-|j, m+1\rangle$$

Es folgt:

$$\begin{aligned} C|j, m\rangle &= \vec{M}^2|j, m\rangle = j(j+1)|j, m\rangle \quad , \quad M_3|j, m\rangle = m|j, m\rangle \\ M_{\pm}|j, m\rangle &= \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}|j, m \pm 1\rangle \end{aligned}$$

Die triviale Darstellung entspricht \mathcal{D}_0 . Die fundamentale Darstellung $U(R) = R$, $U(\Omega) = \Omega$ ist auf $\mathcal{H} = \mathbb{R}^3$ definiert. Sie ist irreduzibel und hat Dimension 3, und somit ist sie isomorph zu \mathcal{D}_1 . Selbiges gilt für die adjungierte Darstellung auf $\mathcal{H} = \mathfrak{so}(3)$ welche definiert ist durch

$$U(R)\Omega = R\Omega R^{-1} \quad \text{bzw.} \quad U(\Omega_1)\Omega_2 = [\Omega_1, \Omega_2]$$

Eine andere Klasse von Darstellungen sind Unterräume der Fkt. auf der Kugel, die durch die Kugelfunktionen erzeugt werden. Auf dem VR dieser Fkt. wirkt die Drehgruppe in Kugelkoordinaten wie folgt:

$$M_3 = -i\frac{\partial}{\partial\phi} \quad , \quad M_{\pm} = e^{\pm i\phi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot(\theta)\frac{\partial}{\partial\phi} \right)$$

Um die invarianten UR zu beschreiben führen wir die Kugelfkt.

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

ein, wobei $m = -l, \dots, l$. P_l^m sind die assoziierten Legendre-Fkt., die die folgende verallgemeinerte Legendre-Gleichung lösen.

$$\frac{d}{dz} \left[(1-z^2) \frac{dP(z)}{dz} \right] + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1-z^2} \right] P(z) = 0$$

Die Explizite Lösung ist:

$$P_l^m(z) = \frac{(-1)^m}{2^l l!} (1-z^2)^{m/2} \frac{d^{l+m}}{dz^{l+m}} (z^2-1)^l$$

Man sieht nun:

$$M_3 Y_{l,m} = m Y_{l,m} \quad , \quad M_{\pm} Y_{l,m} = C_{l,m,\pm} Y_{l,m \pm 1}$$

wobei $C_{l,m,\pm}$ eine Konstante ist. Wir sehen dass die Kugelfunktionen $\{Y_{l,m} \mid m = -l, \dots, l\}$ eine irreduzible Darstellung der Lie Gruppe $SO(3)$ definieren. Sie stimmt gerade mit \mathcal{D}_j überein. $\mathcal{D}_j \cong \{Y_{l,m} \mid m = -l, \dots, l\}$

7.5 $SO(3)$ vs. $SU(2)$

Die Kugelfkt. beschreiben alle Darstellungen von $\mathfrak{so}(3)$, für die $j \in \mathbb{N}$. Die übrigen Darstellungen von $\mathfrak{so}(3)$, also jene für $j \in \mathbb{N} + \frac{1}{2}$, führen nicht zu Darstellungen von $SO(3)$ sondern ihrer Überlagerungsgruppe $SU(2)$.

$$\begin{aligned} SU(2) &= \{A \in U(2) \mid \det(A) = 1\} \\ &= \left\{ g = \begin{pmatrix} a & b \\ -\bar{b} & \bar{a} \end{pmatrix} \mid |a|^2 + |b|^2 = 1 \right\} \\ \mathfrak{su}(2) &= \{A \in \text{Mat}(2, \mathbb{C}) \mid A + A^{\dagger} = 0 \text{ , } \text{tr}(A) = 0\} \end{aligned}$$

Eine Basis von $\mathfrak{su}(2)$ ist gegeben durch die Pauli Matrizen

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Jedes $A \in \mathfrak{su}(2)$ kann geschrieben werden als

$$A \equiv A(\vec{a}) = -\frac{i}{2} \begin{pmatrix} a_3 & a_1 - ia_2 \\ a_1 + ia_2 & -a_3 \end{pmatrix} \equiv -\frac{i}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{a}$$

Somit hat $\mathfrak{su}(2)$ eine (reelle) 3 dim. Basis

$$A_j = -\frac{i}{2} \sigma_j \quad j = 1, 2, 3$$

Es gelten die folgenden Eigenschaften für die Pauli Matrizen:

$$\begin{aligned} \sigma_i \sigma_j &= \delta_{ij} + i\epsilon_{ijk} \sigma_k \quad , \quad (\vec{\sigma} \cdot \vec{a})(\vec{\sigma} \cdot \vec{b}) = (\vec{a} \cdot \vec{b}) \mathbb{1} + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{a} \wedge \vec{b}) \\ [A(\vec{a}), A(\vec{b})] &= A(\vec{a} \wedge \vec{b}) \quad , \quad [A_1, A_2] = A_3 \quad (\text{und zyklisch}) \end{aligned}$$

Die Lie Algebren $\mathfrak{so}(3)$ und $\mathfrak{su}(2)$ sind also isomorph, wobei der Isomorphismus gegeben ist durch

$$\mathfrak{su}(2) \rightarrow \mathfrak{so}(3) \quad , \quad A(\vec{\omega}) \mapsto \Omega(\vec{\omega})$$

Die irreduziblen Darstellungen der $\mathfrak{su}(2)$ sind damit die D_j . Wir definieren für jeden Vektor $\vec{x} \in \mathbb{R}^3$ die Matrix

$$\tilde{x} = \vec{x} \cdot \vec{\sigma} = \begin{pmatrix} x_3 & x_1 - ix_2 \\ x_1 + ix_2 & -x_3 \end{pmatrix}$$

Diese Abbildung ist invertierbar da $x_j = \frac{1}{2} \text{tr}(\tilde{x} \cdot \sigma_j)$. Falls \vec{x} ein reeller Vektor ist, dann ist \tilde{x} eine hermitesche Matrix. Die Umkehrung gilt auch. Es gilt

$$\det(\tilde{x}) = -\vec{x} \cdot \vec{x}$$

Für jedes Element $A \in SU(2)$ betrachten wir die folgende Abbildung:

$$\tilde{x} \mapsto \tilde{x}' = A\tilde{x}A^\dagger$$

Dies ist eine lineare Abbildung. Sie definiert eine Drehung und nach Konstruktion einen Gruppenhomomorphismus

$$SU(2) \rightarrow SO(3)$$

Der Kern dieser Transformation ist gerade $\pm \mathbb{1} \in SU(2)$. Da der Homomorphismus surjektiv ist, folgt

$$SU(2)/\{\pm \mathbb{1}\} \cong SO(3)$$

Zu jedem Element in $SO(3)$ gibt es also zwei Elemente in der Überlagerungsgruppe $SU(2)$, die sich gerade um ein Vorzeichen unterscheiden. Jede Darstellung von $SO(3)$ definiert eine Darstellung von $SU(2)$ (indem man nämlich die Wirkung von $\pm \mathbb{1} \in SU(2)$ trivial definiert), aber die Umkehrung ist nicht richtig: eine Darstellung von $SU(2)$ ist nur dann eine Darstellung von $SO(3)$, falls $\pm \mathbb{1} \in SU(2)$ trivial wirkt.

Im Allgemeinen gilt in $SO(3)$

$$R(\vec{e}_3, \varphi) = \begin{pmatrix} \cos(\varphi) & -\sin(\varphi) & 0 \\ \sin(\varphi) & \cos(\varphi) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \exp \left[\varphi \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right] = e^{-iM_3\varphi}$$

Insbesondere gilt für jeden Darstellungsvektor $|j, m\rangle$

$$U(R(\vec{e}_3, 2\pi))|j, m\rangle = e^{-2\pi i M_3}|j, m\rangle = e^{-2\pi i m}|j, m\rangle = e^{-2\pi i j}|j, m\rangle$$

da $m = j - n$ für $n \in \mathbb{N}$. Wir sehen dass die Rotation um 2π nur für ganzzahlige j trivial dargestellt wird. Diese Darstellungen werden durch die Kugelfunktionen realisiert und sind somit tatsächlich alle Darstellungen von $SO(3)$. Falls $j \in \mathbb{N} + \frac{1}{2}$ dann wird die Rotation um 2π nicht trivial dargestellt: diese Darstellungen der Lie Algebra $\mathfrak{su}(2) \cong \mathfrak{so}(3)$ definieren nur Darstellungen von $SU(2)$, aber nicht von $SO(3)$. Wir finden somit nicht auf den Raum der Kugelfunktionen.

7.6 Projektive Darstellungen

Bis jetzt haben wir nur unitäre Darstellungen der Symmetriegruppe studiert. Es gibt aber eine mögliche Abschwächung. Wir wissen, dass ein physikalischer Zustand nicht durch einen Vektor im Hilbertraum beschrieben wird, sondern lediglich durch einen Strahl. Alle Relationen auf dem Hilbertraum müssen deshalb nur bis auf Phasen richtig sein. Es genügt also wenn die Symmetriegruppe projektiv dargestellt wird, d.h. falls gilt

$$U(g_1)U(g_2) = c(g_1, g_2)U(g_1g_2)$$

wobei $c(g_1, g_2)$ eine Phase ist. Wegen der Assoziativität gilt die Kozyklenbedingung

$$c(g_1, g_2g_3)c(g_2, g_3) = c(g_1g_2, g_3)c(g_1, g_2)$$

Sei $U(g)$ eine echte Darstellung von g , dann definiere

$$\hat{U}(g) = U(g)c(g)$$

wobei $c(g) \forall g \in G$ eine Phase ist. $\hat{U}(g)$ definiert eine projektive Darstellung, wobei

$$c(g, h) = \frac{c(g)c(h)}{c(gh)}$$

Die projektiven Darstellungen einer Lie Gruppe G stehen in eins zu eins Korrespondenz zu den echten Darstellungen der universellen Überlagerungsgruppe \tilde{G} von G . Die Darstellungen von $SU(2)$ werden durch \mathcal{D}_j parametrisiert. Falls $j \in \mathbb{N}$, definiert diese Darstellung tatsächlich eine echte Darstellung von $SO(3)$; andernfalls ist die Darstellung lediglich eine projektive Darstellung von $SO(3)$.

7.7 Der Spin des Elektrons

Die Möglichkeit dass $j \in \mathbb{N} + \frac{1}{2}$, wird vom Elektron realisiert. Evidenz dafür ist, dass der Eigenraum eines rotationssymmetrischen Hamiltonoperators es ebenfalls ist und es somit die projektive Darstellung der $SO(3)$ trägt. Die Vielfachheit (Entartung) des Eigenwertes ist $2j + 1$; sie wird durch eine nicht rotationsinvariante Störung des Hamiltonoperators, wie z.B. infolge eines äusseren Magnetfeldes \vec{B} , aufgehoben. Um die Entartung zu erklären, führt man einen zusätzlichen Freiheitsgrad ein: den Spin. Der Hilbertraum eines einzelnen Elektrons ist dann

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^2$$

Auf diesem Raum wirkt $V \in SU(2)$ gemäss

$$U(V) = U_0(R(V)) \otimes V$$

wobei $U_0(R)$ die Darstellung von $R \in SO(3)$ auf $L^2(\mathbb{R}^3)$ ist. Für den Fall des Elektrons transformiert sich der interne Freiheitsgrad also in der Darstellung $F_{\frac{1}{2}}$. In dieser Darstellung $\mathcal{D}_{1/2}$ ist $M_j = iU(A_j)$ gegeben durch

$$M_j = \frac{\sigma_j}{2}$$

Damit ist

$$M_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad M_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

und die Basis ist gerade gegeben durch die Standardbasis für \mathbb{C}^2

$$|\frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv |e_3\rangle \quad , \quad |-\frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv |-e_3\rangle$$

Spin nach oben, bzw. unten bzgl der Quantisierungsrichtung e_3 . Eigenbasen für M_1 bzw. M_2 sind

$$M_1 : |e_1\rangle = \frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad , \quad |-e_1\rangle = \frac{e^{i\pi/4}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$M_2 : |e_2\rangle = \frac{e^{i\pi/4}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \quad , \quad |-e_2\rangle = \frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix}$$

7.8 Wigners Theorem

Wir haben gesehen, dass es genügt dass Darstellung der Symmetriegruppe projektiv ist. Im Allgemeinen genügt es, wenn die Symmetrie durch anti-unitäre Operatoren $U(g)$ dargestellt wird. Ein anti-unitärer Operator hat die Eigenschaft, dass

$$\langle U(g)\phi | U(g)\psi \rangle = \overline{\langle \phi | \psi \rangle} = \langle \psi | \phi \rangle$$

Das Wignersche Theorem besagt:

Theorem (Wigners Theorem). Sei G eine Gruppe die auf den Zuständen des Hilbertraumes \mathcal{H} so wirkt, dass die Wsk $\frac{|\langle\phi|\psi\rangle|^2}{\langle\phi|\phi\rangle\langle\psi|\psi\rangle}$ erhalten bleibt. Dann kann man die Wirkung von $g \in G$ als $\psi \mapsto U(g)\psi$ schreiben, wobei jedes $U(g)$ ein unitärer oder anti-unitärer Operator ist, und

$$U(gh) = c(g, h)U(g)U(h)$$

gilt, wobei $c(g, h)$ die Kozyklenphasen sind.

Ein Beispiel von Symmetrien, die durch anti-unitäre Operatoren dargestellt wird, ist die Zeitumkehr. Wir definieren die Wirkung des Zeitumkehroperators \mathcal{T} auf den Wellenfunktionen durch

$$(\mathcal{T}\Psi)(t, \vec{x}) = \bar{\Psi}(-t, \vec{x})$$

Die meisten Symmetrien werden aber durch unitäre Operatoren dargestellt. Es gilt:

Lemma (Weyl'sches Lemma). Der Operator $U(g^2)$ ist immer unitär $\forall g \in G$.

Aus diesem Resultat folgt, dass jede Rotation durch unitäre Operatoren dargestellt werden muss.

8 Das Wasserstoffatom

8.1 Relativkoordinaten

Der Hamiltonian für zwei wechselwirkende Teilchen ist

$$H = \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} + V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$$

Wir definieren die Schwerpunkts- und Relativ-Koord. \vec{X} und \vec{x}

$$\vec{x} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \quad , \quad \vec{X} = \frac{m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2}{m_1 + m_2}$$

Entsprechend definieren wir die konjugierten Impulse

$$\vec{p} = \frac{m_2\vec{p}_1 - m_1\vec{p}_2}{m_1 + m_2} \quad , \quad \vec{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2$$

und die reduzierte Masse μ , sowie die totale Masse M

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad , \quad M = m_1 + m_2$$

Dann gilt:

$$\frac{\vec{P}^2}{2M} + \frac{\vec{p}^2}{2\mu} = \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2}$$

Und somit folgt:

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2M} + \frac{\vec{p}^2}{2\mu} + V(|\vec{x}|)$$

Wir ersetzen die Impulse durch die entsprechenden Differentialoperatoren

$$\vec{p}_1 \mapsto -i\hbar\vec{\nabla}_{\vec{r}_1} \quad , \quad \vec{p}_2 \mapsto -i\hbar\vec{\nabla}_{\vec{r}_2} \\ \vec{\nabla}_{\vec{x}} = \frac{i}{\hbar}\vec{p} \quad , \quad \vec{\nabla}_{\vec{X}} = \frac{i}{\hbar}\vec{P}$$

Somit folgt:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_X - \frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_x + V(|\vec{x}|)$$

Da das Potential von \vec{X} unabhängig ist, machen wir folgenden Ansatz

$$\Psi(\vec{x}, \vec{X}) = e^{i\vec{K}\cdot\vec{X}}\psi(\vec{x})$$

Somit erhalten wir für die zeit-unabhängige SG:

$$He^{i\vec{K}\cdot\vec{X}}\psi(\vec{x}) = e^{i\vec{K}\cdot\vec{X}}\left(\frac{\hbar^2\vec{K}^2}{2M} + H_{\text{rel}}\right)\psi(\vec{x})$$

wobei

$$H_{\text{rel}} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_x + V(|\vec{x}|)$$

Also müssen wir nur das Relativproblem lösen

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_x + V(r)\right]\psi(\vec{x}) = E_{\text{rel}}\psi(\vec{x})$$

Die totale Energie ist dann $E = E_{\text{rel}} + \frac{\hbar^2\vec{K}^2}{2M}$.

8.2 Coulomb-Problem

Wir betrachten den Fall wo das Potential die folgende Form hat

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$$

Das Potential beschreibt die Wechselwirkung eines Elektrons der Ladung $-e$ mit einem Atomkern der Ladung Ze . Da der Hamiltonoperator rotationssymmetrisch ist, vertauscht er mit den Generatoren von $\mathfrak{so}(3)$, d.h. den infinitesimalen Rotationen. Auf dem Raum der Wellenfkt. wirken diese Generatoren als

$$\vec{M} = -i\vec{x} \wedge \vec{\nabla}_x$$

Infinitesimale Rotationen sind von der Form $\vec{x} \mapsto \vec{x} + \vec{\omega} \wedge \vec{x}$. Auf dem Raum der Funktionen wirken sie also wie

$$f(\vec{x}) \mapsto f(\vec{x}) - \vec{\omega} \cdot (\vec{x} \wedge \vec{\nabla}_x f)$$

Der Rotationsgenerator ist $\vec{M} = i\vec{U}$. Für den Drehimpulsoperator \vec{L} gilt

$$\vec{L} = \hbar\vec{M}$$

Auf dem Raum der Wellenfkt gilt:

$$\vec{M}^2 = -\vec{x}^2\Delta + \left(r\frac{\partial}{\partial r}\right)^2 + r\frac{\partial}{\partial r} = -\vec{x}^2\Delta + r\frac{\partial^2}{\partial r^2}r \\ \Rightarrow \Delta = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r - \frac{1}{r^2}\vec{M}^2$$

Die Eigenfkt von \vec{M}^2 sind gerade $Y_{lm}(\theta, \phi)$ mit eigenwerten $l(l+1)$. Wir machen also folgenden Ansatz

$$\psi(\vec{x}) = Y_{lm}(\theta, \phi)\psi(r)$$

Es folgt also für $m = \mu$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r)\right)\psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x}) \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r\psi(r) - \frac{1}{r^2}l(l+1)\psi(r)\right) + V(r)\psi(r) = E\psi(r)$$

Wir wählen den Ansatz $\psi(r) = \frac{u(r)}{r}$ und es folgt

$$\left(-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + \mathcal{V}(r)\right)u = \varepsilon u$$

wobei $\mathcal{V}(r) = \frac{2m}{\hbar^2}V(r)$ und $\varepsilon = \frac{2m}{\hbar^2}E$.

8.2.1 Das Verhalten bei $r = 0$

Für $r \rightarrow 0$ vereinfacht sich die DGL zu

$$-u'' + \frac{l(l+1)}{r^2}u = 0$$

Die allgemeine Lösung ist

$$u(r) = ar^{l+1} + br^{-l}$$

wobei oBdA $l \geq 0$. Da unsere Lösung quadratintegrabel sein sollte muss $b = 0$. Die asymptotische Lösung für kleine r ist also

$$u(r) \approx r^{l+1}$$

8.2.2 Das Verhalten bei $r \rightarrow \infty$

Für $r \rightarrow \infty$ vereinfacht sich die DGL zu

$$-u'' = \varepsilon u$$

Wir wollen nur gebundene Lösungen studieren. Diese treten nur dann auf, falls $E \sim \varepsilon < 0$. Wir definieren $\kappa > 0$ durch

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

Die allgemeine Lösung ist

$$u(r) = a^{-\kappa r} + be^{\kappa r}$$

Damit die Lösung quadratintegrabel ist, muss gelten $b = 0$.

Wir betrachten nun den Spezialfall wo das Potential durch das Coulombpotential gegeben ist.

$$\mathcal{V}(r) = -\frac{\gamma}{r} \quad , \quad \gamma = \frac{2mZe^2}{\hbar^2}$$

Obige Diskussion motiviert den Ansatz

$$u(r) = e^{-\kappa r} \sum_{k=l+1}^{\infty} c_k r^k$$

Dann gilt:

$$\begin{aligned} u'(r) &= e^{-\kappa r} \sum_{k=l+1}^{\infty} c_k (-\kappa r^k + k r^{k-1}) \\ u''(r) &= e^{-\kappa r} \sum_{k=l+1}^{\infty} c_k (\kappa^2 r^k - 2\kappa k r^{k-1} + k(k-1)r^{k-2}) \end{aligned}$$

Einsetzen in die DGL führt zu der Gleichung

$$\sum_{k=l+1}^{\infty} c_k (2\kappa k - \gamma) r^{k-1} = \sum_{k=l+1}^{\infty} c_{k+1} ((k+1)k - l(l+1)) r^{k-1}$$

Dies führt zur Rekursionsformel

$$c_{k+1} = c_k \frac{\gamma - 2\kappa k}{l(l+1) - k(k+1)} \quad , \quad (k = l+1, l+2, \dots)$$

Falls diese Reihe nicht abbricht ist die Lösung nicht quadratintegrabel. Das heisst für ein n muss gelten $c_n \neq 0$ aber $c_{n+1} = 0$. So ist die Lösung eine Eigenfkt. Die Bedingung dafür ist

$$\begin{aligned} \kappa_n &= \frac{\gamma}{2n} \quad , \quad (n = l+1, l+2, \dots) \\ \Rightarrow E_n &= -\frac{\hbar^2}{2m} \kappa_n^2 = -\frac{m(Ze^2)^2}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \end{aligned}$$

Für jedes l gibt es $2l+1$ verschiedene Eigenfunktionen Y_{lm} . Somit tritt jedes dieser Energieniveaus mit folgender Multiplizität auf.

$$D_n = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2$$

Die Quantenzahlen n, l, m heissen Haupt-Quantenzahl n , Neben- oder Bahndrehimpuls-Quantenzahl l , und magnetische Quantenzahl m . Wird der Spin berücksichtigt, verdoppelt sich die Entartung, $D_n = 2n^2$. Fundamental ist die Existenz eines energetisch tiefsten Zustandes. Die Energie des H-Atoms ist nach unten beschränkt und ist somit stabil. Die Wellenfkt des Grundzustandes ist also

$$u(r) = e^{-\kappa_1 r} \quad , \quad \kappa_1 = \frac{\gamma}{2} \frac{me^2}{\hbar^2}$$

Also bis auf Normierung:

$$\psi(\vec{x}) = e^{-|\vec{x}|/a} \quad , \quad a = \frac{\hbar^2}{me^2}$$

Hier ist a der Bohr-Radius.

8.3 Dynamische Symmetrie

Die dynamische Symmetrie (die für die Unabhängigkeit der Energie von der Drehimpulszahl l verantwortlich ist) liegt der besonderen Form des Potentials, hier $V(r) \propto 1/r$, zugrunde. Ein Potential $1/r^{1+\varepsilon}$ mit $\varepsilon \neq 0$ hat zwar die geometrische Rotationssymmetrie, nicht aber die dynamische Symmetrie. In der klassischen Mechanik entspricht die dynamische Symmetrie dem Runge-Lenzvektor. In der klassischen Mechanik ist das Kepler Problem

$$H = \frac{p^2}{2\mu} - \frac{\kappa}{r}$$

mit μ der reduzierten Masse und $\kappa = Ze^2$. Die klassischen Bahnen sind geschlossene Ellipsen mit Halbachsen a und b und Exzentrizität $e = \sqrt{1 - b^2/a^2}$. Erhaltungsgrößen sind Energie $E = -\kappa/2a$ und Drehimpuls \vec{L} . \hat{L} legt die Bahnebene fest und $L^2 = \mu\kappa a(1 - e^2)$. Zusätzlich zu H und \vec{L} ist auch der Runge Lenzvektor \vec{J} erhalten

$$\vec{J} = \frac{1}{\mu} \vec{p} \wedge \vec{L} - \frac{\kappa}{r} \vec{x} \quad , \quad \vec{J}^2 = \frac{2H}{\mu} L^2 + \kappa^2 \quad , \quad \vec{J} \cdot \vec{L} = 0$$

Dass \vec{J} konstant ist, impliziert, dass der Perihel sich nicht bewegt. Dies ist eine Besonderheit des $1/r$ -Potentials. Für $V \propto 1/r^{1+\varepsilon}$ resultiert eine Periheldrehung.

Das quantenmechanische Analogon zum Runge-Lenzvektor ist der Pauli-Lenz Vektor

$$\vec{J} = \frac{1}{2\mu} (\vec{p} \wedge \vec{L} - \vec{L} \wedge \vec{p}) - \kappa \frac{\vec{x}}{r} \quad , \quad [H, J_i] = 0$$

Dieser Operator vertauscht mit dem Hamiltonoperator. Somit transformieren sich die Eigenzustände des Hamiltonoperators zu vorgegebenem Eigenwert ineinander unter der Wirkung von \vec{J} . Es gilt weiterhin

$$\vec{J} \cdot \vec{L} = 0 \quad , \quad \vec{L} = \vec{x} \wedge \vec{p}$$

Man findet:

$$\vec{J} = \frac{2H}{\mu} (\vec{L}^2 + \hbar^2) + \kappa^2$$

Die Operatoren, die mit dem Hamiltonoperator vertauschen, beinhalten also die drei Generatoren der Drehgruppe M_i , die die Lie Algebra $\mathfrak{su}(2)$ generieren.

$$\begin{aligned} [M_i, M_j] &= i\varepsilon_{ijk} M_k \quad , \quad [M_i, J_j] = i\varepsilon_{ijk} J_k \\ [J_i, J_j] &= -\frac{2H}{\mu} i\hbar^2 \varepsilon_{ijk} M_k \end{aligned}$$

Wir betrachten den Fall, wo der Eigenwert von H negativ ist. Wir definieren den immer noch selbst-adjungierten Operator K_i .

$$K_i = \sqrt{\frac{\mu}{-2H}} \frac{1}{\hbar} J_i$$

Es gelten folgende Relationen:

$$[K_i, K_j] = i\varepsilon_{ijk} M_k, \quad [M_i, K_j] = i\varepsilon_{ijk} K_k, \quad [M_i, M_j] = i\varepsilon_{ijk} M_k$$

Wir definieren:

$$\vec{S} = \frac{1}{2}(\vec{M} + \vec{K}), \quad \vec{D} = \frac{1}{2}(\vec{M} - \vec{K})$$

Für diese Operatoren gilt:

$$[S_i, D_j] = 0, \quad [S_i, S_j] = i\varepsilon_{ijk} S_k, \quad [D_i, D_j] = i\varepsilon_{ijk} D_k$$

Die Lie Algebra dieser Operatoren ist also gerade $\mathfrak{su}(2) \oplus \mathfrak{su}(2) \cong \mathfrak{so}(4)$. Falls wir die positiven Eigenwerte von H betrachten, dann ist die resultierende Lie Algebra die Lie Algebra der Lorentzgruppe $\mathfrak{so}(1,3)$. Für $E < 0$ folgt:

$$\begin{aligned} \vec{J}^2 &= \frac{2\hbar^2 H}{\mu} (\vec{M}^2 + 1) + \kappa^2 = -\frac{2\hbar^2 H}{\mu} \vec{K}^2 \\ \rightarrow H &= -\frac{\mu\kappa^2}{2\hbar^2 (\vec{K}^2 + \vec{M}^2 + 1)} = -\frac{\mu\kappa^2}{2\hbar^2 (2\vec{S}^2 + 2\vec{D}^2 + 1)} \end{aligned}$$

Die möglichen Eigenwerte von \vec{S}^2 und \vec{D}^2 sind

$$\vec{S}^2 = s(s+1), \quad \vec{D}^2 = d(d+1), \quad s, d = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$$

Da $\vec{K} \cdot \vec{M} = 0$ folgt $\vec{S}^2 = \vec{D}^2$ und somit $s = d$. Die möglichen Energieeigenwerte sind also

$$E = -\frac{\mu\kappa^2}{2\hbar^2 (2s+1)^2} = -\frac{\mu\kappa^2}{2\hbar^2 n^2} \quad \text{mit } 2s+1 = n \in \mathbb{N}$$

Die Dimension der Eigenräume ist

$$\dim_{E_n} = (2s+1)^2 = n^2$$

9 Drehimpulsaddition

Wir wollen verstehen, wie sich der Zustandsraum eines Quantensystems mehrerer Teilchen beschreiben lässt durch den Zustandsraum der einzelnen Teilsysteme.

9.1 Tensorprodukt

Der Hilbertraum eines Systems, das aus zwei Teilsystemen zusammengesetzt ist, ist das Tensorprodukt der Hilberträume der Teilsysteme

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$$

Ein Beispiel ist das 2-Körperproblem. Hier gilt $L^2(\mathbb{R}^6) = L^2(\mathbb{R}^3) \otimes L^2(\mathbb{R}^3)$. D.h. der Hilbertraum der 2-Teilchen-Wellenfkt. $\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$ wird aufgespannt durch

$$\psi^{(1)}(\vec{x}_1) \psi^{(2)}(\vec{x}_2) = (\psi^{(1)} \otimes \psi^{(2)}) (\vec{x}_1, \vec{x}_2)$$

D.h. jede Fkt $\psi(x_1, x_2)$ lässt sich als Summe von Produktfunktionen schreiben. Wenn $e_i^{(1)}$ bzw $e_i^{(2)}$ eine Basis von $\mathcal{H}^{(1)}$ bzw $\mathcal{H}^{(2)}$ ist, dann ist die Basis von $\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$ gegeben durch

$$e_i^{(1)} \otimes e_j^{(2)}$$

Somit gilt auch $\dim(\mathcal{H}) = \dim(\mathcal{H}^{(1)}) \cdot \dim(\mathcal{H}^{(2)})$. Das Skalarprodukt ist definiert als

$$\langle v_1 \otimes w_1 | v_2 \otimes w_2 \rangle = \langle v_1 | v_2 \rangle^{(1)} \cdot \langle w_1 | w_2 \rangle^{(2)}$$

Ein allgemeiner Vektor in $\mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$ ist gegeben als

$$\sum_{m,n} v_m \otimes w_n \quad \text{für } v_m \in \mathcal{H}^{(1)}, w_n \in \mathcal{H}^{(2)}$$

9.2 Addition von Drehimpulsen

Betrachten den Fall wo beide separaten Hilberträume eine (projektive) Darstellung der Drehgruppe tragen. Wir betrachten das Beispiel des 2-Körperproblems. Hier ist der Hamiltonoperator des Gesamtsystems nicht invariant unter den separaten Rotationen, sondern lediglich unter den gemeinsamen Rotationen. D.h. der Hamiltonoperator vertauscht nur mit den Generatoren der gemeinsamen Rotationen. Betrachte denn Fall wo die Beiden Hilberträume $\mathcal{H}^{(1)}$ und $\mathcal{H}^{(2)}$ die Darstellungen $U^{(i)}$ der Rotationsgruppe $SO(3)$ bzw. $SU(2)$ tragen. $\forall g \in SU(2)$ gilt

$$U^{(i)}(g) : \mathcal{H}^{(i)} \rightarrow \mathcal{H}^{(i)}, \quad U^{(i)}(g)U^{(i)}(h) = U^{(i)}(gh)$$

Auf dem Tensorprodukt $\mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$ haben wir die Darstellung der Produktgruppe $SU(2) \times SU(2)$ gegeben durch

$$(g, h) \mapsto U^{(1)}(g) \otimes U^{(2)}(h)$$

$$(U^{(1)}(g) \otimes U^{(2)}(h))(\psi_1 \otimes \psi_2) = ((U^{(1)}(g)\psi_1) \otimes (U^{(2)}(h)\psi_2))$$

Wir interessieren uns für gemeinsame Rotationen, also:

$$g \mapsto U^{(1)}(g) \otimes U^{(2)}(g)$$

Betrachte nun eine Kurve $g(t)$ mit $g(0) = \text{id}$ und den Lie-Algebra Generator

$$\Omega = \left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} g(t)$$

Dann gilt:

$$(U^{(1)} \otimes U^{(2)})(\Omega) = U^{(1)}(\Omega) \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes U^{(2)}(\Omega) = U(\Delta(g))(v \otimes w)$$

Wobei wir die Komultiplikation definiert haben als

$$\Delta : g \mapsto g \otimes g, \quad \Delta(\Omega) = \Omega \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \Omega$$

Es gilt:

$$[\Delta(\Omega_1), \Delta(\Omega_2)] = \Delta([\Omega_1, \Omega_2])$$

$$[(U^{(1)} \otimes U^{(2)})(\Omega_1), (U^{(1)} \otimes U^{(2)})(\Omega_2)] = (U^{(1)} \otimes U^{(2)})([\Omega_1, \Omega_2])$$

9.3 Die Clebsch-Gordan Reihe im allgemeinen Fall

Allgemein gilt die Zerlegung (Clebsch-Gordan Reihe):

$$D_{j_1} \otimes D_{j_2} = D_{j_1+j_2} \oplus D_{j_1+j_2-1} \oplus \dots \oplus D_{|j_1-j_2|}$$

9.4 Clebsch-Gordan Koeffizienten

Wie lassen sich die verschiedenen Vektoren $|j, m\rangle$ der Darstellungen D_j durch die Vektoren des Tensorproduktes ausdrücken. Dazu bezeichnen die Vektoren des Tensorproduktes durch

$$|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \equiv |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle \in D_{j_1} \otimes D_{j_2}$$

und jene der Darstellung D_j die in der Clebsch-Gordan Reihe vorkommen durch

$$|j_1, j_1, j, m\rangle = \sum_{\substack{m_1, m_2 \\ m_1+m_2=m}} \underbrace{\langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j_1, j_2, j, m \rangle}_{\text{C-G Koeff.}} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$$

Für die Clebsch-Gordan Koeffizienten gelten die Dreiecksrekursionen

$$\begin{aligned} &\sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 j(m+1) \rangle \\ &= \sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1+1)} \langle j_1 j_2 (m_1-1) m_2 | j_1 j_2 j m \rangle \\ &\quad + \sqrt{j_2(j_2+1) - m_2(m_2+1)} \langle j_1 j_2 m_1 (m_2-1) | j_1 j_2 j m \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 j(m-1) \rangle \\
&= \sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1+1)} \langle j_1 j_2(m_1+1) m_2 | j_1 j_2 j m \rangle \\
&+ \sqrt{j_2(j_2+1) - m_2(m_2+1)} \langle j_1 j_2 m_1(m_2+1) | j_1 j_2 j m \rangle
\end{aligned}$$

Unser Ziel ist es bei festem aber beliebigem j mit $|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$ die Koeffizienten für alle m_1, m_2 zu finden. Wir finden die Rekursion:

$$\begin{aligned}
& \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \langle j_1, j_2, j_1, m_2 | j_1, j_2, j, m-1 \rangle \\
&= \sqrt{j_2(j_2-1) - m_2(m_2+1)} \langle j_1, j_2, j_1, m_2+1 | j_1, j_2, j, m \rangle
\end{aligned}$$

9.5 Physikalische Beispiele

9.5.1 Magnetisches Moment

Ein Teilchen der Ladung q ($= -e$ für Elektron) und Masse m , welches sich auf einem Orbit mit Drehimpuls \vec{L} bewegt, produziert ein magnetisches Moment \vec{M} . Wir leiten dies nun her.

$$\vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} - \vec{\nabla} \Phi, \quad \vec{B} = \vec{\nabla} \wedge \vec{A}, \quad H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2 + q\Phi$$

Wobei $\vec{p} = m\dot{\vec{x}} + \frac{q}{c} \vec{A}$ der zu \vec{x} konjugierte Impuls ist. Gemäss des Korrespondenzprinzips wird \vec{p} zu $-i\hbar \vec{\nabla}$. Somit folgt für den Hamiltonoperator:

$$\begin{aligned}
H &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + i \frac{\hbar q}{2mc} (\vec{\nabla} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{\nabla}) + \left(\frac{q^2}{2mc^2} \vec{A}^2 + q\Phi \right) \\
&\stackrel{(*)}{=} -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + i \frac{\hbar q}{mc} \vec{A} \cdot \vec{\nabla} + \left(\frac{q^2}{2mc^2} \vec{A}^2 + q\Phi \right)
\end{aligned}$$

Wobei wir in $(*)$ die Coulomb-Eichung $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ gewählt haben. Das Vektorpotential eines konstanten Magnetfeldes \vec{B} ist gegeben durch

$$\vec{A} = -\frac{1}{2} \vec{x} \wedge \vec{B}$$

Wir finden:

$$i \frac{\hbar q}{mc} \vec{A} \cdot \vec{\nabla} = i \frac{\hbar q}{2mc} (\vec{x} \wedge \vec{\nabla}) \cdot \vec{B} = -\frac{q}{2mc} \vec{L} \cdot \vec{B}$$

wobei wir $\vec{L} = -i\hbar (\vec{x} \wedge \vec{\nabla})$ verwendet haben. Das magnetische Moment des Teilchens ist also

$$\vec{M} = \frac{q}{2mc} \vec{L}$$

Den Zusatzterm zum Hamiltonian

$$H_Z = -\vec{M} \cdot \vec{B}$$

nennt man den Zeeman Term. Wir definieren weiter

$$\Delta H = \left(\frac{q^2}{2mc^2} \vec{A}^2 + q\Phi \right)$$

Der Zeeman Term führt dazu, dass die für rotationssymmetrische Probleme typische Entartung der Energieniveaus aufgehoben wird. Betrachte das Beispiel des Wasserstoffatoms. Die Energiezustände ohne einen Einfluss eines Magnetfeldes sind durch die Quantenzahlen (n, l, m) wie folgt parametrisiert:

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

Wenn wir ein homogenes Magnetfeld einschalten erhalten wir

$$E_{n,m} = E_n + \Delta E_Z, \quad \Delta E_Z = \mu_B B_z m, \quad \mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c}$$

wobei ΔE_Z ein Korrekturterm ist und μ_B das Bohr'sche Magneton ist.

9.6 Der anormale Zeeman Effekt

Der Spin eines Teilchens erzeugt auch ein magnetisches Moment, sogar für ungeladene Teilchen. Für ein Elektron:

$$\vec{M}_{\text{el}} = -g \frac{e}{2mc} \vec{S}, \quad g = 2 + \frac{\alpha}{\pi} + \mathcal{O}(\alpha^2), \quad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137.04}$$

Wobei g der Landé Faktor und α die Feinstrukturkonstante sind. In diesem Fall sind \vec{M} und \vec{S} antiparallel, da $g = -e < 0$. Für ein Proton und ein Neutron gilt

$$\vec{M}_{\text{prot}} = g_p \frac{e}{2M_p c} \vec{S}, \quad g_p \approx 5.59$$

$$\vec{M}_{\text{neut}} = -g_n \frac{e}{2M_n c} \vec{S}, \quad g_n \approx 3.83$$

Bewegt sich das Teilchen in einem externen Magnetfeld $\vec{B} = B_z \vec{e}_z$, so erhält man den gesamten Zeemann Term.

$$H_Z = \frac{eB_z}{2mc} (L_z + gS_z)$$

Der 'anormale Zeemann Effekt' beschreibt den Effekt, der vom Spin erzeugt wird. Die Quantenzahlen des Elektrons sind durch (n, l, m, m_s) gegeben, wobei $m_s = \pm \frac{1}{2}$ die Spinquantenzahl ist. Mit $g = 2$ erhält man:

$$\Delta E_Z = \mu_B B_z (m + 2m_s)$$

9.6.1 Spin-Bahn-Kopplung

Das sich im \vec{E} -Feld des Kernes bewegende Elektron spürt ein Magnetfeld $\vec{B} = -\vec{v} \wedge \vec{E}/c$, woran das Spin-Moment koppelt. Die resultierende Energie ist

$$(13) \quad -\frac{e}{mc^2} \vec{S} \cdot (\vec{v} \wedge \vec{E})$$

Die Thomas-Präzession führt eine weitere Korrektur ein. Diese ist gerade das $-1/2$ -fache von Gleichung (13). Wir erhalten folgenden Ausdruck für die Spin-Bahn Kopplung:

$$\begin{aligned}
H_{\text{SO}} &= \frac{-e}{2mc^2} \vec{S} \cdot (\vec{v} \wedge \vec{E}) \stackrel{(*)}{=} \frac{1}{2mc^2} \vec{S} \cdot (\vec{r} \wedge \vec{v}) \frac{1}{r} \partial_r V \\
&= \frac{1}{2m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \vec{L} \cdot \vec{S}
\end{aligned}$$

Wobei wir in $(*)$ verwendet haben, dass $e\vec{E} = \vec{\nabla} V = \hat{r} \partial_r V(r)$. Der Term $\vec{L} \cdot \vec{S}$ ist unter der gemeinsamen Rotation von \vec{L} und \vec{S} invariant. Es gilt:

$$\begin{aligned}
\vec{L}^2 &= \hbar^2 l(l+1) \quad , \quad \vec{S}^2 = \hbar^2 \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) = \hbar^2 \frac{3}{4} \\
(\vec{L} + \vec{S})^2 &= \hbar^2 J(J+1) \quad , \quad J = l \pm \frac{1}{2}
\end{aligned}$$

Hierbei ist J der Spin der Darstellung, in die sich das Tensorprodukt $D_l \otimes D_{\frac{1}{2}}$ zerlegt. \vec{L} und \vec{S} stimmen bis auf einen Faktor von \hbar gerade mit den infinitesimalen Rotationsgeneratoren überein. $\vec{L} + \vec{S}$ ist gerade die Wirkung dieser Generatoren auf dem Tensorprodukt. Es gilt:

$$\vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2} \left((\vec{L} + \vec{S})^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2 \right) = \begin{cases} \frac{\hbar^2}{2} l & J = l + \frac{1}{2} \\ -\frac{\hbar^2}{2} (l+1) & J = l - \frac{1}{2} \end{cases}$$

Weiter gilt:

$$\frac{1}{r} \partial_r V = \frac{e^2}{r^3} \Rightarrow \Delta E_{SB} = \frac{e^2}{2m^2 c^2} \frac{\hbar^2}{2} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl} \begin{cases} l & J = l + \frac{1}{2} \\ -(l+1) & J = l - \frac{1}{2} \end{cases}$$

Da folgendes gilt:

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl} = \frac{1}{a_0^3} \frac{1}{n^3} \frac{1}{l(l + \frac{1}{2})(l + 1)} \quad , \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$$

$$\frac{e^2 \hbar^2}{m^2 c^2} = \frac{e^4}{\hbar^2 c^2} \frac{\hbar^4}{e^2 m^2} = \alpha^2 e^2 a_0^2 \quad , \quad \frac{e^4 m}{2 \hbar^2} = \frac{e^2}{2 a_0} = E_R = 13.6 \text{ eV}$$

folgt:

$$\Delta E_{SB} = \frac{\alpha^2 E_R}{2n^3} \frac{1}{l(l + \frac{1}{2})(l + 1)} \begin{cases} l & J = l + \frac{1}{2} \\ -(l + 1) & J = l - \frac{1}{2} \end{cases}$$

Für kleine externe Magnetfelder ist der Spin-Bahn-Kopplungseffekt relativ zum Zeemann-Effekt dominant.

10 Störungstheorie

10.1 Nicht-entartete zeit-unabhängige ST

Ausgangslage:

$$H\Psi = E\Psi \quad , \quad H = H_0 + H' \quad , \quad H_0\varphi_n = \mathcal{E}_n\varphi_n$$

Hamiltonoperator H mit einem Teil H_0 der exakt lösbar ist. Die φ_n für $n \in \mathbb{N}$ sind ein vollständiger Satz von orthonormierten Eigenfunktionen von H_0 . Es gilt $\mathcal{E}_m \neq \mathcal{E}_n$ für $m \neq n$. Wir fassen H' als kleine Störung auf und wir schreiben

$$H = H_0 + \lambda H'$$

und machen den Störungsansatz

$$\Psi = \Psi_0 + \lambda \Psi_1 + \lambda^2 \Psi_2 + \dots \quad , \quad E = E_0 + \lambda E_1 + \lambda^2 E_2 + \lambda^3 E_3 + \dots$$

Eingesetzt erhalten wir für die s -te Ordnung von λ :

$$(H_0 - E_0)\Psi_s = -H'\Psi_{s-1} + \sum_{j=1}^s E_j \Psi_{s-j} \quad \forall s \geq 1 \quad , \quad (H_0 - E_0)\Psi_0 = 0$$

In 0-ter Ordnung:

$$\Psi_0 = \varphi_n \quad , \quad E_0 = \mathcal{E}_n \quad \text{für geeignetes } n \in \mathbb{N}$$

Die weiteren Ψ_k für $k \geq 1$ können wir iterativ finden. Diese Gleichungen bestimmen Ψ_k nur bis auf Vektoren, die im Kern von $(H_0 - E_0)$ liegen. Da die Eigenwerte von H_0 nicht entartet sind, sind solche Vektoren proportional zu φ_n . Wir legen diese Freiheit dadurch fest, dass wir verlangen, dass

$$\langle \Psi_0 | \Psi_k \rangle = \delta_{0k} \quad \Leftrightarrow \quad \langle \varphi_n | \Psi \rangle = 1$$

Damit folgt:

$$\underbrace{\langle \Psi_0 | H_0 - E_0 | \Psi_s \rangle}_{=0} = \underbrace{\langle \Psi_0 | E_1 - H' | \Psi_{s-1} \rangle}_{\delta_{s1} E_1 - \langle \Psi_0 | H' | \Psi_{s-1} \rangle} + \sum_{j=2}^s E_j \underbrace{\langle \Psi_0 | \Psi_{s-j} \rangle}_{=\delta_{sj}}$$

$$\Rightarrow \quad E_s = \langle \varphi_n | H' | \Psi_{s-1} \rangle \quad s \geq 1$$

$$E = E_0 + \sum_{s=1}^{\infty} \lambda^s E_s = E_0 + \lambda \sum_{s=1}^{\infty} \lambda^{s-1} \langle \varphi_n | H' | \Psi_{s-1} \rangle = \mathcal{E}_n + \lambda \langle \varphi_n | H' | \Psi \rangle$$

Um Ψ_s zu finden, entwickeln wir für $s \geq 1$.

$$|\Psi_s\rangle = \sum_{l \neq n} \langle \varphi_l | \Psi_s \rangle |\varphi_l\rangle$$

$$\langle \varphi_l | \Psi_s \rangle = \frac{1}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_l} \left[\langle \varphi_l | H' | \Psi_{s-1} \rangle - \sum_{j=1}^s E_j \langle \varphi_l | \Psi_{s-j} \rangle \right]$$

Somit gilt:

$$E_s = \langle \varphi_n | H' | \Psi_{s-1} \rangle$$

$$|\Psi_s\rangle = \sum_{l \neq n} \frac{\langle \varphi_l | H' | \Psi_{s-1} \rangle - \sum_{j=0}^{s-1} E_j \langle \varphi_l | \Psi_{s-j} \rangle}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_l} |\varphi_l\rangle$$

Für $s \leq 2$ gilt explizit:

$$E_0 = \mathcal{E}_n \quad , \quad E_1 = \langle n | H' | n \rangle \quad , \quad E_2 = \sum_{l \neq n} \frac{|\langle l | H' | n \rangle|^2}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_l}$$

$$|\Psi_0\rangle = |n\rangle \quad , \quad |\Psi_1\rangle = \sum_{l \neq n} \frac{\langle l | H' | n \rangle}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_l} |l\rangle$$

$$|\Psi_2\rangle = \sum_{l \neq n} \left[\sum_{k \neq n} \frac{\langle l | H' | k \rangle \langle k | H' | n \rangle}{(\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_l)(\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_k)} - \frac{\langle l | H' | n \rangle \langle n | H' | n \rangle}{(\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_l)^2} \right] |l\rangle$$

Die Normierungsbedingung ist

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = 1 + \lambda^2 \sum_{l \neq n} \frac{|\langle l | H' | n \rangle|^2}{(\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_l)^2}$$

10.2 Entartete zeit-unabhängige ST

10.2.1 Aufhebung einer zweifachen Entartung zu erster Ordnung

Angenommen $E_0 = \mathcal{E}_n = \mathcal{E}_m$ und $\mathcal{E}_k \neq E_n$ für $k \neq n, m$. Sei φ_l eine Orthonormalbasis der zugehörigen Eigenvektoren. In diesem Fall ist

$$\Psi_0 = a_m |m\rangle + a_n |n\rangle \quad , \quad a_m, a_n \in \mathbb{C}$$

Aus ST erster Ordnung und durch bilden der Matrixelemente mit $\langle m |$ und $\langle n |$ folgen die folgenden Gleichungen:

$$(\langle m | H' | m \rangle - E_1) a_m + \langle m | H' | n \rangle a_n = 0$$

$$\langle n | H' | m \rangle a_m + (\langle n | H' | n \rangle - E_1) a_n = 0$$

Wir definieren nun

$$\mathcal{E}'_m = \langle m | H' | m \rangle \quad , \quad \mathcal{E}'_n = \langle n | H' | n \rangle \quad , \quad \delta = \langle m | H' | n \rangle \quad , \quad \delta'^* = \langle n | H' | m \rangle$$

Somit lässt sich obiges GLS schreiben als

$$\begin{pmatrix} \mathcal{E}'_m - E_1 & \delta' \\ \delta'^* & \mathcal{E}'_n - E_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_m \\ a_n \end{pmatrix} = 0$$

Eine Lsg $\Psi_0 \neq 0$ existiert falls die Determinante gleich Null ist. Somit folgt für E_1 :

$$E_1^{\pm} = \frac{\mathcal{E}'_m - \mathcal{E}'_n}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\mathcal{E}'_m - \mathcal{E}'_n}{2} \right)^2 + |\delta'|^2}$$

Für die zugehörigen EV muss gelten $\frac{a_m^{\pm}}{a_n^{\pm}} = \frac{\delta'}{E_1^{\pm} - \mathcal{E}'_m}$. In niedrigster Ordnung ist $E_0 = \mathcal{E}$ und $|\Psi_0^{\pm}\rangle = a_m^{\pm} |m\rangle + a_n^{\pm} |n\rangle$. In nächster Ordnung ist $E_1 = E_1^{\pm}$. Falls $\mathcal{E}'_m \neq \mathcal{E}'_n$ oder $\delta' \neq 0$ ist $E_1^+ \neq E_1^-$ und die Entartung ist aufgehoben. Nun betrachten wir noch die Korrektur $|\Psi_1^{\pm}\rangle$ für den EV von H . Wir berechnen die Matrixelemente mit $\langle l |$, $l \neq m, n$.

$$\langle l | H_0 - E_0 | \Psi_1^{\pm} \rangle = \langle l | E_1^{\pm} - H' | \Psi_0^{\pm} \rangle$$

$$(\mathcal{E}_l - \mathcal{E}) \langle l | \Psi_1^{\pm} \rangle = \underbrace{E_1^{\pm} \langle \Psi_0^{\pm} | - \langle l | H' | \Psi_0^{\pm} \rangle}_{=0}$$

Wobei $\mathcal{E} \equiv \mathcal{E}_m = \mathcal{E}_n$. Die Komponenten von Ψ_1^{\pm} im orthogonalen Komplement von $\text{span}\{|m\rangle, |n\rangle\}$ ist

$$|P\Psi_1^{\pm}\rangle = \sum_{l \neq m, n} \frac{\langle l | H' | \Psi_0^{\pm} \rangle}{\mathcal{E} - \mathcal{E}_l} |l\rangle \quad \text{wobei} \quad P = \mathbb{1} - |m\rangle\langle m| - |n\rangle\langle n|$$

P ist der Projektor auf diesen Unterraum. Es gilt $\langle \Psi_n^\pm | \Psi_0^\pm \rangle = 0$ für $n \geq 1$. Wir wollen nun $\langle \psi_1^\pm | \Psi_0^\mp \rangle$ bestimmen. Wir betrachten zweite Ordnung ST.

$$\underbrace{\langle \Psi_0^- | H_0 - E_0 | \Psi_2^+ \rangle}_{=0} = \langle \Psi_0^- | E_1^+ - H' | \Psi_1^+ \rangle + E_2^+ \underbrace{\langle \Psi_0^- | \Psi_0^+ \rangle}_{=0} \\ \Rightarrow \langle \Psi_1^+ | E_1^+ - H' | \Psi_0^- \rangle = 0$$

Andererseits

$$(E_1^+ - H') | \Psi_0^- \rangle = (E_1^+ - PH') | \Psi_0^- \rangle - (1 - P) H' | \Psi_0^- \rangle \\ = (E_1^+ - E_1^-) | \Psi_0^- \rangle - PH' | \Psi_0^- \rangle$$

Wir multiplizieren mit $\langle \Psi_1^+ |$ und finden

$$0 = (E_1^+ - E_1^-) \langle \Psi_0^- | \Psi_1^+ \rangle - \langle \Psi_0^- | H' P | \Psi_1^+ \rangle \\ \langle \Psi_0^- | \Psi_1^+ \rangle = \sum_{l \neq m, n} \frac{\langle \Psi_0^- | H' | l \rangle \langle l | H' | \Psi_0^+ \rangle}{(\mathcal{E} - \mathcal{E}_l) (E_1^+ - E_1^-)}$$

Somit folgt:

$$E_0 = \mathcal{E} \quad , \quad | \Psi_0^\pm \rangle = a_m^\pm | m \rangle + a_n^\pm | n \rangle \quad , \quad E_1 = E_1^\pm \\ | \Psi_1^\pm \rangle = \sum_{l \neq m, n} \left[\frac{\langle \Psi_0^\mp | H' | l \rangle \langle l | H' | \Psi_0^\pm \rangle}{(E_1^\pm - E_1^-) (\mathcal{E} - \mathcal{E}_l)} | \Psi_0^\mp \rangle + \frac{\langle l | H' | \Psi_0^\pm \rangle}{\mathcal{E} - \mathcal{E}_l} | l \rangle \right]$$

10.2.2 Der allgemeine Fall

Betrachte den Eigenraum zu \mathcal{E}_n der Dimension k . Sei $\{\varphi_n^1, \dots, \varphi_n^k\}$ eine Orthonormalbasis dieses Eigenraumes. Für Ψ_0 machen wir den Ansatz

$$\Psi_0 = \sum_{j=1}^k a_n^j \varphi_n^j$$

Nun ist das EW-Problem gegeben durch

$$\begin{pmatrix} \langle \varphi_n^1 | H' | \varphi_n^1 \rangle - E_1 & \langle \varphi_n^1 | H' | \varphi_n^2 \rangle & \dots & \langle \varphi_n^1 | H' | \varphi_n^k \rangle \\ \langle \varphi_n^2 | H' | \varphi_n^1 \rangle & (\langle \varphi_n^2 | H' | \varphi_n^2 \rangle - E_1) & \dots & \langle \varphi_n^2 | H' | \varphi_n^k \rangle \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \langle \varphi_n^k | H' | \varphi_n^1 \rangle & \dots & \dots & \langle \varphi_n^k | H' | \varphi_n^k \rangle - E_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_n^1 \\ a_n^2 \\ \vdots \\ a_n^k \end{pmatrix} = 0$$

Wir bezeichnen die Eigenwerte mit $E_1^\alpha = \langle n^\alpha | H' | n^\alpha \rangle$, für $\alpha = 1, \dots, k$ wobei der zugehörige EV gegeben ist durch

$$| n^\alpha \rangle = \sum_{l=1}^k a_n^l(\alpha) | \varphi_n^l \rangle$$

Zu zweiter Ordnung für E findet man

$$E = \mathcal{E}_n + \langle n^\alpha | H' | n^\alpha \rangle + \sum_{\mathcal{E}_i \neq E_n} \frac{|\langle l | H' | n^\alpha \rangle|^2}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_l}$$

und in erster Ordnung für Ψ

$$| \Psi^\alpha \rangle = | n^\alpha \rangle + \sum_{\alpha' \neq \alpha} \sum_{\mathcal{E}_i \neq \mathcal{E}_n} \frac{\langle n^\alpha | H' | l \rangle \langle l | H' | n^{\alpha'} \rangle}{(\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_i) (E_1^\alpha - E_1^{\alpha'})} + \sum_{\mathcal{E}_i \neq \mathcal{E}_n} \frac{\langle l | H' | n^\alpha \rangle}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_i} | l \rangle$$

Hier wurde angenommen, dass die Entartung in erster Ordnung aufgehoben wurde, d.h. $E_1^\alpha \neq E_1^\beta$ für $\alpha \neq \beta$.

10.2.3 Aufhebung der Entartung zu zweiter Ordnung

Die Entartung für den Fall der zweifachen Entartung ist nicht aufgehoben, falls

$$\langle m | H' | m \rangle = \langle n | H' | n \rangle \quad , \quad \langle m | H' | n \rangle = 0$$

Wir betrachten ST in zweiter Ordnung und nehmen Matrixelemente mit $\langle m |$ und $\langle n |$.

$$\langle m | H_0 - E_0 | \Psi_2 \rangle = \langle m | E_1 - H' | \Psi_1 \rangle + E_2 \langle m | \Psi_0 \rangle$$

Wir benutzen die Resultate aus erster Ordnung

$$| \Psi_0 \rangle = a_m | m \rangle + a_n | n \rangle \quad , \quad E_0 = \mathcal{E} = \mathcal{E}_n = \mathcal{E}_m \quad , \quad \langle n | H' | m \rangle = \mathcal{E}' \delta_{nm}$$

$$P | \Psi_1 \rangle = \sum_{l \neq m, n} \frac{a_m \langle l | H' | m \rangle + a_n \langle l | H' | n \rangle}{\mathcal{E} - \mathcal{E}_l} | l \rangle$$

Daraus folgt:

$$0 = \langle m | E_1 - H' | P \Psi_1 \rangle + \underbrace{\langle m | E_1 - H' | (1 - P) \Psi_1 \rangle}_{=0} + E_2 \langle m | \Psi_0 \rangle$$

Somit $E_2 a_m = \langle m | H' | P \Psi_1 \rangle$ und schliesslich

$$\left[\underbrace{\sum_{l \neq m, n} \frac{|\langle l | H' | m \rangle|^2}{\mathcal{E} - \mathcal{E}_l}}_{=\mathcal{E}'_m} - E_2 \right] a_m + \underbrace{\sum_{l \neq m, n} \frac{\langle m | H' | l \rangle \langle l | H' | n \rangle}{\mathcal{E} - \mathcal{E}_l}}_{=\delta'} a_n = 0$$

Analog folgt für $\langle n |$:

$$(\mathcal{E}'_n - E_2) a_n + \delta'^* a_m = 0 \quad , \quad \mathcal{E}'_n = \sum_{l \neq m, n} \frac{|\langle l | H' | n \rangle|^2}{\mathcal{E} - \mathcal{E}_l}$$

Die Entartung wird zu zweiter Ordnung aufgehoben, falls entweder $\mathcal{E}'_n \neq \mathcal{E}'_m$ oder $\delta' \neq 0$.

10.2.4 Der Stark Effekt

Betrachte ein elektrisches Feld $\vec{\mathcal{E}} = (0, 0, \mathcal{E})$ und die Störung $H' = e\mathcal{E}z$. Betrachte die Aufhebung der Entartung im $n = 2$ Niveau ($|n, l, m\rangle = |2s_0\rangle, |2p_1\rangle, |2p_0\rangle, |2p_{-1}\rangle$). Im Prinzip müsste man eine 4×4 Matrix betrachten, da aber $[L_z, z] = 0$ vertauscht H' mit L_z und es gilt:

$$0 = \langle m' | [H', L_z] | m \rangle = (m - m') \langle m' | H' | m \rangle$$

Somit $\langle m' | H' | m \rangle = 0$ falls $m \neq m'$. Somit bleiben nur die Matrixelemente $\langle 2s_0 | H' | 2p_0 \rangle = \delta'$ übrig und die Diagonaleinträge. Die Kugelfkt. sind Eigenfkt. des Paritätsoperators P mit Parität $(-1)^l$. Andererseits hat der Operator z Parität -1 , und somit

$$(-1)^l \langle Y_{lm} | H' | Y_{lm} \rangle = \langle Y_{lm} | H' P | Y_{lm} \rangle = -\langle Y_{lm} | P H' | Y_{lm} \rangle \\ = -(-1)^l \langle Y_{lm} | H' | Y_{lm} \rangle$$

Daher verschwinden alle Diagonaleinträge der Matrix H' . Die Matrixelemente von H' auf dem entarteten Unterraum sind also durch folgende Matrix beschrieben:

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & \delta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \delta^* & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \delta = \langle 2s_0 | H' | 2p_0 \rangle = -3a_0 e \mathcal{E}$$

Es bleibt die 2×2 Matrix zu diagonalisieren

$$3a_0 e \mathcal{E} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \text{EW} = \mp 3a_0 e \mathcal{E} \quad , \quad \text{EV} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix}$$

10.3 Zeit-abhängige Störungstheorie

Wir nehmen im folgenden an, dass $H' = H'(t)$ zeit-abhängig ist, aber der ungestörte Hamiltonoperator H_0 immernoch zeit-unabhängig ist.

10.3.1 Der Propagator der Quantenmechanik

Im Schrödingerbild sind Operatoren zeit-unabhängig. Die Dynamik des Systems wird durch die Zeitabhängigkeit der Zustandsvektoren $\Psi(t)$ beschrieben. Dies wird durch die SG $i\hbar \partial_t \Psi(t) = H \Psi(t)$ bestimmt. Wir können die Lsg der SG durch einen Propagator beschreiben. Dazu definieren wir einen Operator $U(t, s)$ (den Propagator), der folgende Bedingungen erfüllt.

(i) $U(t, t) = \mathbb{1}$

(ii) Additivität: es gilt $U(t, s)U(s, r) = U(t, r)$

(iii) Der Operator $U(t, s)$ erfüllt die DGL $i\hbar\partial_t U(t, s) = HU(t, s)$

Es gilt $\Psi(t) = U(t, s)\Psi(s)$. Falls H zeit-unabhängig ist, so kann man $U(t, s)$ schreiben als

$$U(t, s) = \exp\left(-iH\frac{(t-s)}{\hbar}\right)$$

Da H selbst-adjungiert ist, folgt dass $U(t, s)$ unitär ist. Im allgemeinen Fall lässt sich $U(t, s)$ wie folgt definieren.

$$U(t, s) = \mathbb{1} \sum_{n=1}^{\infty} U^{(n)}(t, s)$$

$$U^{(n)}(t, s) = \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^n \int_s^t dt_1 \int_s^{t_1} dt_2 \cdots \int_s^{t_{n-1}} dt_n H(t_1)H(t_2)\cdots H(t_n)$$

Es gilt $t \geq t_1 \geq t_2 \geq \cdots \geq s$. Wir definieren den Zeitordnungs-Operator \mathcal{T} :

$$\mathcal{T}(A(t_1)B(t_2)) = \begin{cases} A(t_1)B(t_2) & t_1 > t_2 \\ B(t_2)A(t_1) & t_2 > t_1 \end{cases}$$

Die Verallgemeinerung auf n Operatoren ist

$$\mathcal{T}\left(\prod_{i=1}^n A_i(t_i)\right) = A_{\pi_1}(t_{\pi_1})\cdots A_{\pi_n}(t_{\pi_n})$$

wobei π jene Permutation ist, welche die Zeiten ordnet $t_{\pi_1} \geq t_{\pi_2} \geq \cdots \geq t_{\pi_n}$. Mit dieser Notation können wir schreiben:

$$U(t, s) = \mathcal{T} \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_s^t dt' H(t')\right]$$

10.3.2 Das Heisenbergbild

Im Heisenbergbild sind die Operatoren zeit-abhängig und nicht die Zustände. Die beiden Beschreibungen sind äquivalent und durch den unitären Operator $U(t, s)$ miteinander verbunden. Konkret definieren wir die Zustände im Heisenbergbild durch

$$\Psi_H \equiv \Psi(t_0) \quad , \quad \Psi_H = U(t_0, t)\Psi(t)$$

Die Observablen im Schrödingerbild werden wie folgt zu den Observablen im Heisenbergbild transformiert.

$$A_H = U(t_0, t)AU(t, t_0)$$

Diese definition garantiert $(A\Psi(t))_H = A_H\Psi_H$. Insbesondere

$$\langle A \rangle = \langle \Psi(t) | A | \Psi(t) \rangle = \langle \Psi_H | A_H(t) | \Psi_H \rangle$$

Weiter gilt

$$U(t, s)^\dagger = U(t, s-1) = U(s, t)$$

Die Bew.gl. im Heisenbergbild ist eine Bew.gl. für die Operatoren:

$$i\hbar \frac{d}{dt} = [A_H, H_H] + i\hbar \partial_t A_H$$

Falls $\partial_t H = 0$, so ist $[H, U(t_0, t)] = 0$ und damit $H_H(t) = H_H = H$. Dann ist H_H zeit-unabhängig. Für die Operatoren gilt aber

$$A_H(t) = e^{iH(t-t_0)/\hbar} A e^{-iH(t-t_0)/\hbar}$$

A_H ist eine Erhaltungsgrösse, falls $\partial_t A = 0$ und $[H, A] = 0$. Der Kommutator ist also genau das quantenmechanische Analogon von der Poissonklammer. Für zwei Operatoren gilt

$$\{A, B\} \Rightarrow -\frac{i}{\hbar} [A, B] \quad \text{somit} \quad \{q, p\} = 1 \Rightarrow -\frac{i}{\hbar} [q, p] = 1$$

10.3.3 Das Wechselwirkungsbild

Wir betrachten den Fall der zeit-abhängigen ST, also $H = H_0 + H'(t)$. Hierbei ist H_0 zeit-unabhängig und exakt lösbar und $H'(t)$ ist eine kleine Störung. Im Wechselwirkungsbild sind sowohl die Zustände als auch die Observablen zeit-abhängig. Wir betrachten die unitäre Transformation mit $U_0(t, t_0)$, wobei U_0 der Propagator des ungestörten Problems ist. Dann definieren wir

$$\Psi_D(t) = U_0(t_0, t)\Psi(t) = U_0(t_0, t)U(t, t_0)\Psi(t_0)$$

wobei U der Propagator für $H = H_0 + H'$ ist. Entsprechend:

$$A_D(t) = U_0(t_0, t)AU_0(t, t_0) \quad \text{wobei} \quad U_0(t_0, t) = e^{iH(t-t_0)/\hbar}$$

Die Zeitentwicklung der Zustände Ψ_D ist dann gegeben durch

$$\Psi_D(t) = U_D(t, t_0)\Psi_D(t_0) \quad \text{wobei} \quad U_D(t, t_0) = U_0(t_0, t)U(t, t_0)$$

Der zugehörige Hamiltonoperator ist

$$i\hbar\partial_t U_D = H'_D U_D \quad \text{wobei} \quad H'_D = U_0(t_0, t)H'U_0(t, t_0)$$

Als Neumann-Reihe gilt daher

$$U_D(t, t_0) = \mathcal{T} \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H'_D(t')\right]$$

10.3.4 Erste Ordnung ST

Wir betrachten nun den Fall wo $H(t) = H_0 + H'(t)$ und $H'(t) = 0$ für $t < t_0$. Wir nehmen oBdA an, dass zur Zeit $t = t_0$, das System im Eigenzustand $|i\rangle$ von H_0 mit EW \mathcal{E}_i ist. Wir wollen die Wsk berechnen, dass das System für $t > t_0$ im Zustand $|f\rangle$ ist. Wir nehmen weiter an, dass $\langle f|i\rangle = 0$. Da $\Psi(t) = U_D(t, t_0)|i\rangle$, folgt

$$\begin{aligned} \langle f|\Psi(t)\rangle &= \langle f|U_D(t, t_0)|i\rangle \simeq \langle f|i\rangle - \frac{i}{\hbar} \langle f| \int_{t_0}^t dt' H'_D(t') |i\rangle \\ &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \langle f| e^{i\mathcal{E}_f(t'-t_0)/\hbar} H'(t') e^{-i\mathcal{E}_i(t'-t_0)/\hbar} |i\rangle \end{aligned}$$

Für die Übergangswahrscheinlichkeit erhalten wir zu erster Ordnung also

$$P_{i \rightarrow f} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{t_0}^t dt' e^{i(\mathcal{E}_f - \mathcal{E}_i)t'/\hbar} \langle f|H'(t')|i\rangle \right|^2$$

Wir betrachten das Bsp $H'(t) = V\theta(t-t_0)$. Wir wählen oBdA $t_0 = 0$ und definieren $\omega_{if} = (\mathcal{E}_f - \mathcal{E}_i)/\hbar$. Dann gilt:

$$P_{i \rightarrow f} = \left| \frac{e^{i\omega_{if}t} - 1}{\hbar\omega_{if}} \langle f|V|i\rangle \right| = \left(\frac{\sin(\omega_{if}t/2)}{\hbar\omega_{if}/2} \right)^2 |\langle f|V|i\rangle|^2$$

Diese Übergangswahrscheinlichkeit hat Nullstellen bei $\omega_{if}t = 2\pi n$. Für $\omega_{if} \rightarrow 0$ und somit für $t \rightarrow \infty$ verhält sich der zeitabhängige Vorfaktor wie

$$\frac{(\omega_{if}t/2)^2}{(\hbar\omega_{if}/2)^2} \approx \left(\frac{t}{\hbar}\right)^2$$

Für $t \rightarrow \infty$ erhalten wir einen scharfen Peak bei $\omega_{if} = 0$ mit Gewicht proportional zu t . Die Interpretation ist die folgende: Nach Einschalten der Störung können prinzipiell Übergänge zu allen Energien erfolgen. Die relevanten Übergänge, jene welche eine grosse Wsk haben und nicht in der Zeit oszillieren, sind diejenigen welche die Energie erhalten, $\omega_{if} = 0$, d.h. $\mathcal{E}_i = \mathcal{E}_f$. Das Gewicht dieser energieerhaltenden Prozesse nimmt linear mit der Zeit zu.

$$\int_{-\frac{2\pi}{t}}^{\frac{2\pi}{t}} P_{i \rightarrow f}(\omega) d\omega = \frac{2t}{\hbar} \int_{-\pi}^{\pi} du \frac{\sin^2(u)}{u^2} |\langle f|V|i\rangle|^2 \sim t$$

Wir betrachten nun ein Kontinuum von Zuständen oder eine Gruppe von Finalzuständen welche dicht liegen. Die Dichte dieser Zustände im Energieraum sei beschrieben durch $\rho(\mathcal{E}_f)$. D.h. wir können die Summe über Zustände $|f\rangle$ ersetzen durch Integrale über \mathcal{E}_f : $\sum_f \rightarrow \int d\mathcal{E}_f \rho(\mathcal{E}_f)$. Die Wsk für einen Übergang in einen Zustand um $|f\rangle$ herum ist dann

$$\Gamma t = \sum_f P_{i \rightarrow f}(t) = \int d\mathcal{E}_f \rho(\mathcal{E}_f) \frac{\sin^2(\omega_{if}t/2)}{(\hbar\omega_{if}/2)^2} |\langle f|V|i\rangle|^2 = \frac{2\pi}{\hbar} t \rho(\mathcal{E}_f) |\langle f|V|i\rangle|^2 \Big|_{\mathcal{E}_i=\mathcal{E}_f}$$

Hierbei wurde benutzt, dass $\sin^2(\omega t)/\pi t \omega^2 \rightarrow \delta(\omega)$ für $t \rightarrow \infty$, sowie $d\mathcal{E}_f = \hbar d\omega_{if}$. Somit finden wir die Übergangsrate $dP_{i \rightarrow f}/dt = \Gamma$

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f|V|i\rangle|^2 \rho(\mathcal{E}_f)$$

Diese Relation nennt man Fermis Goldene Regel. Hierbei ist $2\pi\hbar/\Delta\mathcal{E}_f < t \ll 2\pi\hbar/\delta\varepsilon$. Die Zeitrestriktionen haben folgenden Ursprung:

- Der Peak in $P_{i \rightarrow f}$ muss innerhalb der Gruppe von Zuständen um f liegen. Wir bezeichnen die Breite dieser Gruppe mit $\Delta\mathcal{E}_f$, insbesondere sei das Matrixelement $|\langle i|V|f\rangle|$ innerhalb von $\Delta\mathcal{E}_f$ in etwa konstant. Dann muss $\Delta\mathcal{E}_f > 2\pi\hbar/t$ sein.
- Die Dichte unter dem Peak muss genügend gross sein, d.h., die Energieseparation $\delta\varepsilon$ zwischen Zuständen klein, s.d. viele Zustände innerhalb des Zentralen Peaks zu liegen kommen, $\delta\varepsilon \ll 2\pi\hbar/t$.